Topic Models Shiro:Chapter3 学習アルゴリズム

@anemptyarchive[*]

2019/11/21-2020/02/04

Contents

[*] https://www.anarchive-beta.com/

はじめに

青トピ本に引き続き薄い本 2 冊目です。楽しんで書きました。頑張って読んでください。

3 学習アルゴリズム

3.1 統計的学習アルゴリズム

・KL 情報量

統計モデルの「近さ」($\neq$ 距離) を表す指標として、カルバック・ライブラー情報量を導入する。

$$\begin{aligned} KL[p^*(x)\|p(x|\phi)] &= \int p^*(x)\log\frac{p^*(x)}{p(x|\phi)}dx \qquad (3.2) \\ &= \int p^*(x)\Big(\log p^*(x) - \log p(x|\phi)\Big)dx \\ &= -\int p^*(x)\Big(\log p(x|\phi) - \log p^*(x)\Big)dx \\ &= -\int p^*(x)\log\frac{p(x|\phi)}{p^*(x)}dx \end{aligned}$$

-1 を掛けることで、1 行目の分母分子、あるいは 2 行目の括弧の中を入れ替えることができる。

$$\begin{aligned} KL[p^*(x)\parallel p(x|\phi)] &= \int p^*(x)\log\frac{p^*(x)}{p(x|\phi)}dx \qquad (3.2) \\ &= \mathbb{E}_{p^*(x)}\left[\log\frac{p^*(x)}{p(x|\phi)}\right] \\ &= \mathbb{E}_{p^*(x)}[\log p^*(x)] - \mathbb{E}_{p^*(x)}[\log p(x|\phi)] \qquad (3.6) \end{aligned}$$

確率分布 $p^*(x)$ による期待値とみることができる。

$$\begin{aligned} KL[p^*(x)\parallel p(x|\phi)] &= \int p^*(x)\log\frac{p^*(x)}{p(x|\phi)}dx \qquad (3.2) \\ &= \int p^*(x)\Big(\log p^*(x) - \log p(x|\phi)\Big)dx \\ &= \int p^*(x)\log p^*(x)dx - \int p^*(x)\log p(x|\phi)dx \\ &= \mathbb{E}_{p^*(x)}[\log p^*(x)] - \mathbb{E}_{p^*(x)}[\log p(x|\phi)] \qquad (3.6) \end{aligned}$$

1 行目の分母分子を別々の積分計算に分割することもよく用いる。

その他は省略する。

3.2 サンプリング近似法

確率分布からのサンプリングに基づく近似アルゴリズムについて説明する。

・モデルの生成過程

$$\begin{aligned} x_i &\sim p(x_i|\phi_{z_i}) \\ z_i &\sim \mathrm{Multi}(z_i|\boldsymbol{\pi}) \\ \phi_k &\sim p(\phi_k|\eta) \\ \boldsymbol{\pi} &\sim \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \end{aligned}$$

3.2.1 ギブスサンプリング

$\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}$ を経由して、潜在変数 $\boldsymbol{z}_{1:n}$ をサンプリングする。

$$p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}|\eta, \alpha) = \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}|\eta, \alpha)$$

を用いる。

・z_i のサンプリング式の導出

$$\begin{aligned} p(z_i = k|\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}, \eta, \alpha) &= \frac{p(z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}|\eta, \alpha)}{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}|\eta, \alpha)} && (3.17) \\ &\propto p(z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}|\eta, \alpha) && (3.18) \\ &= p(x_i|z_i = k, \boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{x}_{1:n}^{\setminus i}|\boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}, \boldsymbol{\phi}) p(z_i|\boldsymbol{\pi}) p(\boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}|\boldsymbol{\pi}) p(\boldsymbol{\phi}|\eta) p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \\ &= \left[\prod_{i'=1}^{n} p(x_{i'}|z_{i'} = k, \boldsymbol{\phi}) p(z_{i'}|\boldsymbol{\pi})\right] \left[\prod_{k=1}^{K} p(\phi_k|\eta)\right] p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) && (3.19) \\ &\propto p(x_i|z_i = k, \boldsymbol{\phi}) p(z_i|\boldsymbol{\pi}) \\ &= p(x_i|\phi_k) p(z_i|\boldsymbol{\pi}) && (3.20) \end{aligned}$$

【途中式の途中式】

0. $p(A|B, C) = \frac{p(A,B|C)}{p(B|C)}$ より、項を変形する。
1. $z_i = k$ と関係のない分母を省く。
2. 生成過程より分解する。
3. i を含む $i' = 1, 2, \cdots, n$ として項をまとめる。また、それぞれ項を分解する。
4. z_i に関係のある項のみを残す。

条件付き独立性から

$$p(z_i = k|\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\setminus i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}, \eta, \alpha) = p(z_i = k|x_i, \phi_k, \boldsymbol{\pi})$$

である (?)。

これを正規化すると

$$p(z_i = k|x_i, \phi_k, \boldsymbol{\pi}) = \frac{p(x_i|\phi_k) p(z_i = k|\boldsymbol{\pi})}{\sum_{k'=1}^{K} p(x_i|\phi_{k'}) p(z_i = k'|\boldsymbol{\pi})}$$

が得られる。

・ϕ_k のサンプリング式の導出

$$
\begin{aligned}
p(\phi_k|\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\pi},\eta,\alpha) &= \frac{p(\phi_k,\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\pi}|\eta,\alpha)}{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\pi}|\eta,\alpha)} \\
&\propto p(\phi_k,\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\pi}|\eta,\alpha) \\
&= p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\phi_k,\boldsymbol{\phi}^{\backslash k})p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})p(\phi_k,\boldsymbol{\phi}^{\backslash k}|\eta)p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \\
&= \left[\prod_{i=1}^{n} p(x_i|z_i,\boldsymbol{\phi})p(z_i|\boldsymbol{\pi})\right] p(\phi_k|\eta)p(\boldsymbol{\phi}^{\backslash k}|\eta)p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \\
&\propto \left[\prod_{i=1}^{n} p(x_i|\phi_{z_i})^{\delta(z_i=k)}\right] p(\phi_k|\eta)
\end{aligned}
$$

条件付き独立性から

$$
p(\phi_k|\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\pi},\eta,\alpha) = p(\phi_k|\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\eta)
$$

である。
これを正規化すると

$$
p(\phi_k|\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\eta) = \frac{\left[\prod_{i=1}^{n} p(x_i|\phi_{z_i})^{\delta(z_i=k)}\right] p(\phi_k|\eta)}{\sum_{k'=1}^{K}\left[\prod_{i=1}^{n} p(x_i|\phi_{z_i})^{\delta(z_i=k)}\right] p(\phi_k|\eta)}
$$

が得られる。

・$\boldsymbol{\pi}$ のサンプリング式の導出

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\eta,\alpha) &= \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\eta,\alpha)}{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}|\eta,\alpha)} \\
&\propto p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\eta,\alpha) \\
&= p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})p(\boldsymbol{\phi}|\eta)p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \\
&= \left[\prod_{i=1}^{n} p(x_i|z_i,\boldsymbol{\phi})p(z_i|\boldsymbol{\pi})\right]\left[\prod_{k=1}^{K} p(\phi_k|\eta)\right] p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \\
&\propto \left[\prod_{i=1}^{n} p(z_i|\boldsymbol{\pi})\right] p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \qquad (3.22)
\end{aligned}
$$

条件付き独立性から

$$
p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\eta,\alpha) = p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{z}_{1:n},\alpha)
$$

である。
これを正規化すると

$$
p(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{z}_{1:n},\alpha) = \frac{[\prod_{i=1}^{n} p(z_i|\boldsymbol{\pi})]p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{\int[\prod_{i=1}^{n} p(z_i|\boldsymbol{\pi})]p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)d\boldsymbol{\pi}}
$$

が得られる。

3.2.2 周辺化ギブスサンプリング

$\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}$ を積分消去して、潜在変数 $\boldsymbol{z}_{1:n}$ のみをサンプリングする。

周辺化した結合確率は

$$p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \eta, \alpha) = \int p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \eta, \alpha) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}$$

となる。

・z_i のサンプリング式の導出

$$\begin{aligned}
p(z_i = k | \boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) &= \frac{p(z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i} | \eta, \alpha)}{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i} | \eta, \alpha)} \\
&\propto p(z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i} | \eta, \alpha) \\
&= p(z_i = k, x_i, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i} | \eta, \alpha) \\
&= p(x_i | z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i} | \eta, \alpha) \\
&= p(x_i | z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(z_i = k | \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(\boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i} | \eta, \alpha) \\
&\propto p(x_i | z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(z_i = k | \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha)
\end{aligned}$$

【途中式の途中式】

0. $p(A|B,C) = \frac{p(A,B|C)}{p(B|C)}$ より、変形する。
1. $z_i = k$ と関係のない分母を省く。
2. $\boldsymbol{x}_{1:n}$ を、i についての x_i とそれ以外の $\boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}$ に分解する。
3. $p(A,B|C) = p(A|B,C)p(B|C)$ より、分解する。
4. $p(A,B|C) = p(A|B,C)p(B|C)$ より、後の項を分解する。
5. i 以外の項を省く。

ここからは、積分消去した $\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}$ を明示して進める。

$$\begin{aligned}
p(z_i = k | \boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) &\propto p(x_i | z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(z_i = k | \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) \\
&= \int p(x_i, \boldsymbol{\phi} | z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) d\boldsymbol{\phi} \int p(z_i = k, \boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int p(x_i | \boldsymbol{\phi}, z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(\boldsymbol{\phi} | z_i = k, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) d\boldsymbol{\phi} \\
&\qquad * \int p(z_i = k | \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) p(\boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \eta, \alpha) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int p(x_i | \boldsymbol{\phi}, z_i = k) p(\phi_k, \boldsymbol{\phi}^{\backslash k} | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \eta) d\phi_k d\boldsymbol{\phi}^{\backslash k} \int p(z_i = k | \boldsymbol{\pi}) p(\boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \alpha) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int p(x_i | \phi_k) p(\phi_k | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \eta) d\phi_k \int p(\boldsymbol{\phi}^{\backslash k} | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \eta) d\boldsymbol{\phi}^{\backslash k} \int p(z_i = k | \boldsymbol{\pi}) p(\boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \alpha) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int p(x_i | \phi_k) p(\phi_k | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \eta) d\phi_k \int p(z_i = k | \boldsymbol{\pi}) p(\boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \alpha) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \mathbb{E}_{p(\phi_k | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \eta)} [p(x_i | \phi_k)] \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \alpha)} [p(z_i = k | \boldsymbol{\pi})] \qquad (3.25)
\end{aligned}$$

【途中式の途中式】

1. 積分消去した確率変数を明示する。
2. $p(A,B|C) = p(A|B,C)p(B|C)$ より、項を分割する。
3. 式を整理する。
   - 条件付き独立性から、影響しない条件を消す。
   - $\boldsymbol{\phi}$ を、k についての ϕ_k とそれ以外の $\boldsymbol{\phi}^{\backslash k}$ に分解する。
4. ϕ_k と $\boldsymbol{\phi}^{\backslash k}$ で項を分解する。
5. $\int p(\boldsymbol{\phi}^{\backslash k}|\boldsymbol{z}_{1:n}^{\backslash i}, \boldsymbol{x}_{1:n}^{\backslash i}, \eta) d\boldsymbol{\phi}^{\backslash k} = 1$ より消える。
6. 期待値に置き換える。

3.2.3 LDA のギブスサンプリング

LDA のギブスサンプリングを導出する。

結合分布は生成過程より

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) \\ &= \prod_{d=1}^{M}\prod_{i=1}^{n_d} p(w_{d,i}|z_{d,i}, \boldsymbol{\phi})p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) \prod_{d=1}^{M} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \end{aligned} \tag{3.27}$$

と分解できる。

・潜在トピックのサンプリング式の導出

$$\begin{aligned} & p(z_{d,i} = k|w_{d,i} = v, \boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\ & = \frac{p(z_{d,i} = k, w_{d,i} = v, \boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(w_{d,i} = v, \boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \\ & \propto p(z_{d,i} = k, w_{d,i} = v, \boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\ & = p(w_{d,i} = v|z_{d,i} = k, \boldsymbol{\phi})p(z_{d,i} = k|\boldsymbol{\theta}_d)p(\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) \\ & \propto p(w_{d,i} = v|z_{d,i} = k, \boldsymbol{\phi})p(z_{d,i} = k|\boldsymbol{\theta}_d) \\ & = \phi_{k,v}\theta_{d,k} \end{aligned} \tag{3.28}$$

条件付き独立性から

$$p(z_{d,i} = k|w_{d,i} = v, \boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = p(z_{d,i} = k|w_{d,i} = v, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}) \tag{3.30}$$

である。

これを正規化すると

$$p(z_{d,i} = k|w_{d,i} = v, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{\phi_{k,v}\theta_{d,k}}{\sum_{k'=1}^{K}\phi_{k',v}\theta_{d,k'}} \tag{3.29}$$

が得られる。

・トピック分布のサンプリング式の導出

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}^{\backslash d},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \frac{p(\boldsymbol{\theta}_d,\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}^{\backslash d}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}^{\backslash d}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})} \\
&\propto p(\boldsymbol{\theta}_d,\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}^{\backslash d}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \\
&= p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}_d|\boldsymbol{\theta}_d)p(\boldsymbol{z}^{\backslash d}|\boldsymbol{\theta}^{\backslash d})p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})p(\boldsymbol{\theta}^{\backslash d}|\boldsymbol{\alpha})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) \\
&\propto p(\boldsymbol{z}_d|\boldsymbol{\theta}_d)p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})
\end{aligned}$$

　更に、正規化項を省いた Dirichlet 分布 $p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \propto \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{\alpha_k-1}$ を用いて

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}^{\backslash d},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &\propto p(\boldsymbol{z}_d|\boldsymbol{\theta}_d)p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \\
&= \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{n_{d,k}} \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{\alpha_k-1} \\
&= \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{n_{d,k}+\alpha_k-1} \qquad (3.31)
\end{aligned}$$

となる。
　また、条件付き独立性から

$$p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}^{\backslash d},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}_d,\boldsymbol{\alpha}) \qquad (3.32)$$

である。
　よって、$p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha})$ は、$n_{d,k}+\alpha_k$ をパラメータを持つ正規化項のない Dirichlet 分布であることが分かる。従って、正規化する (Dirichlet 分布の正規化項を与える) と

$$p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}_d,\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K n_{d,k}+\alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(n_{d,k}+\alpha_k)} \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{n_{d,k}+\alpha_k} \qquad (3.36)$$

が得られる。

・単語分布のサンプリング式の導出

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \frac{p(\boldsymbol{\phi}_k,\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})} \\
&\propto p(\boldsymbol{\phi}_k,\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \\
&= p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}_k,\boldsymbol{\phi}^{\backslash k})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\phi}^{\backslash k}|\boldsymbol{\beta}) \\
&\propto p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}$$

　更に、正規化項を省いた Dirichlet 分布 $p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \propto \prod_{v=1}^V \phi_{k,v}^{\beta_v-1}$ を用いて

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &\propto p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \\
&= \left[\prod_{d=1}^{M}\prod_{i=1}^{n_d}\prod_{k=1}^{K} p(w_{d,i}|z_{d,i}=k,\boldsymbol{\phi}_k)\right] p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \\
&\propto \left[\prod_{d=1}^{M}\prod_{i=1}^{n_d} p(w_{d,i}|z_{d,i}=k,\boldsymbol{\phi}_k)\right] p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \\
&\propto \prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}}\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{\beta_v-1} \\
&= \prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}+\beta_v-1}
\end{aligned} \tag{3.34}
$$

となる。

また、条件付き独立性から

$$
p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}^{\backslash k},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\beta}) \tag{3.35}
$$

である。

よって、$p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\beta})$ は、パラメータ $n_{k,v}+\beta_v$ を持つ正規化項のない Dirichlet 分布であることが分かる。従って、正規化すると

$$
p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\beta}) = \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{k,v}+\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{k,v}+\beta_v)}\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}+\beta_v-1} \tag{3.37}
$$

が得られる。

3.2.4 LDA の周辺化ギブスサンプリング

LDA の周辺化ギブスサンプリングを導出する。

パラメータ $\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}$ について周辺化 (積分消去) した

$$
p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \int p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}
$$

を用いる。

・潜在トピックのサンプリング式の導出

$$
\begin{aligned}
&p(z_{d,i}=k|w_{d,i}=v,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \\
&= \frac{p(z_{d,i}=k,w_{d,i}=v,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{p(w_{d,i}=v,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})} \\
&\propto p(z_{d,i}=k,w_{d,i}=v,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \\
&= p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \\
&\propto p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
$$

ここからは、周辺化したパラメータを明示して進める。

$$
\begin{aligned}
&p(z_{d,i}=k|w_{d,i}=v,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&\propto p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&=\int p(w_{d,i}=v,\boldsymbol{\phi}|z_{d,i}=k,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}\int p(z_{d,i}=k,\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\theta}\\
&=\int p(w_{d,i}=v|\boldsymbol{\phi},z_{d,i}=k,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\phi}|z_{d,i}=k,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}\\
&\qquad*\int p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\theta}\\
&=\int p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}\int p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}\\
&\propto\int p(w_{d,i}=v|\boldsymbol{\phi}_k)p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}_k\int p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta}_d)p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}_d\\
&=\int \phi_{k,v}p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}_k\int \theta_{d,k}p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}_d\\
&=\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\beta})}[\phi_{k,v}]\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha})}[\theta_{d,k}]
\end{aligned}
$$

式 (3.36) と式 (3.37) から $p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\beta}),p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha})$ も Dirichlet 分布である。よって、正規化した (正規化項を付けた) 上で、Dirichlet 分布の期待値計算 (2.10) を行うと

$$
\begin{aligned}
p(z_{d,i}=k|w_{d,i}=v,\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})&=\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\beta})}[\phi_{k,v}]\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha})}[\theta_{d,k}]\\
&=\frac{n_{k,v}^{\backslash d,i}+\beta_v}{\sum_{v'=1}^{V}n_{k,v'}^{\backslash d,i}+\beta_{v'}}\frac{n_{d,k}^{\backslash d,i}+\alpha_k}{\sum_{k'=1}^{K}n_{d,k'}^{\backslash d,i}+\alpha_{k'}}\\
&=\frac{n_{k,v}^{\backslash d,i}+\beta_v}{n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}+\sum_{v'=1}^{V}\beta_{v'}}\frac{n_{d,k}^{\backslash d,i}+\alpha_k}{n_{d}^{\backslash d,i}+\sum_{k'=1}^{K}\alpha_{k'}} \qquad (3.38)
\end{aligned}
$$

が得られる。

3.3 変分近似法

変分ベイズ法と呼ばれる決定論的な近似アルゴリズムにについて説明する。

3.3.1 変分法

本を参照のこと。

3.3.2 変分ベイズ法 (1)

一般的なモデルにおける変分ベイズ法の導出を行っていく。

・本節で対象とするモデルの生成過程

$$
\begin{aligned}
x_i &\sim p(x_i|\phi_{z_i})\\
z_i &\sim \mathrm{Multi}(z_i|\boldsymbol{\pi})\\
\phi_k &\sim p(\phi_k|\eta)\\
\boldsymbol{\pi} &\sim \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\pi}|\alpha)
\end{aligned}
$$

$p(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{x}_{1:n}, \alpha, \eta)$ の計算は難しい。そこで、尤度関数のパラメータを周辺化 (積分消去) し

$$p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) = \int \sum_{\boldsymbol{z}_{i:n}} p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}$$

更に、対数をとった

$$\log p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) = \log \int \sum_{\boldsymbol{z}_{i:n}} p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \tag{3.45}$$

対数周辺尤度を用いる。

・変分下限の導出

対数周辺尤度に対して、イエンセンの不等式を用いて

$$\begin{aligned}
\log p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) &= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}_{i:n}} p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} && (3.45) \\
&= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}_{i:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta)}{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\geq \int \sum_{\boldsymbol{z}_{i:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta)}{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \equiv F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})] && (3.50)
\end{aligned}$$

【途中式の途中式】

1. $\frac{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})} = 1$ を掛ける。
2. イエンセンの不等式を用いる。

変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})]$ が得られる。
対数周辺尤度と変分下限との差を求めると

$$\begin{aligned}
&\log p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) - F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})] \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} \int q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} \int q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta)}{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} \int q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \left(\log p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) - \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta)}{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})} \right) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} \int q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n} | \alpha, \eta) q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})}{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \alpha, \eta)} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} \int q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \log \frac{q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})}{p(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{x}_{1:n}, \alpha, \eta)} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&= \mathrm{KL}[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) \parallel p(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi} | \boldsymbol{x}_{1:n}, \alpha, \eta)] && (A.2)
\end{aligned}$$

【途中式の途中式】

0. 変分下限の式と形を揃えるため、対数周辺尤度に $\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} \int q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} = 1$ を掛ける。
1. 括弧でくくる。
2. $\log A - \log \frac{B}{C} = \log(A \frac{C}{B})$ の変形を行う。

3. ベイズの定理 $\frac{p(A,B|C)}{p(A|C)} = p(B|A,C)$ より、$\frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\alpha,\eta)}{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\alpha,\eta)} = \frac{1}{p(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{x}_{1:n},\alpha,\eta)}$ である。
4. KL 情報量に置き換える。

近似事後分布 $q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})$ と $p(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{x}_{1:n},\alpha,\eta)$ の KL 情報量になることが分かる。
　またここから、対数周辺尤度と変分下限、KL 情報量は

$$\log p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\alpha,\eta) = F[q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})] + \mathrm{KL}[q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}) \parallel p(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{x}_{1:n},\alpha,\eta)] \tag{3.46}$$

の関係を満たすことが分かる。
　従って、変分下限を最大 (KL 情報量を最小) にする $q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})$ を求めることで、対数周辺尤度を最大化できることが分かる。(図 3.3)

　更に、変分下限は

$$\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}|\alpha,\eta)}{q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \qquad (3.50)\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})p(\boldsymbol{\phi}|\eta)p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \left(\log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} + \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\eta)}{q(\boldsymbol{\phi})} + \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} \right) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&\quad + \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\eta)}{q(\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} + \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&\quad + \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi} \int q(\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\eta)}{q(\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} + \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi}) d\boldsymbol{\phi} \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&\quad + \sum_{k=1}^{K} \int q(\phi_k) \log \frac{p(\phi_k|\eta)}{q(\phi_k)} d\phi_k + \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\pi}
\end{aligned}$$

【途中式の途中式】

1. 因子分解仮定 (3.42)、生成過程より、それぞれ分解する。
2. $\log(AB) = \log A + \log B$ の変形を行う。
3. 括弧を展開する。
4. 式を整理する。
5. $\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) = \int q(\boldsymbol{\phi})d\boldsymbol{\phi} = \int q(\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\pi} = 1$ より消える。

となる。ここから更に、KL 情報量の形にしていく。

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \sum_{k=1}^{K} \int q(\phi_k) \log \frac{p(\phi_k|\eta)}{q(\phi_k)} d\phi_k + \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \sum_{k=1}^{K} \int q(\phi_k) \Big(\log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) \Big) d\phi_k + \int q(\boldsymbol{\pi}) \Big(\log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) \Big) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad - \sum_{k=1}^{K} \int q(\phi_k) \Big(-\log p(\phi_k|\eta) + \log q(\phi_k) \Big) d\phi_k - \int q(\boldsymbol{\pi}) \Big(-\log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) + \log q(\boldsymbol{\pi}) \Big) d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad - \sum_{k=1}^{K} \int q(\phi_k) \log \frac{q(\phi_k)}{p(\phi_k|\eta)} d\phi_k - \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{q(\boldsymbol{\pi})}{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)} d\boldsymbol{\pi} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} && (3.52) \\
&\quad - \sum_{k=1}^{K} \mathrm{KL}[q(\phi_k) \parallel p(\phi_k|\eta)] - \mathrm{KL}[q(\boldsymbol{\pi}) \parallel p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)] && (3.53)
\end{aligned}
$$

【途中式の途中式】

1. $\log \frac{A}{B} = \log A - \log B$ の変形を行う。
2. 元の分母分子を入れ替えるために、括弧から -1 を括り出す。
3. $-\log A + \log B = \log \frac{B}{A}$ の変形を行う。
4. KL 情報量に置き換える。

式 (3.52) について

$$
\begin{aligned}
\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}) &= \log \prod_{i=1}^{n} p(x_i, z_i|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \log p(x_i, z_i|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})
\end{aligned}
$$

であり、また

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \log q(\boldsymbol{z}_{1:n}) &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{z_i} q(z_i) \log q(z_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k)
\end{aligned}
$$

である。よって、式 (3.52) は

$$
\begin{aligned}
&\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})}{q(\boldsymbol{z}_{1:n})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} && (3.52)\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \Big(\log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) - \log q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \Big) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log q(\boldsymbol{z}_{1:n}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \int q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \log q(\boldsymbol{z}_{1:n})\\
&= \int \sum_{i=1}^{n} \sum_{z_i} q(z_i)q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k) && (3.55)
\end{aligned}
$$

【途中式の途中式】

1. $\log \frac{A}{B} = \log A - \log B$ の変形を行う。
2. 括弧を展開する。
3. 式を整理する。
4. 式を整理する。
   - $\int q(\boldsymbol{\phi}) d\boldsymbol{\phi} = \int q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi} = 1$ より消える。
   - 式を置き換える。

となる。従って、変分下限は

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})] &= \int \sum_{i=1}^{n} \sum_{z_i} q(z_i)q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k)\\
&\qquad + \sum_{k=1}^{K} \int q(\phi_k) \log \frac{p(\phi_k|\eta)}{q(\phi_k)} d\phi_k + \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int \sum_{i=1}^{n} \sum_{z_i} q(z_i)q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k)\\
&\qquad - \sum_{k=1}^{K} \mathrm{KL}[q(\phi_k) \parallel p(\phi_k|\eta)] - \mathrm{KL}[q(\boldsymbol{\pi}) \parallel p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)]
\end{aligned}
$$

になる。

・近似事後分布 $q(z_i)$ の導出

変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})]$ から $q(z_i)$ に関係のある項のみ取り出して $\tilde{F}[q(z_i)]$ とおく (取り出さなくとも変分の時点で消えてしまう (たぶん))。

$$
\begin{aligned}
\tilde{F}[q(z_i)] &= \int \sum_{z_i} q(z_i)q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k)\\
&= \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \int q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k) && (3.56)
\end{aligned}
$$

z_i についてのみ取り出したので、$z_1, z_2, \cdots, z_{i-1}, z_{i+1}, \cdots, z_n$ は含まれない。

・正攻法 Ver

制約 $\sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) = 1$ の下での最適化問題として、ラグランジュ乗数 λ を用いて、ラグランジュ関数 $L[q(z_i)]$ を置く。

$$\begin{aligned}L[q(z_i)] = \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \log q(z_i = k) \\ + \lambda \left(1 - \sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) \right)\end{aligned}$$

この式を $q(z_i = k)$ に関して変分する。

$$\begin{aligned}\frac{\partial L[q(z_i)]}{\partial q(z_i = k)} &= \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \log q(z_i = k) - q(z_i = k) \frac{1}{q(z_i = k)} - \lambda \\ &= \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \log q(z_i = k) - 1 - \lambda \qquad (3.57)\end{aligned}$$

$\frac{\partial L[q(z_i)]}{\partial q(z_i = k)} = 0$ となる $q(z_i = k)$ を求める。

$$\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \log q(z_i = k) - 1 - \lambda = 0 \qquad (3.57)$$

$$\begin{aligned}\log q(z_i = k) &= \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - 1 - \lambda \\ q(z_i = k) &= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - 1 - \lambda \right] \qquad (3.58)\end{aligned}$$

制約条件 $\sum_{k=1}^{K} q(z_i = k) = 1$ に代入すると

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{K} \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - 1 - \lambda \right] &= 1 \\ \exp[-1 - \lambda] \sum_{k=1}^{K} \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \right] &= 1 \\ \exp[-1 - \lambda] &= \frac{1}{\sum_{k=1}^{K} \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \right]}\end{aligned}$$

となる。これを式 (3.58) に代入すると

$$\begin{aligned}q(z_i = k) &= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - 1 - \lambda \right] \qquad (3.58) \\ &= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \right] \exp[-1 - \lambda] \\ &= \frac{\exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \right]}{\sum_{k'=1}^{K} \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k' | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \right]} \qquad (3.60)\end{aligned}$$

が得られる。

・工夫 Ver

$$\tilde{F}[q(z_i = k)] = \sum_{k=1}^{K} f(z_i = k, q)$$

とおくと、$f(z_i = k, q)$ は

$$f(z_i = k, q) = q(z_i = k) \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - q(z_i = k) \log q(z_i = k)$$

である。この式を $q(z_i = k)$ に関して変分する。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(z_i = k, q)}{\partial q(z_i = k)} &= \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \log q(z_i = k) - q(z_i = k) \frac{1}{q(z_i = k)} \\
&= \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \log q(z_i = k) - 1
\end{aligned}$$

$\frac{\partial f(z_i = k, q)}{\partial q(z_i = k)} = 0$ となる $q(z_i = k)$ を求める。

$$\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - \log q(z_i = k) - 1 = 0$$

$$\begin{aligned}
\log q(z_i = k) &= \int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - 1 \\
q(z_i = k) &= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} - 1 \right] \\
&\propto \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(x_i, z_i = k | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \right]
\end{aligned}$$

$\exp[-1]$ は $z_i = k$ に無関係な定数因子なので省き、$q(z_i = k)$ との比例関係に注目する。
　この式を正規化 (和が 1 となるように) する。ここでは、1 から K までの和をとったもので割ると、式 (3.60) になることが確認できる。

・近似事後分布 $q(\boldsymbol{\pi})$ の導出

　続いて、変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})]$ から $q(\boldsymbol{\pi})$ に関係のある項のみ取り出して $\tilde{F}[q(\boldsymbol{\pi})]$ とおく。

$$\tilde{F}[q(\boldsymbol{\pi})] = \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} + \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi} | \alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\pi}$$

・正攻法 Ver

　制約条件 $\int q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi} = 1$ から、ラグランジュ乗数 λ を用いて、ラグランジュ関数 $L[q(\boldsymbol{\pi})]$ をおき、制約付き最適化問題として解く。

$$
\begin{aligned}
L[q(\boldsymbol{\pi})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\pi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} d\boldsymbol{\pi} + \lambda \left(1 - \int q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi}\right) \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\pi}) \Big(\log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi})\Big) d\boldsymbol{\pi} + \lambda \left(1 - \int q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi}\right) \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\pi}) \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) d\boldsymbol{\pi} - \int q(\boldsymbol{\pi}) \log q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi} + \lambda \left(1 - \int q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi}\right)
\end{aligned}
$$

この式を $q(\boldsymbol{\pi})$ に関して変分する。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L[q(\boldsymbol{\pi})]}{\partial q(\boldsymbol{\pi})} &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} \\
&\quad + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) - q(\boldsymbol{\pi}) \frac{1}{q(\boldsymbol{\pi})} - \lambda \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} \\
&\quad + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) - 1 - \lambda
\end{aligned}
$$

$\frac{\partial L[q(\boldsymbol{\pi})]}{\partial q(\boldsymbol{\pi})} = 0$ となる $q(\boldsymbol{\pi})$ を求める。

$$
\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) - 1 - \lambda = 0
$$

$$
\begin{aligned}
\log q(\boldsymbol{\pi}) &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - 1 - \lambda \\
q(\boldsymbol{\pi}) &= \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - 1 - \lambda\right] \\
&= p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi}\right] \exp[-1 - \lambda]
\end{aligned}
$$

制約条件 $\int q(\boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\pi} = 1$ に代入すると

$$
\begin{aligned}
\int p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi}\right] \exp[-1 - \lambda] d\boldsymbol{\pi} &= 1 \\
\exp[-1 - \lambda] &= \frac{1}{\int p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{x}_{1:n}, \boldsymbol{z}_{1:n} | \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi}) d\boldsymbol{\phi}\right] d\boldsymbol{\pi}}
\end{aligned}
$$

となる。これを上の式に代入すると

$$q(\boldsymbol{\pi}) = \frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}\right]}{\int p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}\right]d\boldsymbol{\pi}}$$

が得られる。次で求める式 (3.66) を正規化したものと等しくなることが確認できる。

・工夫 Ver

$$\tilde{F}[q(\boldsymbol{\pi})] = \int f(\boldsymbol{\pi},q)d\boldsymbol{\pi}$$

とおくと、$f(\boldsymbol{\pi},q)$ は

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{\pi},q) &= \int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + q(\boldsymbol{\pi})\log\frac{p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)}{q(\boldsymbol{\pi})} \\
&= \int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + q(\boldsymbol{\pi})\Big(\log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi})\Big) \\
&= \int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - q(\boldsymbol{\pi})\log q(\boldsymbol{\pi}) \qquad (3.63)
\end{aligned}$$

である。この式を $q(\boldsymbol{\pi})$ に関して変分する。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\boldsymbol{\pi},q)}{\partial q(\boldsymbol{\pi})} &= \int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) - q(\boldsymbol{\pi})\frac{1}{q(\boldsymbol{\pi})} \\
&= \int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) - 1 \qquad (3.64)
\end{aligned}$$

$\frac{\partial f(\boldsymbol{\pi},q)}{\partial q(\boldsymbol{\pi})} = 0$ となる $q(\boldsymbol{\pi})$ を求める。

$$\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - \log q(\boldsymbol{\pi}) - 1 = 0$$

$$\begin{aligned}
\log q(\boldsymbol{\pi}) &= \int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - 1 \\
q(\boldsymbol{\pi}) &= \exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi} + \log p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) - 1\right] \\
&= p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}\right]\exp[-1] \\
&\propto p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}\right] \qquad (3.66)
\end{aligned}$$

更に、生成過程より

$$p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}) = p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})$$

と分割できるので、$\boldsymbol{\pi}$ と関係のない定数因子を省くと $q(\boldsymbol{\pi})$ は

$$
\begin{aligned}
q(\boldsymbol{\pi}) &\propto p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}\right] \quad (3.66)\\
&= p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\int\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})\log\Big(p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})\Big)d\boldsymbol{\phi}\right]\\
&\propto p(\boldsymbol{\pi}|\alpha)\exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})\log p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})\right] \quad (3.67)
\end{aligned}
$$

となる。

・**近似事後分布 $q(\phi_k)$ の導出**

最後に、変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})]$ から $q(\phi_k)$ に関係のある項のみを取り出して $\tilde{F}[q(\phi_k)]$ とおく。

ただし、生成過程より

$$
p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi}) = p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})
$$

と分割でき、また

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}) &= \prod_{i=1}^{n} p(x_i|z_i,\boldsymbol{\phi})\\
&= \prod_{i=1}^{n}\prod_{k=1}^{K} p(x_i|\phi_{z_i})^{\delta(z_i=k)}\\
\log p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi}) &= \log\prod_{i=1}^{n}\prod_{k=1}^{K} p(x_i|\phi_{z_i})^{\delta(z_i=k)}\\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{K}\delta(z_i=k)\log p(x_i|\phi_{z_i})
\end{aligned}
$$

である。よって、変分下限の 1 つ目の因子は

$$
\begin{aligned}
&\int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n},\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log\Big(p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})\Big)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\Big(\log p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})+\log p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})\Big)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{x}_{1:n}|\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi})d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\pi}+\int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\pi}\\
&= \int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\phi})q(\boldsymbol{\pi})\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{K}\delta(z_i=k)\log p(x_i|\phi_{z_i})d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\pi}+\int\sum_{i=1}^{n}\sum_{z_i} q(\boldsymbol{z}_{1:n})q(\boldsymbol{\pi})\log p(\boldsymbol{z}_{1:n}|\boldsymbol{\pi})d\boldsymbol{\pi}
\end{aligned}
$$

となる。
　従って、$\tilde{F}[q(\phi_k)]$ は

$$\tilde{F}[q(\phi_k)] = \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\phi_k d\boldsymbol{\pi} + \int q(\phi_k) \log \frac{p(\phi_k|\eta)}{q(\phi_k)} d\phi_k \tag{3.69}$$

である。($\sum_{i=1}^{n} q(z_i = k)$ ではなく $\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n})$ なのは何故だ??)

・正攻法 Ver

　制約条件 $\int q(\phi_k) d\phi_k = 1$ から、ラグランジュ乗数 λ を用いて、ラグランジュ関数 $L[q(\phi_k)]$ をおき、制約付き最適化問題として解く。

$$\begin{aligned}
L[q(\phi_k)] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\phi_k d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \int q(\phi_k) \log \frac{p(\phi_k|\eta)}{q(\phi_k)} d\phi_k + \lambda \left(1 - \int q(\phi_k) d\phi_k\right) \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\phi_k d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \int q(\phi_k) \Big(\log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k)\Big) d\phi_k + \lambda \left(1 - \int q(\phi_k) d\phi_k\right) \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\phi_k d\boldsymbol{\pi} \\
&\quad + \int q(\phi_k) \log p(\phi_k|\eta) d\phi_k - \int q(\phi_k) \log q(\phi_k) d\phi_k + \lambda \left(1 - \int q(\phi_k) d\phi_k\right)
\end{aligned}$$

　この式を $q(\phi_k)$ に関して変分する。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L[q(\phi_k)]}{\partial q(\phi_k)} &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi} + \log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) - q(\phi_k) \frac{1}{q(\phi_k)} - \lambda \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi} + \log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) - 1 - \lambda
\end{aligned}$$

　$\frac{\partial L[q(\phi_k)]}{\partial q(\phi_k)} = 0$ となる $q(\phi_k)$ を求める。

$$\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi} + \log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) - 1 - \lambda = 0$$

$$\begin{aligned}
\log q(\phi_k) &= \int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi} + \log p(\phi_k|\eta) - 1 - \lambda \\
q(\phi_k) &= \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi} + \log p(\phi_k|\eta) - 1 - \lambda\right] \\
&= \log p(\phi_k|\eta) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi}\right] \exp[-1 - \lambda]
\end{aligned}$$

制約条件 $\int q(\phi_k)d\phi_k = 1$ に代入すると

$$\int \log p(\phi_k|\eta) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi}\right] \exp[-1-\lambda] d\phi_k = 1$$

$$\exp[-1-\lambda] = \frac{1}{\int \log p(\phi_k|\eta) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi}\right] d\phi_k}$$

となる。これを上の式に代入すると

$$q(\phi_k) = \frac{\log p(\phi_k|\eta) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi}\right]}{\int \log p(\phi_k|\eta) \exp\left[\int \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) d\boldsymbol{\pi}\right] d\phi_k}$$

が得られる。次で求める式 (3.71) を正規化したものと等しくなることが確認できる。

・工夫 Ver

$$\tilde{F}[q(\phi_k)] = \int f(\phi_k, q) d\phi_k$$

とおくと、$f(\phi_k, q)$ は

$$\begin{aligned}
f(\phi_k, q) &= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + q(\phi_k) \log \frac{p(\phi_k|\eta)}{q(\phi_k)} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + q(\phi_k) \Big(\log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k)\Big) \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) q(\phi_k) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + q(\phi_k) \log p(\phi_k|\eta) - q(\phi_k) \log q(\phi_k)
\end{aligned}$$

である。この式を $q(\phi_k)$ に関して変分する。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\phi_k, q)}{\partial q(\phi_k)} &= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + \log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) - q(\phi_k) \frac{1}{q(\phi_k)} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + \log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) - 1 \qquad (3.70)
\end{aligned}$$

$\frac{\partial f(\phi_k, q)}{\partial q(\phi_k)} = 0$ となる $q(\phi_k)$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + \log p(\phi_k|\eta) - \log q(\phi_k) - 1 = 0 \\
\log q(\phi_k) &= \sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + \log q(\phi_k|\eta) - 1 \\
q(\phi_k) &= \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i}) + \log q(\phi_k|\eta) - 1\right] \\
&= q(\phi_k|\eta) \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i})\right] \exp[-1] \\
&\propto q(\phi_k|\eta) \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}_{1:n}} q(\boldsymbol{z}_{1:n}) \sum_{i=1}^{n} \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i})\right] \\
&= q(\phi_k|\eta) \exp\left[\sum_{i=1}^{n} \sum_{z_i} q(z_i) \delta(z_i = k) \log p(x_i|\phi_{z_i})\right] \\
&= q(\phi_k|\eta) \exp\left[\sum_{i=1}^{n} q(z_i = k) \log p(x_i|\phi_k)\right] \qquad (3.71)
\end{aligned}
$$

3.3.3 変分ベイズ法 (2)

本を参照のこと。

3.3.4 LDA の変分ベイズ法 (準備)

・Dirichlet 分布の期待値の導出

Dirichlet 分布の期待値計算を導出する。

・プサイ関数

$$
\frac{d\Gamma(x)}{dx} = \Psi(x)
$$

$$
\begin{aligned}
\int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta} &= 1 \\
\int \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^{K} \theta_k^{\alpha_k - 1} d\boldsymbol{\theta} &= 1 \\
\int \prod_{k=1}^{K} \theta_k^{\alpha_k - 1} d\boldsymbol{\theta} &= \frac{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)} \qquad (3.75) \\
\int \exp\left[\log\left(\prod_{k=1}^{K} \theta_k^{\alpha_k - 1}\right)\right] d\boldsymbol{\theta} &= \frac{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)} \\
\int \exp\left[\sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) \log \theta_k\right] d\boldsymbol{\theta} &= \frac{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)} \qquad (3.76) \\
\log\left(\int \exp\left[\sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) \log \theta_k\right] d\boldsymbol{\theta}\right) &= \log\left(\frac{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)}\right) \\
&= \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma(\alpha_k) - \log \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right) \qquad (3.77)
\end{aligned}
$$

この式の両辺を α_k で微分する。

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\int \exp\left[\sum_{k'=1}^{K} (\alpha_{k'} - 1) \log \theta_{k'}\right] d\boldsymbol{\theta}} \int \exp\left[\sum_{k'=1}^{K} (\alpha_{k'} - 1) \log \theta_{k'}\right] d\boldsymbol{\theta} (\log \theta_k) &= \frac{d \log \Gamma(\alpha_k)}{d\alpha_k} - \frac{d \log \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right)}{d\alpha_k} \\
\int (\log \theta_k) \frac{\Gamma(\sum_{k'=1}^{K} \alpha_{k'})}{\prod_{k'=1}^{K} \Gamma(\alpha_{k'})} \prod_{k'=1}^{K} \theta_{k'}^{\alpha_{k'} - 1} d\boldsymbol{\theta} &= \Psi(\alpha_k) - \Psi\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right) \\
\int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \log \theta_k d\boldsymbol{\theta} &= \Psi(\alpha_k) - \Psi\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right) \\
\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}[\log \theta_k] &= \Psi(\alpha_k) - \Psi\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right) \qquad (3.79)
\end{aligned}
$$

【途中式の途中式】

0. 左辺は合成関数の微分より
   - $f' = (\log A)' = \frac{1}{A}$
   - $A' = (\exp[B])' = \exp[B]$
   - $B' = (\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \log \theta_k - \theta_k)' = \log \theta_k$
1. - 左辺の前の項を式 (3.76) より正規化項の逆数に置き換える。
   - 左辺の後の項の $\exp[\log()]$ を外す。
   - 右辺をプサイ関数にそれぞれ置き換える。
2. Dirichlet 分布の式を $p()$ の表記に戻す。
3. 期待値の計算式になっているため $\mathbb{E}[]$ の表記に置き換える。

続いて、この期待値計算を用いて、Dirichlet 分布の KL 情報量を求めていく。

・**Dirichlet 分布の KL 情報量の導出**

$$
\begin{aligned}
\int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta} &= \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^K \theta_k^{\alpha_k - 1} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \left(\log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} + \log \prod_{k=1}^K \theta_k^{\alpha_k - 1} \right) d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\theta} \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} + \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log \prod_{k=1}^K \theta_k^{\alpha_k - 1} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} + \sum_{k=1}^K (\alpha_k - 1) \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log \theta_k d\boldsymbol{\theta} \\
&= \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} + \sum_{k=1}^K (\alpha_k - 1) \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi})}[\log \theta_k] \qquad (3.80)
\end{aligned}
$$

これを用いて、KL 情報量は

$$
\begin{aligned}
\mathrm{KL}[p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \parallel p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})] &= \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi})}{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \Big(\log p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) - \log p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \Big) d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\theta} - \int p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}) \log p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta} \\
&= \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \xi_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\xi_k)} + \sum_{k=1}^K (\xi_k - 1) \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi})}[\log \theta_k] \\
&\quad - \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} - \sum_{k=1}^K (\alpha_k - 1) \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi})}[\log \theta_k] \\
&= \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \xi_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\xi_k)} - \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} + \sum_{k=1}^K \{(\xi_k - 1) - (\alpha_k - 1)\} \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi})}[\log \theta_k] \\
&= \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \xi_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\xi_k)} - \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} + \sum_{k=1}^K (\xi_k - \alpha_k) \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi})}[\log \theta_k] \qquad (3.81)
\end{aligned}
$$

となる。

3.3.5 LDA の変分ベイズ法 (1)

LDA の変分ベイズ法の導出を行う。この節では、あらかじめ近似事後分布の形を仮定せずに導出する。

・**変分下限の導出**

$\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}$ について周辺化 (積分消去) して対数をとった対数周辺尤度 $\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ に対して、イエンセンの不等式を用いて変分下限を求める。

$$\begin{aligned}\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}} p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\ &= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}) \frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\ &\geq \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \equiv F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})] \end{aligned} \tag{3.82}$$

ここで、近似事後分布は

$$\begin{aligned} q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}) &= q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi}) \\ &= \left[\prod_{d=1}^{M}\prod_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i})\right]\left[\prod_{d=1}^{M} q(\boldsymbol{\theta}_d)\right]\left[\prod_{k=1}^{K} q(\boldsymbol{\phi}_k)\right] \end{aligned} \tag{3.83}$$

と因子分解できると仮定する。
　また、結合分布は生成過程より、ベイズの定理を用いて

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \\ &= p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \\ &= \left[\prod_{d=1}^{M}\prod_{i=1}^{n_d} p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_{z_{d,i}})p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)\right]\left[\prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})\right]\left[\prod_{d=1}^{M} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})\right] \end{aligned} \tag{3.84}$$

となる。
　従って、式 (3.83) と式 (3.84) より、変分下限 $F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})]$ は

$$\begin{aligned} F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \qquad (3.82) \\ &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\ &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi}) \left(\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) - \log q(\boldsymbol{z}) + \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta})} + \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi})}\right) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\ &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} - \int q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log q(\boldsymbol{z}) \\ &\quad + \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\phi}) d\boldsymbol{\phi} \int q(\boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} + \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta} \int q(\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} \\ &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{\theta})q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} - \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log q(\boldsymbol{z}) \\ &\quad + \int q(\boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} + \int q(\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} \end{aligned}$$

【途中式の途中式】

1. 式 (3.83)、式 (3.84) より項を分解する。

2. $\log \frac{AB}{C} = \log A + \log B - \log C$ の変形を行う。
3. 括弧を展開する。
4. $\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) = \int q(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta} = \int q(\boldsymbol{\phi}) d\boldsymbol{\phi} = 1$ であるため消える。

となる。ここから更に、KL 情報量の形にしていく。

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} - \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log q(\boldsymbol{z}) \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} + \int q(\boldsymbol{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi})} d\boldsymbol{\phi} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} - \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log q(\boldsymbol{z}) \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\theta}) \Big(\log p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) - \log q(\boldsymbol{\theta}) \Big) d\boldsymbol{\theta} + \int q(\boldsymbol{\phi}) \Big(\log p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) - \log q(\boldsymbol{\phi}) \Big) d\boldsymbol{\phi} \\
&= \int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i}) q(\boldsymbol{\theta}_d) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(w_{d,i}|z_{d,i},\boldsymbol{\phi}) p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) \log q(z_{d,i}=k) \\
&\quad - \sum_{d=1}^{M} \int q(\boldsymbol{\theta}_d) \Big(-\log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) + \log q(\boldsymbol{\theta}_d) \Big) d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{k=1}^{K} \int q(\boldsymbol{\phi}_k) \Big(-\log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) + \log q(\boldsymbol{\phi}_k) \Big) d\boldsymbol{\phi}_k \\
&= \int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i}) q(\boldsymbol{\theta}_d) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(w_{d,i}|z_{d,i},\boldsymbol{\phi}) p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) \log q(z_{d,i}=k) \\
&\quad - \sum_{d=1}^{M} \int q(\boldsymbol{\theta}_d) \log \frac{q(\boldsymbol{\theta}_d)}{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})} d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{k=1}^{K} \int q(\boldsymbol{\phi}_k) \log \frac{q(\boldsymbol{\phi}_k)}{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})} d\boldsymbol{\phi}_k \\
&= \int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i}) q(\boldsymbol{\theta}_d) q(\boldsymbol{\phi}) \log p(w_{d,i}|z_{d,i},\boldsymbol{\phi}) p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) \log q(z_{d,i}=k) \\
&\quad - \sum_{d=1}^{M} \mathrm{KL}[q(\boldsymbol{\theta}_d) \parallel p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})] - \sum_{k=1}^{K} \mathrm{KL}[q(\boldsymbol{\phi}_k) \parallel p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})]
\end{aligned} \tag{3.85}
$$

【途中式の途中式】

1. $\log \frac{A}{B} = \log A - \log B$ の変形を行う。
2.
   - 前の 2 つの因子は、式 (3.84) より項を更に分解する。
   - 後の 2 つの因子は、分母分子を入れ替えるために括弧から -1 を外に出す。
3. $-\log A + \log B = \log \frac{B}{A}$ の変形を行う。
4. KL 情報量に置き換える。

以上で変分下限が求まった。次からは、この変分下限を最大にする近似事後分布を求めていく。

・トピック分布の近似事後分布の導出

変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\pi})]$ から、$q(\boldsymbol{\theta}_d)$ に関係する項のみを取り出して $\tilde{F}[q(\boldsymbol{\theta}_d)]$ とおく。

$$
\tilde{F}[q(\boldsymbol{\theta}_d)] = \int q(\boldsymbol{\theta}_d) \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) d\boldsymbol{\theta}_d - \int q(\boldsymbol{\theta}_d) \log \frac{q(\boldsymbol{\theta}_d)}{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})} d\boldsymbol{\theta} \tag{3.86}
$$

$q(\boldsymbol{\theta}_d)$ に関係する項を取り出したので、$d = 1, 2, \cdots, d-1, d+1, \cdots, D$ については含まれない。(頭の $q(\boldsymbol{z})$ はそのままなのは何故??)

$\tilde{F}[q(\boldsymbol{\theta}_d)] = \int f(\boldsymbol{\theta}_d, q(\boldsymbol{\theta}_d)) d\boldsymbol{\theta}_d$ とすると、$f(\boldsymbol{\theta}_d, q(\boldsymbol{\theta}_d))$ は

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{\theta}_d, q(\boldsymbol{\theta}_d)) &= q(\boldsymbol{\theta}_d) \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) - q(\boldsymbol{\theta}_d) \log \frac{q(\boldsymbol{\theta}_d)}{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})} \\
&= q(\boldsymbol{\theta}_d) \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) - q(\boldsymbol{\theta}_d) \Big(\log q(\boldsymbol{\theta}_d) - \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \Big) \\
&= q(\boldsymbol{\theta}_d) \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) - q(\boldsymbol{\theta}_d) \log q(\boldsymbol{\theta}_d) + q(\boldsymbol{\theta}_d) \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})
\end{aligned}
$$

である。この式を $q(\boldsymbol{\theta}_d)$ に関して変分する。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(\boldsymbol{\theta}_d, q(\boldsymbol{\theta}_d))}{\partial q(\boldsymbol{\theta}_d)} &= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) - \log q(\boldsymbol{\theta}_d) - q(\boldsymbol{\theta}_d) \frac{1}{q(\boldsymbol{\theta}_d)} + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) - \log q(\boldsymbol{\theta}_d) + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) - 1 \qquad (3.87)
\end{aligned}
$$

$\frac{\partial f(\boldsymbol{\theta}_d, q(\boldsymbol{\theta}_d))}{\partial q(\boldsymbol{\theta}_d)} = 0$ となる $q(\boldsymbol{\theta}_d)$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) - \log q(\boldsymbol{\theta}_d) + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) - 1 = 0 \\
\log q(\boldsymbol{\theta}_d) &= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) - 1 \\
q(\boldsymbol{\theta}_d) &= \exp \left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) - 1 \right] \\
&\propto \exp \left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \right]
\end{aligned}
$$

更に、正規化項を省いた Dirichlet 分布 $p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \propto \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\alpha_k - 1}$ を用いて

$$
\begin{aligned}
q(\boldsymbol{\theta}_d) &\propto \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) + \log p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})\right] \\
&\propto \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \log \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\delta(z_{d,i}=k)} + \log \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\alpha_k - 1}\right] \\
&= \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} \delta(z_{d,i}=k) \log \theta_{d,k} + \sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) \log \theta_{d,k}\right] \\
&= \exp\left[\sum_{k=1}^{K} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{d,k}] \log \theta_{d,k} + \sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) \log \theta_{d,k}\right] \\
&= \exp\left[\sum_{k=1}^{K} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{d,k}] + \alpha_k - 1) \log \theta_{d,k}\right] \\
&= \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{d,k}] + \alpha_k - 1} \qquad (3.88)
\end{aligned}
$$

となる。
　ここで

$$
\xi_{d,k}^{\theta} = \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{d,k}] + \alpha_k \qquad (3.89)
$$

とおくと式 (3.88) から、$q(\boldsymbol{\theta}_d)$ はパラメータ $\boldsymbol{\xi}_d^{\theta} = (\xi_{d,1}^{\theta}, \xi_{d,2}^{\theta}, \cdots, \xi_{d,K}^{\theta})$ を持つ正規化項のない Dirichlet 分布の形をしていることが分かる。正規化すると

$$
q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) = \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K} \xi_{d,k}^{\theta}} \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\xi_{d,k}^{\theta} - 1} \qquad (3.90)
$$

が得られる。

・単語分布の近似事後分布の導出

　続いて、単語分布の近似事後分布を導出する。
　トピック分布と同様に、変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})]$ から $\boldsymbol{\phi}_k$ に関係のある項のみ取り出して、$\tilde{F}[\boldsymbol{\phi}_k]$ とおく。

ここで、変分下限の 1 つ目の因子は

$$
\begin{aligned}
&\int \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i})q(\boldsymbol{\theta}_d)q(\boldsymbol{\phi})\log p(w_{d,i}|z_{d,i},\boldsymbol{\phi})p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i})q(\boldsymbol{\theta}_d)q(\boldsymbol{\phi})\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_{z_{d,i}})p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i})q(\boldsymbol{\theta}_d)q(\boldsymbol{\phi})\log\left(\prod_{k=1}^{K} p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k)^{\delta(z_{d,i}=k)}p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)\right)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int q(\boldsymbol{\phi})\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{z_{d,i}} q(\boldsymbol{\theta}_d)q(z_{d,i})\sum_{k=1}^{K}\delta(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k)p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int q(\boldsymbol{\phi})\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{k=1}^{K} q(\boldsymbol{\theta}_d)q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k)p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int \sum_{k=1}^{K} q(\boldsymbol{\phi}_k)\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(\boldsymbol{\theta}_d)q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k)p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}_d \qquad (3.91)
\end{aligned}
$$

である。(ちょっとよく解ってない…)

$$
\tilde{F}[\boldsymbol{\phi}_k] = \int q(\boldsymbol{\phi}_k)\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k)d\boldsymbol{\phi}_k - \int q(\boldsymbol{\phi}_k)\log\frac{q(\boldsymbol{\phi}_k)}{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})}d\boldsymbol{\phi}_k \qquad (3.92)
$$

$q(\boldsymbol{\phi}_k)$ に関係する項を取り出したので、$k = 1, 2, \cdots, k-1, k+1, \cdots, K$ については含まれない。
$\tilde{F}[\boldsymbol{\phi}_k] = \int f(\boldsymbol{\phi}_k, q(\boldsymbol{\phi}_k))d\boldsymbol{\phi}_k$ とすると

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{\phi}_k, q(\boldsymbol{\phi}_k)) &= q(\boldsymbol{\phi}_k)\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) - q(\boldsymbol{\phi}_k)\log\frac{q(\boldsymbol{\phi}_k)}{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})} \\
&= q(\boldsymbol{\phi}_k)\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) - q(\boldsymbol{\phi}_k)\Big(\log q(\boldsymbol{\phi}_k) - \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})\Big) \\
&= q(\boldsymbol{\phi}_k)\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) - q(\boldsymbol{\phi}_k)\log q(\boldsymbol{\phi}_k) + q(\boldsymbol{\phi}_k)\log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
$$

である。
この式を $q(\boldsymbol{\phi}_k)$ に関して変分する。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(\boldsymbol{\phi}_k, q(\boldsymbol{\phi}_k))}{\partial q(\boldsymbol{\phi}_k)} &= \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) - \log q(\boldsymbol{\phi}_k) - q(\boldsymbol{\phi}_k)\frac{1}{q(\boldsymbol{\phi}_k)} + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \\
&= \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) - \log q(\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) - 1 \qquad (3.93)
\end{aligned}
$$

$\frac{\partial f(\boldsymbol{\phi}_k, q(\boldsymbol{\phi}_k))}{\partial q(\boldsymbol{\phi}_k)} = 0$ となる $q(\boldsymbol{\phi}_k)$ を求める。

$$\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) - \log q(\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) - 1 = 0$$

$$\begin{aligned}
\log q(\boldsymbol{\phi}_k) &= \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) - 1 \\
q(\boldsymbol{\phi}_k) &= \exp\left[\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) - 1\right] \\
&\propto \exp\left[\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})\right]
\end{aligned}$$

更に、正規化項を省いた Dirichlet 分布 $p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \propto \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\beta_v - 1}$ を用いて

$$\begin{aligned}
q(\boldsymbol{\phi}_k) &\propto \exp\left[\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})\right] \\
&\propto \exp\left[\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}=k)\log \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\delta(w_{d,i}=v)} + \log \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\beta_v - 1}\right] \\
&= \exp\left[\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{v=1}^{V} q(z_{d,i}=k)\delta(w_{d,i}=v)\log \phi_{k,v} + \sum_{v=1}^{V}(\beta_v - 1)\log \phi_{k,v}\right] \\
&= \exp\left[\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}]\log \phi_{k,v} + \sum_{v=1}^{V}(\beta_v - 1)\log \phi_{k,v}\right] \\
&= \exp\left[\sum_{v=1}^{V} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - 1)\log \phi_{k,v}\right] \\
&= \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - 1} \qquad (3.94)
\end{aligned}$$

となる。

ここで

$$\xi_{k,v}^{\phi} = \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v \qquad (3.95)$$

とおくと式 (3.94) から、$q(\boldsymbol{z})$ はパラメータ $\boldsymbol{\xi}_k^{\phi} = (\xi_{k,1}^{\phi}, \xi_{k,2}^{\phi}, \cdots, \xi_{k,V}^{\phi})$ を持つ正規化項のない Dirichlet 分布の形をしていることが分かる。正規化すると

$$q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) = \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\xi_{k,v}^{\phi} - 1} \qquad (3.96)$$

が得られる。

・トピック集合の近似事後分布の導出

最後に、トピック集合の近似事後分布を求めていく。

これまでと同様に、変分下限 $F[q(\boldsymbol{z}_{1:n}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\pi})]$ から $q(z_{d,i})$ に関係する項のみ取り出して $\tilde{F}[q(z_{d,i})]$ とする。

$$
\begin{aligned}
\tilde{F}[q(z_{d,i})] &= \int \sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i}) q(\boldsymbol{\theta}_d) q(\boldsymbol{\phi}) \log \Big(p(w_{d,i} | z_{d,i}, \boldsymbol{\phi}) p(z_{d,i} | \boldsymbol{\theta}_d) \Big) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k) \\
&= \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log \Big(p(w_{d,i} | \boldsymbol{\phi}_k) p(z_{d,i} = k | \boldsymbol{\theta}_d) \Big) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k) \\
&= \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log(\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k) \qquad (3.97)
\end{aligned}
$$

$\tilde{F}[q(z_{d,i})]$ を $q(z_{d,i} = k)$ に関して変分する。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{F}[q(z_{d,i})]}{\partial q(z_{d,i} = k)} &= \int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log(\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - \log q(z_{d,i} = k) - q(z_{d,i} = k) \frac{1}{q(z_{d,i} = k)} \\
&= \int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log(\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - \log q(z_{d,i} = k) - 1 \qquad (3.98)
\end{aligned}
$$

$\frac{\partial \tilde{F}[q(z_{d,i})]}{\partial q(z_{d,i} = k)} = 0$ となる $q(z_{d,i} = k)$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log(\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - \log q(z_{d,i} = k) - 1 = 0 \\
\log q(z_{d,i} = k) &= \int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log(\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - 1 \\
q(z_{d,i} = k) &= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) \log(\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - 1 \right] \\
&= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}_k) q(\boldsymbol{\theta}_d) (\log \phi_{k,w_{d,i}} + \log \theta_{d,k}) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d - 1 \right] \\
&= \exp \left[\int q(\boldsymbol{\theta}_d) d\boldsymbol{\theta}_d \int q(\boldsymbol{\phi}_k) \log \phi_{k,w_{d,i}} d\boldsymbol{\phi}_k + \int q(\boldsymbol{\phi}_k) d\boldsymbol{\phi}_k \int q(\boldsymbol{\theta}_d) \log \theta_{d,k} d\boldsymbol{\theta}_d - 1 \right] \\
&\propto \exp \left[\int q(\boldsymbol{\phi}_k) \log \phi_{k,w_{d,i}} d\boldsymbol{\phi}_k \right] \exp \left[\int q(\boldsymbol{\theta}_d) \log \theta_{d,k} d\boldsymbol{\theta}_d \right] \\
&= \exp \left[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k)} [\log \phi_{k,w_{d,i}}] \right] \exp \left[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d)} [\log \theta_{d,k}] \right]
\end{aligned}
$$

更に、先ほど得られた

$$
\begin{aligned}
q(\boldsymbol{\phi}_k) &\propto q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \\
q(\boldsymbol{\theta}_d) &\propto q(\boldsymbol{\theta}_d | \boldsymbol{\xi}_k^{\theta})
\end{aligned}
$$

の関係と期待値計算式 (3.79) を用いて

$$
\begin{aligned}
q(z_{d,i}=k) &\propto \exp\left[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k)}[\log \phi_{k,w_{d,i}}]\right] \exp\left[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d)}[\log \theta_{d,k}]\right] \\
&\propto \exp\left[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log \phi_{k,w_{d,i}}]\right] \exp\left[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_k^{\theta})}[\log \theta_{d,k}]\right] \\
&= \exp\left[\Psi(\xi^{\phi}_{k,w_{d,i}}) - \Psi\left(\sum_{v'=1}^{V} \xi^{\theta}_{k,v'}\right)\right] \exp\left[\Psi(\xi^{\theta}_{d,k}) - \Psi\left(\sum_{k'=1}^{K} \xi^{\theta}_{d,k'}\right)\right] \\
&= \exp\left[\Psi(\xi^{\phi}_{k,w_{d,i}})\right] \frac{1}{\exp\left[\Psi\left(\sum_{v'=1}^{V} \xi^{\theta}_{k,v'}\right)\right]} \exp\left[\Psi(\xi^{\theta}_{d,k})\right] \frac{1}{\exp\left[\Psi\left(\sum_{k'=1}^{K} \xi^{\theta}_{d,k'}\right)\right]} \\
&= \frac{\exp\left[\Psi(\xi^{\phi}_{k,w_{d,i}})\right]}{\exp\left[\Psi\left(\sum_{v'=1}^{V} \xi^{\theta}_{k,v'}\right)\right]} \frac{\exp\left[\Psi(\xi^{\theta}_{d,k})\right]}{\exp\left[\Psi\left(\sum_{k'=1}^{K} \xi^{\theta}_{d,k'}\right)\right]}
\end{aligned} \tag{3.99}
$$

が得られる。

3.3.6 LDA の変分ベイズ法 (2)

LDA に対して、あらかじめ近似事後分布の形を仮定して導出する。

トピック分布と単語分布の近似事後分布に関して、それぞれ $\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}, \boldsymbol{\xi}_k^{\phi}$ をパラメータとする Dirichlet 分布 $q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}), q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})$ を仮定する。

・変分下限の導出

$\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}$ について周辺化 (積分消去) して対数をとった対数周辺尤度 $\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ に対して、イエンセンの不等式を用いて変分下限を求める。

$$
\begin{aligned}
\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}} p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi}) \frac{p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\
&\geq \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \equiv F[q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi})]
\end{aligned}
$$

ここで、近似事後分布は

$$
\begin{aligned}
q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi}) &= q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi}) \\
&= \left[\prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i})\right] \left[\prod_{d=1}^{M} q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\right] \left[\prod_{k=1}^{K} q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\right]
\end{aligned}
$$

と因子分解できると仮定する。

また、結合分布は生成過程より、ベイズの定理を用いて

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \\
&= p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \\
&= \left[\prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{n_d} p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_{z_{d,i}}) p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)\right] \left[\prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})\right] \left[\prod_{d=1}^{M} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})\right]
\end{aligned}
$$

となる。
　従って、変分下限 $F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})]$ は

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi})} d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi}) \left(\log\Big(p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) \Big) - \log q(\boldsymbol{z}) + \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta})} + \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi})} \right) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi}) \log\Big(p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) \Big) d\boldsymbol{\phi} d\boldsymbol{\theta} - \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log q(\boldsymbol{z}) \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\xi}^{\theta})} d\boldsymbol{\theta} + \int q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\phi})} d\boldsymbol{\phi} \\
&= \int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \log\Big(p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_{z_{d,i}}) p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta}_d) \Big) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d \qquad \text{(a)} \\
&\quad - \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) \log q(z_{d,i}=k) \\
&\quad + \sum_{d=1}^{M} \int q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})} d\boldsymbol{\theta}_d + \sum_{k=1}^{K} \int q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \log \frac{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})} d\boldsymbol{\phi}_k \qquad \text{(b)}
\end{aligned}
$$

となる。式 (a) は更に

$$
\begin{aligned}
&\int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \log\Big(p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_{z_{d,i}}) p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta}_d) \Big) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d \qquad \text{(a)} \\
&= \int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \log\Big(\prod_{v=1}^{V} p(w_{d,i}|\phi_{k,v})^{\delta(z_{d,i}=k)} p(z_{d,i}=k|\theta_{d,k}) \Big) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} q(z_{d,i}=k) q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \log\Big(\phi_{k,v}^{\delta(z_{d,i}=k)\delta(w_{d,i}=v)} \theta_{d,k}^{\delta(z_{d,i}=k)} \Big) d\boldsymbol{\phi}_k d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} q(z_{d,i}=k) \delta(z_{d,i}=k) \delta(w_{d,i}=v) \int q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}) \log \phi_{k,v} d\boldsymbol{\phi}_k \\
&\quad + \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k) \delta(z_{d,i}=k) \int q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta}) \log \theta_{d,k} d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log \phi_{k,v}] + \sum_{d=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log \theta_{d,k}]
\end{aligned}
$$

となる。また、式 (b) を KL 情報量に置き換える。

$$
\begin{aligned}
&\sum_{d=1}^{M}\int q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\log\frac{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}d\boldsymbol{\theta}_d+\sum_{k=1}^{K}\int q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\log\frac{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}\boldsymbol{\phi}_k \qquad \text{(b)}\\
&=\sum_{d=1}^{M}\int q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\log\Big(p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})-q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\Big)d\boldsymbol{\theta}_d+\sum_{k=1}^{K}\int q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\log\Big(p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})-q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\Big)d\boldsymbol{\phi}_k\\
&=-\sum_{d=1}^{M}\int q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\log\Big(-p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})+q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\Big)d\boldsymbol{\theta}_d-\sum_{k=1}^{K}\int q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\log\Big(-p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})+q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\Big)d\boldsymbol{\phi}_k\\
&=-\sum_{d=1}^{M}\int q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\log\frac{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})}d\boldsymbol{\theta}_d-\sum_{k=1}^{K}\int q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\log\frac{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})}d\boldsymbol{\phi}_k\\
&=-\sum_{d=1}^{M}\mathrm{KL}[q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\parallel p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})]-\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}[q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\parallel p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})]
\end{aligned}
$$

更に、式 (3.81) を用いて KL 情報量を置き換える。

$$
\begin{aligned}
&-\sum_{d=1}^{M}\mathrm{KL}[q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})\parallel p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})]-\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}[q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\parallel p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})]\\
&=-\sum_{d=1}^{M}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}-\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)}\right]-\sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\xi_{k,v}^{\theta}-\alpha_k)\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]\\
&\quad-\sum_{k=1}^{K}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}-\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)}\right]-\sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\xi_{k,v}^{\phi}-\beta_v)\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}]\\
&=\sum_{d=1}^{M}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)}-\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right]+\sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\alpha_k-\xi_{k,v}^{\theta})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]\\
&\quad+\sum_{k=1}^{K}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)}-\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\right]+\sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\beta_v-\xi_{k,v}^{\phi})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}]
\end{aligned}
$$

従って、変分下限は

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})] &= \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}]\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] + \sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}] \\
&\quad - \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k)\log q(z_{d,i}=k) \\
&\quad + \sum_{d=1}^{M}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right] + \sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\alpha_k - \xi_{k,v}^{\theta})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}] \\
&\quad + \sum_{k=1}^{K}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\right] + \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&= \sum_{k=1}^{K}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\right] + \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&\quad + \sum_{d=1}^{M}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right] + \sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k - \xi_{k,v}^{\theta})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}] \\
&\quad - \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k)\log q(z_{d,i}=k) \qquad (3.102)
\end{aligned}
$$

になる。

・トピック分布の近似事後分布のパラメータの導出

変分下限を $\xi_{d,k}^{\theta}$ で微分するには

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})]}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}} &= \frac{\partial}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}}\left(-\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right) + \frac{\partial}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}}\left(-\xi_{d,k}^{\theta}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]\right) \\
&\quad + \sum_{k'=1}^{K}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k'}] + \alpha_{k'} - \xi_{d,k'}^{\theta})\frac{\partial}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}}\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k'}]\right)
\end{aligned}
$$

の 3 つの項の微分をすればよい。

1 つ目の項は、プサイ関数への置き換え (あるいは式 (3.76) から式 (3.77) への式変形) と Dirichlet 分布の期待値計算 (3.74) を用いて

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}}\left(-\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right) &= \frac{\partial}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}}\left(\sum_{k=1}^{K}\log\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta}) - \log\Gamma\Big(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\Big)\right) \\
&= \Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right) \\
&= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]
\end{aligned}
$$

となる。2 つ目の項は

$$
\frac{\partial}{\partial\xi_{d,k}^{\theta}}\left(-\xi_{d,k}^{\theta}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]\right) = -\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]
$$

となるので、1 つ目の項と合わせて消えてしまう。よって、3 つ目の項が 0 となる $\xi^{\theta}_{d,k}$ を求めればよいことが分かる。

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k - \xi^{\theta}_{d,k} &= 0 \\
\xi^{\theta}_{d,k} &= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k
\end{aligned}
$$

これは式 (3.89) と等しくなることが確認できる。

・単語分布の近似事後分布のパラメータの導出

トピック分布と同様に、変分下限を $\xi^{\phi}_{d,k}$ で微分するには

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F[q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi} | \boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi})]}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} &= \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \left(-\log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^{V} \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \Big(-\xi^{\phi}_{k,v} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)}[\log \phi_{k,v}] \Big) \\
&\quad + \sum_{v'=1}^{V} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v'}] + \beta_{v'} - \xi^{\phi}_{k,v'}) \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \Big(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)}[\log \phi_{k,v'}] \Big)
\end{aligned}
$$

の 3 つの項の微分をすればよい。

1 つ目の項は、プサイ関数への置き換え (あるいは式 (3.76) から式 (3.77) への式変形) と Dirichlet 分布の期待値計算 (3.74) を用いて

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \left(-\log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^{V} \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \left(\sum_{v=1}^{V} \log \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v}) - \log \Gamma\Big(\sum_{v=1}^{V} \xi^{\phi}_{k,v} \Big) \right) \\
&= \Psi(\xi^{\phi}_{k,v}) - \Psi \left(\sum_{v=1}^{V} \xi^{\phi}_{k,v} \right) \\
&= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)}[\log \phi_{k,v}]
\end{aligned}
\tag{3.103}
$$

となる。2 つ目の項は

$$
\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \Big(-\xi^{\phi}_{k,v} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)}[\log \phi_{k,v}] \Big) = -\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)}[\log \phi_{k,v}]
$$

となるので、1 つ目の項と合わせて消えてしまう。よって、3 つ目の項が 0 となる $\xi^{\phi}_{k,v}$ を求めればよいことが分かる。

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi^{\phi}_{k,v} &= 0 \\
\xi^{\phi}_{k,v} &= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v
\end{aligned}
$$

これは式 (3.95) と等しくなることが確認できる。

3.3.7 LDA の変分ベイズ法 (3)

トピック集合とトピック分布の近似事後分布を変分ベイズ法で求めて、単語分布は MAP 推定で求める。

・変分下限の導出

対数周辺尤度 $\log p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ に対してイエンセンの不等式を用いて変分下限を求める。

$$\begin{aligned}
\log p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}} p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\theta} \\
&= \log \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}) \frac{p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} \\
&\geq \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} \equiv F[q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta})]
\end{aligned}$$

ここで、近似事後分布は

$$\begin{aligned}
q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}) &= q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}) \\
&= \left[\prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}) \right] \left[\prod_{d=1}^{M} q(\boldsymbol{\theta}_d) \right]
\end{aligned}$$

と因子分解できると仮定する。
また、結合分布は生成過程より、ベイズの定理を用いて

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) \\
&= \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{n_d} p(w_{d,i}|z_{d,i}, \boldsymbol{\phi}) p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \prod_{d=1}^{M} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) \\
&= \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{n_d} p(w_{d,i}|\phi_{z_{d,i}}) p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d) \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \prod_{d=1}^{M} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})
\end{aligned}$$

となる。
従って、変分下限は

$$\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta})] &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}) \left(\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) - \log q(\boldsymbol{z}) + \log p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) + \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta})} \right) d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) q(\boldsymbol{\theta}) \log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta} - \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log q(\boldsymbol{z}) + \log p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) \\
&\quad + \int q(\boldsymbol{\theta}) \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})}{q(\boldsymbol{\theta})} d\boldsymbol{\theta} \qquad (3.105)
\end{aligned}$$

となる。

・単語分布の導出

変分下限から $\boldsymbol{\phi}_k$ に関係する項を取り出して $\tilde{F}[\boldsymbol{\phi}_k]$ とおく。
ここで

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}) \log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}) &= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i}) \log p(w_{d,i}|\phi_{z_{d,i}}) \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k)^{\delta(z_{d,i}=k)}
\end{aligned}
$$

である。

$$
\begin{aligned}
\tilde{F}[\boldsymbol{\phi}_k] &= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i} = k) \log p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_k) + \log p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) \\
&\propto \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{v=1}^{V} q(z_{d,i} = k) \log \phi_{k,v}^{\delta(w_{d,i}=v)} + \log \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\beta_{k,v}-1} \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{v=1}^{V} q(z_{d,i} = k) \delta(w_{d,i} = v) \log \phi_{k,v} + \sum_{v=1}^{V} (\beta_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} \\
&= \sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] \log \phi_{k,v} + \sum_{v=1}^{V} (\beta_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} \\
&= \sum_{v=1}^{V} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} \qquad (3.107)
\end{aligned}
$$

制約条件 $\sum_{v=1}^{V} \phi_{k,v} = 1$ から、ラグランジュ乗数 λ を用いて、ラグランジュ関数 $L[q(\boldsymbol{\phi}_k)]$ をおき、制約付き最適化問題として解く。

$$
L[q(\boldsymbol{\phi}_k)] = \sum_{v=1}^{V} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} + \lambda \left(1 - \sum_{v=1}^{V} \phi_{k,v} \right)
$$

この式を $\boldsymbol{\phi}_k$ で微分する。

$$
\frac{\partial L[q(\boldsymbol{\phi}_k)]}{\partial \boldsymbol{\phi}_k} = (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1) \frac{1}{\phi_{k,v}} - \lambda
$$

$\frac{\partial L[q(\boldsymbol{\phi}_k)]}{\partial \boldsymbol{\phi}_k} = 0$ となる $\phi_{k,v}$ を求める。

$$
\begin{aligned}
(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1) \frac{1}{\phi_{k,v}} - \lambda = 0 \\
\phi_{k,v} = \frac{\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1}{\lambda}
\end{aligned}
$$

これを制約条件に代入すると

$$
\begin{aligned}
\sum_{v=1}^{V} \frac{\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1}{\lambda} = 1 \\
\lambda = \sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_{k,v} - 1
\end{aligned}
$$

となる。これを上の式に代入すると

$$\phi_{k,v}=\frac{\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}]+\beta_{k,v}-1}{\sum_{v=1}^{V}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}]+\beta_{k,v}-1}$$

が得られる。

トピック分布の近似事後分布は $\tilde{F}[q(\boldsymbol{\theta})]$ に $\boldsymbol{\phi}$ が無関係なため、3.3.5 の方法で導出できる。
トピック集合の近似事後分布の導出については、少し変更が必要である。
式 (3.99) の計算において、点推定した $\phi_{k,v}$ の期待値は $\phi_{k,v}$ なので、$\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k)}[\log\phi_{k,v}]=\log\phi_{k,v}$ である。よって、$w_{d,i}=v$ のとき

$$\begin{aligned}q(z_{d,i}=k)&\propto\exp[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k)}[\log\phi_{k,v}]]\exp[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d)}[\log\theta_{d,k}]]\\&=\exp[\log\phi_{k,v}]\exp[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d)}[\log\theta_{d,k}]]\\&=\phi_{k,v}\exp[\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d)}[\log\theta_{d,k}]]\end{aligned}\tag{3.110}$$

となる。(本当は $q(\boldsymbol{\phi})$ を導入しないで求めるため、もう少し早い段階で $\phi_{k,v}$ に定まっていたと思われる)

3.3.8 LDA の周辺化変分ベイズ法

$\boldsymbol{\theta}_d,\boldsymbol{\phi}_k$ を周辺化した周辺化変分ベイズ法について説明する。

$\boldsymbol{\theta}_d,\boldsymbol{\phi}_k$ を周辺化した

$$p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\int p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\theta}d\boldsymbol{\phi}$$

を用いる。

・変分下限の導出

$$\begin{aligned}\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})&=\log\sum_{\boldsymbol{z}}p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\&=\log\sum_{\boldsymbol{z}}q(\boldsymbol{z})\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z})}\\&\geq\sum_{\boldsymbol{z}}q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z})}\equiv F_{\mathrm{CVB}}[q(\boldsymbol{z})]\end{aligned}\tag{3.111}$$

この周辺化変分ベイズ法の変分下限 $F_{\mathrm{CVB}}[q(\boldsymbol{z})]$ と変分ベイズ法の変分下限 (3.82) との関係を見る。

$$F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})]=\int\sum_{\boldsymbol{z}}q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})\log\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})}d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}\tag{3.82}$$

$p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$、$q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})=q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})$ より

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})] &= \int\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})}d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})\left(\log\frac{p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})}+\log\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z})}\right)d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta} \\
&= \int\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})}d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}+\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z})} \qquad (3.114)
\end{aligned}
$$

となる。

$q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z}) = p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$(完全に $\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}$ を推定できた) とすると ($\log 1 = 0$ より)

$$
\begin{aligned}
F[p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})q(\boldsymbol{z})] &= \int\sum_{\boldsymbol{z}} p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}d\boldsymbol{\phi}d\boldsymbol{\theta}+\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z})} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z})\log\frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(\boldsymbol{z})} = F_{\mathrm{CVB}}[q(\boldsymbol{z})] \qquad (3.115)
\end{aligned}
$$

$F_{\mathrm{CVB}}[q(\boldsymbol{z})]$ と等しくなる。従って

$$
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi})] = F[q(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z})q(\boldsymbol{z})] \le F[p(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})q(\boldsymbol{z})] = F_{\mathrm{CVB}}[q(\boldsymbol{z})] \qquad (3.116)
$$

という関係が分かる。

・潜在トピックの近似事後分布の導出

変分下限から $q(z_{d,i})$ に関係する項を取り出して $\tilde{F}[q(z_{d,i})]$ とおく。
ここで

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= p(w_{d,i},z_{d,i},\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \\
&= p(w_{d,i},z_{d,i}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
$$

である。

$$
\begin{aligned}
\tilde{F}[q(z_{d,i})] &= \sum_{\boldsymbol{z}} q(z_{d,i})q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})\log\frac{p(w_{d,i},z_{d,i}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{q(z_{d,i})} \qquad (3.118) \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}} q(z_{d,i})q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})\Big(\log p(w_{d,i},z_{d,i}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})-\log q(z_{d,i})\Big) \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}} q(z_{d,i})q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})\log p(w_{d,i},z_{d,i}|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})-\sum_{z_{d,i}} q(z_{d,i})\log q(z_{d,i})
\end{aligned}
$$

この式を $q(z_{d,i}=k)$ で微分する。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\tilde{F}[q(z_{d,i}=k)]}{\partial q(z_{d,i}=k)} &= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})\log p(w_{d,i}=v,z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})-\log q(z_{d,i}=k)-q(z_{d,i}=k)\frac{1}{q(z_{d,i}=k)} \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})\log p(w_{d,i}=v,z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i},\boldsymbol{z}^{\backslash d,i},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})-\log q(z_{d,i}=k)-1
\end{aligned}
$$

$\frac{\partial \tilde{F}[q(z_{d,i}=k)]}{\partial q(z_{d,i}=k)} = 0$ となる $q(z_{d,i}=k)$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}) \log p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) - \log q(z_{d,i}=k) - 1 = 0 \\
\log q(z_{d,i}=k) &= \sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}) \log p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) - 1 \\
q(z_{d,i}=k) &= \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}) \log p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) - 1\right] \\
&\propto \exp\left[\sum_{\boldsymbol{z}} q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i}) \log p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})\right] \\
&= \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})\right]
\end{aligned}
$$

ここで、式 (3.38) の計算過程より

$$
\begin{aligned}
p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k, \boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \frac{n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v}{\sum_{v'=1}^{V} n_{k,v'}^{\backslash d,i} + \beta_{v'}} \frac{n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k}{n_d^{\backslash d,i} + \sum_{k'=1}^{K} \alpha_{k'}}
\end{aligned}
\tag{3.38}
$$

である。

よって

$$
\begin{aligned}
q(z_{d,i}=k) &\propto \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log p(w_{d,i}=v, z_{d,i}=k|\boldsymbol{w}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{z}^{\backslash d,i}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})\right] \\
&= \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log \frac{n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v}{\sum_{v'=1}^{V} n_{k,v'}^{\backslash d,i} + \beta_{v'}} \frac{n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k}{n_d^{\backslash d,i} + \sum_{k'=1}^{K} \alpha_{k'}}\right] \\
&\propto \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log \frac{n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v}{\sum_{v'=1}^{V} n_{k,v'}^{\backslash d,i} + \beta_{v'}} (n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k)\right] \\
&= \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v) - \log(\sum_{v'=1}^{V} n_{k,v'}^{\backslash d,i} + \beta_{v'}) + \log(n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k)\right] \\
&= \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v)\right] \frac{1}{\exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(\sum_{v'=1}^{V} n_{k,v'}^{\backslash d,i} + \beta_{v'})\right]} \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k)\right] \\
&= \frac{\exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v)\right]}{\exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(\sum_{v'=1}^{V} n_{k,v'}^{\backslash d,i} + \beta_{v'})\right]} \exp \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k)\right]
\end{aligned}
\tag{3.120}
$$

が得られる。

しかしこの式には解析的に積分できない項があるため、近似計算を行うことにする。

・テイラー展開による近似

テイラー展開を用いて近似を考える。

・テイラー展開

対数関数 $\log x$ を a の周りで 2 次までテイラー展開すると

$$\log x \approx \log a + \frac{1}{a}(x-a) - \frac{1}{2a^2}(x-a)^2 \tag{3.121}$$

である。これを $a = \mathbb{E}[x]$ として、更に全体の期待値をとると

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\log x] &\approx \mathbb{E}\left[\log \mathbb{E}[x] + \frac{1}{\mathbb{E}[x]}(x - \mathbb{E}[x]) - \frac{1}{2\mathbb{E}[x]^2}(x - \mathbb{E}[x])^2\right] \\
&= \mathbb{E}\Big[\log \mathbb{E}[x]\Big] + \mathbb{E}\left[\frac{1}{\mathbb{E}[x]}(x - \mathbb{E}[x])\right] - \mathbb{E}\left[\frac{1}{2\mathbb{E}[x]^2}(x - \mathbb{E}[x])^2\right] \\
&= \log \mathbb{E}[x] + \frac{1}{\mathbb{E}[x]}(\mathbb{E}[x] - \mathbb{E}[x]) - \frac{1}{2\mathbb{E}[x]^2}\mathbb{E}\Big[(x - \mathbb{E}[x])^2\Big] \\
&= \log \mathbb{E}[x] - \frac{\mathbb{V}[x]}{2\mathbb{E}[x]^2}
\end{aligned} \tag{3.122}$$

になる。また、$\log(x+b)$ に対して $a = \mathbb{E}[x] + b$ とすると

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\log(x+b)] &\approx \mathbb{E}\left[\log(\mathbb{E}[x]+b) + \frac{1}{\mathbb{E}[x]+b}\{x+b-(\mathbb{E}[x]+b)\} - \frac{1}{2(\mathbb{E}[x]+b)^2}\{x+b-(\mathbb{E}[x]+b)\}^2\right] \\
&= \mathbb{E}\Big[\log(\mathbb{E}[x]+b)\Big] + \mathbb{E}\left[\frac{1}{\mathbb{E}[x]+b}(x - \mathbb{E}[x])\right] - \mathbb{E}\left[\frac{1}{2(\mathbb{E}[x]+b)^2}(x - \mathbb{E}[x])^2\right] \\
&= \log(\mathbb{E}[x]+b) + \frac{1}{\mathbb{E}[x]+b}(\mathbb{E}[x] - \mathbb{E}[x]) - \frac{1}{2(\mathbb{E}[x]+b)^2}\mathbb{E}\Big[(x - \mathbb{E}[x])^2\Big] \\
&= \log(\mathbb{E}[x]+b) - \frac{\mathbb{V}[x]}{2(\mathbb{E}[x]+b)^2}
\end{aligned} \tag{3.122'}$$

になる。

式 (3.122') を用いて、式 (3.120) を近似していく。

まずは、分子の項 $\log(n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v)$ を $\mathbb{E}[n_{k,v}^{\backslash d,i}] + \beta_v$ の周りでテイラー展開する。

$$\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v)\right] \approx \log(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\backslash d,i}] + \beta_v) - \frac{\mathbb{V}[n_{k,v}^{\backslash d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\backslash d,i}] + \beta_v)^2}$$

次に、分母の項 $\sum_{v=1}^{V} \log(n_{k,v}^{\backslash d,i} + \beta_v) = \log(n_{k,\cdot}^{\backslash d,i} + \beta.)$ を $\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}] + \beta.$ の周りでテイラー展開する。

$$\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\backslash d,i})}\left[\log(n_{k,\cdot}^{\backslash d,i} + \beta.)\right] \approx \log(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}] + \beta.) - \frac{\mathbb{V}[n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}] + \beta.)^2}$$

最後に、後の項 $\log(n_{d,k}^{\backslash d,i} + \alpha_k)$ を $\mathbb{E}[n_{d,k}^{\backslash d,i}] + \alpha_k$ の周りでテイラー展開する。

$$\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\setminus d,i})}\left[\log(n_{d,k}^{\setminus d,i}+\alpha_k)\right]\approx\log(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)-\frac{\mathbb{V}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)^2} \tag{3.123}$$

これらを式 (3.120) に代入すると

$$\begin{aligned}
q(z_{d,i}=k) &\propto \frac{\exp\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\setminus d,i})}\left[\log(n_{k,v}^{\setminus d,i}+\beta_v)\right]}{\exp\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\setminus d,i})}\left[\log(\sum_{v'=1}^{V}n_{k,v'}^{\setminus d,i}+\beta_{v'})\right]}\exp\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}^{\setminus d,i})}\left[\log(n_{d,k}^{\setminus d,i}+\alpha_k)\right] \qquad (3.120)\\
&\approx \frac{\exp\left[\log(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]+\beta_v)-\frac{\mathbb{V}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]+\beta_v)^2}\right]}{\exp\left[\log(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]+\beta.)-\frac{\mathbb{V}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]+\beta.)^2}\right]}\exp\left[\log(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)-\frac{\mathbb{V}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)^2}\right]\\
&= \frac{\exp\left[\log(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]+\beta_v)\right]}{\exp\left[\log(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]+\beta.)\right]}\exp\left[\log(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)\right]\\
&\quad *\exp\left[-\frac{\mathbb{V}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]+\beta_v)^2}\right]\exp\left[-\frac{\mathbb{V}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)^2}\right]\exp\left[-\frac{2(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]+\beta.)^2}{\mathbb{V}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]}\right]\\
&= \frac{\mathbb{E}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]+\beta_v}{\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]+\beta.}(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)\\
&\quad *\exp\left[-\frac{\mathbb{V}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,v}^{\setminus d,i}]+\beta_v)^2}-\frac{\mathbb{V}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}]+\alpha_k)^2}\right]\exp\left[\frac{\mathbb{V}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]}{2(\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\setminus d,i}]+\beta.)^2}\right] \qquad (3.130)
\end{aligned}$$

が得られる。

ここで、$n_{d,k}$ は文書 d において潜在トピックに k が割り当てられた単語数である。また、文書 d の単語 i の潜在トピック $z_{d,i}$ に k を割り当てる確率が $q(z_{d,i}=k)$ である。$\delta(z_{d,i}=k)$ は $z_{d,i}=k$ のときに 1、$z_{d,i}\neq k$ のときに 0 となる確率変数である。潜在トピック $z_{d,i}$ が k でない確率は $1-q(z_{d,i}=k)$ である。つまり、$\delta(z_{d,i}=k)$ はベルヌーイ分布に従うと言える。

従って、ベルヌーイ分布の期待値と分散の定義より、$\mathbb{E}[\delta(z_{d,i}=k)]=q(z_{d,i}=k)$、$\mathbb{V}[\delta(z_{d,i}=k)]=q(z_{d,i}=k)(1-q(z_{d,i}=k))$ であることが分かる。

よって、$n_{d,k}^{\setminus d,i}=\sum_{i'\neq i}\delta(z_{d,i}=k)$ より

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[n_{d,k}^{\setminus d,i}] &= \mathbb{E}\left[\sum_{i'\neq i}\delta(z_{d,i'}=k)\right]\\
&= \sum_{i'\neq i}\mathbb{E}[\delta(z_{d,i'}=k)]\\
&= \sum_{i'\neq i}q(z_{d,i'}=k) \qquad (3.124)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\mathbb{V}[n_{d,k}^{\backslash d,i}] &= \mathbb{V}\left[\sum_{i' \neq i} \delta(z_{d,i'} = k)\right] \\
&= \sum_{i' \neq i} \mathbb{V}[\delta(z_{d,i'} = k)] \\
&= \sum_{i' \neq i} q(z_{d,i'} = k)\Big(1 - q(z_{d,i'} = k)\Big)
\end{aligned}
\tag{3.125}
$$

である。

同様に、$n_{k,v}$ は文書全体において単語 v の潜在トピックに k が割り当てられた単語数である。$\delta(w_{d,i} = v)$ は、文書 d の i 番目の単語 $w_{d,i}$ が文書全体で v 番目の単語であるとき 1 となり、$w_{d,i} \neq v$ のとき 0 となる。

よって、$n_{k,v}^{\backslash d,i} = \sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} \delta(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)$ より、それぞれ

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}[n_{k,v}^{\backslash d,i}] &= \mathbb{E}\left[\sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} \delta(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)\right] \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} \mathbb{E}\left[\delta(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)\right] \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} q(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)
\end{aligned}
\tag{3.126}
$$

$$
\mathbb{E}[n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}] = \sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}[n_{k,v}^{\backslash d,i}]
\tag{3.127}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbb{V}[n_{k,v}^{\backslash d,i}] &= \mathbb{V}\left[\sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} \delta(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)\right] \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} \mathbb{V}\left[\delta(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)\right] \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} q(z_{d,i'} = k)\delta(w_{d,i'} = v)\Big(1 - q(z_{d,i'} = k)\Big)\delta(w_{d,i'} = v) \\
&= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i' \neq i} q(z_{d,i'} = k)\Big(1 - q(z_{d,i'} = k)\Big)\delta(w_{d,i'} = v)^2
\end{aligned}
\tag{3.128}
$$

(こう??。ついでに $\delta(w_{d,i'} = v)^2 = \delta(w_{d,i'} = v)$ だよね)

$$
\mathbb{V}[n_{k,\cdot}^{\backslash d,i}] = \sum_{v=1}^{V} \mathbb{V}[n_{k,v}^{\backslash d,i}]
\tag{3.129}
$$

となる。

3.4 逐次ベイズ学習——変分近似法の場合——

データ 1 つひとつを処理する際に、逐次的に近似事後分布を更新する逐次学習について説明する。

3.4.1 確率的最適化と逐次学習

・勾配法

目的関数 $f(x)$ が最小となる x^* について考える。微分して 0 となる x を求められればよいのだが、できないことが多い。そこで、ランダムに決めた初期値 $x^{(1)}$ から更新を繰り返して x^* に近づけていく。このような手法を反復法と呼ぶ。

まず、$f(x^{(1)})$ の微分係数 (傾き)$\frac{\partial}{\partial x}f(x^{(1)})$ を調べる。微分係数が正の値だったとき、$x^{(1)}$ をマイナス方向に少し動かすことで $f(x^{(1)})$ が小さくなることが分かる。逆に微分係数が負の値だったとき、$x^{(1)}$ をプラスの方向に少し動かすことで、目的関数が小さくなる。

微分係数の正負と逆方向に動かすために、$x^{(s-1)}$ から微分係数 $\frac{\partial}{\partial x}f(x^{(s-1)})$ を引いた値を s 回目の更新値 $x^{(s)}$ とする。

$$x^{(s)} = x^{(s-1)} - \frac{\partial}{\partial x}f(x^{(s-1)})$$

次に、1 回の更新でどれだけ x を動かすのかを調整する。大きすぎると x^* 飛び越えてしまうなどの問題が生じる。逆に小さすぎると、必要な更新回数が増えてしまう。

そこで、微分係数 $\frac{\partial}{\partial x}f(x^{(s-1)})$ にステップサイズ (学習率)$\nu^{(s)}$ を移動量を調整するための重みとして掛けた値を引くことにする。

$$x^{(s)} = x^{(s-1)} - \nu^{(s)}\frac{\partial}{\partial x}f(x^{(s-1)})$$

更に、多次元関数に一般化する。$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ としたとき、微分係数のベクトル

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}f(x_1^{(s-1)}), \frac{\partial}{\partial x_2}f(x_2^{(s-1)}), \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}f(x_n^{(s-1)})\right)^\top$$

を勾配と呼ぶ。すると、先ほどの式は

$$\boldsymbol{x}^{(s)} = \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)}\nabla_{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) \tag{3.133}$$

となる。ここで、$\nabla_{\boldsymbol{x}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}$ とおく。

この手法を勾配法の中でも最急降下法と呼ぶ。

・確率的勾配法

続いて、目的関数が

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} f_i(\boldsymbol{x})$$

の形をしている場合を考える。
　このとき、勾配は $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \nabla_{\boldsymbol{x}} f_i(\boldsymbol{x})$ となる。この式は $\sum$ を含み計算コストが高いため、近似することを考える。
　そこで、目的関数を

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} f_i(\boldsymbol{x}) = n \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} f_i(\boldsymbol{x})$$

と変形すると、確率 $p(i) = \frac{1}{n}$ による f_i の期待値とみることができる。

$$f(\boldsymbol{x}) = n \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} f_i(\boldsymbol{x}) = n \mathbb{E}_{p(i)}[f_i(\boldsymbol{x})]$$

　従って、$\{f_i\}_{i=1}^{n}$ から確率 $p(i) = \frac{1}{n}$ でサンプリングした f_i を用いて

$$f(\boldsymbol{x}) = n \mathbb{E}_{p(i)}[f_i(\boldsymbol{x})] \approx n f_i(\boldsymbol{x}), \quad i \sim p(i)$$

とすれば、更新式は

$$\boldsymbol{x}^{(s)} = \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)} n \nabla_{\boldsymbol{x}} f_i(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) \tag{3.134}$$

となる。この式で逐次的に更新を行うことができる。
　この手法はアルゴリズムに乱数を含むことから確率的勾配降下法と呼ばれる。

　ではこれを用いて、ある確率変数 θ による期待値計算を含む目的関数

$$f(\boldsymbol{x}) = \int p(\theta) f_\theta(\boldsymbol{x}) d\theta = \mathbb{E}_{p(\theta)}[f_\theta(\boldsymbol{x})]$$

について考える。
　この関数の勾配は $\nabla_{\boldsymbol{x}} \mathbb{E}_{p(\theta)}[f_\theta(\boldsymbol{x})]$ である。これを、$\theta_i \sim p(\theta)$ として確率的勾配 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x})$ によりサンプル近似すると、更新式は

$$\boldsymbol{x}^{(s)} = \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)} \nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)})$$

である。
　ここから更に、$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) = 0$ を加えて

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{(s)} &= \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)} \nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) \\
&= \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)} \Big(\nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) + \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) \Big) \\
&= \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)} \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nu^{(s)} \Big(\nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) \Big) \\
&= \boldsymbol{x}^{(s-1)} - \nu^{(s)} \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nu^{(s)} \boldsymbol{\epsilon}^{(s)}
\end{aligned} \tag{3.135}$$

と変形する。ここで、$\boldsymbol{\epsilon}^{(s)} = \nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)})$ とおく。
　$\boldsymbol{\epsilon}^{(s)}$ は確率的勾配 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)})$ と真の勾配 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)})$ との差であるため

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\epsilon}^{(s)} &= \nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) \\ &= \nabla_{\boldsymbol{x}} f_{\theta_i}(\boldsymbol{x}^{(s-1)}) - \nabla_{\boldsymbol{x}} \mathbb{E}_{p(\theta)}[f_\theta(\boldsymbol{x}^{(s-1)})] \end{aligned} \tag{3.136}$$

平均からのサンプル誤差を示す。
従って、式 (1.135) は、真の勾配による勾配法 (3.133) に確率的なノイズ $\boldsymbol{\epsilon}^{(s)}$ を組み込んだと見ることができる。

3.4.2 自然勾配法

目的関数が確率分布に依存する場合に、その確率分布に基づいた空間における勾配を計算する。

この節では、目的関数が

$$f(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log p(x_i|\theta)$$

のように確率分布 $p(x_i|\theta)$ によって構成されているとする。$f(\theta)$ を最大化する θ について考える。

・勾配の導出

$f(\theta + \delta\theta)$ を θ の周りで 1 次までテイラー展開すると

$$\begin{aligned} f(\theta + \delta\theta) &\approx f(\theta) + \frac{\partial f(\theta)^\top}{\partial \theta}\{(\theta + \delta\theta) - \theta\} \\ &= f(\theta) + \nabla_\theta f(\theta)^\top \delta\theta \end{aligned}$$

であることを用いて

$$\begin{aligned} \underset{\delta\theta}{\operatorname{argmax}}\, f(\theta + \delta\theta) &\approx \underset{\delta\theta}{\operatorname{argmax}}\{f(\theta) + \nabla_\theta f(\theta)^\top \delta\theta\} \\ &= \underset{\delta\theta}{\operatorname{argmax}}\, \nabla_\theta f(\theta)^\top \delta\theta \end{aligned} \tag{3.139}$$

となる。$f(\theta)$ は $\delta\theta$ に影響しないため省ける。

$\delta\theta$ について、$\|\delta\theta\|^2 \leq \epsilon$ ($\epsilon > 0$) の制約を導入する。この制約の下での最適化問題として、ラグランジュ乗数 $\lambda \geq 0$ を用いて

$$\underset{\delta\theta}{\operatorname{argmax}}\, \nabla_\theta f(\theta)^\top \delta\theta + \lambda(\epsilon - \|\delta\theta\|^2)$$

を解くと (ムリだった…)

$$\underset{\delta\theta:\|\delta\theta\|^2\leq\epsilon}{\mathrm{argmax}}\ \nabla_\theta f(\theta)^\top\delta\theta = \sqrt{\frac{\epsilon}{\|\nabla_\theta f(\theta)\|^2}}\nabla_\theta f(\theta) \tag{3.140}$$

となる。$\nu = \sqrt{\frac{\epsilon}{\|\nabla_\theta f(\theta)\|^2}}$ とおくと、勾配は

$$\underset{\delta\theta:\|\delta\theta\|^2\leq\epsilon}{\mathrm{argmax}}\ f(\theta+\delta\theta) \approx \underset{\delta\theta:\|\delta\theta\|^2\leq\epsilon}{\mathrm{argmax}}\ \nabla_\theta f(\theta)^\top\delta\theta = \nu\nabla_\theta f(\theta) \tag{3.141}$$

と最適化問題により定義できる。

更に、ユークリッド空間における距離の制約 $\|\delta\theta\|^2$ を $\|\delta\theta\|^2 = \|\theta - (\theta+\delta\theta)\|^2$ として、これを確率分布間の距離 (正確には距離とは言えない) である KL 情報量に置き換える。

確率分布 $p(x|\delta\theta)$ と $p(x|\theta+\delta\theta)$ との KL 情報量 $KL[p(x|\theta)\|p(x|\theta+\delta\theta)]$ を用いて、勾配は

$$\underset{\delta\theta:KL[p(x|\theta)\|p(x|\theta+\delta\theta)]\leq\epsilon}{\mathrm{argmax}}\ \nabla_\theta f(\theta)^\top\delta\theta \tag{3.142}$$

と定式化できる。

ただし、この最適化問題を解析的に解くことは難しいため、テイラー近似およびフィッシャーの情報行列を用いて KL 情報量を近似する。

・フィッシャー情報量

パラメータ θ を持つ確率分布 $p(x|\theta)$ の対数をとり θ で偏微分したものをスコア関数 $S(x)$ と呼ぶ。

$$S(x) = \frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)$$

スコア関数は、期待値が

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[S(x)] &= \int p(x|\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)dx \\
&= \int p(x|\theta)\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)dx \\
&= \int \frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)dx \\
&= \frac{\partial}{\partial\theta}\int p(x|\theta)dx \\
&= \frac{\partial}{\partial\theta}1 \\
&= 0
\end{aligned}$$

0 となる性質を持つ。ただし、微分と積分を交換可能であるとする。

また、スコア関数の分散をフィッシャー情報量 $g(\theta)$ と呼ぶ。

$$g(\theta) = \mathbb{V}[S(x)]$$

スコア関数の期待値は 0 であることから、フィッシャー情報量は

$$
\begin{aligned}
g(\theta) &= \mathbb{V}[S(x)] \\
&= \mathbb{E}[S(x)^2] - \mathbb{E}[S(x)]^2 \\
&= \mathbb{E}[S(x)^2] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)\right)^2\right]
\end{aligned}
$$

である。

　また、$\log p(x|\theta)$ を 2 階微分すると

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta) &= \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)\right) \\
&= -\frac{1}{p(x|\theta)^2}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta) + \frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta) \\
&= -\left(\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)\right)^2 + \frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta) \\
\left(\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)\right)^2 &= \frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta) - \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)
\end{aligned}
$$

【途中式の途中式】

0. $(\log p(x|\theta))' = \frac{1}{p(x|\theta)}p(x|\theta)'$ より、$(\log p(x|\theta))'' = (\frac{1}{p(x|\theta)}p(x|\theta)')'$ となる。
1. (積の (合成関数の) 微分を行う。

$$
\begin{aligned}
f(x) &= \frac{1}{p(x|\theta)} = p(x|\theta)^{-1} \\
h'(x) &= \frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)
\end{aligned}
$$

とおき、右辺を (積の) 微分すると $(f(x)h'(x))' = f'(x)h'(x) + f(x)h''(x)$ の形になる。よって、他の項は

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= -p(x|\theta)^{-2}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta) = -\frac{1}{p(x|\theta)^2}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta) \\
h''(x) &= \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta)
\end{aligned}
$$

となる。

2. 項を整理する。
3. 移項する。

　両辺で期待値をとる (あるいは $g(\theta) = \mathbb{E}[(\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta))^2]$ に代入する) と

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[\left(\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)\right)^2\right] &= \mathbb{E}\left[\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta) - \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right] \\
\mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)\right)^2\right] &= \mathbb{E}\left[\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta)\right] - \mathbb{E}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right] \\
g(\theta) &= \int p(x|\theta)\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta)dx - \mathbb{E}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right] \\
&= \int \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}p(x|\theta)dx - \mathbb{E}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right] \\
&= \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\int p(x|\theta)dx - \mathbb{E}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right] \\
&= -\mathbb{E}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right]
\end{aligned}
$$

となる。(左辺は計算過程より $g(\theta) = \mathbb{E}[(\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta))^2] = \mathbb{E}[(\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta))^2]$ である。)

・フィッシャー情報行列

フィッシャー情報量

$$
\begin{aligned}
g(\theta) &= -\mathbb{E}_{p(x|\theta)}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\right] \\
&= -\int p(x|\theta)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)dx
\end{aligned}
$$

を多次元に拡張したものをフィッシャー情報行列 $G(\theta)$ と呼ぶ。(他の節と表記を合わせるには $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}$ とすべきでは?$g(\theta)$ と $G(\theta)$ で式変わってないし…)

$$
\begin{aligned}
G(\theta) &= -\int p(x|\theta)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)dx \\
&= -\int p(x|\theta)\nabla_\theta^2\log p(x|\theta)dx \qquad (3.143)
\end{aligned}
$$

また、各要素は

$$
G_{j,i}(\theta) = -\int p(x|\theta)\frac{\partial^2}{\partial\theta_j\partial\theta_i}\log p(x|\theta)dx \qquad (3.144)
$$

と定義される。

・KL 情報量とフィッシャー情報行列の関係

$\log p(x|\theta+\delta\theta)$ を θ の周りで 2 次までテイラー展開すると

$$
\log p(x|\theta+\delta\theta) \approx \log p(x|\theta) + \frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)^\top\delta\theta + \frac{1}{2}\delta\theta^\top\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\delta\theta \qquad (A.6)
$$

である。これを用いて、KL 情報量を式変形する。

$$
\begin{aligned}
KL[p(x|\theta)\|p(x|\theta+\delta\theta)] &= \int p(x|\theta)\log\frac{p(x|\theta)}{p(x|\theta+\delta\theta)}dx \\
&= \int p(x|\theta)\Big(\log p(x|\theta) - \log p(x|\theta+\delta\theta)\Big)dx \\
&\approx \int p(x|\theta)\left\{\log p(x|\theta) - \left(\log p(x|\theta) + \frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)^\top\delta\theta + \frac{1}{2}\delta\theta^\top\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\delta\theta\right)\right\}dx \\
&= \int p(x|\theta)\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)^\top\delta\theta - \frac{1}{2}\delta\theta^\top\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\delta\theta\right)dx \qquad \text{(A.7)} \\
&= -\int p(x|\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)^\top\delta\theta dx - \int\frac{1}{2}p(x|\theta)\delta\theta^\top\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\delta\theta dx
\end{aligned}
$$

　前の因子は

$$
\begin{aligned}
&-\int p(x|\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\log p(x|\theta)^\top\delta\theta dx \\
&= -\int p(x|\theta)\frac{1}{p(x|\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}p(x|\theta)^\top\delta\theta d\theta \\
&= -\frac{\partial}{\partial\theta}\int p(x|\theta)^\top d\theta\delta\theta \\
&= -\frac{\partial}{\partial\theta}1\delta\theta \\
&= 0
\end{aligned}
$$

なので、式 (A.7) はフィッシャー情報行列 (3.143) を用いて

$$
\begin{aligned}
KL[p(x|\theta)\|p(x|\theta+\delta\theta)] &\approx -\int\frac{1}{2}p(x|\theta)\delta\theta^\top\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)\delta\theta dx \\
&= \frac{1}{2}\delta\theta^\top\left(-\int p(x|\theta)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log p(x|\theta)dx\right)\delta\theta \\
&= \frac{1}{2}\delta\theta^\top G(\theta)\delta\theta \qquad \text{(A.9, 3.147)}
\end{aligned}
$$

と近似できる。

・勾配の近似

　では話戻って、勾配 (3.142) を近似していく。

　$p(x|\theta)$ のフィッシャー情報行列 $G(\theta)$ を用いて KL 情報量を近似する。

$$
\underset{\delta\theta:KL[p(x|\theta)\|p(x|\theta+\delta\theta)]\leq\epsilon}{\operatorname{argmax}}\nabla_\theta f(\theta)^\top\delta\theta \approx \underset{\delta\theta:\frac{1}{2}\delta\theta^\top G(\theta)\delta\theta\leq\epsilon}{\operatorname{argmax}}\nabla_\theta f(\theta)^\top\delta\theta \qquad (3.148)
$$

これを、制約 $\frac{1}{2}\delta\theta^\top G(\theta)\delta\theta$ の下での最適化問題としてラグランジュ乗数 λ を用いて解く。

$$L(\delta\theta) = \nabla_\theta f(\theta)^\top \delta\theta + \lambda\left(\epsilon - \frac{1}{2}\delta\theta^\top G(\theta)\delta\theta\right)$$

この式を $\delta\theta$ で微分する。

$$\begin{aligned}\frac{\partial L(\delta\theta)}{\partial\delta\theta} &= \nabla_\theta f(\theta) - \frac{1}{2}\lambda G(\theta)^\top\delta\theta - \frac{1}{2}\lambda\delta\theta^\top G(\theta)\\ &= \nabla_\theta f(\theta) - \frac{1}{2}\lambda\Big(G(\theta)^\top + G(\theta)\Big)\delta\theta\\ &= \nabla_\theta f(\theta) - \lambda G(\theta)\delta\theta\end{aligned}$$

$\frac{\partial L(\delta\theta)}{\partial\delta\theta} = 0$ となる $\delta\theta$ を求める。

$$\begin{aligned}\nabla_\theta f(\theta) - \lambda G(\theta)\delta\theta = 0\\ \delta\theta &= \frac{\nabla_\theta f(\theta)}{\lambda G(\theta)}\\ &= \lambda G(\theta)^{-1}\nabla_\theta f(\theta)\end{aligned}$$

(こっちも解けない…どうしたら λ を消せるんだ?ϵ を出すためにも、制約の式を使って置き換えるのがセオリーだと思っていたのだが…解らん??)
従って

$$\underset{\delta\theta:\frac{1}{2}\delta\theta^\top G(\theta)\delta\theta\leq\epsilon}{\operatorname{argmax}} \nabla_\theta f(\theta)^\top\delta\theta = \nu G(\theta)^{-1}\nabla_\theta f(\theta) \tag{3.150}$$

となる。

これを利用して、更新式

$$\theta = \theta + \nu G(\theta)^{-1}\nabla_\theta f_\theta(p(x|\theta)) \tag{3.151}$$

が得られる。

3.4.3 LDA の確率的変分ベイズ法

単語分布の近似事後分布 $q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^\phi)$ を逐次学習により更新する。

・フィッシャー情報行列の導出

まずは、フィッシャー情報行列を求めるために $\nabla_\xi^2 \log q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^\phi)$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log p(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) &= \frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} \prod_{v=1}^V \phi_{k,v}^{\xi^{\phi}_{k,v}-1} \\
&= \frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \left(\log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} + \sum_{v=1}^V (\xi^{\phi}_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} \right) \\
&= \frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \sum_{v=1}^V (\xi^{\phi}_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} \qquad (3.152)
\end{aligned}
$$

後の因子は

$$
\frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \sum_{v=1}^V (\xi^{\phi}_{k,v} - 1) \log \phi_{k,v} = \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \log \phi_{k,v'} = 0
$$

であるため

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log p(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) &= \frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} \\
&= \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})}
\end{aligned}
$$

となる。更に、式 (3.103) を用いて期待値に置き換える。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log p(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) &= -\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \left(-\log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v})}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v})} \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \left(\sum_{v=1}^V \log \Gamma(\xi^{\phi}_{k,v}) - \log \Gamma\Big(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v} \Big) \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \left(\Psi(\xi^{\phi}_{k,v'}) - \Psi\Big(\sum_{v=1}^V \xi^{\phi}_{k,v} \Big) \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)} [\log \phi_{k,v'}] \qquad (3.153)
\end{aligned}
$$

従って、式 (3.144) より $q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)$ のフィッシャー情報行列 $G(\boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)$ の v, v' 要素は

$$
\begin{aligned}
G_{v,v'}(\boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) &= -\int q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) \frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) d\boldsymbol{\phi}_k \\
&= -\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)} \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^{\phi}_{k,v} \partial \xi^{\phi}_{k,v'}} \log q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k) \right] \\
&= -\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)} \left[-\frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)} [\log \phi_{k,v'}] \right] \\
&= \frac{\partial}{\partial \xi^{\phi}_{k,v}} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}^{\phi}_k)} [\log \phi_{k,v'}] \qquad (3.154)
\end{aligned}
$$

となる。

・変分下限の勾配の導出

LDA の変分下限は 3.3.6 項の式 (3.102) を用いる。

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})] = &\sum_{k=1}^{K}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\right] + \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&+ \sum_{d=1}^{M}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right] + \sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k - \xi_{d,k}^{\theta})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}] \\
&- \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i}=k)\log q(z_{d,i}=k)
\end{aligned} \tag{3.102}
$$

変分下限の勾配 $\nabla_{\xi_{k,v}^{\phi}} F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})]$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})] &= \frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}\left(-\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\right) + \frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}\left(-\xi_{k,v}^{\phi}\right)\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&\quad + \sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] - \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&\quad + \sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&= \sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}]
\end{aligned} \tag{3.104}
$$

・更新式の導出

従って、式 (3.150) より自然勾配を用いた更新式は、ステップサイズを ν_s として

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\xi}_k^{\phi(s+1)} &= \boldsymbol{\xi}_k^{\phi(s)} + \nu_s G^{-1}(\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\nabla_{\boldsymbol{\xi}_k^{\phi}}F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})] \qquad (3.156) \\
&= \boldsymbol{\xi}_k^{\phi(s)} + \nu_s G^{-1}(\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})\sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\frac{\partial}{\partial\xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}]
\end{aligned}
$$

となる。

また、各成分は、式 (3.154) より

$$
\begin{aligned}
\xi_{k,v}^{\phi(s+1)} &= \xi_{k,v}^{\phi(s)} + \nu_s G_{v,v'}(\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})^{-1}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\frac{\partial}{\partial \xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log \phi_{k,v}] \\
&= \xi_{k,v}^{\phi(s)} + \nu_s \frac{1}{\frac{\partial}{\partial \xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log \phi_{k,v}]}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\frac{\partial}{\partial \xi_{k,v}^{\phi}}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log \phi_{k,v}] \\
&= \xi_{k,v}^{\phi(s)} + \nu_s(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi}) \\
&= \xi_{k,v}^{\phi(s)} - \nu_s \xi_{k,v}^{\phi} + \nu_s(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v) \\
&= (1-\nu_s)\xi_{k,v}^{\phi} + \nu_s(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)
\end{aligned}
\tag{3.157}
$$

となる。

この更新式が $\nu_s = 1$ のとき

$$
\xi_{k,v}^{\phi(s+1)} = \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v \tag{3.95}
$$

となり、変分ベイズ法での更新式となることが確認できる。

・確率的最適化

文書 d に含まれる同一単語 v の中でトピック k が割り当てられた単語数を $n_{d,k,v}$ とすると、その期待値は

$$
\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{d,k,v}] = \sum_{i=1}^{n_d} q(z_{d,i} = k)\delta(w_{d,i} = v)
$$

である。全文書における同一単語 v の中でトピック k が割り当てられた単語数 $n_{k,v}$ の期待値は

$$
\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] = \sum_{d=1}^{M} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{d,k,v}]
$$

となる。

これを用いて、式 (3.157) の (3 行目の) 勾配を

$$
\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi} = \sum_{d=1}^{M} \frac{1}{M}\left(M\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi}\right) \tag{3.158}
$$

と変形する。$p(d) = \frac{1}{M}$ として、確率的最適化による更新式

$$
\xi_{k,v}^{\phi(s+1)} = \xi_{k,v}^{\phi(s)} + \nu_s(M\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi(s)}) \tag{3.159}
$$

が得られる。

3.5 逐次ベイズ学習——サンプリング近似法の場合——

データに対して S 個の周辺化ギブスサンプリングを並列に行うことで事後分布を近似する。

3.5.1 粒子フィルタ

粒子フィルタは、時系列データを解析する動的システムにおいて、潜在変数のサンプリングを可能にする技術である。ある時刻において、それまでに与えられた観測データの下での潜在変数の事後分布を重み付きサンプルによって近似する。

時刻 t の観測データ x_t は、潜在変数 z_t に依存する確率分布 $p(x_t|z_t)$ によって生成されたと仮定する。また、潜在変数 z_t は 1 つ前の時刻 $t-1$ における潜在変数 z_{t-1} に依存した確率分布 $p(z_t|z_{t-1})$ によって生成されたと仮定する。(図 3.7(a))

$$
\begin{aligned}
x_t &\sim p(x_t|z_t) \\
z_t &\sim p(z_t|z_{t-1})
\end{aligned}
$$

・重みの導入

時刻 $t+1$ において、それまでに観測されたデータ $x_{1:t}$ が与えられた下で、観測データ x_{t+1} を生成する潜在変数 z_{t+1} の条件付き確率分布 $p(z_{t+1}|x_{t:1})$ は、提案分布 $q(z_{1:t}|x_{1:t})$ を $\frac{q(z_{1:t}|x_{1:t})}{q(z_{1:t}|x_{1:t})}=1$ を掛ける形で導入して

$$
\begin{aligned}
p(z_{t+1}|x_{1:t}) &= \int p(z_{t+1}, z_{1:t}|x_{1:t})dz_{1:t} \\
&= \int p(z_{t+1}|z_{1:t}, x_{1:t})p(z_{1:t}|x_{1:t})dz_{1:t} \\
&= \int p(z_{t+1}|z_{1:t})\frac{p(z_{1:t}|x_{1:t})}{q(z_{1:t}|x_{1:t})}q(z_{1:t}|x_{1:t})dz_{1:t} \\
&= \int p(z_{t+1}|z_{1:t})\omega(z_{1:t})q(z_{1:t}|x_{1:t})dz_{1:t}
\end{aligned}
\tag{3.160}
$$

となる。ここで

$$
\omega(z_{1:t}) = \frac{p(z_{1:t}|x_{1:t})}{q(z_{1:t}|x_{1:t})} \tag{3.161}
$$

とおく。

提案分布 $q(z_{1:t}|x_{1:t})$ からのサンプル $z_{1:t}^{(s)} \sim q(z_{1:t}|x_{1:t})$ $(s = 1, 2, \cdots, S)$ を用いて、$p(z_{1:t}|x_{1:t})$ を

$$
\begin{aligned}
p(z_{1:t}|x_{1:t}) &= \frac{p(z_{1:t}|x_{1:t})}{q(z_{1:t}|x_{1:t})}q(z_{1:t}|x_{1:t}) \\
&= \omega(z_{1:t})q(z_{1:t}|x_{1:t}) \approx \tilde{p}_S(z_{1:t}|x_{1:t})
\end{aligned}
$$

と近似する。$\tilde{p}_S(z_{1:t}|x_{1:t})$ は

$$\tilde{p}_S(z_{1:t}|x_{1:t}) = \sum_{s=1}^{S} \frac{\omega(z_{1:t}^{(s)})}{\sum_{s=1}^{S}\omega(z_{1:t}^{(s)})}\delta(z_{1:t} = z_{1:t}^{(s)})$$
$$= \sum_{s=1}^{S} \bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)})\delta(z_{1:t} = z_{1:t}^{(s)}) \tag{3.162}$$

である。ここで、$\bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)}) = \frac{\omega(z_{1:t}^{(s)})}{\sum_{s=1}^{S}\omega(z_{1:t}^{(s)})}$, $0 \leq \bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)}) \leq 1$, $\sum_{s=1}^{S}\bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)}) = 1$ とおく。(数学的に高度なので読み飛ばし可とのことなので今回はこの理由を読み飛ばした…)

次からは、この重みの逐次更新式を求めていく。

・重みの更新式の導出

式 (3.60) の積分を $\tilde{p}_S(z_{1:t}|x_{1:t})$ によって近似する。

$$p(z_{t+1}|x_{1:t}) = \int p(z_{t+1}|z_{1:t})p(z_{1:t}|x_{1:t})dz_{1:t}$$
$$\approx \int p(z_{t+1}|z_{1:t})\tilde{p}_S(z_{1:t}|x_{1:t})dz_{1:t}$$
$$= \int p(z_{t+1}|z_{1:t})\sum_{s=1}^{S}\bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)})\delta(z_{1:t} = z_{1:t}^{(s)})dz_{1:t}$$
$$= \sum_{s=1}^{S}\bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)})p(z_{t+1}|z_{1:t}^{(s)}) \tag{3.165}$$

デルタ関数の性質 $\int f(x)\delta(x=a)dx = f(x=a)$ を用いている。

ここで、提案分布を

$$q(z_{1:t}|x_{1:t}) = q(z_t, z_{1:t-1}|x_{1:t})$$
$$= q(z_t|x_{1:t}, z_{1:t-1})q(z_{1:t-1}|x_{1:t})$$
$$= q(z_t|x_{1:t}, z_{1:t-1})q(z_{t-1}, z_{1:t-2}|x_{1:t})$$
$$= q(z_t|x_{1:t}, z_{1:t-1})q(z_{t-1}|x_{1:t}, z_{1:t-2})q(z_{1:t-2}|x_{1:t})$$
$$= q(z_t|x_{1:t}, z_{1:t-1})q(z_{t-1}|x_{1:t}, z_{1:t-2})\cdots q(z_1|x_{1:t}, z_0)q(z_0|x_{1:t})$$
$$= q(z_t|x_{1:t}, z_{1:t-1})q(z_{t-1}|x_{1:t-1}, z_{1:t-2})\cdots q(z_1|x_1, z_0)q(z_0)$$
$$= q(z_0)\prod_{l=1}^{t} q(z_l|x_{1:l}, z_{1:l-1}) \tag{3.166}$$

とおく。ただし図 3.7(a) より、時刻 t の観測値 x_t が 1 つ前の時刻の潜在変数 z_{t-1} に影響しないことを考慮して、$q(z_{1:t-1}|x_{1:t}) = q(z_{1:t-1}|x_{1:t-1})$ と設定し、置き換えている。

これを用いて、重みの更新式を導出する。更新式は $\omega(z_{1:t}^{(s)}) = \omega(z_{1:t-1}^{(s)})F(\cdot)$ の形になることから、$\frac{\omega(z_{1:t}^{(s)})}{\omega(z_{1:t-1}^{(s)})}$ を求めればよい。よって、式 (3.161) より

$$
\begin{aligned}
\frac{\omega(z_{1:t}^{(s)})}{\omega(z_{1:t-1}^{(s)})} &= \frac{p(z_{1:t}^{(s)}|x_{1:t})}{q(z_{1:t}^{(s)}|x_{1:t})} \frac{q(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t-1})}{p(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t-1})} \\
&= \frac{p(z_{1:t}^{(s)}|x_{1:t})}{p(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t-1})} \frac{q(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t-1})}{q(z_{1:t}^{(s)}|x_{1:t})} \\
&= \frac{p(z_{1:t}^{(s)}, x_{1:t})p(x_{1:t-1})}{p(x_{1:t})p(z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})} \frac{q(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t-1})}{q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)})q(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t})} \\
&\propto \frac{p(z_{1:t}^{(s)}, x_{1:t})}{p(z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})} \frac{1}{q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)})} \\
&= \frac{p(z_t^{(s)}, x_t, z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})}{p(z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})} \frac{1}{q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)})} \\
&= \frac{p(z_t^{(s)}, x_t|z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})}{q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)})} \\
&= \frac{p(x_t|z_t^{(s)}, z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})p(z_t^{(s)}|z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})}{q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)})} \qquad (3.168)
\end{aligned}
$$

【途中式の途中式】

0. 式 (3.161) より置き換える。
1. $p(\cdot)$ と $q(\cdot)$ を揃えるために、分母を入れ替える。
2. 項を変形する。
   - $p(A_1|A_2, B) = \frac{p(A_1, A_2|B)}{p(A_2|B)}$ より、前の因子の分母分子をそれぞれ変形する。
   - $p(A_{1:2}|B) = p(A_1, A_2|B) = p(A_1|A_2, B)p(A_2|B)$ より、後ろの因子の分母を変形する。
3. 式を整理する。
   - $z_{1:t}^{(s)}, z_{1:t-1}^{(s)}$ に関係する項のみ取り出す。
   - 提案分布を $q(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t}) = q(z_{1:t-1}^{(s)}|x_{1:t-1})$ と設定したので、約分する。
4. 式を整理するために、分子の項から t についての変数を取り出しておく。
5. $\frac{p(A_1, A_2)}{p(A_2)} = p(A_1|A_2)$ より、変形する。

更に、提案分布を $q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)}) = p(z_t^{(s)}|z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})$ とすると

$$
\begin{aligned}
\frac{\omega(z_{1:t}^{(s)})}{\omega(z_{1:t-1}^{(s)})} &\propto \frac{p(x_t|z_t^{(s)}, z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})p(z_t^{(s)}|z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})}{q(z_t^{(s)}|x_{1:t}, z_{1:t-1}^{(s)})} \qquad (3.168) \\
&= \frac{p(x_t|z_t^{(s)}, z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})p(z_t^{(s)}|z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})}{p(z_t^{(s)}|z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1})} \\
&= p(x_t|z_t^{(s)}, z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1}) \\
\omega(z_{1:t}^{(s)}) &= \omega(z_{1:t-1}^{(s)})p(x_t|z_t^{(s)}, z_{1:t-1}^{(s)}, x_{1:t-1}) \qquad (3.169)
\end{aligned}
$$

重みの逐次更新式が得られる。
正規化は次の式で行う。

$$
\bar{\omega}(z_{1:t}^{(s)}) = \frac{\omega(z_{1:t}^{(s)})}{\sum_{s=1}^{S} \omega(z_{1:t}^{(s)})}
$$

3.5.2 LDA の粒子フィルタ

LDA の学習に粒子フィルタを用いる方法を説明する。
観測された単語 $\boldsymbol{w}$ の下での、潜在トピック $\boldsymbol{z}$ の条件付き分布 $p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ を粒子フィルタを用いて近似する。

・サンプリング式の導出

3.2.4 項 (LDA の周辺化ギブスサンプリング) のサンプリング式 (3.38) の導出過程と同様にして、$\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i)}$ が与えられた下での潜在変数 $z_{d,i}$ の分布を求める。

$$
\begin{aligned}
&p(z_{d,i}=k|w_{d,i}=v,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&=\frac{p(z_{d,i}=k,w_{d,i}=v,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{p(w_{d,i}=v,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}\\
&\propto p(z_{d,i}=k,w_{d,i}=v,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&=p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&\propto p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
$$

周辺化したパラメータを明示すると

$$
\begin{aligned}
&p(z_{d,i}=k|w_{d,i}=v,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&\propto p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\\
&=\int p(w_{d,i}=v,\boldsymbol{\phi}|z_{d,i}=k,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}\int p(z_{d,i}=k,\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\theta}\\
&=\int p(w_{d,i}=v|\boldsymbol{\phi},z_{d,i}=k,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\phi}|z_{d,i}=k,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}\\
&\qquad *\int p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\theta}\\
&=\int p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{\phi})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}\int p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}\\
&\propto\int p(w_{d,i}=v|z_{d,i}=k,\boldsymbol{\phi}_k)p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}_k\int p(z_{d,i}=k|\boldsymbol{\theta}_d)p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}_d\\
&=\int \phi_{k,v}p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}_k\int \theta_{d,k}p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}_d\\
&=\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\beta})}[\phi_{k,v}]\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha})}[\theta_{d,k}]
\end{aligned}
$$

となる。$p(\boldsymbol{\phi}_k|\cdot),p(\boldsymbol{\theta}_d|\cdot)$ をそれぞれ正規化した (正規化項を付けた) 上で、Dirichlet 分布の期待値計算 (2.10) を行うと

$$
\begin{aligned}
p(z_{d,i}=k|w_{d,i}=v,\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})&=\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{w}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\beta})}[\phi_{k,v}]\mathbb{E}_{p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)},\boldsymbol{\alpha})}[\theta_{d,k}]\\
&=\frac{n_{k,v}^{(d,i-1)}+\beta_v}{\sum_{v=1}^{V}(n_{k,v}^{(d,i-1)}+\beta_v)}\frac{n_{d,k}^{(d,i-1)}+\alpha_k}{\sum_{k=1}^{K}(n_{d,k}^{(d,i-1)}+\alpha_k)}
\end{aligned}
\tag{3.171}
$$

が得られる。
従って、S 個の並列サンプルを $\{\boldsymbol{z}^{(d,i)(s)}\}_{s=1}^{S}$ として表すと、それぞれのサンプル粒子 $\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)},\boldsymbol{w}^{(d,i)}$ が与えられた下での $z_{d,i}^{(s)}$ の分布は

$$p(z_{d,i}^{(s)} = k | w_{d,i} = v, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \propto \frac{n_{k,v}^{(d,i-1)(s)} + \beta_v}{\sum_{v=1}^{V}(n_{k,v}^{(d,i-1)(s)} + \beta_v)} \frac{n_{d,k}^{(d,i-1)(s)} + \alpha_k}{\sum_{k=1}^{K}(n_{d,k}^{(d,i-1)(s)} + \alpha_k)} \tag{3.172}$$

となる。(正規化した上で期待値を出した結果がこの式なので両辺はイコールでいいと思うのだが??)

・重みの更新式の導出

3.5.1 項の重みの更新式 (3.168) より、LDA の重みの更新式は

$$\frac{\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i)(s)})}{\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)})} = \frac{p(w_{d,i} | z_{d,i}^{(s)}, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{q(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \tag{3.173}$$

となる。
　分母の提案分布を

$$q(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$$

と設定すると

$$\begin{aligned}
\frac{\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i)(s)})}{\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)})} &\propto p(w_{d,i} | z_{d,i}^{(s)}, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \frac{1}{p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \frac{p(w_{d,i}, z_{d,i}^{(s)}, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(z_{d,i}^{(s)}, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \frac{p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(z_{d,i}^{(s)}, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \frac{p(\boldsymbol{z}^{(d,i)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \frac{p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(\boldsymbol{z}^{(d,i)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \\
&\quad * p(z_{d,i}^{(s)} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \frac{p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \\
&= \frac{p(w_{d,i}, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})}{p(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \\
&= p(w_{d,i} | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \sum_{k=1}^{K} p(w_{d,i}, z_{d,i} = k | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})
\end{aligned} \tag{3.174}$$

となる。最後は周辺化 $\sum_B p(A, B|C) = p(A|C)$ する形式で、$z_{d,i}$ を式に含めた。
　従って、重みの更新式

$$\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i)(s)}) \propto \omega(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}) \sum_{k=1}^{K} p(w_{d,i}, z_{d,i}^{(s)} = k | \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \tag{3.175}$$

が得られる。ここで、サンプリング式 (3.171) の導出仮定より

$$
\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{K} p(w_{d,i}=v, z_{d,i}^{(s)}=k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \sum_{k=1}^{K} p(w_{d,i}=v|z_{d,i}^{(s)}=k, \boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) p(z_{d,i}^{(s)}=k|\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}, \boldsymbol{w}^{(d,i-1)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \\
&= \sum_{k=1}^{K} \frac{n_{k,v}^{(d,i-1)(s)} + \beta_v}{\sum_{v=1}^{V}(n_{k,v}^{(d,i-1)(s)} + \beta_v)} \frac{n_{d,k}^{(d,i-1)(s)} + \alpha_k}{\sum_{k=1}^{K}(n_{d,k}^{(d,i-1)(s)} + \alpha_k)}
\end{aligned}
\tag{3.176}
$$

である。

・事後分布の近似

重み $\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)})$ を次の式で正規化する。

$$
\bar{w}(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}) = \frac{\omega(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)})}{\sum_{s=1}^{S} \omega(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)})}
$$

これを用い、式 (3.162) と同様にして、$p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ を近似できる。

$$
p(\boldsymbol{z}^{(d,i)}|\boldsymbol{w}^{(d,i)}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \approx \sum_{s=1}^{S} \bar{w}(\boldsymbol{z}^{(d,i-1)(s)}) \delta(\boldsymbol{z}^{(d,i)} = \boldsymbol{z}^{(d,i)(s)})
\tag{3.177}
$$

3.6 Dirichlet 分布のパラメータ推定

事前分布 $p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})$, $p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})$ のパラメータ $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ を点推定する方法について説明する。

3.6.1 対象/非対称 Dirichlet 分布の性質

トピック分布のパラメータ $\boldsymbol{\alpha}$ は非対称とし、単語分布のパラメータ $\boldsymbol{\beta}$ は対称とした方が良い結果になることが知られている。

3.6.2 変分ベイズ法における Dirichlet 分布のパラメータ推定

特になし。

3.6.3 固定点反復法

固定点反復法を用いて、LDA のハイパーパラメータ $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ を推定する。

関数 $f(x)$ に対して

$$x = f(x) \tag{3.180}$$

の形の非線形方程式を考える。この方程式を満たす x^* を関数 $f(x)$ の固定点 (不動点) と呼ぶ。
固定点反復法は、適当な初期値 $x^{(0)}$ から

$$x^{(s+1)} = f(x^{(s)}) \tag{3.181}$$

の計算を繰り返し行うことで不動点 x^* に近づけていく方法である。

・変分下限の導出

Dirichlet 分布のパラメータ推定における固定点反復法では、変分下限の更に下限を用いる。

3.3.6 項 (LDA の変分ベイズ法 (2)) の変分下限 (3.102) を用いる。

$$\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi} | \boldsymbol{\xi}^{\theta}, \boldsymbol{\xi}^{\phi})] = &\sum_{k=1}^{K} \left[\log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} \beta_v)}{\prod_{v=1}^{V} \Gamma(\beta_v)} - \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} \xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V} \Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})} \right] \\
&+ \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi}) \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k | \boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log \phi_{k,v}] \\
&+ \sum_{d=1}^{M} \left[\log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)} - \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})} \right] \\
&+ \sum_{d=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} (\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k - \xi_{d,k}^{\theta}) \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d | \boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log \theta_{d,k}] \\
&- \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k)
\end{aligned} \tag{3.102}$$

また、3.3.5 項や 3.3.6 項で導出したハイパーパラメータの更新式は

$$\begin{aligned}
\xi_{k,v}^{\phi} &= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v \\
\xi_{d,k}^{\theta} &= \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k
\end{aligned}$$

である。
この更新後の値をそれぞれ変分下限 (3.102) に代入すると

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^\theta,\boldsymbol{\xi}^\phi)] &= \sum_{k=1}^K \left[\log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\beta_v)} - \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)}\right] \\
&\quad + \sum_{d=1}^M \left[\log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} - \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k)}\right] \\
&\quad - \sum_{d=1}^M \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^K q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k) \\
&= \sum_{k=1}^K \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\beta_v)} \frac{\prod_{v=1}^V \Gamma(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)} \\
&\quad + \sum_{d=1}^M \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} \frac{\prod_{k=1}^K \Gamma(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^K \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k)} \\
&\quad - \sum_{d=1}^M \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^K q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k) \\
&= \sum_{k=1}^K \log \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)} \prod_{v=1}^V \frac{\Gamma(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v)}{\Gamma(\beta_v)} \qquad (1) \\
&\quad + \sum_{d=1}^M \log \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^K \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k)} \prod_{k=1}^K \frac{\Gamma(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k)}{\Gamma(\alpha_k)} \qquad (2) \\
&\quad - \sum_{d=1}^M \sum_{i=1}^{n_d} \sum_{k=1}^K q(z_{d,i} = k) \log q(z_{d,i} = k)
\end{aligned} \tag{3.182}
$$

が得られる。次の不等式と対応させるために、それぞれ分母を入れ替えて式を整理している。

・ガンマ関数の不等式

任意の $\hat{x} \geq 0$ に対して、$x > 0,\ n \geq 0$ のとき

$$
\frac{\Gamma(x)}{\Gamma(n+x)} \geq \frac{\Gamma(\hat{x}) \exp\Big((\hat{x} - x) b\Big)}{\Gamma(n+\hat{x})} \tag{3.183}
$$

$$
b = \Psi(n+\hat{x}) - \Psi(\hat{x}) \tag{3.184}
$$

また、$n \geq 1$ のとき

$$
\frac{\Gamma(n+x)}{\Gamma(x)} \geq c x^a \tag{3.185}
$$

$$
a = \Big(\Psi(n+\hat{x}) - \Psi(\hat{x})\Big)\hat{x} \tag{3.186}
$$

$$
c = \frac{\Gamma(n+\hat{x})}{\Gamma(\hat{x})} \hat{x}^{-a} \tag{3.187}
$$

が成り立つ。

この不等式を用いて、変分下限 (3.182) の更に下限を求めて、それを用いてハイパーパラメータの更新式を導出する。

・トピック分布のパラメータの更新式の導出

まずは、トピック分布のパラメータ $\boldsymbol{\alpha}$ を求める。

式 (2) について、$\sum_{k=1}^{K}\alpha_k,\ \alpha_k$ を x、$\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}],\ \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]$ を n と対応させて、$a,\ b$ をそれぞれ $a_{d,k}^{\theta},\ b_d^{\theta}$ として、下限を求める。

前の因子は

$$\frac{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right)}{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\alpha_k\right)} \geq \frac{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k\right)\exp\Big((\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k-\alpha_k)b_d^{\theta}\Big)}{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\right)}$$

$$b_d^{\theta}=\Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\right)-\Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k\right)$$

となり、また後の因子は

$$\frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\alpha_k\right)}{\Gamma(\alpha_k)} \geq \frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\right)}{\Gamma(\hat{\alpha}_k)}\hat{\alpha}_k^{-a_{d,k}^{\theta}}\alpha_k^{a_{d,k}^{\theta}}$$

$$a_{d,k}^{\theta}=\Big(\Psi(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k)-\Psi(\hat{\alpha}_k)\Big)\hat{\alpha}_k$$

となる。

従って、式 (2) の下限はこれらを組み併せて

$$\begin{aligned}
&\sum_{d=1}^{M}\log\frac{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right)}{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\alpha_k\right)}\prod_{k=1}^{K}\frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\alpha_k\right)}{\Gamma(\alpha_k)} \qquad (2)\\
&\geq \sum_{d=1}^{M}\log\frac{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k\right)\exp\Big((\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k-\alpha_k)b_d^{\theta}\Big)}{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\right)}\prod_{k=1}^{K}\frac{\Gamma\Big(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\Big)}{\Gamma(\hat{\alpha}_k)}\hat{\alpha}_k^{-a_{d,k}^{\theta}}\alpha_k^{a_{d,k}^{\theta}}\\
&=\sum_{d=1}^{M}\Bigg[\log\Gamma\Big(\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k\Big)+\Big(\sum_{k=1}^{K}\hat{\alpha}_k-\alpha_k\Big)b_d^{\theta}-\log\Gamma\Big(\sum_{k=1}^{K}\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\Big)\\
&\qquad+\sum_{k=1}^{K}\Big\{\log\Gamma\Big(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}]+\hat{\alpha}_k\Big)-\log\Gamma(\hat{\alpha}_k)-a_{d,k}^{\theta}\log\hat{\alpha}_k+a_{d,k}^{\theta}\log\alpha_k\Big\}\Bigg]\\
&=\sum_{d=1}^{M}\Bigg[-b_d^{\theta}\sum_{k=1}^{K}\alpha_k+\sum_{k=1}^{K}a_{d,k}^{\theta}\log\alpha_k\Bigg]+(\text{const.})\equiv F[\alpha_k] \qquad (3.190)
\end{aligned}$$

となる。(どうせ微分すると消えるので)$\boldsymbol{\alpha}$ に関係しない項をまとめて (const.) とする。
　この下限 $F[\alpha_k]$ を最大にする $\boldsymbol{\alpha}$ を求めるために、α_k で微分して 0 となる停留点を求める。

$$\frac{\partial F[\alpha_k]}{\partial \alpha_k} = \sum_{d=1}^{M} \left[-b_d^{\theta} + \frac{1}{\alpha_k} a_{d,k}^{\theta} \right] = 0$$

$$\alpha_k = \frac{\sum_{d=1}^{M} a_{d,k}^{\theta}}{\sum_{d=1}^{M} b_d^{\theta}}$$

　$a_{d,k}^{\theta},\ b_d^{\theta}$ をそれぞれ代入すると

$$\alpha_k = \hat{\alpha}_k \frac{\sum_{d=1}^{M} \left[\Psi\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \hat{\alpha}_k \right) - \Psi(\hat{\alpha}_k) \right]}{\sum_{d=1}^{M} \left[\Psi\left(\sum_{k=1}^{K} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k \right) - \Psi\left(\sum_{k=1}^{K} \hat{\alpha}_k \right) \right]} \tag{3.191}$$

が得られる。
　$\hat{\alpha}_k$ を 1 ステップ前の値とすれば、α_k に対する固定点反復法が得られた。

・単語分布のパラメータの更新式の導出

・非対称

　同様にして、単語分布のパラメータ $\boldsymbol{\beta}$ を求める。
　式 (1) について、$\sum_{v=1}^{V} \beta_v,\ \beta_v$ を x、$\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}],\ \mathbb{E}_{p(\boldsymbol{z}_d)}[n_{k,v}]$ を n と対応させて、$a,\ b$ をそれぞれ $a_{k,v}^{\phi},\ b_k^{\phi}$ として、下限を求める。

　前の因子は

$$\frac{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \beta_v \right)}{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v \right)} \geq \frac{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v \right) \exp\Big((\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v - \beta_v) b_k^{\phi} \Big)}{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v \right)}$$

$$b_k^{\phi} = \Psi\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v \right) - \Psi\left(\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v \right)$$

となり。また後ろの因子は

$$\frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v \right)}{\Gamma(\beta_v)} \geq \frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v \right)}{\Gamma(\hat{\beta}_v)} \hat{\beta}_v^{-a_{k,v}^{\phi}} \beta_v^{a_{k,v}^{\phi}}$$

$$a_{k,v}^{\phi} = \Big(\Psi(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v) - \Psi(\hat{\beta}_v) \Big) \hat{\beta}_v$$

となる。
　従って、式 (1) の下限はこれらを組み併せて

$$
\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{K} \log \frac{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \beta_v\right)}{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v\right)} \prod_{v=1}^{V} \frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v\right)}{\Gamma(\beta_v)} \qquad (1) \\
&\geq \sum_{k=1}^{K} \log \frac{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v\right) \exp\Big((\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v - \beta_v) b_k^{\phi}\Big)}{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v\right)} \prod_{v=1}^{V} \frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v\right)}{\Gamma(\hat{\beta}_v)} \hat{\beta}_v^{-a_{k,v}^{\phi}} \beta_v^{a_{k,v}^{\phi}} \\
&= \sum_{k=1}^{K} \Bigg[\log \Gamma\Big(\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v\Big) + \Big(\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v - \beta_v\Big) b_k^{\phi} - \log \Gamma\Big(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v\Big) \\
&\qquad + \sum_{v=1}^{V} \Big\{ \log \Gamma\Big(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v\Big) - \log \Gamma(\hat{\beta}_v) - a_{k,v}^{\phi} \log \hat{\beta}_v + a_{k,v}^{\phi} \log \beta_v \Big\} \Bigg] \\
&= \sum_{k=1}^{K} \left[-b_k^{\phi} \sum_{v=1}^{V} \beta_v + \sum_{v=1}^{V} a_{k,v}^{\phi} \log \beta_v \right] + (\text{const.}) \equiv F[\beta_v]
\end{aligned}
$$

となる。(どうせ微分すると消えるので)$\boldsymbol{\beta}$ と関係しない項を (const.) とする。

この下限 $F[\beta_v]$ を最大にする $\boldsymbol{\beta}$ を求めるために、β_v で微分して 0 となる停留点を求める。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F[\beta_v]}{\partial \beta_v} = \sum_{k=1}^{K} \left[-b_k^{\phi} + \frac{1}{\beta_v} a_{k,v}^{\phi} \right] = 0 \\
\beta_v = \frac{\sum_{k=1}^{K} a_{k,v}^{\phi}}{\sum_{k=1}^{K} b_k^{\phi}}
\end{aligned}
$$

$a_{k,v}^{\phi}$, b_k^{ϕ} をそれぞれ代入すると

$$
\beta_v = \hat{\beta}_v \frac{\sum_{k=1}^{K} \left[\Psi\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v\right) - \Psi(\hat{\beta}_v) \right]}{\sum_{k=1}^{K} \left[\Psi\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}_v\right) - \Psi\left(\sum_{v=1}^{V} \hat{\beta}_v\right) \right]} \tag{3.192}
$$

が得られる。

$\hat{\beta}_v$ を 1 ステップ前の値とすれば、β_v に対する固定点反復法が得られた。

・対称

$\boldsymbol{\beta}$ は対称とした方が良い結果となることが経験的に知られている。全ての単語に対して同じ値 β を用いる場合の更新式も求める。

$\boldsymbol{\beta} = (\beta, \beta, \cdots, \beta)$ のとき、$\sum_{v=1}^{V} \beta = V\beta$ なので、式 (1) は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{K} \log \frac{\Gamma(V\beta)}{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta\right)} \prod_{v=1}^{V} \frac{\Gamma\left(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta\right)}{\Gamma(\beta)} \qquad (1) \\
&\geq \sum_{k=1}^{K} \left[-b_k^{\phi} V\beta + \sum_{v=1}^{V} a_{k,v}^{\phi} \log \beta \right] + (\text{const.}) \equiv F[\beta]
\end{aligned}
$$

となる。

$a^{\phi}_{k,v}$, b^{ϕ}_k をそれぞれ代入すると

$$F[\beta] \equiv \sum_{k=1}^K \left[- \left(\Psi\Big(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta} \Big) - \Psi(V\hat{\beta}) \right) V\beta + \sum_{v=1}^V \Big(\Psi(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}) - \Psi(\hat{\beta}) \Big) \hat{\beta} \log \beta \right] + (\text{const.}) \tag{3.193}$$

β で微分して 0 となる停留点を求める。

$$\frac{\partial F[\beta]}{\partial \beta} = \sum_{k=1}^K \left[- \left(\Psi\Big(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta} \Big) - \Psi(V\hat{\beta}) \right) V + \frac{1}{\beta} \sum_{v=1}^V \Big(\Psi(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta}) - \Psi(\hat{\beta}) \Big) \hat{\beta} \right] = 0$$

これを解くと

$$\begin{aligned} V\beta \sum_{k=1}^K \left[\Psi\left(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta} \right) - \Psi(V\hat{\beta}) \right] &= \hat{\beta} \sum_{k=1}^K \sum_{v=1}^V \Big[\Psi\Big(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta} \Big) - \Psi(\hat{\beta}) \Big] \\ \beta &= \frac{\hat{\beta}}{V} \frac{\sum_{k=1}^K \sum_{v=1}^V \Big[\Psi\Big(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta} \Big) - \Psi(\hat{\beta}) \Big]}{\sum_{k=1}^K \Big[\Psi\Big(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta} \Big) - \Psi(V\hat{\beta}) \Big]} \end{aligned} \tag{3.194}$$

が得られる。($\sum_v$, $\sum_k$ がどこまで影響するのか注意すること。例えば $\Psi(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \hat{\beta})$ は $\Psi(V\hat{\beta} + \sum_{v=1}^V \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}])$ である。)

3.6.4 ニュートン・ラフソン法

ニュートン・ラフソン法を用いて LDA のハイパーパラメータを推定する。

・変分下限の導出

3.3.6 項 (LDA の変分ベイズ法 (2)) の変分下限 (3.102) を用いる。

$$
\begin{aligned}
F[q(\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\xi}^{\theta},\boldsymbol{\xi}^{\phi})] = &\sum_{k=1}^{K}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\xi_{k,v}^{\phi})}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\xi_{k,v}^{\phi})}\right] \\
&+\sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})}[n_{k,v}] + \beta_v - \xi_{k,v}^{\phi})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\xi}_k^{\phi})}[\log\phi_{k,v}] \\
&+\sum_{d=1}^{M}\left[\log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)} - \log\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta})}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\xi_{d,k}^{\theta})}\right] \\
&+\sum_{d=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z}_d)}[n_{d,k}] + \alpha_k - \xi_{d,k}^{\theta})\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}] \\
&-\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{n_d}\sum_{k=1}^{K}q(z_{d,i}=k)\log q(z_{d,i}=k) \qquad (3.102)
\end{aligned}
$$

(次の微分で他の項は消えるので) ここから、$\boldsymbol{\alpha}$ に関係のある項を取り出して

$$
F[\boldsymbol{\alpha}] = \sum_{d=1}^{M}\left[\log\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right) - \sum_{k=1}^{K}\log\Gamma(\alpha_k) + \sum_{k=1}^{K}\alpha_k\mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]\right] \qquad (3.195)
$$

とおく。

よって、変分下限 (3.102) を $\boldsymbol{\alpha}$ で微分すると、プサイ関数を用いた Dirichlet 分布の期待値計算 (3.74) を用いて

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial\alpha_k} &= \sum_{d=1}^{M}\left[\frac{\partial\log\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right)}{\partial\alpha_k} - \frac{\partial\log\Gamma(\alpha_k)}{\partial\alpha_k} + \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\xi}_d^{\theta})}[\log\theta_{d,k}]\right] \\
&= \sum_{d=1}^{M}\left[\Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right) - \Psi(\alpha_k) + \Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right)\right] \\
&= M\left[\Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right) - \Psi(\alpha_k)\right] + \sum_{d=1}^{M}\left[\Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k'=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right)\right] \qquad (3.196)
\end{aligned}
$$

となる。

最適化問題を解くために、$\frac{\partial F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial\alpha_k}$ が 0 となる $\boldsymbol{\alpha}$ を求めたいが、この式を解析的に求めるのは困難である。そこで、ニュートン・ラフソン法と呼ばれる最適化手法を用いる。

・テイラー展開による近似

通常の勾配法では、1 次のテイラー展開により勾配の導出を行ったが、ニュートン・ラフソン法では、2 次のテイラー展開を行う。そのため、目的関数が持つ 2 次情報を勾配に利用することができる。

・ヘッセ行列

関数 $f(\boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_N)$ を $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{a}$ で 2 次までテイラー展開すると

$$f(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{a})+(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})^\top\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x})+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})^\top\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}^2}f(\boldsymbol{a})(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})$$

となる (たぶん)。ここで、2 次偏導関数を並べた行列のことをヘッセ行列 $H(\boldsymbol{x})$ 呼ぶ。

$$H(\boldsymbol{x})=\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}^2}f(\boldsymbol{a})=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1\partial x_N}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_N^2}\end{bmatrix}$$

ヘッセ行列の $k'k$ 成分は

$$H(\boldsymbol{x})_{k'k}=\frac{\partial^2}{\partial x_{k'}\partial x_k}f(\boldsymbol{x})$$

である。

$F[\boldsymbol{\alpha}]$ を $\boldsymbol{\alpha}$ の近傍点 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ を中心として 2 次のテイラー展開したものを $\tilde{F}[\boldsymbol{\alpha}]$ とおく。

$$\begin{aligned}\tilde{F}[\boldsymbol{\alpha}]&=F[\hat{\boldsymbol{\alpha}}]+(\boldsymbol{\alpha}-\hat{\boldsymbol{\alpha}})^\top\left.\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\alpha}}F[\boldsymbol{\alpha}]\right|_{\boldsymbol{\alpha}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha}-\hat{\boldsymbol{\alpha}})^\top\left.\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\alpha}^2}F[\boldsymbol{\alpha}]\right|_{\boldsymbol{\alpha}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}}(\boldsymbol{\alpha}-\hat{\boldsymbol{\alpha}})\\&=F[\hat{\boldsymbol{\alpha}}]+(\boldsymbol{\alpha}-\hat{\boldsymbol{\alpha}})^\top\left.\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\alpha}}F[\boldsymbol{\alpha}]\right|_{\boldsymbol{\alpha}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha}-\hat{\boldsymbol{\alpha}})^\top H(\hat{\boldsymbol{\alpha}})(\boldsymbol{\alpha}-\hat{\boldsymbol{\alpha}})\end{aligned}\tag{3.197}$$

($|_{\boldsymbol{\alpha}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}}$ は $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ の周りでテイラー展開したって示してるだけで深い意味はないですよね? 検索の仕方が分からないのでよく分かってないまま)

ヘッセ行列の $k'k$ 成分は

$$H(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_{k'k}=\left.\frac{\partial^2 F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial\alpha_{k'}\partial\alpha_k}\right|_{\boldsymbol{\alpha}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}}\tag{3.98}$$

である。

$F[\boldsymbol{\alpha}]$ の近似式 $\tilde{F}[\boldsymbol{\alpha}]$ も $\boldsymbol{\alpha}$ で偏微分して $\mathbf{0}$ となる $\boldsymbol{\alpha}$ を求める。

$$\begin{aligned}\frac{\partial\tilde{F}[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial\boldsymbol{\alpha}}&=\cdots=0\\ \boldsymbol{\alpha}&=\hat{\boldsymbol{\alpha}}-H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})\end{aligned}\tag{3.199}$$

(...線形代数と微積勉強しますちゃんとします)

ここで

$$g(\hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}} F[\boldsymbol{\alpha}] \bigg|_{\boldsymbol{\alpha}=\hat{\boldsymbol{\alpha}}} \tag{3.200}$$

とおく。

式 (3.199) がハイパーパラメータの更新式になる。この計算を行うために、式に含まれるヘッセ行列の逆行列 $H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ を求めていく。

・ヘッセ行列の逆行列の導出

トリガンマ関数

$$\Psi^{(1)}(x) = \frac{d}{dx}\Psi(x) = \frac{d^2}{dx^2}\log\Gamma(x)$$

を用いて、ヘッセ行列の $k'k$ 成分は、式 (3.196) より

$$\begin{aligned} H(\boldsymbol{\alpha})_{k'k} = \frac{\partial^2 F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial \alpha_{k'} \partial \alpha_k} &= M\left[\frac{\partial}{\partial \alpha_{k'}}\Psi\left(\sum_{k=1}^K \alpha_k\right) - \frac{\partial}{\partial \alpha_{k'}}\Psi(\alpha_k)\right] \\ &= M\left[\Psi^{(1)}\left(\sum_{k=1}^K \alpha_k\right) - \delta(k'=k)\Psi^{(1)}(\alpha_k)\right] \end{aligned} \tag{3.201}$$

となる。後の因子は

$$\Psi^{(1)}(\alpha_k) = \frac{\partial}{\partial \alpha_k}\Psi(\alpha_k) = \frac{\partial}{\partial \alpha_k^2}\Gamma(\alpha_k) = \frac{\partial}{\partial \alpha_k^2}\alpha_k\Gamma(\alpha_k - 1)$$

である。つまり、$k' \neq k$ のとき (α_k 以外の $\boldsymbol{\alpha}$ で偏微分したとき)0 になる。そこで、$k' = k$ のとき 1 となり $k' \neq k$ のとき 0 となるデルタ関数 $\delta(k' = k)$ を用いている。

式 (3.201) の前の因子を

$$y = M\Psi^{(1)}\left(\sum_{k=1}^K \hat{\alpha}_k\right) \tag{3.203}$$

とおく。また、後ろの因子を

$$h_k = -M\Psi^{(1)}(\hat{\alpha}_k) \tag{3.202}$$

とおき、更に、$\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})$ を $\boldsymbol{h} = (h_1, h_2, \cdots, h_K)$ を対角要素とする対角行列とする。

これらと、K 個の 1 を要素とする行ベクトル

$$\mathbf{1}^\top = (1, 1, \cdots, 1) \tag{3.204}$$

を用いて、式 (3.201) を参考に (k 成分以外を含めて)、ヘッセ行列 $H(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ を

$$H(\hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \mathrm{diag}(\boldsymbol{h}) + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top} \tag{3.205}$$

とする。

次に

$$Y = \mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{\frac{1}{y} + \mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}} \tag{A.4}$$

とおく。(何故こういう形なのかは深く考えない…と言うかこれが逆行列であることを求めていく。)
これを式 (3.205) と掛けると、単位行列を E として

$$\begin{aligned}
H(\hat{\boldsymbol{\alpha}})Y &= \left(\mathrm{diag}(\boldsymbol{h}) + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\right)\left(\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{\frac{1}{y} + \mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}}\right) \\
&= E - \frac{\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{\frac{1}{y} + \mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}} + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{\frac{1}{y} + \mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}} \\
&= E + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{\frac{1}{y} + \mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}}
\end{aligned}$$

となる。
ここで

$$\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1} = \sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}$$

より、置き換えると

$$\begin{aligned}
H(\hat{\boldsymbol{\alpha}})Y &= E + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} + y\mathbf{1}\left(\sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}\right)\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{\frac{1}{y} + \sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}} \\
&= E + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\left\{1 + y\left(\sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}\right)\right\}}{\frac{1}{y} + \sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}} \\
&= E + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}y\left\{\frac{1}{y} + \sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}\right\}}{\frac{1}{y} + \sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}} \\
&= E + y\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}y \\
&= E
\end{aligned} \tag{A.5}$$

となる。
右逆行列の存在定理より

$$
\begin{aligned}
YH(\hat{\boldsymbol{\alpha}}) &= E \\
Y &= H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})
\end{aligned}
$$

となる。

従って、式 (A.4) がヘッセ行列 $H(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ の逆行列である。(逆行列の導出は難しい (あるいは紙面をとる) からこういう形で一応証明したということ?)

・ハイパーパラメータの更新式の導出

ヘッセ行列の逆行列

$$
H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}) = \mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} - \frac{\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1}}{y^{-1} + \sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}} \tag{3.206}
$$

の kk 成分は

$$
H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_{kk} = h_k^{-1} - \frac{h_k^{-1}\sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}}{y^{-1} + \sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}}
$$

である (?)。

また、$g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ の k 番目の要素 $g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_k$ は $\frac{\partial F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial \alpha_k}$ なので、式 (3.196) である。

これらを用いて、$H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ の k 番目の要素 $\Big(H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})\Big)_k$ は

$$
\begin{aligned}
\Big(H^{-1}(\hat{\boldsymbol{\alpha}})g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})\Big)_k &= \left(h_k^{-1} - \frac{h_k^{-1}\sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}}{y^{-1} + \sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}}\right) g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_k \\
&= \left(\frac{1}{h_k} - \frac{1}{h_k}\frac{1}{y^{-1} + \sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}}\sum_{k=1}^{K}\frac{1}{h_k}\right) g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_k \\
&= \frac{g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_k}{h_k} - \frac{1}{h_k}\frac{1}{y^{-1} + \sum_{k=1}^{K} h_k^{-1}}\sum_{k=1}^{K}\frac{g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_k}{h_k}
\end{aligned} \tag{3.207}
$$

となる (??? 式が入れ子過ぎて整理できない)。(あと $g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})_k$ が $\sum_k$ の影響下になるのは、$\mathbf{1}\mathbf{1}^{\top}\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})^{-1} * g(\hat{\boldsymbol{\alpha}})$ の計算を理解しないといけないんでしょうね)

従って、式 (3.199) より $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ を 1 ステップ前の $\boldsymbol{\alpha}$ とすると、$\boldsymbol{\alpha}$ の各要素の更新式は

$$
\alpha_k^{(s+1)} = \alpha_k^{(s)} - \Big(H^{-1}(\boldsymbol{\alpha}^{(s)})g(\boldsymbol{\alpha}^{(s)})\Big)_k \tag{3.209}
$$

が得られる。

単語分布のパラメータ $\boldsymbol{\beta}$ も同様に求めることができる。

3.6.5 逐次学習ー確率的ニュートン・ラフソン法

ニュートン・ラフソン法において、文書ごとに勾配を求めることで LDA のハイパーパラメータを逐次更新する。

ニュートン・ラフソン法によるハイパーパラメータの更新式 (3.209) において、文書全体に関わる部分は $g_k(\boldsymbol{\alpha})$

$$g_k(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\partial F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial \alpha_k} = M\left[\Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right) - \Psi(\alpha_k)\right] + \sum_{d=1}^{M}\left[\Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k'=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right)\right] \tag{3.210}$$

の後の因子である。
そこで、後ろの因子を

$$\sum_{d=1}^{M}\left[\Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k'=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right)\right] = M\sum_{d=1}^{M}\frac{1}{M}\left[\Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k'=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right)\right] \tag{3.210}$$

とする。
$p(d) = \frac{1}{M}$ とすると、$d \sim p(d)$ としてサンプリングすることで、確率的勾配により

$$\tilde{g}_k(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\partial F[\boldsymbol{\alpha}]}{\partial \alpha_k} = M\left[\Psi\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right) - \Psi(\alpha_k)\right] + M\left[\Psi(\xi_{d,k}^{\theta}) - \Psi\left(\sum_{k'=1}^{K}\xi_{d,k}^{\theta}\right)\right] \tag{3.212}$$

と近似できる。

従って、s ステップ目のステップサイズを ν_s とすると、更新式

$$\boldsymbol{\alpha}^{(s+1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(s)} - \nu_s H^{-1}(\boldsymbol{\alpha}^{(s)})\tilde{g}(\boldsymbol{\alpha}^{(s)}) \tag{3.213}$$

が得られる。

単語分布のパラメータ $\boldsymbol{\beta}$ も同様に求めることができる。

3.6.6 周辺化ギブスサンプリング/変分ベイズ法の場合

LDA のハイパーパラメータを点推定する。

・周辺化ギブスサンプリングの場合

周辺化ギブスサンプリングでハイパーパラメータの推定を行う。

パラメータ $\boldsymbol{\phi}$, $\boldsymbol{\theta}$ を積分消去した周辺尤度 $p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ を考える。

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \int p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\theta}d\boldsymbol{\phi} \\
&= \int p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{z})p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta})p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}d\boldsymbol{\phi} \\
&= \int \left[\prod_{d=1}^{M}\prod_{i=1}^{N_d} p(w_{d,i}|\boldsymbol{\phi}_{z_{d,i}})p(z_{d,i}|\boldsymbol{\theta}_d)\right]\left[\prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})\right]\left[\prod_{d=1}^{M} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})\right] d\boldsymbol{\theta}d\boldsymbol{\phi} \\
&= \int \prod_{k=1}^{K}\left[\prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{N_d}\delta(z_{d,i}=k,w_{d,i}=v)}\right] p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}_k \int \prod_{d=1}^{M}\left[\prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\sum_{i=1}^{N_d}\delta(z_{d,i}=k)}\right] p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}_d
\end{aligned} \tag{3.214}
$$

それぞれ

$$
\begin{aligned}
n_{k,v} &= \sum_{d=1}^{M}\sum_{i=1}^{N_d}\delta(z_{d,i}=k,w_{d,i}=v) \\
n_{d,k} &= \sum_{i=1}^{N_d}\delta(z_{d,i}=k)
\end{aligned}
$$

とする。

$n_{k,v}$ は、トピック k が割り当てられた語彙 v の数を、デルタ関数を使って全文書の全単語について和をとることで求めたもの。$n_{d,k}$ は、各文書においてトピック k が割り当てられた単語数を、デルタ関数を使って和をとることで求めたもの。

それぞれ置き換えると

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \int \prod_{k=1}^{K}\left[\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}}\right] p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta})d\boldsymbol{\phi}_k \int \prod_{d=1}^{M}\left[\prod_{k=1}^{K}\theta_{d,k}^{n_{d,k}}\right] p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha})d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int \prod_{k=1}^{K}\left[\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}}\right] \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)}\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{\beta_v-1}d\boldsymbol{\phi}_k \int \prod_{d=1}^{M}\left[\prod_{k=1}^{K}\theta_{d,k}^{n_{d,k}}\right] \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)}\prod_{k=1}^{K}\theta_{d,k}^{\alpha_k-1}d\boldsymbol{\theta}_d \\
&= \int \prod_{k=1}^{K}\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)}\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}+\beta_v-1}d\boldsymbol{\phi}_k \int \prod_{d=1}^{M}\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)}\prod_{k=1}^{K}\theta_{d,k}^{n_{d,k}+\alpha_k-1}d\boldsymbol{\theta}_d
\end{aligned}
$$

となる。

$\prod_{v=1}^{V}\phi_{k,v}^{n_{k,v}+\beta_v-1}$, $\prod_{k=1}^{K}\theta_{d,k}^{n_{d,k}+\alpha_k-1}$ のみ取り出すと、それぞれパラメータ $n_{k,v}+\beta_v-1$, $n_{d,k}+\alpha_k-1$ を持つ正規化項のない Dirichlet 分布とみることができる。よって定義より、正規化項の逆数の形に変形できる (そもそもこれの逆数が正規化項である)。

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \prod_{k=1}^{K}\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)}\frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{k,v}+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}n_{k,v}+\beta_v)}\prod_{d=1}^{M}\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)}\frac{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(n_{d,k}+\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}n_{d,k}+\alpha_k)} \qquad (3.215) \\
&= \prod_{k=1}^{K}\left[\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}n_{k,v}+\beta_v)}\prod_{v=1}^{V}\frac{\Gamma(n_{k,v}+\beta_v)}{\Gamma(\beta_v)}\right]\prod_{d=1}^{M}\left[\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}n_{d,k}+\alpha_k)}\prod_{k=1}^{K}\frac{\Gamma(n_{d,k}+\alpha_k)}{\Gamma(\alpha_k)}\right]
\end{aligned}
$$

対数をとり対数周辺尤度として、サンプリングした S 個のトピック $\boldsymbol{z}^{(s)}$ を用いると

$$\log p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}^{(s)}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{k=1}^{K} \log \left(\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} \beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{k,v}^{(s)} + \beta_v)} \prod_{v=1}^{V} \frac{\Gamma(n_{k,v}^{(s)} + \beta_v)}{\Gamma(\beta_v)} \right) \\ * \prod_{d=1}^{M} \log \left(\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^{K} n_{d,k}^{(s)} + \alpha_k)} \prod_{k=1}^{K} \frac{\Gamma(n_{d,k}^{(s)} + \alpha_k)}{\Gamma(\alpha_k)} \right)$$

となる。
サンプルの平均

$$\mathbb{E}[n_{k,v}] = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^{S} n_{k,v}^{(s)}$$
$$\mathbb{E}[n_{d,k}] = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^{S} n_{d,k}^{(s)}$$

にそれぞれ置き換えると、(教科書の (このノートだと 3 行目を除いた)) 式 (3.182) となる。

従って、ハイパーパラメータの更新式は 3.6.3 項と同様にして求まる。
また、単語分布のパラメータ $\boldsymbol{\beta}$ についても同様にして導出できる。

・変分ベイズ法の場合

変分ベイズ法でハイパーパラメータの推定を行う。

潜在トピック集合 $\boldsymbol{z}$ とパラメータ $\boldsymbol{\phi}$, $\boldsymbol{\theta}$ を積分消去した周辺尤度 $p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ を考える。

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\theta} d\boldsymbol{\phi} \\ &= \int \sum_{\boldsymbol{z}} p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{z}) p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\phi}|\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta} d\boldsymbol{\phi} \\ &= \int \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \sum_{k=1}^{K} p(w_{d,i}|z_{d,i} = k, \boldsymbol{\phi}_k) p(z_{d,i} = k|\boldsymbol{\theta}_d) p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta}_d \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi}_k \\ &= \int \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \sum_{k=1}^{K} (\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta}_d \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi}_k \end{aligned}$$

$\sum_{k=1}^{K} \phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}$ を $\sum_{k=1}^{K} f(\phi, \theta)$ とおき、対数をとり、$\frac{q(z_{d,i}=k)}{q(z_{d,i}=k)} = 1$ を掛けることで $q(z_{d,i} = k)$ を導入し、イエンセンの不等式を用いて

$$
\begin{aligned}
\log \sum_{k=1}^{K} f(\phi, \theta) &= \log \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \frac{f(\phi, \theta)}{q(z_{d,i} = k)} \\
&\geq \sum_{k=1}^{K} q(z_{d,i} = k) \log \frac{f(\phi, \theta)}{q(z_{d,i} = k)} \\
&= \log \prod_{k=1}^{K} \left(\frac{f(\phi, \theta)}{q(z_{d,i} = k)} \right)^{q(z_{d,i}=k)}
\end{aligned}
$$

下限を求める。これを log を外して用いると

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) &= \int \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \sum_{k=1}^{K} (\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}) p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta}_d \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi}_k \\
&\geq \int \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^{K} \left(\frac{\phi_{k,w_{d,i}} \theta_{d,k}}{q(z_{d,i} = k)} \right)^{q(z_{d,i}=k)} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta}_d \prod_{k=1}^{K} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi}_k \\
&= \left[\prod_{k=1}^{K} \int \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{q(z_{d,i}=k)\delta(w_{d,i}=v)} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi}_k \right] \left[\prod_{d=1}^{M} \int \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{q(z_{d,i}=k)} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta}_d \right] \\
&\quad * \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^{K} \left(\frac{1}{q(z_{d,i} = k)} \right)^{q(z_{d,i}=k)} \\
&= \left[\prod_{k=1}^{K} \int \prod_{v=1}^{V} \phi_{k,v}^{\sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{N_d} q(z_{d,i}=k)\delta(w_{d,i}=v)} p(\boldsymbol{\phi}_k|\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{\phi}_k \right] \left[\prod_{d=1}^{M} \int \prod_{k=1}^{K} \theta_{d,k}^{\sum_{i=1}^{N_d} q(z_{d,i}=k)} p(\boldsymbol{\theta}_d|\boldsymbol{\alpha}) d\boldsymbol{\theta}_d \right] \\
&\quad * \prod_{d=1}^{M} \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^{K} \left(\frac{1}{q(z_{d,i} = k)} \right)^{q(z_{d,i}=k)}
\end{aligned}
$$

となる。
それぞれ

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}[n_{k,v}] &= \sum_{d=1}^{M} \sum_{i=1}^{N_d} q(z_{d,i} = k) \delta(w_{d,i} = v) \\
\mathbb{E}[n_{d,k}] &= \sum_{i=1}^{N_d} q(z_{d,i} = k)
\end{aligned}
$$

とする。
$\mathbb{E}[n_{k,v}]$ は、トピック k が割り当てられた語彙 v の数の期待値を、各単語がトピック k となる確率 $q(z_{d,i} = k)$ を全文書の全単語について和をとることで求めたもの。ただし、デルタ関数を使って各単語をそれぞれの語彙に変換している。$\mathbb{E}[n_{d,k}]$ は、各文書においてトピック k が割り当てられた単語数の期待値を、各単語がトピック k となる確率 $q(z_{d,i} = k)$ の全単語について和をとることで求めたもの。
それぞれ置き換えると

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) &= \prod_{k=1}^K \left[\prod_{v=1}^V \phi_{k,v}^{\mathbb{E}[n_{k,v}]} \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\beta_v)} \prod_{v=1}^V \phi_{k,v}^{\beta_v-1}\right] \prod_{d=1}^M \left[\prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{\mathbb{E}[n_{d,k}]} \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{\alpha_k-1}\right] \\
&\qquad * \prod_{d=1}^M \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^K \left(\frac{1}{q(z_{d,i}=k)}\right)^{q(z_{d,i}=k)} \\
&= \prod_{k=1}^K \left[\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\beta_v)} \prod_{v=1}^V \phi_{k,v}^{\mathbb{E}[n_{k,v}]+\beta_v-1}\right] \prod_{d=1}^M \left[\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^K \theta_{d,k}^{\mathbb{E}[n_{d,k}]+\alpha_k-1}\right] \\
&\qquad * \prod_{d=1}^M \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^K \left(\frac{1}{q(z_{d,i}=k)}\right)^{q(z_{d,i}=k)} \\
&= \prod_{k=1}^K \left[\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\prod_{v=1}^V \Gamma(\beta_v)} \frac{\prod_{v=1}^V \Gamma(\mathbb{E}[n_{k,v}]+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}[n_{k,v}]+\beta_v)}\right] \prod_{d=1}^M \left[\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} \frac{\prod_{k=1}^K \Gamma(\mathbb{E}[n_{d,k}]+\alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^K \mathbb{E}[n_{d,k}]+\alpha_k)}\right] \\
&\qquad * \prod_{d=1}^M \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^K \left(\frac{1}{q(z_{d,i}=k)}\right)^{q(z_{d,i}=k)} \\
&= \prod_{k=1}^K \left[\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^V \beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^V \mathbb{E}[n_{k,v}]+\beta_v)} \prod_{v=1}^V \frac{\Gamma(\mathbb{E}[n_{k,v}]+\beta_v)}{\Gamma(\beta_v)}\right] \prod_{d=1}^M \left[\frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\Gamma(\sum_{k=1}^K \mathbb{E}[n_{d,k}]+\alpha_k)} \prod_{k=1}^K \frac{\Gamma(\mathbb{E}[n_{d,k}]+\alpha_k)}{\Gamma(\alpha_k)}\right] \\
&\qquad * \prod_{d=1}^M \prod_{i=1}^{N_d} \prod_{k=1}^K \left(\frac{1}{q(z_{d,i}=k)}\right)^{q(z_{d,i}=k)} \qquad (3.218)
\end{aligned}
$$

となる。

対数をとると (教科書だと 3 行目を除くと) 式 (3.182) となる。

従って、ハイパーパラメータの更新式は 3.6.3 項と同様にして求まる。

また、単語分布のパラメータ $\boldsymbol{\beta}$ についても同様にして導出できる。

おわりに

あとがきまで読んでいただきありがとうございます。

年度内には疑似コードを R で実装します。

著者略歴

しょこ β (@anemptyarchive)

2020 年 2 月 線形代数と微分積分に入門

R4DS 修了

2020 年 3 月 疑似コードを R で組む

2020 年 4 月 Python に入門

白トピックモデルのノート

2020 年 2 月 2 日　初版　第 1 刷

著者 @anemptyarchive

発行者 anarchive-beta.com

製本 RStudio
