演習問題 1.34

変分法を用いて、汎関数 (1.08)′ の停留点が、式 (1.08) で与えられることを示せ。また、制約 (1.05), (1.06), (1.07) を用いて、ラグランジュ乗数を消去し、最大エントロピー解がガウス分布 (1.09) で与えられることを示せ。

[微分エントロピーの 3 つの制約]

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\,dx = 1$$

… (1.105)

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\,p(x)\,dx = \mu$$

… (1.106)

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2\,p(x)\,dx = \sigma^2$$

… (1.107)

[汎関数]

$$-\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\ln p(x)\,dx + \lambda_1\left(\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\,dx - 1\right)$$
$$+\lambda_2\left(\int_{-\infty}^{\infty} x\,p(x)\,dx - \mu\right) + \lambda_3\left(\int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2\,p(x)\,dx - \sigma^2\right)$$

… (1.08)′

[汎関数 (1.08)′ の停留点]

$$p(x) = \exp\{-1 + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 (x-\mu)^2\}$$

… (1.108)

[ガウス分布]

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}$$

… (1.109)

[ガウス分布の規格化]

ガウス分布は正規化されており、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{N}(x\,|\,\mu,\sigma^2)\,dx = 1$$

… (1.48)

を満たす。式 (1.109) と (1.48) より、以下の式が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}dx = (2\pi\sigma^2)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{N}(x\,|\,\mu,\sigma^2)\,dx = (2\pi\sigma^2)^{1/2}$$

… (1.109)′

[ガウス分布の平均]

$$\mathrm{E}[\, x\,] = \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{N}(\, x \mid \mu\,, \sigma^2\,)\, x\, dx = \mu$$

… (1.49)

$$\mathrm{E}[\, x^2\,] = \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{N}(\, x \mid \mu\,, \sigma^2\,)\, x^2\, dx = \mu^2 + \sigma^2$$

… (1.50)

[ラグランジュ関数]

複数の変数に 1 つ以上の制約条件が課せられたとき、関数の停留点を求めるために用いる。

$$L(\,\mathbf{x},\ \lambda\,) \equiv f(\,\mathbf{x}\,) + \lambda\, g(\,\mathbf{x}\,)$$

等号制約条件 $g(\,\mathbf{x}\,)$ の下で、関数 $f(\,\mathbf{x}\,)$ を最大化するためには、ラグランジュ関数 $L(\,\mathbf{x},\ \lambda\,)$ の $\mathbf{x}$ と λ の両方に対する停留点を求めればよい。$\mathbf{x}$ が D 次元ベクトルとすると、x_1 , x_2 , … , x_D と λ でラグランジュ関数をそれぞれ偏微分した際、計 ($D+1$) 個の方程式が得られるので、それを解けば停留点 $\mathbf{x}^*$ と λ の値が求められる。また、求めたいものが $\mathbf{x}^*$ のみの場合は、停留式から λ を消去してから解を求めればよい。⇒ つまり、制約条件が課された下で、微分計算をする際に用いる。

[ラグランジュ乗数]

ラグランジュ関数におけるパラメータ λ のことである。

[解]

式 (1.08)′ を、変分法を用いて $p(\,x\,)$ について最大化する。そのために、式 (1.08)′ を $F(\,p\,)$ とおいて整理すると、式 (1.08)′ は、

$$\begin{aligned} F(\,p\,) &= -\int_{-\infty}^{\infty} p(\,x\,)\, \ln p\,(\,x\,)\; dx + \lambda_1 \left(\int_{-\infty}^{\infty} p(\,x\,)\, dx - 1 \right) \\ &\quad + \lambda_2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} x\, p(\,x\,)\, dx - \mu \right) + \lambda_3 \left(\int_{-\infty}^{\infty} (\,x - \mu\,)^2\, p(\,x\,)\, dx - \sigma^2 \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \{\, -p(\,x\,)\, \ln p(\,x\,) + \lambda_1 p(\,x\,) + \lambda_2\, x\, p(\,x\,) + \lambda_3\, (\,x - \mu\,)^2\, p(\,x\,)\,\}\, dx \\ &\quad + (\, -\lambda_1 - \lambda_2\, \mu - \lambda_3\, \sigma^2\,) \end{aligned}$$

と整理できる。ここで、上記の式を $p(\,x\,)$ について変分すると、汎関数 (1.08)′ が停留点をもつのは、$\frac{\partial F(\,p\,)}{\partial p} = 0$ のときであるので、

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(\,p\,)}{\partial p} &= -\{\, (\, p(\,x\,)\,)'\, \ln p(\,x\,) + p(\,x\,)\,(\, \ln p(\,x\,)\,)'\} + \lambda_1 + \lambda_2\, x + \lambda_3\,(\,x - \mu\,)^2 \\ &= -\{\, (\, p(\,x\,)\,)'\, \ln p(\,x\,) + p(\,x\,)\,(\, \ln p(\,x\,)\,)'\,\} + \lambda_1 + \lambda_2\, x + \lambda_3\,(\,x - \mu\,)^2 \end{aligned}$$

$$= -\left\{ \ln p(x) + p(x)\frac{1}{p(x)} \right\} + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 (x - \mu)^2$$

$$= -\ln p(x) - 1 + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 (x - \mu)^2 = 0$$

より、これを $p(x)$ について解くと、

$$\ln p(x) = -1 + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 (x - \mu)^2$$

$$p(x) = \exp\{ -1 + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 (x - \mu)^2 \}$$

となるため、汎関数（ 1.08)′ の停留点が、式（ 1.08 ）で与えられることが示せた。

次に、制約（ 1.05), (1.06), (1.07 ）を用いて、ラグランジュ乗数 λ_1 , λ_2 , λ_3 を消去し、最大エントロピー解がガウス分布（ 1.09 ）で与えられることを示す。そのために、式（ 1.08 ）に式（ 1.109)′ が適用できるように、式（ 1.08 ）を変形しておく。

$$p(x) = \exp\{ -1 + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 (x - \mu)^2 \}$$

$$= \exp\{ -1 + \lambda_1 + \lambda_2 x + \lambda_3 x^2 - 2\lambda_3 \mu x + \lambda_3 \mu^2 \}$$

$$= \exp\left\{ -1 + \lambda_1 + \lambda_3 x^2 + 2\lambda_3 \left(\frac{\lambda_2}{2\lambda_3} - \mu \right) x + \lambda_3 \mu^2 \right\}$$

$$= \exp\left\{ -1 + \lambda_1 + \lambda_3 \left\{ x^2 - 2\left(\mu - \frac{\lambda_2}{2\lambda_3} \right) x \right\} + \lambda_3 \mu^2 \right\}$$

$$= \exp\left\{ -1 + \lambda_1 + \lambda_3 \left\{ x - \left(\mu - \frac{\lambda_2}{2\lambda_3} \right) \right\}^2 - \lambda_3 \left(\mu - \frac{\lambda_2}{2\lambda_3} \right)^2 + \lambda_3 \mu^2 \right\}$$

ここで、$\mu - \frac{\lambda_2}{2\lambda_3} = m$, $\lambda_3 = -\frac{1}{2s^2}$ と置換すると、上記の式は、

$$= \exp\left\{ -1 + \lambda_1 - \frac{1}{2s^2} (x - m)^2 - \lambda_3 m^2 + \lambda_3 \mu^2 \right\}$$

$$= \exp\{ -1 + \lambda_1 - \lambda_3 m^2 + \lambda_3 \mu^2 \} \exp\left\{ -\frac{(x - m)^2}{2s^2} \right\}$$

… ※

と整理できる。ここで、式（ 1.05), (1.06), (1.07), ※ より、各パラメータの値を求めていく。まず、式（ 1.05 ）と式 ※ より、式（ 1.05 ）は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)\, dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{ -1 + \lambda_1 - \lambda_3 m^2 + \lambda_3 \mu^2 \} \exp\left\{ -\frac{(x - m)^2}{2s^2} \right\} = 1$$

$$\exp\{ -1 + \lambda_1 - \lambda_3 m^2 + \lambda_3 \mu^2 \} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{ -\frac{(x - m)^2}{2s^2} \right\} = 1$$

となる。ここで、式（ 1.109)′ を適用すると、

$$\exp\{ -1 + \lambda_1 - \lambda_3 m^2 + \lambda_3 \mu^2 \} (2\pi s^2)^{1/2} = 1$$

となり、この両辺に $(2\pi s^2)^{-1/2}$ を掛け、

$$\exp\{-1+\lambda_1-\lambda_3 m^2+\lambda_3\mu^2\} = (2\pi s^2)^{-1/2}$$

さらに、$\exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right\}$ を掛けると、

$$\exp\{-1+\lambda_1-\lambda_3 m^2+\lambda_3\mu^2\}\exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right\}$$

$$= (2\pi s^2)^{-1/2}\exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right\}$$

であるから、式 ※ より、上記の式の左辺が $p(x)$ に書き直せるので、$p(x)$ は、

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right\}$$

… ※※

と表される。次に、式 ※※ より、式 (1.06) は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\,p(x)\,dx = \mu$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right\}\right]dx = \mu$$

となり、ここで、式 (1.49) より、

$$m = \mu$$

… ※※※

と表される。さらに、式 ※※, ※※※ より、式 (1.07) は、

$$\int_{-\infty}^{\infty}(x-\mu)^2\,p(x)\,dx = \sigma^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}(x-\mu)^2\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2s^2}\right\}\right]dx = \sigma^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}(x-\mu)^2\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2s^2}\right\}\right]dx = \sigma^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^2\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2s^2}\right\}\right]dx$$

$$-2\mu\int_{-\infty}^{\infty}x\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2s^2}\right\}\right]dx$$

$$+\mu^2\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}}\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2s^2}\right\}\right]dx = \sigma^2$$

となり、ここで、式 (1.50) より、

$$(s^2+\mu^2)-2\mu^2+\mu^2 = \sigma^2$$

$$s^2 = \sigma^2$$

… ※※※※

と表される。最終的に、式 ※※ , ※※※ , ※※※※ の 3 つの方程式

$$\begin{cases} p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left\{ - \dfrac{(x - m)^2}{2s^2} \right\} & \cdots \text{※※} \\ m = \mu & \cdots \text{※※※} \\ s^2 = \sigma^2 & \cdots \text{※※※※} \end{cases}$$

より、最大エントロピー解となる停留点 $p(x)$ は、

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{ - \frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\}$$

となる。以上から、最大エントロピー解がガウス分布 (1.09) で与えられることを示せた。