12.22

$$p(\mathbf{x},\mathbf{z}\mid\boldsymbol{\mu},\mathbf{W},\boldsymbol{\Psi}) = p(\mathbf{x}\mid\mathbf{z},\boldsymbol{\mu},\mathbf{W},\boldsymbol{\Psi})\,p(\mathbf{z})$$

(12.64)　(12.31)

$$= \mathcal{N}(\mathbf{x}\mid\mathbf{W}\mathbf{z}+\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Psi})\,\mathcal{N}(\mathbf{z}\mid\mathbf{0},\mathbf{I})$$

なので

$(\mathbf{x}_1,\mathbf{z}_1),(\mathbf{x}_2,\mathbf{z}_2),\cdots$は独立なので

$$p(\mathbf{X},\mathbf{Z}\mid\boldsymbol{\mu},\mathbf{W},\boldsymbol{\Psi}) = \prod_{n=1}^{N} p(\mathbf{x}_n\mid\mathbf{z}_n,\boldsymbol{\mu},\mathbf{W},\boldsymbol{\Psi})\,p(\mathbf{z}_n)$$

$$= \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}(\mathbf{x}_n\mid\mathbf{W}\mathbf{z}_n+\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Psi})\,\mathcal{N}(\mathbf{z}_n\mid\mathbf{0},\mathbf{I})$$

となる。これの対数は

$$\ln p(\mathbf{X},\mathbf{Z}\mid\boldsymbol{\mu},\mathbf{W},\boldsymbol{\Psi}) = \sum_{n=1}^{N} \ln\mathcal{N}(\mathbf{x}_n\mid\mathbf{W}\mathbf{z}_n+\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Psi}) + \ln\mathcal{N}(\mathbf{z}_n\mid\mathbf{0},\mathbf{I})$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \ln\frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{|\boldsymbol{\Psi}|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_n-\mathbf{W}\mathbf{z}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\mathbf{W}\mathbf{z}_n-\boldsymbol{\mu})\right\} + \ln\frac{1}{(2\pi)^{\frac{M}{2}}}\exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{z}_n\right)$$

$$= \sum_{n=1}^{N}\left\{-\frac{D}{2}\ln(2\pi)-\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Psi}| - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_n-\mathbf{W}\mathbf{z}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\mathbf{W}\mathbf{z}_n-\boldsymbol{\mu}) - \frac{M}{2}\ln(2\pi) - \frac{1}{2}\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{z}_n\right\}$$

$$= -\sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{D}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Psi}| + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})\right.$$

$$\left.-\frac{1}{2}\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{z}_n + \frac{1}{2}\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{z}_n + \frac{M}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{z}_n\right\}$$

$$= -\sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{D}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Psi}| + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})\right.$$

$$- \mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W})$$

$$\left.+\frac{M}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}})\right\}$$

スカラーなので転置しても同じ
[illegible]$\boldsymbol{\Psi}^{-1}$は対称

- $(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{z}_n = \mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})$

スカラーなのでTr取っても同じ

- $\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{z}_n = \mathrm{Tr}(\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{z}_n)$
  $= \mathrm{Tr}(\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W})$ ← Trの回転

$\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{z}_n = \mathrm{Tr}(\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{z}_n)$ ← スカラーなので
$= \mathrm{Tr}(\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}})$ ← Trの回転

となる。これより

$$\mathbb{E}_{p(\mathbf{Z}\mid\mathbf{X})}\left[\ln p(\mathbf{X},\mathbf{Z}\mid\boldsymbol{\mu},\mathbf{W},\boldsymbol{\Psi})\right]$$

$$= -\sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{D}{2}\ln(2\pi)+\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Psi}| + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu})\right.$$

$$- \mathbb{E}_{p(\mathbf{z}_n\mid\mathbf{x}_n)}[\mathbf{z}_n]^{\mathrm{T}}\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}_{p(\mathbf{z}_n\mid\mathbf{x}_n)}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}]\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{W}\right)$$

$$\left.+\frac{M}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}_{p(\mathbf{z}_n\mid\mathbf{x}_n)}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^{\mathrm{T}}]\right)\right\}$$

を得る。

(Φについて最大化)

Φは対角行列であるという条件の下で $E[\ln p(X,Z|\mu,W,\Phi)]$ を最大化する

$E[\ln p(X,Z|\mu,W,\Phi)]$ を Φ で微分して 0 とおく

$$
\begin{aligned}
O &= \frac{\partial}{\partial \Phi} E[\ln p(X,Z|\mu,W,\Phi)] \\
&= -\sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2}(\Phi^{-1})^T \\
&\quad -\frac{1}{2}(\Phi^{-1})^T(x_n-\mu)(x_n-\mu)^T(\Phi^{-1})^T \\
&\quad +(\Phi^{-1})^T W E[z_n](x_n-\mu)^T(\Phi^{-1})^T \\
&\quad -\frac{1}{2}(\Phi^{-1})^T W E[z_n z_n^T] W^T(\Phi^{-1})^T
\end{aligned}
$$

- $\frac{\partial}{\partial \Phi}\ln|\Phi| = (\Phi^{-1})^T$ (C,28)
- $\frac{\partial}{\partial \phi_{ij}} a^T\Phi^{-1}b = a^T\frac{\partial \Phi^{-1}}{\partial \phi_{ij}}b$ (C,21)

$$
\begin{aligned}
&= a^T(-\Phi^{-1})\frac{\partial \Phi}{\partial \phi_{ij}}\Phi^{-1}b \\
&= -a^T\Phi^{-1}J^{ij}\Phi^{-1}b \\
&= -((a^T\Phi^{-1})^T(\Phi^{-1}b)^T)_{ij}
\end{aligned}
$$

J^{ij} はシングルエントリ行列

$x^T J^{ij} y = (x y^T)_{ij}$ 成分計算より

$\therefore \frac{\partial}{\partial \Phi} a^T\Phi^{-1}b = -(\Phi^{-1})^T a b^T(\Phi^{-1})^T$

- $\frac{\partial}{\partial \phi_{ij}}Tr(A^T\Phi^{-1}B) = tr(A^T\frac{\partial \Phi^{-1}}{\partial \phi_{ij}}B)$

$$
\begin{aligned}
&= Tr(A^T(-\Phi^{-1})\frac{\partial \Phi}{\partial \phi_{ij}}\Phi^{-1}B) \\
&= -Tr(A^T\Phi^{-1}J^{ij}\Phi^{-1}B) \\
&= -\{(A^T\Phi^{-1})^T(\Phi^{-1}B)^T\}_{ij} \\
&= -\{(\Phi^{-1})^T A B^T(\Phi^{-1})^T\}_{ij}
\end{aligned}
$$

J^{ij} の性質より $Tr(AJ^{ij}B) = (A^T B^T)_{ij}$

$\therefore \frac{\partial}{\partial \Phi}Tr(A^T\Phi^{-1}B) = -(\Phi^{-1})^T A B^T(\Phi^{-1})^T$

Φ^{-1} は対称、また $z_n z_n^T$ は対称なので $E[z_n z_n^T]$ も対称なので

$$
O = \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{1}{2}\Phi^{-1} - \frac{1}{2}\Phi^{-1}(x_n-\mu)(x_n-\mu)^T\Phi^{-1} + \Phi^{-1}WE[z_n](x_n-\mu)^T\Phi^{-1} - \frac{1}{2}\Phi^{-1}WE[z_n z_n^T]W^T\Phi^{-1}\right\} \quad \cdots ①
$$

を得る。

Φ は対角行列なので、$\phi_{ij} = 0 \ (i \neq j)$ である。(Φの要素)

よって ① の対角成分以外の条件式は不要である。

注 スカラーEの行列Φによる微分とは $\frac{\partial E}{\partial \phi_{ij}}$ を行列の形にまとめたものである。
なので①は $\frac{\partial E}{\partial \phi_{ij}} = 0 \ (i,j = 1 \sim D)$
という連立方程式を行列の形にまとめたものである。
$\phi_{ij} = 0 \ (i \neq j)$ なので連立方程式のうち
$\frac{\partial E}{\partial \phi_{ii}} = 0$ の式だけ残して他は不要である。

対角成分 ϕ_{ii} についての条件式は

$$
diag(O) = diag\left(\sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{1}{2}\Phi^{-1} - \frac{1}{2}\Phi^{-1}(x_n-\mu)(x_n-\mu)^T\Phi^{-1} + \Phi^{-1}WE[z_n](x_n-\mu)^T\Phi^{-1} - \frac{1}{2}\Phi^{-1}WE[z_n z_n^T]W^T\Phi^{-1}\right\}\right)
$$

で与えられる。これより

$$
O = \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{1}{2}\Phi^{-1} - \frac{1}{2}\Phi^{-1}diag((x_n-\mu)(x_n-\mu)^T)\Phi^{-1} + \Phi^{-1}diag(WE[z_n](x_n-\mu)^T)\Phi^{-1} - \frac{1}{2}\Phi^{-1}diag(WE[z_n z_n^T]W^T)\Phi^{-1}\right\}
$$

を得る。

- $k\,diag(A) = diag(kA)$
- $diag(A+B) = diag(A) + diag(B)$ ← 成分計算より
- 対角行列Λについて $diag(\Lambda) = \Lambda$
- 対角行列Λについて
  $diag(\Lambda A \Lambda) = \Lambda\, diag(A)\Lambda$ ← 成分計算より
- $diag(O) = O$

両辺に左右からΨを掛けると

$$0 = \sum_{n=1}^{N}\left\{ \frac{1}{2}\Psi - \frac{1}{2}\mathrm{diag}\left((x_n-\mu)(x_n-\mu)^T\right) + \mathrm{diag}\left(W\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right) - \frac{1}{2}\mathrm{diag}\left(W\mathbb{E}[z_n z_n^T]W^T\right)\right\}$$

となる。これより

$$\Psi = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{N}\left\{\sum_{n=1}^{N}(x_n-\mu)(x_n-\mu)^T - 2W\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T + W\mathbb{E}[z_n z_n^T]W^T\right\}\right)$$

$$= \mathrm{diag}\left(S - \frac{2}{N}W\sum_{n=1}^{N}\left[\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right] + \frac{1}{N}W\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n z_n^T]\right]W^T\right)$$

ここで、(12.69)を最ゴのWに適用すると

$$\Psi = \mathrm{diag}\left(S - \frac{2}{N}W\sum_{n=1}^{N}\left[\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right] + \frac{1}{N}W\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n z_n^T]\right]\left(\left[\sum_{n=1}^{N}(x_n-\mu)\mathbb{E}[z_n]^T\right]\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n z_n^T]\right]^{-1}\right)^T\right)$$

$$= \mathrm{diag}\left(S - \frac{2}{N}W\sum_{n=1}^{N}\left[\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right] + \frac{1}{N}W\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n z_n^T]\right]\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n z_n^T]\right]^{-1}\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right]\right)$$

$$= \mathrm{diag}\left(S - \frac{2}{N}W\sum_{n=1}^{N}\left[\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right] + \frac{1}{N}W\left[\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right]\right)$$

$$= \mathrm{diag}\left(S - \frac{1}{N}W\sum_{n=1}^{N}\left[\mathbb{E}[z_n](x_n-\mu)^T\right]\right)$$

となり、(12.70)を得る。

← 成分み系より

$z_n z_n^T$ は対称なので　転置しても

$\mathbb{E}[z_n z_n^T]$ も対称なので　各成分同じになるので

$\mathbb{E}[z_n z_n^T]^{-1}$ も対称である

$I = (AA^{-1})^T = (A^{-1})^T A$

$\therefore\ A^{-1} = (A^{-1})^T$

（ W について最大化する）

$\mathbb{E}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} \mid \boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Psi})]$ を W について微分して 0 とおく

$$0 = \frac{\partial}{\partial W} \mathbb{E}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} \mid \boldsymbol{\mu}, W, \boldsymbol{\Psi})]$$

$$= -\sum_{n=1}^{N} \left\{ -\boldsymbol{\Psi}^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}) \mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^{T} + \boldsymbol{\Psi}^{-1} W \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^{T}] \right\}$$

- $\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \mathbf{a}^{T} \mathbf{X}^{T} \mathbf{b} = \mathbf{b} \mathbf{a}^{T}$ ← 演習12.15で確認した
- $Q(\mathbf{X}) = \mathrm{Tr}(A \mathbf{X}^{T} B \mathbf{X})$ とすると $\mathbf{h} = h \mathbb{J}^{ij}$ として（シングルエントリ行列）

$Q(\mathbf{X}+\mathbf{h}) = \mathrm{Tr}(A(X+\mathbf{h})^{T} B (X+\mathbf{h}))$

$= \mathrm{Tr}(AX^{T}BX) + \mathrm{Tr}(AX^{T}B\mathbf{h}) + \mathrm{Tr}(A\mathbf{h}^{T}BX) + \mathrm{Tr}(A\mathbf{h}^{T}B\mathbf{h})$

よって

$Q(X+\mathbf{h}) - Q(X) = \mathrm{Tr}(AX^{T}B\mathbf{h}) + \mathrm{Tr}(A\mathbf{h}^{T}BX) + \mathrm{Tr}(A\mathbf{h}^{T}B\mathbf{h})$

$= h\,\mathrm{Tr}(AX^{T}B\mathbb{J}^{ij}) + h\,\mathrm{Tr}(A\mathbb{J}^{ji}BX) + h^2\,\mathrm{Tr}(A\mathbb{J}^{ji}B\mathbb{J}^{ij})$

$\sim h\{\mathrm{Tr}(AX^{T}B\mathbb{J}^{ij}) + \mathrm{Tr}(A\mathbb{J}^{ji}BX)\}$ ← h^2 の項を無視する

$= h\{(AX^{T}B)^{T}_{ij} + (BXA)^{T}_{ji}\}$ ← $\mathrm{Tr}(\mathbb{J}^{ij}A) = (A^{T})_{ij}$

$= h(B^{T}XA^{T} + BXA)_{ij}$

$\therefore \frac{\partial \mathrm{Tr}(AX^{T}BX)}{\partial X} = B^{T}XA^{T} + BXA = 2BXA$

（B, A が対称の場合）

これより

$$\sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\Psi}^{-1} W \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^{T}] = \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\Psi}^{-1} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}) \mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^{T}$$

$$\therefore \boldsymbol{\Psi}^{-1} W \sum_{n=1}^{N} \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^{T}] = \boldsymbol{\Psi}^{-1} \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}) \mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^{T}$$

左から $\boldsymbol{\Psi}$ を掛け、右から $\left[\sum_{n=1}^{N} \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^{T}]\right]^{-1}$ を掛けると

$$W = \left[\sum_{n=1}^{N} (\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}) \mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^{T}\right] \left[\sum_{n=1}^{N} \mathbb{E}[\mathbf{z}_n \mathbf{z}_n^{T}]\right]^{-1}$$

となり、(12.56) を得る。