変分ベイズ法の混合正規分布への適用

中村 友昭

1 一般式の導出

変分ベイズ学習では,全ての未知量を周辺化した次式の周辺尤度を考える.

$$\mathcal{L}(D) = \log p(\mathbf{D}) = \log \sum_{m} \sum_{\mathbf{Z}} \int p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m) d\boldsymbol{\theta}$$
 (1)

ここで, $\mathbf{D}=\{x_1,\ldots,x_N\}$ は N 個の学習データ, $\mathbf{Z}=\{z_1,\ldots,z_N\}$ は潜在変数, $\boldsymbol{\theta}=\{\boldsymbol{\theta}_1,\ldots,\boldsymbol{\theta}_I\}$ は I 個のモデルのパラメータ,m はモデル指標を表す.全ての確率変数の結合分布 $p(\mathbf{D},\mathbf{Z},\boldsymbol{\theta},m)$ は

$$p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m) = p(m)p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|m) \prod_{i} p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)$$
(2)

と分解できる.ここで以下のような,各未知量毎に独立性を仮定した,新たな分布 q を導入する.

$$q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m) = q(m)q(\mathbf{Z}|m) \prod_{i} q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)$$
(3)

qを用いて $\mathcal{L}(\mathbf{D})$ を以下のように変形する.

$$\mathcal{L}(\mathbf{D}) = \log \sum_{m} \sum_{\mathbf{Z}} \int q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m) \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m)}{q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m)} d\boldsymbol{\theta}$$

$$= \sum_{m} \sum_{\mathbf{Z}} \int_{\boldsymbol{\theta}} q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m) \log \frac{q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m)}{p(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m | \mathbf{D})} d\boldsymbol{\theta}$$

$$+ \sum_{m} \sum_{\mathbf{Z}} \int_{\boldsymbol{\theta}} q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m) \log \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m)}{q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m)} d\boldsymbol{\theta}$$

$$\equiv \text{KL}(q(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m), p(\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}, m | \mathbf{D})) + \mathcal{F}[q]$$

$$(4)$$

ただし, $\mathcal{F}[q]$ は自由エネルギーと呼ばれ,分布 q を変関数とする汎関数, KL は分布間の距離を表すカルバック・ライブラー距離 (KL 距離) である.ここで, $\mathcal{L}(D)$ が変分事後分布 q に依存しないため,F[q] を最大化することは,q と真の事後分布

pとの KL 距離を最少化することと同義である. すなわち, $\mathcal{F}[q]$ を最大化することで, 変分事後分布 q は真の事後分布 p の最良の近似となる.

式 (3) を用いて, $\mathcal{F}(q)$ を以下のように変形する.

$$\mathcal{F}[q] = \sum_{m} q(m) \left\{ \left\langle \log \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)}{q(\mathbf{Z}|m)} \right\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}|m)} + \sum_{i=1}^{I} \left\langle \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)}{q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)} \right\rangle_{q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)} + \log \frac{p(m)}{q(m)} \right\}$$
(5)

1.1 潜在変数の変分事後分布 $q(\mathbf{Z}|m)$ の導出

 $q(\mathbf{Z}|m)$ は,制約条件 $\sum_{\mathbf{Z}} q(\mathbf{Z}|m) = 1$ の下で, $\mathcal{F}(q)$ を最大化することで得られる.最大化にはラグランジュの未定乗数法を用いる.式 (5) から, $q(\mathbf{Z}|m)$ に関する項を

$$\mathcal{F}[q(\mathbf{Z}|m)] = \left\langle \log \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)}{q(\mathbf{Z}|m)} \right\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}|m)}$$
(6)

とし, λ をラグランジュ乗数として,次式の汎関数 $\mathcal{J}[q(\mathbf{Z}|m)]$ の極値問題を解く.

$$\mathcal{J}[q(\mathbf{Z}|m)] = \mathcal{F}[q(\mathbf{Z}|m)] + \lambda \left(\sum_{\mathbf{Z}} q(\mathbf{Z}|m) - 1\right) \tag{7}$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}[q(\mathbf{Z}|m)]}{\partial q(\mathbf{Z}|m)} = \frac{\partial}{\partial q(\mathbf{Z}|m)} \left[\sum_{\mathbf{Z}} \left\{ q(\mathbf{Z}|m) \int q(\boldsymbol{\theta}|m) \log \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)}{q(\mathbf{Z}|m)} d\boldsymbol{\theta} \right\} \right]$$

$$+\lambda \left(\sum_{\mathbf{Z}} q(\mathbf{Z}|m) - 1\right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial q(\mathbf{Z}|m)} \int q(\boldsymbol{\theta}|m) \left\{ q(\mathbf{Z}|m) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) - q(\mathbf{Z}|m) \log q(\mathbf{Z}|m) \right\} d\boldsymbol{\theta} + \lambda$$

$$= \int q(\boldsymbol{\theta}|m) \left\{ \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) - \log q(\mathbf{Z}|m) - 1 \right\} d\boldsymbol{\theta} + \lambda$$

$$= \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)} - \log q(\mathbf{Z}|m) - 1 + \lambda$$

$$= 0$$

$$q(\mathbf{Z}|m) = \exp \left\{ \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)} + \lambda - 1 \right\} \tag{8}$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}[q(\mathbf{Z}|m)]}{\partial \lambda} = \sum_{\mathbf{Z}} q(\mathbf{Z}|m) - 1$$

$$= \sum_{\mathbf{Z}} \exp\left\{ \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)} + \lambda - 1 \right\} - 1 = 0$$

$$\exp(\lambda - 1) = \frac{1}{\sum_{\mathbf{Z}} \exp\left\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)}} \tag{9}$$

式 (8), 式 (9) より,潜在変数の変分事後分布 $q(\mathbf{Z}|m)$ を得る.

$$q(\mathbf{Z}|m) = \frac{\exp \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)}}{\sum_{\mathbf{Z}} \exp \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)}}$$
$$= C \exp \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)}$$
(10)

Cは,規格化定数である.

$oldsymbol{1.2}$ パラメータの変分事後分布 $q(oldsymbol{ heta}_i|m)$ の導出

前節と同様に, $q(\pmb{\theta}_i|m)$ は,制約条件 $\sum_{\theta_i}q(\pmb{\theta}_i|m)=1$ の下で, $\mathcal{F}(q)$ を最大化することで得られる.式 (5) から, $q(\pmb{\theta}_i|m)$ に関する項を

$$\mathcal{F}[q(\boldsymbol{\theta}_i|m)] = \left\langle \log \frac{p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)}{q(\mathbf{Z}|m)} \right\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}|m)} + \sum_{i} \left\langle \log \frac{p(\boldsymbol{\theta}_i|m)}{q(\boldsymbol{\theta}_i|m)} \right\rangle_{q(\boldsymbol{\theta}_i|m)} (11)$$

とし, λ をラグランジュ乗数として,次式の汎関数 $\mathcal{J}[q(m{ heta}_i|m)]$ の極値問題を解く.

$$\mathcal{J}[q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)] = \mathcal{F}[q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)] + \lambda \left(\int q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)d\boldsymbol{\theta}_{i} - 1\right)
\frac{\partial \mathcal{J}[q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)]}{\partial q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)} = \frac{\partial}{\partial q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)} \left[\sum_{\mathbf{Z}} \left\{ q(\mathbf{Z}|m) \int q(\boldsymbol{\theta}|m) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) - q(\boldsymbol{\theta}|m) \log q(\mathbf{Z}|m)d\boldsymbol{\theta} \right\}
+ q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) \log p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) - q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) \log q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) + \lambda
= \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)} + \log p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)
- \log q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) - 1 = 0$$
(12)

$$q(\boldsymbol{\theta}_i|m) = p(\boldsymbol{\theta}_i|m) \exp\left(\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)} + \lambda - 1\right)$$
(13)

$$\frac{\partial \mathcal{J}[q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)]}{\partial \lambda} = \int q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m)d\boldsymbol{\theta}_{i} - 1$$

$$= \int p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) \exp\left(\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)} + \lambda - 1\right) d\boldsymbol{\theta}_{i} - 1 = 0 \tag{14}$$

$$\exp(\lambda - 1) = \frac{1}{\int p(\boldsymbol{\theta}_i | m) \exp\left(\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z} | m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i} | m)}\right) d\boldsymbol{\theta}_i}$$
(15)

ただし, θ_{-i} は, θ 中の, θ_{i} 以外のパラメータの集合を表す.

式 (13) に式 (15) を代入することでパラメータの変分事後分布 $q(\boldsymbol{\theta}_i|m)$ を得る.

$$q(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) = \frac{p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) \exp\left(\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)}\right)}{\int p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) \exp\left(\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)}\right) d\boldsymbol{\theta}_{i}}$$

$$= C_{i}p(\boldsymbol{\theta}_{i}|m) \exp\left(\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)}\right)$$
(16)

ただし, C_i は規格化定数である.

1.3 モデル指標の変分事後分布のq(m)の導出

 $\mathcal{F}[q]$ の q(m) を含まない項をまとめて \mathcal{F}_m と置き , 式 (5) を変形すると次式を得る .

$$\mathcal{F}[q] = \left\langle \mathcal{F}_m \right\rangle_{q(m)} + \left\langle \log \frac{p(m)}{q(m)} \right\rangle_{q(m)} \tag{17}$$

 $q(\mathbf{Z}|m)$, $q(\boldsymbol{\theta}_i|m)$ は,式 (17) の \mathcal{F}_m のみに依存するので, $\mathcal{F}[q]$ の $q(\mathbf{Z}|m)$, $q(\boldsymbol{\theta}_i|m)$ に関する最大化は, \mathcal{F}_m の $q(\mathbf{Z}|m)$, $q(\boldsymbol{\theta}_i|m)$ に関する最大化と等価である. \mathcal{F}_m の $q(\mathbf{Z}|m)$, $q(\boldsymbol{\theta}_i|m)$ に関する最大値を \mathcal{F}_m^* と置くと,式 (17) は次のようになる.

$$\mathcal{F}[q] = \left\langle \mathcal{F}_m^* \right\rangle_{q(m)} + \left\langle \log \frac{p(m)}{q(m)} \right\rangle_{q(m)} \tag{18}$$

これを $\sum_m q(m)=1$ の制約条件の下で,q(m) に関して最大化することで m の最適値を得ることができる.ラグランジュ乗数を λ と置くと,次式の汎関数 $\mathcal{J}[q(m)]$

の極値問題となる.

$$\mathcal{J}[q(m)] = \langle \mathcal{F}_{m}^{*} \rangle_{q(m)} + \left\langle \log \frac{p(m)}{q(m)} \right\rangle_{q(m)} + \lambda \left(\sum_{m} q(m) - 1 \right) \\
= \sum_{m} q(m) \left(\mathcal{F}_{m}^{*} + \log \frac{p(m)}{q(m)} \right) + \lambda \left(\sum_{m} q(m) - 1 \right) \\
\frac{\partial \mathcal{J}[q(m)]}{\partial q(m)} = \mathcal{F}_{m}^{*} + \log p(m) - \log q(m) - 1 + \lambda = 0 \\
q(m) = p(m) \exp \left(\mathcal{F}_{m}^{*} - 1 + \lambda \right) \\
\frac{\partial \mathcal{J}[q(m)]}{\partial \lambda} = \sum_{m} q(m) - 1 = 0 \\
\exp(\lambda - 1) = \frac{1}{\sum_{m} p(m) \exp \left(\mathcal{F}_{m}^{*} \right)} \tag{20}$$

式 (20) を ,式 (19) に代入することで ,モデル指標の変分事後分布 q(m) を得る .

$$q(m) = \frac{p(m)\exp\left(\mathcal{F}_{m}^{*}\right)}{\sum_{m} p(m)\exp\left(\mathcal{F}_{m}^{*}\right)} = C_{m}p(m)\exp\left(\mathcal{F}_{m}^{*}\right)$$
(21)

ただし, C_m は規格化定数である.さらに簡単のため,事前分布 p(m)=(-様) と仮定すると,q(m) の最大化は, \mathcal{F}_m の最大化と等価である.すなわち, \mathcal{F}_m を $q(\mathbf{Z}|m)$, $q(\pmb{\theta}_i|m)$ に関して最大化すると同時に,m に関しても最大化することにより,最適なモデル指標 m が求まる.

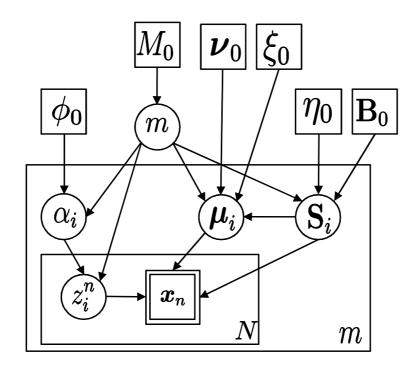


図 1: 混合正規分布のグラフィカルモデル

2 混合正規分布への適用

2.1 混合正規分布の確率モデル

図 1 に混合正規分布のグラフィカルモデルを示す.内側のプレートは学習データ数 N に対する反復計算を表し, $x_n(n=1,\cdots,N)$ は可観測の学習データを表す.また, μ_i , S_i , α_i はそれぞれ,混合正規分布の第 i 要素 $(i=1,\cdots,m)$ の平均,精度行列,混合比を表している.m はモデルの構造である混合数である.これらのパラメータはそれぞれ確率分布として与えられ,さらに各パラメータはハイパーパラメータとして共役事前分布を有している. $\alpha=\{\alpha_1,\cdots,\alpha_m\}$ はディリクレ分布, $\mu=\{\mu_1,\cdots,\mu_m\}$ は正規分布, $S=\{S_1,\cdots,S_m\}$ はウィシャート分布,混合数 m は一様分布をそれぞれ仮定している.

N 個の d 次元の学習データ集合を $\mathbf{D}=\{m{x}_1,\cdots,m{x}_N\}$ とする.各データ $m{x}_n$ が 第 i 要素から生成されているならば, $z_i^n=1$ さもなくば $z_i^n=0$ となる潜在変数 $\mathbf{Z}=\{z_i^n\}_{n=1,i=1}^{N,m}$ を導入すると,完全データ集合の混合正規分布の結合分布は以下のようになる.

$$p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m) = \prod_{i}^{m} \prod_{n}^{N} \left\{ \alpha_{i} \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_{n} | \boldsymbol{\mu}_{i}, \mathbf{S}_{i}^{-1}) \right\}^{z_{i}^{n}}$$

$$= \prod_{i}^{m} \prod_{n}^{N} \left\{ \alpha_{i} (2\pi)^{-d/2} |\mathbf{S}_{i}|^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i})^{T} \mathbf{S}_{i} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i}) \right) \right\}^{z_{i}^{n}}$$

$$= \prod_{i}^{m} \prod_{n}^{N} \left\{ \alpha_{i} (2\pi)^{-d/2} |\mathbf{S}_{i}|^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_{i} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i}) (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i})^{T} \right) \right) \right\}^{z_{i}^{n}}$$

 \mathcal{N} は正規分布を表し,右辺2式目から3式目への変形は,

$$\mathbf{a}^T \mathbf{A} \mathbf{a} = \text{Tr} \left(\mathbf{A} \mathbf{a} \mathbf{a}^T \right) \tag{23}$$

を用いている.前節で計算した一般式を再掲する.

$$q(\mathbf{Z}|m) \propto \exp \langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\boldsymbol{\theta}|m)}$$
 (24)

For $i = 1, \dots, I$

$$q(\boldsymbol{\theta}_i|m) \propto p(\boldsymbol{\theta}_i|m) \exp\left(\langle \log p(\boldsymbol{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\theta}_{-i}|m)}\right)$$
 (25)

ただし,I は独立なパラメータの個数を表し,混合正規分布モデルの場合,式 (25) は次式となる.

$$q(\boldsymbol{\alpha}|m) \propto p(\boldsymbol{\alpha}|m) \exp\left(\langle \log p(\boldsymbol{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m)\rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}|m)}\right)$$
 (26)

$$q(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}|m) \propto p(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}|m) \exp\left(\langle \log p(\boldsymbol{D}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m), q(\boldsymbol{\alpha}|m)}\right)$$
 (27)

ここでの目標は,この式(24),式(26),式(27)を具体化することである.

2.2 $\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m)}$ の導出

まず,式(26)と式(27)に共通に現れる,完全データの対数尤度を計算する.

$$\log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m)$$

$$\propto \sum_{i}^{m} \sum_{n}^{N} z_{i}^{n} \left[\log \alpha_{i} + \log |\mathbf{S}_{i}|^{1/2} - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i}) (\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i})^{T} \right\} \right]$$
(28)

さらに,式(28)の $q(\mathbf{Z}|m)$ に関する期待値をとり式変形を行う.

$$\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m)} = \int q(\mathbf{Z}|m) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m) d\mathbf{Z}$$

$$= \int q(\mathbf{Z}|m) \sum_{i}^{m} \sum_{n}^{N} z_{i}^{n} \left[\log \alpha_{i} + \frac{1}{2} \log |\mathbf{S}_{i}| - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right)^{T} \right\} \right] d\mathbf{Z}$$

$$= \int \sum_{i}^{m} \sum_{n}^{N} q(\mathbf{Z}|m) \left[z_{i}^{n} \log \alpha_{i} + \frac{1}{2} z_{i}^{n} \log |\mathbf{S}_{i}| \right] d\mathbf{Z}$$

$$- \int \sum_{i}^{m} \sum_{n}^{N} \frac{1}{2} q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right)^{T} \right\} d\mathbf{Z}$$

$$(29)$$

以下,各項に分解し計算を行う.

(第1項目) =
$$\sum_{i}^{m} \left[\log \alpha_{i} \sum_{n}^{N} \int q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} d\mathbf{Z} + \frac{1}{2} \log |\mathbf{S}_{i}| \sum_{n}^{N} \int q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} d\mathbf{Z} \right]$$

$$= \sum_{i}^{m} \left[\bar{N}_{i} \log \alpha_{i} + \bar{N}_{i} \frac{1}{2} \log |\mathbf{S}_{i}| \right]$$

$$= \sum_{i}^{m} \bar{N}_{i} (\log \alpha_{i} + \frac{1}{2} \log |\mathbf{S}_{i}|)$$
(30)

ただし, $ar{z}_i^n = \int q(\mathbf{Z}|m) z_i^n d\mathbf{Z}$, $ar{N}_i = \sum_n^N z_i^n$ とした.

(第 2 項) =
$$-\sum_{i}^{m} \sum_{n}^{N} \int \frac{1}{2} q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right)^{T} \right\} d\mathbf{Z}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{i}^{m} \operatorname{Tr} \left[\sum_{n}^{N} \int q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} \mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} \right.$$

$$+ q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} \mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T}$$

$$-2q(\mathbf{Z}|m) z_{i}^{n} \mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) d\mathbf{Z} \right]$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{i}^{m} \operatorname{Tr} \left[\mathbf{S}_{i} \bar{N}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} \right.$$

$$+ \mathbf{S}_{i} \sum_{n}^{N} \bar{z}_{i}^{n} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T}$$

$$-2\mathbf{S}_{i} \left\{ \sum_{n}^{N} \bar{z}_{i}^{n} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} \right.$$

$$= \sum_{i}^{m} -\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left[\mathbf{S}_{i} \left\{ \bar{N}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} + \bar{\mathbf{C}}_{i} \right\} \right]$$

$$(31)$$

ただし,

$$\bar{\boldsymbol{x}}_i = \frac{1}{\bar{N}_i} \sum_{n=1}^{N} \bar{z}_i^n \boldsymbol{x}_i \tag{32}$$

とし,右辺1式目から2式目への変形は以下の式変形を用いた.

$$(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i})(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i})^{T} = ((\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{x}_{n}) - (\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}))((\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{x}_{n}) - (\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}))^{T}$$

$$= (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})^{T} + (\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})^{T}$$

$$-2(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})^{T}$$

$$(33)$$

また,右辺3式目から4式目への変形では, $\bar{\mathbf{C}}_i = \sum_n^N \bar{z}_i^n \left({m{x}}_n - \bar{m{x}}_i \right) \left({m{x}}_n - \bar{m{x}}_i \right)^T$ とおき,さらに以下のような変形を用いた.

$$\sum_{n}^{N} \bar{z}_{i}^{n} (\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}) = \bar{N}_{i} \frac{1}{\bar{N}_{i}} \sum_{n}^{N} \bar{z}_{i}^{n} \boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \sum_{n}^{N} \bar{z}_{i}^{n}$$
$$= \bar{N}_{i} \bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \bar{N}_{i} = 0$$
(34)

以上より完全データの $q(\mathbf{Z}|m)$ に関する期待値は以下のようになる.

$$\langle \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\theta}, m) \rangle_{q(\mathbf{Z}|m)} = \sum_{i}^{m} \left\{ \bar{N}_{i} (\log \alpha_{i} + \frac{1}{2} \log |\mathbf{S}_{i}|) - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\mathbf{S}_{i} \left\{ \bar{N}_{i} (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i})^{T} + \bar{\mathbf{C}}_{i} \right\} \right] \right\}$$
(35)

2.3 $q(oldsymbol{lpha}|m)$ の導出

次に , 式 (26) の導出を行う . 混合正規分布のモデルでは , α の事前分布として , 次式のディリクレ分布を仮定している .

$$p(\boldsymbol{\alpha}|m) = \mathcal{D}(\{\alpha_i\}_{i=1}^m | \phi_0) \propto \prod_{i=1}^m \alpha_i^{\phi_o - 1}$$
(36)

ただし, $\mathcal{D}()$ はディリクレ分布を表している.式 (26) に,式 (35) と式 (36) を代入し α に関する項のみを取り出すと次式になる.

$$q(\boldsymbol{\alpha}|m) \propto \left(\prod_{i=1}^{m} \alpha_{i}^{\phi_{o}-1}\right) \exp\left(\int \int q(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}|m) \sum_{i}^{m} \bar{N}_{i} \log \alpha_{i} d\boldsymbol{\mu} d\mathbf{S}\right)$$

$$= \left(\prod_{i=1}^{m} \alpha_{i}^{\phi_{o}-1}\right) \exp\left(\sum_{i}^{m} \bar{N}_{i} \log \alpha_{i}\right)$$

$$= \prod_{i}^{m} \alpha_{i}^{\phi_{o}+\bar{N}_{i}-1} = \mathcal{D}(\{\alpha_{i}\}_{i=1}^{m} | \{\phi_{0} + \bar{N}_{i}\}_{i=1}^{m})$$
(37)

$\mathbf{2.4}$ $q(oldsymbol{\mu}|m)$, $q(\mathbf{S}|m)$ の導出

次に式 (27) の導出を行う.混合正規分布のモデルでは, μ と S の事前分布として,それぞれ正規分布とウィシャート分布を仮定している.

$$p(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}) = \prod_{i=1}^{m} \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_i | \boldsymbol{\nu}_0, (\xi_0 \mathbf{S}_i)^{-1}) \mathcal{W}(\mathbf{S}_i | \eta_0, \mathbf{B}_0)$$
(38)

ただし, $\mathcal{W}()$ はウィシャート分布を表し,

$$W(\mathbf{S}_i|\eta_0, \mathbf{B}_0) \propto |\mathbf{S}_i|^{1/2(\eta_0 - d - 1)} \exp\left\{-\frac{1}{2} \operatorname{Tr}\left(\mathbf{S}_i \mathbf{B}_0\right)\right\}$$
(39)

となる.式 (27) に式 (35) を代入し μ , ${\bf S}$ に関する項のみを取り出すと次式のようになる.

$$q(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}|m) \propto \left\{ \prod_{i=1}^{m} \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{i}|\boldsymbol{\nu}_{0}, (\xi_{0}\mathbf{S}_{i})^{-1}) \mathcal{W}(\mathbf{S}_{i}|\eta_{0}, \mathbf{B}_{0}) \right\} \exp \left[\int \sum_{i}^{m} \left[\frac{1}{2} \bar{N}_{i} \log |\mathbf{S}_{i}| \right] - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left[\mathbf{S}_{i} \left\{ \bar{N}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} + \bar{\mathbf{C}}_{i} \right\} \right] q(\boldsymbol{\alpha}|m) d\boldsymbol{\alpha} \right] \right]$$

$$\propto \prod_{i}^{m} \left[|\mathbf{S}_{i}|^{1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0})^{T} \xi_{0} \mathbf{S}_{i} (\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}) \right\} \right]$$

$$\times |\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{0} - d - 1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_{i} \mathbf{B}_{0} \right) \right\}$$

$$\times \exp \left\{ \frac{1}{2} \bar{N}_{i} \log |\mathbf{S}_{i}| \right\}$$

$$- \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left[\mathbf{S}_{i} \left(\bar{N}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} + \bar{\mathbf{C}}_{i} \right) \right] \right\}$$

$$= \prod_{i}^{m} \left[|\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{0} + \bar{N}_{i} - d)} \right]$$

$$\exp \left[-\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left(\xi_{0} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0} \right)^{T} + \mathbf{C}_{i} \right) \right\} \right]$$

$$+ \mathbf{B}_{0} + \bar{N}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i} \right)^{T} + \bar{\mathbf{C}}_{i} \right) \right\} \right]$$

$$(40)$$

右辺 , 2 式目から 3 式目への変形では , 式 (23) を用いている . さらにここで , 以下の式変形を使用する .

$$\bar{N}_{i} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}\right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}\right)^{T} + \xi_{0} \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}\right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}\right)^{T} = \\
\left(\bar{N}_{i} + \xi_{0}\right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \frac{\bar{N}_{i}\bar{\boldsymbol{x}}_{i} + \xi_{0}\nu_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}}\right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \frac{\bar{N}_{i}\bar{\boldsymbol{x}}_{i} + \xi_{0}\nu_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}}\right)^{T} \\
+ \frac{\bar{N}_{i}\xi_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}} \left(\bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}\right) \left(\bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}\right)^{T} \tag{41}$$

$$q(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{S}|m) \propto \prod_{i}^{m} \left[|\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{0} + \bar{N}_{i} - d)} \right] \times \exp \left[-\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left((\bar{N}_{i} + \xi_{0}) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \frac{\bar{N}_{i} \bar{\boldsymbol{x}}_{i} + \xi_{0} \nu_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}} \right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \frac{\bar{N}_{i} \bar{\boldsymbol{x}}_{i} + \xi_{0} \nu_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}} \right)^{T} \right] + \frac{\bar{N}_{i} \xi_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}} (\bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}) (\bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0})^{T} + \mathbf{B}_{0} + \bar{\mathbf{C}}_{i} \right] \right]$$

$$= \prod_{i}^{m} \left[|\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{0} + \bar{N}_{i} - d)} \times \exp \left[-\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left((\bar{N}_{i} + \xi_{0}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})^{T} + \mathbf{B}_{i} \right) \right\} \right] \right]$$

$$= \prod_{i}^{m} \left[|\mathbf{S}_{i}|^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ \mathbf{S}_{i} \left((\bar{N}_{i} + \xi_{0}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})^{T} \right) \right\} \right] \right]$$

$$\times \prod_{i}^{m} \left[|\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{0} + \bar{N}_{i} - d - 1)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_{i} \mathbf{B}_{i} \right) \right\} \right]$$

$$(42)$$

ただし,

$$\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i} = \frac{\bar{N}_{i}\bar{\boldsymbol{x}}_{i} + \xi_{0}\boldsymbol{\nu}_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}} \tag{43}$$

$$\mathbf{B}_{i} = \frac{\bar{N}_{i}\xi_{0}}{\bar{N}_{i} + \xi_{0}} \left(\bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}\right) \left(\bar{\boldsymbol{x}}_{i} - \boldsymbol{\nu}_{0}\right)^{T} + \mathbf{B}_{0} + \bar{\mathbf{C}}_{i}$$

$$(44)$$

とする.これは,定数項を無視すれば,正規分布とウィシャート分布の積と見ることができる.すなわち, μ_i と \mathbf{S}_i の最適事後分布は以下のようになる.

$$q(\boldsymbol{\mu}_i|\mathbf{S}_i, m) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_i|\bar{\boldsymbol{\mu}}_i, ((\bar{N}_i + \xi_0)\mathbf{S}_i)^{-1})$$
(45)

$$q(\mathbf{S}_i|m) = \mathcal{W}(\mathbf{S}_i|\eta_0 + \bar{N}_i, \mathbf{B}_i)$$
(46)

さらに,式(42)を \mathbf{S}_i に関して周辺化することにより, $q(\boldsymbol{\mu}_i|m)$ を得る.

$$q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m) = \int q(\boldsymbol{\mu}_{i}, \mathbf{S}_{i}|m) d\mathbf{S}_{i}$$

$$= \int |\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{0} + \bar{N}_{i} - d)}$$

$$\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_{i} \left((\bar{N}_{i} + \xi_{0}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}) (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})^{T} + \mathbf{B}_{i} \right) \right) \right\} d\mathbf{S}_{i}$$

$$(47)$$

ここで,

$$\mathbf{B}_{i}^{\prime} = (\bar{N}_{i} + \xi_{0}) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right) \left(\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right)^{T} + \mathbf{B}_{i}$$

$$(48)$$

$$\eta_i' = \eta_0 + \bar{N}_i + 1 \tag{49}$$

とおき式変形すると,

$$q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m) = \int |\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{i}'-d-1)} \exp\left\{-\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\left(\mathbf{S}_{i}\mathbf{B}_{i}'\right)\right\} d\mathbf{S}_{i}$$
(50)

となる.ここで, $\int \mathcal{W}(\mathbf{S}_i|\eta_i',\mathbf{B}_i')d\mathbf{S}_i=1$ が成り立つので,

$$\int \mathcal{W}(\mathbf{S}_{i}|\eta_{i}', \mathbf{B}_{i}')d\mathbf{S}_{i} = \int |\mathbf{B}_{i}'|^{\eta_{i}'/2} \left(2^{\frac{\eta_{i}'d}{2}} \pi^{\frac{d(d-1)}{4}} \prod_{j}^{d} \Gamma\left(\frac{\eta_{i}'+i-j}{2}\right)\right)^{-1} \times |\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{i}'-d-1)} \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{Tr}\left(\mathbf{S}_{i} \mathbf{B}_{i}'\right)\right) d\mathbf{S}_{i}$$

$$= |\mathbf{B}_{i}'|^{\eta_{i}'/2} \left(2^{\frac{\eta_{i}'d}{2}} \pi^{\frac{d(d-1)}{4}} \prod_{j}^{d} \Gamma\left(\frac{\eta_{i}'+i-j}{2}\right)\right)^{-1} q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m)$$

$$= 1$$

$$(51)$$

となる.したがって,

$$q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m) = |\mathbf{B}'_{i}|^{-\eta'_{i}/2} \left(2^{\frac{\eta'_{i}d}{2}} \pi^{\frac{d(d-1)}{4}} \prod_{j}^{d} \Gamma\left(\frac{\eta'_{i}+i-j}{2}\right) \right)$$

$$\propto |\mathbf{B}'_{i}|^{-\eta'_{i}/2}$$

$$= |(\bar{N}_{i}+\xi_{0}) (\boldsymbol{\mu}_{i}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}) (\boldsymbol{\mu}_{i}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})^{T} + \mathbf{B}_{i}|^{-\frac{\eta_{0}+\bar{N}_{i}+1}{2}}$$
(52)

となる.ここで行列式の公式 $|A+aa^T|=|A|(1+a^TA^{-1}a)$ を用いて変形すると,以下のようなティ分布となる.

$$q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m) = \left[|\mathbf{B}_{i}| \left\{ 1 + (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})^{T} (\bar{N}_{i} + \xi_{0}) \mathbf{B}_{i}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_{i} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}) \right\} \right]^{-\frac{\eta_{0} + N_{i} + 1}{2}}$$

$$\propto \mathcal{T}(\boldsymbol{\mu}_{i}|\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}})$$
(53)

ただし,

$$\Sigma_{\mu_i} = \frac{\mathbf{B}_i}{(\bar{N}_i + \xi_0) f_{\mu_i}}$$

$$f_{\mu_i} = \eta_0 + \bar{N}_i + 1 - d$$
(54)

また,ティ分布の確率密度関数は次式で定義される.

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},f) = \frac{\Gamma((f+d)/2)}{(f\pi)^{(d/2)}\Gamma(f/2)|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \left\{ 1 + (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T (\boldsymbol{\Sigma}f)^{-1} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) \right\}^{-\frac{d+f}{2}}$$
(55)

ただし, Γ はガンマ関数を表す.

2.5 $q(\mathbf{Z}|m)$ の導出

次に潜在変数の最適事後分布の導出を行う.式 (24) に式 (28) を代入すると次式を得る.

$$q(\mathbf{Z}|m) \propto \exp \left[\int \int \int q(\mathbf{S}|m) q(\boldsymbol{\mu}|m) q(\boldsymbol{\alpha}|m) \sum_{i}^{m} \sum_{n}^{N} z_{i}^{n} \left\{ \log \alpha_{i} + \log |\mathbf{S}_{i}|^{1/2} - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_{i} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right)^{T} \right) \right\} d\mathbf{S} d\boldsymbol{\mu} d\boldsymbol{\alpha} \right]$$

$$= \prod_{i}^{m} \prod_{n}^{N} \exp \left[z_{i}^{n} \left\{ \langle \log \alpha_{i} \rangle_{q(\boldsymbol{\alpha}|m)} + \frac{1}{2} \langle \log |\mathbf{S}_{i}| \rangle_{q(\mathbf{S}_{i}|m)} - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\langle \mathbf{S}_{i} \rangle_{q(\mathbf{S}_{i}|m)} \left\langle \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i} \right)^{T} \right\rangle_{q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m)} \right) \right\} \right]$$

$$(56)$$

すなわち,

$$q(z_i^n = 1|m) \propto \exp\left\{\left\langle \log \alpha_i \right\rangle_{q(\mathbf{a}|m)} + \frac{1}{2}\left\langle \log |\mathbf{S}_i| \right\rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} - \frac{1}{2} \operatorname{Tr}\left(\left\langle \mathbf{S}_i \right\rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} \left\langle \left(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_i\right) \left(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_i\right)^T \right\rangle_{q(\boldsymbol{\mu}_i|m)}\right)\right\}$$
(57)

となる.続いて,この式内の各期待値

$$\langle \log \alpha_i \rangle_{q(\boldsymbol{\alpha}|m)}$$
 (58)

$$\langle \mathbf{S}_i \rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} \tag{59}$$

$$\langle \log |\mathbf{S}_i| \rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)}$$
 (60)

$$\left\langle \left(\boldsymbol{x}_{n}-\boldsymbol{\mu}_{i}\right)\left(\boldsymbol{x}_{n}-\boldsymbol{\mu}_{i}\right)^{T}\right\rangle _{q\left(\boldsymbol{\mu}_{i}\mid m\right)}$$
 (61)

の4つを計算する.

2.5.1 $\langle \log \alpha_i angle_{q(m{lpha}|m)}$ の計算

式 (37) を式 (58) に代入することで次式を得る.

$$\langle \log \alpha_i \rangle_{q(\boldsymbol{\alpha}|m)} = \frac{\Gamma(\sum_j^m \phi_j')}{\prod_j^m \Gamma(\phi_j')} \int \log \alpha_i \prod_j^m \alpha_j^{\phi_j'-1} d\boldsymbol{\alpha}$$
 (62)

ただし, $\phi_i' = \phi_0 + \bar{N}_i$ とする.ここで,次式で定義される $\operatorname{diggama}$ 関数

$$\Psi(\phi_i') = \frac{\partial \log \Gamma(\phi_i')}{\partial \phi_i'} = \frac{1}{\Gamma(\phi_i')} \frac{\partial \Gamma(\phi_i')}{\partial \phi_i'}$$
(63)

より,

$$\frac{\partial \Gamma(\phi_i')}{\partial \phi_i'} = \Gamma(\phi_i') \Psi(\phi_i') \tag{64}$$

が成り立つ.また,

$$\Psi(\sum_{i}^{m} \phi_{i}') = \frac{\partial \log \Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')}{\partial(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')} = \frac{1}{\Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')} \frac{\frac{\partial \Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')}{\partial \phi_{i}'}}{\frac{\partial (\sum_{i}^{m} \phi_{i}')}{\partial \phi_{i}'}} = \frac{1}{\Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')} \frac{\partial \Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')}{\partial \phi_{i}'}$$
(65)

より,

$$\frac{\partial \Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}')}{\partial \phi_{i}'} = \Gamma(\sum_{i}^{m} \phi_{i}') \Psi(\sum_{i}^{m} \phi_{i}') \tag{66}$$

が成り立つ . さらに , $\int \mathcal{D}(\{\alpha_i\}_{i=1}^m|\{\phi_i'\}_{i=1}^m)d\pmb{\alpha}=1$ より , 以下の式が成り立つ .

$$\int \frac{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi'_{j})}{\prod_{j}^{m} \Gamma(\phi'_{j})} \prod_{j}^{m} \alpha_{j}^{\phi'_{j}-1} d\boldsymbol{\alpha} = 1$$

$$\int \prod_{j}^{m} \alpha_{j}^{\phi'_{j}-1} d\boldsymbol{\alpha} = \frac{\prod_{j}^{m} \Gamma(\phi'_{j})}{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi'_{j})} \tag{67}$$

この式の両辺を ϕ_i で微分する.

$$\int (\log \alpha_i) \prod_{j}^{m} \alpha_j^{\phi'_j - 1} d\boldsymbol{\alpha} = \frac{\partial}{\partial \phi'_i} \frac{\prod_{j}^{m} \Gamma(\phi'_j)}{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi'_j)}
= \frac{\prod_{j \neq i} \Gamma(\phi'_j)}{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi'_j)} \frac{\partial \Gamma(\phi'_i)}{\partial \phi'_i} - \frac{\prod_{j}^{m} \Gamma(\phi'_j)}{\left\{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi'_j)\right\}^2} \frac{\partial \Gamma(\sum_{j}^{m} \phi'_j)}{\partial \phi'_i} (68)$$

さらに,式(64),式(66)を代入すると,

$$\int (\log \alpha_i) \prod_{j}^{m} \alpha_j^{\phi_j'-1} d\boldsymbol{\alpha} = \frac{\prod_{j \neq i} \Gamma(\phi_j')}{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi_j')} \Gamma(\phi_i') \Psi(\phi_i') - \frac{\prod_{j}^{m} \Gamma(\phi_j')}{\left\{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi_j')\right\}^2} \Gamma(\sum_{j}^{m} \phi_j') \Psi(\sum_{j}^{m} \phi_j')$$

$$= \frac{\prod_{j} \Gamma(\phi_j')}{\Gamma(\sum_{j}^{m} \phi_j')} \left\{\Psi(\phi_i') - \Psi(\sum_{j}^{m} \phi_j')\right\} \tag{69}$$

これを,式(62)に代入すると,以下の式を得る.

$$\langle \log \alpha_i \rangle_{q(\boldsymbol{\alpha}|m)} = \Psi(\phi_i') - \Psi(\sum_j^m \phi_j') = \Psi(\phi_0 + \bar{N}_i) - \Psi(\sum_j^m (\phi_0 + \bar{N}_j))$$
 (70)

2.5.2 $\langle \mathbf{S}_i angle_{q(\mathbf{S}_i|m)}$ の計算

式(59)に,式(46)を代入すると,

$$\langle \mathbf{S}_i \rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} = \int \mathbf{S}_i \mathcal{W}(\mathbf{S}_i|\eta', \mathbf{B}_i) d\mathbf{S}_i$$
 (71)

ただし,

$$\mathcal{W}(\mathbf{S}_i|\eta_i',\mathbf{B}_i) = C_{\mathcal{W}}(\eta_i',\mathbf{B}_i)|\mathbf{S}_i|^{1/2(\eta_i'-d-1)} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\mathbf{S}_i\mathbf{B}_i\right)\right)$$
(72)

$$C_{\mathcal{W}}(\eta_i', \mathbf{B}_i) = |\mathbf{B}_i|^{\eta_i'/2} \left\{ 2^{\eta_i'd/2} \pi^{d(d-1)/4} \prod_j^d \Gamma(\frac{\eta_i' + 1 - j}{2}) \right\}^{-1}$$
 (73)

$$\eta_i' = \eta_0 + \bar{N}_i \tag{74}$$

とする.また, $\int \mathcal{W}(\mathbf{S}_i|\eta_i',\mathbf{B}_i)d\mathbf{S}_i=1$ より次式が成り立つ.

$$\int |\mathbf{S}_i|^{1/2(\eta_i'-d-1)} \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{Tr}\left(\mathbf{S}_i \mathbf{B}_i\right)\right) d\mathbf{S}_i = \frac{1}{C_{\mathcal{W}}(\eta_i', \mathbf{B}_i)}$$
(75)

この両辺を,トレースの微分の公式 $\frac{\partial \mathrm{Tr}(AB)}{\partial A} = \frac{\partial \mathrm{Tr}(BA)}{\partial A} = B^T$ を用いて, \mathbf{S}_i が対象行列であることに注意し, \mathbf{B}_i で微分する.

$$-\frac{1}{2} \int \mathbf{S}_{i} |\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{i}'-d-1)} \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{Tr}\left(\mathbf{S}_{i} \mathbf{B}_{i}\right)\right) d\mathbf{S}_{i} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{B}_{i}} C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1}$$
(76)

さらに,行列式の微分公式 $\frac{\partial \log |A|}{\partial A} = (A^{-1})^T$ を用いて, $\log C_{\mathcal{W}}(\eta_i', \mathbf{B}_i)^{-1}$ を \mathbf{B}_i で微分し, \mathbf{B}_i が対称行列であることに注意し,変形する.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{B}_{i}} \log C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{B}_{i}} \log |\mathbf{B}_{i}|^{-\frac{\eta_{i}'}{2}}$$

$$C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{B}_{i}} C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} = -\frac{\eta_{i}'}{2} \mathbf{B}_{i}^{-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{B}_{i}} C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} = -\frac{\eta_{i}'}{2C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})} \mathbf{B}_{i}^{-1}$$
(77)

この式を式(76)に代入すると次式を得る.

$$\int \mathbf{S}_{i} |\mathbf{S}_{i}|^{1/2(\eta_{i}'-d-1)} \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{Tr}\left(\mathbf{S}_{i} \mathbf{B}_{i}\right)\right) d\mathbf{S}_{i} = \frac{\eta_{i}'}{C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})} \mathbf{B}_{i}^{-1}$$
(78)

この式を , 式 (71) へ代入すると , $\langle \mathbf{S}_i
angle_{q(\mathbf{S}_i|m)}$ は以下のようになる .

$$\langle \mathbf{S}_i \rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} = \eta_i' \mathbf{B}_i^{-1} = (\eta_0 + \bar{N}_i) \mathbf{B}_i^{-1}$$

$$\tag{79}$$

2.5.3 $\langle \log |\mathbf{S}_i|
angle_{q(\mathbf{S}_i|m)}$ の計算

式(60)に,式(46)を代入すると,次式を得る.

$$\langle \log |\mathbf{S}_i| \rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} = \int \log |\mathbf{S}_i| \mathcal{W}(\mathbf{S}_i|\eta_i', \mathbf{B}_i) d\mathbf{S}_i$$
 (80)

式 (75) を , η_i' で微分すると ,

$$\frac{1}{2} \int (\log |\mathbf{S}_i|) |\mathbf{S}_i|^{1/2(\eta_i' - d - 1)} \exp \left(-\frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{B}_i \right) \right) d\mathbf{S}_i = \frac{\partial}{\partial \eta_i'} C_{\mathcal{W}}(\eta_i', \mathbf{B}_i)^{-1}$$
(81)

となる.また, $\Psi(x)=rac{\partial \log \Gamma(x)}{\partial x}$ に注意し, $\log C_{\mathcal{W}}(\eta_i',\mathbf{B}_i)^{-1}$ を η_i' で微分する.

$$\frac{\partial}{\partial \eta_{i}'} \log C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} = \frac{\partial}{\partial \eta_{i}'} \log \left(|\mathbf{B}_{i}|^{-\eta_{i}'/2} 2^{\eta_{i}'d/2} \pi^{d(d-1)/4} \prod_{j}^{d} \Gamma(\frac{\eta_{i}' + 1 - j}{2}) \right)$$

$$C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i}) \frac{\partial}{\partial \eta_{i}'} C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} = -\frac{1}{2} \log |\mathbf{B}_{i}| + \frac{d}{2} \log 2 + \frac{1}{2} \sum_{j}^{d} \Psi(\frac{\eta_{i}' + 1 + j}{2})$$

$$\frac{\partial}{\partial \eta_{i}'} C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} = C_{\mathcal{W}}(\eta_{i}', \mathbf{B}_{i})^{-1} \left\{ -\frac{1}{2} \log |\mathbf{B}_{i}| + \frac{d}{2} \log 2 + \frac{1}{2} \sum_{j}^{d} \Psi(\frac{\eta_{i}' + 1 + j}{2}) \right\}$$
(82)

式(82)と式(81)より,式(80)は次式となる.

$$\langle \log |\mathbf{S}_i|^{1/2} \rangle_{q(\mathbf{S}_i|m)} = -\log |\mathbf{B}_i| + d\log 2 + \sum_j^d \Psi(\frac{\eta_i' + 1 + j}{2})$$

$$= -\log |\mathbf{B}_i| + d\log 2 + \sum_j^d \Psi(\frac{\eta_0 + \bar{N}_i + 1 + j}{2}) \qquad (83)$$

2.5.4 $\left\langle \left(m{x}_n-m{\mu}_i
ight)\left(m{x}_n-m{\mu}_i
ight)^T
ight
angle_{q(m{\mu}_i|m)}$ の計算

まず,以下のようなティ分布の積分を考える.

$$\int \mathcal{T}\left(\boldsymbol{\mu}_{i}|\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}, \frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}-2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}-2\right) d\boldsymbol{\mu}_{i} = 1$$

$$\int C_{\mathcal{T}}\left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}-2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}-2\right) \left\{1 + (\boldsymbol{\mu}_{i}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})^{T}(f_{\mu_{i}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}})^{-1}(\boldsymbol{\mu}_{i}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i})\right\}^{-\frac{f_{\mu_{i}}+d-2}{2}} d\boldsymbol{\mu}_{i} = 1$$
(85)

ただし, $C_T(\Sigma,f)$ は以下のような正規化項である.

$$C_{\mathcal{T}}(\mathbf{\Sigma}, f) = \frac{\Gamma((f+d)/2)}{(f\pi)^{d/2}\Gamma(f/2)|\Sigma|^{1/2}}$$
 (86)

式(85)を変形し,次式を得る.

$$\int \left\{ 1 + (\boldsymbol{\mu}_i - \bar{\boldsymbol{\mu}}_i)^T (f_{\mu_i} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_i})^{-1} (\boldsymbol{\mu}_i - \bar{\boldsymbol{\mu}}_i) \right\}^{-\frac{f_{\mu_i} + d - 2}{2}} d\boldsymbol{\mu}_i = C_T (\frac{f_{\mu_i}}{f_{\mu_i} - 2} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_i}, f_{\mu_i} - 2)^{-1}$$
(87)

この左辺を,行列の微分公式 $rac{\partial m{a}^Tm{A}m{b}}{\partial m{A}} = m{a}m{b}^T$ を用いて, $m{\Sigma}_{\mu_i}^{-1}$ で微分し変形する.

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma_{\mu_{i}}^{-1}} \int \left\{ 1 + (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i})^{T} (f_{\mu_{i}} \Sigma_{\mu_{i}})^{-1} (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i}) \right\}^{-\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2}} d\mu_{i}$$

$$= -\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2} \int \left\{ 1 + (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i})^{T} (f_{\mu_{i}} \Sigma_{\mu_{i}})^{-1} (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i}) \right\}^{-\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2}}$$

$$\times \frac{1}{f_{\mu_{i}}} (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i}) (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i})^{T} d\mu_{i}$$

$$= -\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2} \int \left\{ 1 + (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i})^{T} (f_{\mu_{i}} \Sigma_{\mu_{i}})^{-1} (\mu_{i} - \bar{\mu}_{i}) \right\}^{-\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2}}$$

$$\times \frac{1}{f_{\mu_{i}}} \left\{ (x_{n} - \mu_{i}) (x_{n} - \mu_{i})^{T} + (x_{n} - \bar{\mu}_{i}) (x_{n} - \bar{\mu}_{i})^{T} \right.$$

$$- 2(x_{n} - \mu_{i}) (x_{n} - \bar{\mu}_{i})^{T} \right\} d\mu_{i}$$

$$= -\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2f_{\mu_{i}}} C_{T} (\Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}})^{-1} \left[\int (x_{n} - \mu_{i}) (x_{n} - \mu_{i})^{T} \mathcal{T}(\mu_{i} | \bar{\mu}_{i}, \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}) d\mu_{i}$$

$$- 2x_{n}(x_{n} - \bar{\mu}_{i})^{T} \int \mathcal{T}(\mu_{i} | \bar{\mu}_{i}, \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}) d\mu_{i}$$

$$- 2x_{n}(x_{n} - \bar{\mu}_{i})^{T} \int \mathcal{T}(\mu_{i} | \bar{\mu}_{i}, \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}) d\mu_{i}$$

$$+ 2 \int \mu_{i} \mathcal{T}(\mu_{i} | \bar{\mu}_{i}, \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}) d\mu_{i}(x_{n} - \bar{\mu}_{i}) \right]$$

$$= -\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2f_{\mu_{i}}} C_{T} (\Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}})^{-1} \left[\left\langle (x_{n} - \mu_{i}) (x_{n} - \mu_{i})^{T} \right\rangle_{q(\mu_{i} | m)} + (x_{n} - \bar{\mu}_{i}) (x_{n} - \bar{\mu}_{i})^{T} \right]$$

$$= -\frac{f_{\mu_{i}} + d - 2}{2f_{\mu_{i}}} C_{T} (\Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}})^{-1} \left[\left\langle (x_{n} - \mu_{i}) (x_{n} - \mu_{i})^{T} \right\rangle_{q(\mu_{i} | m)} - (x_{n} - \bar{\mu}_{i}) (x_{n} - \bar{\mu}_{i})^{T} \right]$$
(88)

次に,式 (87) の右辺の対数をとり, $\Sigma_{\mu_i}^{-1}$ で微分する.

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma_{\mu_{i}}^{-1}} \log C_{\mathcal{T}} \left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}} - 2} \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}} - 2 \right)^{-1} = \frac{\partial}{\partial \Sigma_{\mu_{i}}^{-1}} - \frac{1}{2} \log |\Sigma_{\mu_{i}}^{-1}|
C_{\mathcal{T}} \left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}} - 2} \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}} - 2 \right) \frac{\partial}{\partial \Sigma_{\mu_{i}}^{-1}} C_{\mathcal{T}} \left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}} - 2} \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}} - 2 \right)^{-1} = -\frac{1}{2} \Sigma_{\mu_{i}}
\frac{\partial}{\partial \Sigma_{\mu_{i}}^{-1}} C_{\mathcal{T}} \left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}} - 2} \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}} - 2 \right)^{-1} = -\frac{1}{2} C_{\mathcal{T}} \left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}} - 2} \Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}} - 2 \right)^{-1} \Sigma_{\mu_{i}} (89)$$

また,行列式の性質 $|a{m A}|=a^d|{m A}|$ とガンマ関数の性質 $\Gamma(x+1)=x\Gamma(x)$ に注意し,式変形を行うと,次式が成り立つ.

$$\frac{C_{\mathcal{T}}(\Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}})}{C_{\mathcal{T}}(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}-2}\Sigma_{\mu_{i}}, f_{\mu_{i}}-2)} = \frac{\Gamma((f_{\mu_{i}}+d)/2)}{(f_{\mu_{i}}\pi)^{d/2}\Gamma(f_{\mu_{i}}/2)|\Sigma_{\mu_{i}}|^{1/2}} \left\{ \frac{\Gamma((f_{\mu_{i}}+d-2)/2)}{((f_{\mu_{i}}-2)\pi)^{d/2}\Gamma((f_{\mu_{i}}-2)/2)|\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}-2}\Sigma_{\mu_{i}}|^{1/2}} \right\} \\
= \frac{\Gamma(\frac{f_{\mu_{i}}+d-2}{2}+1)}{\Gamma(\frac{f_{\mu_{i}}+d-2}{2})} \frac{\Gamma(\frac{f_{\mu_{i}}-2}{2})}{\Gamma(\frac{f_{\mu_{i}}-2}{2}+1)} \left(\frac{f_{\mu_{i}}-2}{f_{\mu_{i}}}\right)^{d/2} \left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}-2}\right)^{d/2} \\
= \frac{f_{\mu_{i}}+d-2}{f_{\mu_{i}}-2} \tag{9}$$

式(88)=式(89)より

$$-\frac{f_{\mu_{i}}+d-2}{2f_{\mu_{i}}}C_{\mathcal{T}}(\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}},f_{\mu_{i}})^{-1}\left[\left\langle \left(\boldsymbol{x}_{n}-\boldsymbol{\mu}_{i}\right)\left(\boldsymbol{x}_{n}-\boldsymbol{\mu}_{i}\right)^{T}\right\rangle_{q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m)}-\left(\boldsymbol{x}_{n}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right)\left(\boldsymbol{x}_{n}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right)^{T}\right]$$

$$=-\frac{1}{2}C_{\mathcal{T}}\left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}-2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}},f_{\mu_{i}}-2\right)^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}}$$

$$\left\langle \left(\boldsymbol{x}_{n}-\boldsymbol{\mu}_{i}\right)\left(\boldsymbol{x}_{n}-\boldsymbol{\mu}_{i}\right)^{T}\right\rangle_{q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m)}$$

$$=\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}}+d-2}\frac{C_{\mathcal{T}}(\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}},f_{\mu_{i}})}{C_{\mathcal{T}}\left(\frac{f_{\mu_{i}}}{f_{n}-2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}},f_{\mu_{i}}-2\right)}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}}+\left(\boldsymbol{x}_{n}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right)\left(\boldsymbol{x}_{n}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right)^{T}$$
(91)

最終的に,式(90)を代入することで,求めるべき期待値は以下のようになる.

$$\left\langle \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i}\right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \boldsymbol{\mu}_{i}\right)^{T} \right\rangle_{q(\boldsymbol{\mu}_{i}|m)} = \frac{f_{\mu_{i}}}{f_{\mu_{i}} - 2} \boldsymbol{\Sigma}_{\mu_{i}} + \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}\right)^{T} \quad (92)$$

2.5.5 $q(z_i^n = 1|m)$ の計算

ここまでで計算した , 式 (70) , 式 (79) , 式 (83) , 式 (92) を式 (57) へ代入することで次式を得る .

$$q(z_i^n = 1|m) = \frac{\exp(\gamma_i^n)}{\sum_j^m \exp(\gamma_j^n)}$$

$$\gamma_i^n = \Psi(\phi_0 + \bar{N}_i) - \Psi(\sum_j^m \phi_0 + \bar{N}_i)$$

$$-\frac{1}{2}\log|\mathbf{B}_i| + \frac{1}{2}\sum_j^m \Psi(\frac{\eta_0 + \bar{N}_i + 1 + j}{2})$$

$$-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left\{(\eta_0 + \bar{N}_i)\mathbf{B}_i^{-1}\right\}$$

$$\times \left(\frac{f_{\mu_i}}{f_{\mu_i} - 2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mu_i} + (\boldsymbol{x}_n - \bar{\boldsymbol{\mu}}_i)(\boldsymbol{x}_n - \bar{\boldsymbol{\mu}}_i)^T\right\}$$
(93)

2.6 アルゴリズム

以上の導出結果に基づいて、アルゴリズム形式で以下にまとめる、

[VB algorithm]

Step1:初期化

事前分布のパラメータを初期値 $(\phi_0,\xi_0,\eta_0,m{
u}_0,{f B}_0)$ とし, $ar{N}_i^{(0)}=N/m$ として,変分事後分布のパラメータを初期化する.

$$\bar{\boldsymbol{\mu}}_i^{(0)} = \boldsymbol{\nu}_0, \ \mathbf{B}_i^{(0)} = \mathbf{B}_0,$$
 (94)

$$f_{\mu_i}^{(0)} = \eta_0 + \bar{N}_i + 1 - d, \quad \Sigma_{\mu_i}^{(0)} = \frac{\mathbf{B}_i^{(0)}}{(\bar{N}_i^{(0)} + \xi_0) f_{\mu_i}^{(0)}}$$
(95)

Step2:収束するまで以下を繰り返す

2-1:潜在変数の事後分布の更新

$$i=0,\ldots,m, \quad n=1,\ldots,N$$
 に対し,

$$\bar{z}_i^n = \frac{\exp\left(\gamma_i^n\right)}{\sum_i^m \exp\left(\gamma_i^n\right)} \tag{96}$$

を計算する.ただし, γ_i^n は以下のようになる.

$$\gamma_{i}^{n} = \Psi(\phi_{0} + \bar{N}_{i}^{(t)}) - \Psi(\sum_{j}^{m} (\phi_{0} + \bar{N}_{j}^{(t)}))
- \frac{1}{2} \log |\mathbf{B}_{i}^{(t)}| + \frac{1}{2} \sum_{j}^{d} \Psi(\frac{\eta_{0} + \bar{N}_{i}^{(t)} + 1 + j}{2})
- \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left\{ (\eta_{0} + \bar{N}_{i}^{(t)}) (\mathbf{B}_{i}^{(t)})^{-1} \right\}
\times \left(\frac{f_{\mu_{i}}^{(t)}}{f_{\mu_{i}}^{(t)} - 2} \Sigma_{\mu_{i}}^{(t)} + \left(\mathbf{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}^{(t)} \right) \left(\mathbf{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{\mu}}_{i}^{(t)} \right)^{T} \right) \}$$
(97)

2-2:変分事後分布の更新

$$i = 0, ..., m, n = 1, ..., N$$
 に対し,

$$\bar{N}_i^{(t)} \leftarrow \sum_{n=1}^N \bar{z}_i^n, \ \bar{\boldsymbol{x}}_i^{(t)} \leftarrow \frac{1}{\bar{N}_i^{(t)}} \sum_{n=1}^N \bar{z}_i^n \boldsymbol{x}_n$$
 (98)

$$\bar{\mathbf{C}}_{i}^{(t)} = \sum_{n=1}^{N} \bar{z}_{i}^{n} \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}^{(t)} \right) \left(\boldsymbol{x}_{n} - \bar{\boldsymbol{x}}_{i}^{(t)} \right)^{T}$$
(99)

$$\boldsymbol{\mu}_{i}^{(t)} \leftarrow \frac{\bar{N}_{i}^{(t)} \bar{\boldsymbol{x}}_{i}^{(t)} + \xi_{0} \boldsymbol{\nu}_{0}}{\bar{N}_{i}^{(t)} + \xi_{0}}, \quad f_{\mu_{i}}^{(t)} \leftarrow \eta_{i}^{(t)} + 1 - d$$
 (100)

$$\mathbf{B}_{i}^{(t)} \leftarrow \mathbf{B}_{0} + \bar{\mathbf{C}}_{i}^{(t)} + \frac{\bar{N}_{i}^{(t)} \xi_{0}}{\bar{N}_{i}^{(t)} + \xi_{0}} \left(\bar{\boldsymbol{x}}_{i}^{(t)} - \boldsymbol{\nu}_{0} \right) \left(\bar{\boldsymbol{x}}_{i}^{(t)} - \boldsymbol{\nu}_{0} \right)^{T}$$
(101)

$$\Sigma_{\mu_i}^{(t)} \leftarrow \frac{\mathbf{B}_i^{(t)}}{(\bar{N}_i^{(t)} + \xi_0) f_{\mu_i}^{(t)}}$$
(102)

を計算し, $t \leftarrow t+1$ とする.