

### 演習問題 2.14

この演習問題では、共分散が与えられているときに、エントロピーを最大にする多変量分布は、多変量ガウス分布であることを示す。まず、分布  $p(\mathbf{x})$  のエントロピーは、

$$H[\mathbf{x}] = - \int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \cdots (2.279)$$

である。そして、分布が正規化されていることと、平均と共分散が固定されているということを示す制約式

$$\int p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad \cdots (2.280)$$

$$\int p(\mathbf{x}) \mathbf{x} d\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu} \quad \cdots (2.281)$$

$$\int p(\mathbf{x}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma} \quad \cdots (2.282)$$

を満たすすべての分布中で、この  $H[\mathbf{x}]$  を最大化したい。制約式 (2.280), (2.281), (2.282) を扱うために、ラグランジュ乗数を用い、式 (2.279) を変分最大化し、尤度を最大にする分布がガウス分布 (2.43) であることを示せ。

#### [ 多変量ガウス分布 ]

$$N(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} \quad \cdots (2.43)$$

ただし、 $\boldsymbol{\mu}$  は  $D$  次元ベクトル、 $\boldsymbol{\Sigma}$  は  $D \times D$  の共分散行列、 $|\boldsymbol{\Sigma}|$  は  $\boldsymbol{\Sigma}$  の行列式を表す。

#### [ 多変量ガウス分布の正規化 ]

$$\int p(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \prod_{j=1}^D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi\lambda_j)^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{y_j^2}{2\lambda_j} \right\} dy_j = 1 \quad \cdots (2.57)$$

#### [ 多変量ガウス分布の期待値 (一次のモーメント) ]

$$E[\mathbf{x}] = \boldsymbol{\mu} \quad \cdots (2.59)$$

#### [ 多変量ガウス分布の期待値 (二次のモーメント) ]

$$E[\mathbf{x}\mathbf{x}^T] = \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^T + \boldsymbol{\Sigma} \quad \cdots (2.62)$$

**[ 多変量ガウス分布の共分散 ]**

$$\text{cov}[\mathbf{x}] = E[(\mathbf{x} - E[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - E[\mathbf{x}])^T] = \Sigma$$

… ( 2.64 )

[ 解 ]

共分散が与えられているときに、エントロピーを最大にする多変量分布は、多変量ガウス分布であることを示す。分布  $p(\mathbf{x})$  のエントロピー ( 2.279 ) と、制約式 ( 2.280 ), ( 2.281 ), ( 2.282 ) より、 $p(\mathbf{x})$  に関するラグランジュ関数  $L(p)$  は、

$$\begin{aligned} L(p) = & - \int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \lambda \left( \int p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - 1 \right) \\ & + \lambda^T \left( \int p(\mathbf{x}) \mathbf{x} d\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} \right) + \Lambda \left( \int p(\mathbf{x}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} - \Sigma \right) \end{aligned}$$

… ※

で与えられる。ここで、各制約条件に対して、 $\lambda$  はスカラー、 $\boldsymbol{\lambda}$  は  $D$  次元のベクトル、 $\Lambda$  は  $D$  次元の正方行列で表されるラグランジュ乗数である。さらに、上記の式の第四項は、ベクトルの二次形式であることから、トレースを用いて、

$$\Lambda \left( \int p(\mathbf{x}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} - \Sigma \right) = \text{Tr} \left\{ \Lambda \left( \int p(\mathbf{x}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} - \Sigma \right) \right\}$$

と書き表せるので、式 ※ は、

$$\begin{aligned} = & - \int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \lambda \left( \int p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - 1 \right) \\ & + \lambda^T \left( \int p(\mathbf{x}) \mathbf{x} d\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} \right) + \text{Tr} \left\{ \Lambda \left( \int p(\mathbf{x}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} - \Sigma \right) \right\} \end{aligned}$$

と書き直せ、さらに、トレースの連結性を用い、上記の式を展開すると、

$$\begin{aligned} = & - \int p(\mathbf{x}) \ln p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \lambda \int p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \lambda \\ & + \lambda^T \int p(\mathbf{x}) \mathbf{x} d\mathbf{x} - \lambda^T \boldsymbol{\mu} + \text{Tr} \left\{ \Lambda \left( \int p(\mathbf{x}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} \right) \right\} - \text{Tr}(\Lambda \Sigma) \end{aligned}$$

… ※※

となる。上記の式を  $p(\mathbf{x})$  について変分すると、 $\frac{L(p)}{p(\mathbf{x})}$  は、

$$\frac{L(p)}{p(\mathbf{x})} = -1 - \ln p(\mathbf{x}) + \lambda + \lambda^T \mathbf{x} + \text{Tr} \{ \Lambda (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \}$$

となり、トレースの循環性を考慮すると、

$$= -1 - \ln p(\mathbf{x}) + \lambda + \lambda^T \mathbf{x} + \text{Tr} \{ (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Lambda (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \}$$

となり、さらに、上記の式中のトレースは、ベクトルと行列の二次形式となっているので、

$$= -1 - \ln p(\mathbf{x}) + \lambda + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

と書き直せる。 $L(p)$  が最大となる停留点  $p(\mathbf{x})$  は、 $\frac{L(p)}{p(\mathbf{x})} = 0$  で求められるので、

$$-1 - \ln p(\mathbf{x}) + \lambda + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = 0$$

より、これを  $p(\mathbf{x})$  について解くと、

$$\ln p(\mathbf{x}) = -1 + \lambda + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

となり、上記の式の両辺を対数化すると、

$$p(\mathbf{x}) = \exp\{-1 + \lambda + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\}$$

… ※※※

となり、 $p(\mathbf{x})$  がラグランジュ乗数を含んだ状態で得られた。ここで、式 ※※※ の指数部について平方完成すると、

$$\begin{aligned} & -1 + \lambda + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \\ &= -1 + \lambda + \left( \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right)^T \boldsymbol{\Lambda} \left( \mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right) + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \end{aligned}$$

となるので、ここで、 $\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$  と変数変換してやると、上記の式は、

$$= -1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}$$

… ※※※※

と書き直せる。これを基に、ラグランジュ乗数を求めていく。制約式 ( 2.281 ) に、式 ※※※※ を適用し、 $\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}$  で変数変換すると、

$$\begin{aligned} & \int \exp\left\{-1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}\right\} \left( \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right) d\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu} \\ & \int \exp\left\{-1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}\right\} \mathbf{y} d\mathbf{x} \\ & + \int \exp\left\{-1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}\right\} \boldsymbol{\mu} d\mathbf{x} \\ & - \frac{1}{2} \int \exp\left\{-1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}\right\} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} d\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu} \end{aligned}$$

が得られる。ここで、変数変換  $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}$  は、 $\frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{y}} = 1 \Leftrightarrow d\mathbf{x} = d\mathbf{y}$  の線形

変換であることから、上記の式は、

$$\begin{aligned} & \int \exp\left\{-1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}\right\} \mathbf{y} d\mathbf{y} \\ & + \int \exp\left\{-1 + \lambda + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda}\right\} \boldsymbol{\mu} d\mathbf{y} \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \int \exp \left\{ -1 + \lambda + \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right\} \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} d\mathbf{y} = \boldsymbol{\mu}$$

… ※※※※※

となる。同様に、制約式 ( 2.280 ) より、

$$\int \exp \left\{ -1 + \lambda + \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right\} d\mathbf{y} = 1$$

の関係式が得られることから、式 ※※※※※ は、

$$\int \exp \left\{ -1 + \lambda + \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right\} \mathbf{y} d\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu} - \frac{1}{2} \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\mu}$$

$$\int \exp \left\{ -1 + \lambda + \mathbf{y}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{\lambda} - \frac{1}{4} \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} \right\} \mathbf{y} d\mathbf{y} - \frac{1}{2} \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$$

となり、ここで、上記の式の第一項であるが、 $\mathbf{y}$  は積分区間  $[-\infty, \infty]$  において、奇関数となるため、この第一項は消滅する。よって、上記の式は、

$$-\frac{1}{2} \mathbf{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$$

と整理でき、この式から、ベクトル  $\boldsymbol{\lambda}$  が、 $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$  であることがわかる。このことから、式 ※※※ で与えられる  $p(\mathbf{x})$  は、

$$p(\mathbf{x}) = \exp \{ -1 + \lambda + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \}$$

… ※※※※※

となる。最後に、制約式 ( 2.282 ) に対し、上記の式で表される  $p(\mathbf{x})$  を適用する。

$$\int \exp \{ -1 + \lambda + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\int \exp \{ -1 + \lambda + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\int \exp \{ -1 + \lambda \} \cdot \exp \{ (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma}$$

… ※※※※※

ここで、多変量ガウス分布の共分散は、式 ( 2.64 ) より、

$$\text{cov}[\mathbf{x}] = E [ (\mathbf{x} - E[\mathbf{x}]) (\mathbf{x} - E[\mathbf{x}])^T ] = \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\int N(\mathbf{x} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) (\mathbf{x} - E[\mathbf{x}]) (\mathbf{x} - E[\mathbf{x}])^T d\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma}$$

$$\int \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T d\mathbf{x} = \boldsymbol{\Sigma}$$

で与えられるから、この式を先程の式 ※※※※※ と比較すると、

$$\left\{ \begin{array}{l} \exp\{-1 + \lambda\} = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\Sigma|^{1/2}} \Leftrightarrow -1 + \lambda = \ln\left\{ \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\Sigma|^{1/2}} \right\} \\ \Lambda = -\frac{1}{2} \Sigma^{-1} \end{array} \right.$$

となることがわかる。よって、式 ※※※※※※ より、 $p(\mathbf{x})$  は、

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}) &= \exp\{-1 + \lambda + (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Lambda (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\} \\ &= \exp\left\{ \ln\left\{ \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\Sigma|^{1/2}} \right\} - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\Sigma|^{1/2}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} \end{aligned}$$

となるため、共分散が与えられているときに、エントロピーを最大にする多変量分布は、多変量ガウス分布であることが示せた。

#### 【 トレース ( trace ) 】

線形代数において、基底変換を行うと、行列の具体形は変わってしまう。しかし、トレースや行列式は、基底の取り方に依らないので、座標表示の取り方に依らない不変量として非常に重要となる。また、トレースは簡単な形をしているので、計算が楽になる。

○  $\text{Tr}(\mathbf{A}) = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{NN}$

⇒  $N \times N$  正方行列  $\mathbf{A}$  の主対角成分の和で求められる。

#### 【 トレースの性質 】

○ **連結性** ...  $\text{Tr}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \text{Tr}(\mathbf{A}) + \text{Tr}(\mathbf{B})$

○  $\text{Tr}(k\mathbf{A}) = k \text{Tr}(\mathbf{A})$

○  $\text{Tr}(\mathbf{AB}) = \text{Tr}(\mathbf{BA})$

○  $\det(\mathbf{P}) \neq 0$  のとき、 $\text{Tr}(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}) = \text{Tr}(\mathbf{A})$

○  $\mathbf{A}^2 - \text{Tr}(\mathbf{A})\mathbf{A} + \det(\mathbf{A})\mathbf{E} = 0$

○  $\text{Tr}(\mathbf{A}^2) - (\text{Tr}(\mathbf{A}))^2 + 2\det(\mathbf{A}) = 0$

○ **循環性** ...  $\text{Tr}(\mathbf{ABC}) = \text{Tr}(\mathbf{CAB}) = \text{Tr}(\mathbf{BCA})$

⇒ この循環性は、任意の数の行列に対しても拡張される。

(ただし、 $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{P}$  は  $N$  次の正方行列とする。)

○  $\text{Tr}(\mathbf{ab}^T) = \text{Tr}\{(\mathbf{ab}^T)^T\} = \text{Tr}(\mathbf{ba}^T)$

⇒ トレース内で転置をとっても等しくなる。

○ **ベクトルと行列の二次形式の性質** ...  $\mathbf{a}^T \Sigma \mathbf{a} = \text{Tr}(\mathbf{a}^T \Sigma \mathbf{a})$

(ただし、 $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  は  $N$  次のベクトル、 $\Sigma$  は  $N$  次の正方行列とする。)