演習5.3

本文中の独立の仮定を捨てるというのは「$w_0, w_1 \cdots$ が独立」という仮定のこと

$w_0, w_1 \cdots$ が独立でない = 共分散Σが対角でない

(問題) 確率変数t(ベクトル)のx(ベクトル)に対する条件付確率が

$$p(t|x,w) = N(t|y(x,w),\Sigma) \quad \cdots (5.192)$$

このとき観測値$(t_1,x_1),(t_2,x_2)\cdots$に対する$w$についての誤差関数を書く。

但し各観測値は独立とする。

次にこの誤差関数を使ってΣを最尤法で決める。

観測値$(t_1,x_1),(t_2,x_2)$の尤度関数は

$$p(t_1,t_2|x_1,x_2) = \prod_{n=1}^{N} N(t_n|y_n,\Sigma) = \prod_{n=1}^{N} \frac{1}{(2\pi)^{K/2}} \frac{1}{|\Sigma|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}(t_n-y_n)\right\}$$

各要素は独立なので

誤差関数は

$$E = -\ln p = -\frac{K}{2}\cdot 2\pi\cdot N - \frac{1}{2}\ln|\Sigma|\cdot N + \sum_{n=1}^{N} -\frac{1}{2}(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}(t_n-y_n) \quad \cdots ①$$

となる。

Σを最尤法で決める

The matrix cook book の2.4.4より ← web に pdf あり

$$\frac{\partial}{\partial X}Tr(AX^{-1}B) = -(X^{-1}BAX^{-1})^T$$

各要素のΣの微分は以下の通り

$$\frac{\partial \ln|\Sigma|}{\partial \Sigma} = (\Sigma^{-1})^T = \Sigma^{-1}$$

(C.28)より　対称なので

スカラーなので

$$\frac{\partial}{\partial\Sigma}(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}(t_n-y_n) = \frac{\partial}{\partial\Sigma}Tr\{(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}(t_n-y_n)\} = -\left(\Sigma^{-1}(t_n-y_n)(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}\right)^T = -\Sigma^{-1}(t_n-y_n)(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}$$

これらを使って①の停留条件は

$$0 = \frac{\partial E}{\partial \Sigma} = -\frac{N}{2}\Sigma^{-1} + \sum_{n=1}^{N} -\frac{1}{2}\left\{-\Sigma^{-1}(t_n-y_n)(t_n-y_n)^T\Sigma^{-1}\right\} = -\frac{N}{2}\Sigma^{-1} + \frac{1}{2}\Sigma^{-1}\left\{\sum_{n=1}^{N}(t_n-y_n)(t_n-y_n)^T\right\}\Sigma^{-1}$$

両辺にΣをかけて

$$N I = \left\{\sum_{n=1}^{N}(t_n-y_n)(t_n-y_n)^T\right\}\Sigma^{-1}$$

これより

$$\Sigma = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(t_n-y_n)(t_n-y_n)^T$$

を得る。

The matrix cook book の2.4.4の $\frac{\partial}{\partial X}Tr(AX^{-1}B) = -(X^{-1}BAX^{-1})^T$ の証明

$$ij成分 = \frac{\partial}{\partial X_{ij}}Tr(AX^{-1}B) = \frac{\partial}{\partial X_{ij}}Tr(X^{-1}BA) = Tr\left(\frac{\partial X^{-1}}{\partial X_{ij}}BA\right) = Tr\left(-X^{-1}\frac{\partial X}{\partial X_{ij}}X^{-1}BA\right) = Tr(-X^{-1}J^{ij}X^{-1}BA)$$

Trの回転　微分とTrの交換 The matrix cook book 2の(4)　逆行列の微分 The matrix cookbookの2.2　Single entry matrix

$$= -Tr(J^{ij}X^{-1}BAX^{-1}) = -(X^{-1}BAX^{-1})^T_{ij}$$

Trの回転 Trの線形性　Single entry の性質 The matrix cook book 8.2.5

よって $\frac{\partial}{\partial X}Tr(AX^{-1}B) = -(X^{-1}BAX^{-1})^T$ を得る。

The matrix cookbook 9.2.5 $\mathrm{Tr}(AJ^{ij}) = (A^T)_{ij}$ の証明

Aが 3x3 で ij が 23 の場合

$$\mathrm{Tr}(AJ^{23}) = \mathrm{Tr}\left\{\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right\} = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 0 & 0 & A_{12} \\ 0 & 0 & A_{22} \\ 0 & 0 & A_{32} \end{pmatrix} = A_{32} = (A^T)_{23}$$