12.4

$$p(\mathbf{x}) = \int p(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})d\mathbf{z} = \int N(\mathbf{x}|W\mathbf{z}+\boldsymbol{\mu}, \sigma^2 I)\, N(\mathbf{z}|\mathbf{m}, \Sigma)d\mathbf{z} \quad \cdots ①$$

積分を計算するために、$\mathbf{z}$を白色化する。(12.24)より

$$\mathbf{y} = \Lambda^{-\frac{1}{2}} U^T(\mathbf{z}-\mathbf{m}) \quad \cdots ②$$

とおく。ここで、$U = (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_m)$, $\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m \end{pmatrix}$, $\Sigma \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i$ とすると、(C.38)より

$$\Sigma U = U\Lambda \quad \cdots ③$$

である。②より

②より

$$\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y} = \underbrace{\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{-\frac{1}{2}}}_{=I} U^T(\mathbf{z}-\mathbf{m}) = U^T(\mathbf{z}-\mathbf{m})$$

$$\therefore U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y} = \underbrace{UU^T}_{=I}(\mathbf{z}-\mathbf{m}) = \mathbf{z}-\mathbf{m} \quad \leftarrow (C.37)$$

$$\therefore \mathbf{z} = \mathbf{m} + U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{m} + U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y} \cdots ④$$

これより

$$\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{y}} = U\Lambda^{\frac{1}{2}}$$

$$z_i = m_i + (U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y})_i$$

$$= m_i + \left\{\begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m1} & \cdots & u_{mm}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_1^{\frac{1}{2}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m^{\frac{1}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m\end{pmatrix}\right\}_i$$

$$= m_i + \left\{\begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m1} & \cdots & u_{mm}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_1^{\frac{1}{2}} y_1 \\ \vdots \\ \lambda_m^{\frac{1}{2}} y_m\end{pmatrix}\right\}_i$$

$$= m_i + \sum_{j=1}^{M} u_{ij}\lambda_j^{\frac{1}{2}} y_j$$

$$\therefore \frac{\partial z_i}{\partial y_j} = u_{ij}\lambda_j^{\frac{1}{2}}$$

なので

$$\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{y}} = \begin{pmatrix} u_{11}\lambda_1^{\frac{1}{2}} & \cdots & u_{1m}\lambda_m^{\frac{1}{2}} \\ & \ddots & \\ u_{m1}\lambda_1^{\frac{1}{2}} & & u_{mm}\lambda_m^{\frac{1}{2}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m1} & \cdots & u_{mm}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_1^{\frac{1}{2}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m^{\frac{1}{2}}\end{pmatrix} = U\Lambda^{\frac{1}{2}}$$

よって

$UU^T = I$ より
$|U||U^T| = 1$
$\therefore |U| = 1$

$$\left|\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{y}}\right| = |U||\Lambda^{\frac{1}{2}}| = \prod_{i=1}^{M}\lambda_i^{\frac{1}{2}} = |\Sigma|^{\frac{1}{2}} \quad \cdots ⑤$$

となる

① と ④ で変数変換して積分する。ここで

$$N(\mathbf{x}|W\mathbf{z}+\boldsymbol{\mu}, \sigma^2 I) = N(\mathbf{x}|W(\mathbf{m}+U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y})+\boldsymbol{\mu}, \sigma^2 I)$$

$$= N(\mathbf{x}|WU\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y} + W\mathbf{m}+\boldsymbol{\mu}, \sigma^2 I)$$

$$N(\mathbf{z}|\mathbf{m},\Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{M}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mathbf{m})^T\Sigma^{-1}(\mathbf{z}-\mathbf{m})\right\}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{M}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{m}+U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}-\mathbf{m})^T\Sigma^{-1}(\mathbf{m}+U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}-\mathbf{m})\right\}$$

$\Sigma^{-1} = U\Lambda^{-1}U^T$ (C.44)

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{M}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T\Lambda^{\frac{1}{2}}U^T\Sigma^{-1}U\Lambda^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}\right)$$

$$\Lambda^{\frac{1}{2}}U^T\Sigma^{-1}U\Lambda^{\frac{1}{2}} = \Lambda^{\frac{1}{2}}U^TU\Lambda^{-1}U^TU\Lambda^{\frac{1}{2}} \leftarrow UU^T = U^TU = I$$

$$= \Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{-1}\Lambda^{\frac{1}{2}} = I$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{M}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{y}^T\mathbf{y}\right) = \frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}N(\mathbf{y}|\mathbf{0}, I)$$

なので ① の積分は ← 積分区間は変数がxでもyでも全区間である

$$p(x) = \int N(x \mid WU\Lambda^{\frac{1}{2}}y + Wm + \mu,\ \sigma^2 I)\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}} N(y \mid 0, I)\ \overset{⑤}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}} dy$$

$$= \int N(x \mid WU\Lambda^{\frac{1}{2}}y + Wm + \mu,\ \sigma^2 I) N(y \mid 0, I) dy$$

ここで

$$\mathbb{M} = \mathbb{W}U\Lambda^{\frac{1}{2}},\quad \nu = \mathbb{W}m + \mu$$

とおくと

$$p(x) = \int N(x \mid \mathbb{M}y + \nu) N(y \mid 0, I)\, dy$$

となり、平均0, 分散Iの潜在分布の問題に帰着させることができる。

(12.34), (12.36) を使うと

$$p(x) = N(x \mid \nu, \mathbb{D})$$

$$\mathbb{D} = \mathbb{M}\mathbb{M}^T + \sigma^2 I = \mathbb{W}U\Lambda^{\frac{1}{2}}(\mathbb{W}U\Lambda^{\frac{1}{2}})^T + \sigma^2 I = \mathbb{W}\overbrace{U\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{\frac{1}{2}}U^T}^{=U\Lambda U^T = \Sigma\ (C.47)}\mathbb{W}^T + \sigma^2 I = \mathbb{W}\Sigma\mathbb{W}^T + \sigma^2 I$$

を得る。