

1 近似推論法

- 変分推論が必要だった理由

- 潜在変数に関する事後分布 $p(Z|X, \theta)$ の計算は、困難であることが多い
- どのような場合に困難になるのか、次の図 1 に示す
- $p(Z|X, \theta)$ の厳密な計算は諦める代わりに、別の確率分布で近似したい
- 別の確率分布で近似するとき、単純な項の積として表現できるといった、何らかの仮定を置く

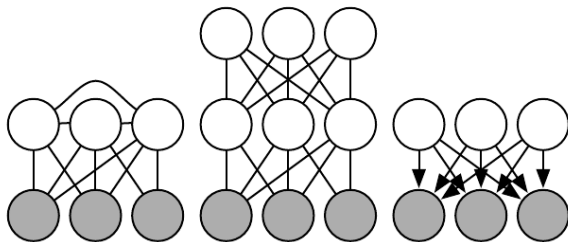


図 1: 事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ の計算が困難な場合

Figure 19.1: Intractable inference problems in deep learning are usually the result of interactions between latent variables in a structured graphical model. These can be due to edges directly connecting one latent variable to another, or due to longer paths that are activated when the child of a V-structure is observed. *(Left)* A **semi-restricted Boltzmann machine** (Osindero and Hinton, 2008) with connections between hidden units. These direct connections between latent variables make the posterior distribution intractable due to large cliques of latent variables. *(Center)* A deep Boltzmann machine, organized into layers of variables without intra-layer connections, still has an intractable posterior distribution due to the connections between layers. *(Right)* This directed model has interactions between latent variables when the visible variables are observed, because every two latent variables are co-parents. Some probabilistic models are able to provide tractable inference over the latent variables despite having one of the graph structures depicted above. This is possible if the conditional probability distributions are chosen to introduce additional independences beyond those described by the graph. For example, probabilistic PCA has the graph structure shown in the right, yet still has simple inference

図 2: 事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ の計算が困難な場合

- 事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ の計算が困難な場合 1
 - グラフィカルモデルにおいて、**潜在変数間の相互作用がある**場合、計算が困難になる
 - 左側の**半制限付きボルツマンマシン**では、全ての潜在変数の組み合わせ間で、接続がある
 - 従って、潜在変数間に**依存関係**が存在し、事後分布の計算が手に負えない
 - 白丸で描かれた潜在変数を $\mathbf{Z} = \{z_1, z_2, z_3\}$ 、灰色で描かれた観測データを \mathbf{X} とおくと、事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ は、例えば次のようになる

$$\begin{aligned} & p(z_1, z_2, z_3 | \mathbf{X}) \\ = & p(z_1 | \mathbf{X}, z_2, z_3) p(z_2 | \mathbf{X}, z_3) p(z_3 | \mathbf{X}) \end{aligned} \quad (1)$$

- 事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ の計算が困難な場合 2
 - 中央は、層間の結合がない潜在変数の層で構成される、**深層ボルツマンマシン**を表す
 - 潜在変数の層間の結合があるため、事後分布の計算が手に負えない
- 上の層の潜在変数を $\mathbf{Z}_1 = \{z_{11}, z_{12}, z_{13}\}$ 、中間層の潜在変数を $\mathbf{Z}_2 = \{z_{21}, z_{22}, z_{23}\}$ 、灰色で描かれた観測データを \mathbf{X} とおくと、事後分布は、例えば次のようになる

$$\begin{aligned} & p(\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2 | \mathbf{X}) \\ = & p(\mathbf{Z}_2 | \mathbf{X}) p(\mathbf{Z}_1 | \mathbf{Z}_2) \end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned} = & p(z_{21}, z_{22}, z_{23} | \mathbf{X}) p(z_{11}, z_{12}, z_{13} | \mathbf{Z}_2) \\ = & p(z_{21} | \mathbf{X}) p(z_{22} | \mathbf{X}) p(z_{23} | \mathbf{X}) \\ & p(z_{11} | \mathbf{Z}_2) p(z_{12} | \mathbf{Z}_2) p(z_{13} | \mathbf{Z}_2) \end{aligned} \tag{3}$$

- 変分推論の目的

- 同時分布 $p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ が求まっているときに、事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ と、エビデンス $p(\mathbf{X})$ の近似を求める

- 注意点

- 観測変数と潜在変数をまとめて、 \mathbf{X}, \mathbf{Z} とおく
- $p(\mathbf{X})$ は、確率モデルからデータ \mathbf{X} が生起する確率である
- データからみたモデルの好みと解釈できるから、 $p(\mathbf{X})$ をモデルエビデンスという

- 周辺分布の対数 $\ln p(\mathbf{X})$ の分解

- EM アルゴリズムのときと同様であり、次のように分解できる

$$\ln p(\mathbf{X}) = \mathcal{L}(q) + \text{KL}(q||p) \quad (4)$$

- 但し、 $\mathcal{L}(q)$ と $\text{KL}(q||p)$ は次のように定義した

$$\mathcal{L}(q) = \int q(\mathbf{Z}) \ln \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})}{q(\mathbf{Z})} \quad (5)$$

$$\text{KL}(q||p) = - \int q(\mathbf{Z}) \ln \frac{p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})}{q(\mathbf{Z})} \quad (6)$$

- パラメータ θ の扱い

- EM アルゴリズムとは異なり、パラメータ θ がどこにも現れていない
- パラメータも潜在変数として扱っているので、パラメータベクトルは明示的には書かない

- ここでは、パラメータ θ については、あまり気にしない
- ここでは連続潜在変数について考えるが、離散潜在変数であれば、積分を Z に関する総和に置き換えればよい
- 下界 $\mathcal{L}(q)$ を最適化する動機
 - $\mathcal{L}(q)$ はエビデンスの対数 $\ln p(\mathbf{X})$ の下界であるから、エビデンス下界 (Evidence lower bound, ELBO) ともいう
 - または、負の変分自由エネルギー (Variational free energy) という
 - $\mathcal{L}(q)$ を q について最大化し、従って $\text{KL}(q||p)$ を最小化できれば、分布 $q(\mathbf{Z})$ を真の事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ に近づけられる
 - $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ が分かれば、データ \mathbf{X} から、潜在変数やパラメータ \mathbf{Z} が得られる

- 下界 $\mathcal{L}(q)$ の最適化

- EM アルゴリズムのときと同じように、下界 $\mathcal{L}(q)$ を、分布 $q(\mathbf{Z})$ について最大化する
- これは、KL ダイバージェンス $\text{KL}(q||p)$ を最小化することと等価である
- 従って、もし $q(\mathbf{Z})$ を任意の分布にしてよければ、 $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ において、KL ダイバージェンスを 0 にすればよい
- しかしここでは、真の事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を求めることは不可能と仮定する

- 分布 $q(\mathbf{Z})$ の近似

- 計算コストを削減するために、 $q(\mathbf{Z})$ の形をある程度制限する
- 制限したクラスの $q(\mathbf{Z})$ の中で、KL ダイバージェンス $\text{KL}(q||p)$ を最小化するものを探す

● 変分推論の目的

- 分布のクラスを制限することで、 $q(\mathbf{Z})$ を計算可能にすること
- 表現力が豊かなクラスを使うことで、真の事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を良く近似する
- 計算可能な分布のクラスの中で、**可能な限り豊かな表現力を持つもの**を選びたい
- 表現力が豊かな分布を使うことは、真の事後分布を、精度良く近似することにつながるのであって、従って**過学習は発生しない**

- 分布 $q(\mathbf{Z})$ のクラスを制限する方法
 - 例えば分布 $q(\mathbf{Z})$ を、**パラメトリックな分布に限定**することができる
 - 即ち、パラメータベクトル ω によって $q(\mathbf{Z}|\omega)$ と記述されるような、分布に制限する
- 分布 $q(\mathbf{Z})$ を、ガウス分布などの、何らかの特別なパラメトリックな分布と仮定することに相当

- クラスを制限する別の方法 (平均場近似)
 - 分布 $q(\mathbf{Z})$ のクラスを制限する別の方法として、平均場近似がある
 - 潜在変数 \mathbf{Z} を、 M 個の互いに排反なグループ $\{\mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_M\}$ に分割
 - 分布 $q(\mathbf{Z})$ が、これらのグループによって分解されると仮定

$$q(\mathbf{Z}) = \prod_{i=1}^M q_i(\mathbf{Z}_i) \quad (7)$$

- 分布 q について、これ以上の仮定はしない
- 従って、各因子 $q_i(\mathbf{Z}_i)$ の関数形については、何の制限も課さない
- 平均場近似とは、元々は物理学における用語である

- 下界 $\mathcal{L}(q)$ の最大化

- $q(\mathbf{Z}) = \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i)$ と分解できるような分布 $q(\mathbf{Z})$ の中で、**下界 $\mathcal{L}(q)$ を最大にするもの**を探す
- $\mathcal{L}(q)$ を $q(\mathbf{Z})$ について最大化するために、 $\mathcal{L}(q)$ を各因子 $q_i(\mathbf{Z}_i)$ について**順番に最大化**していく
- $\mathcal{L}(q)$ に $q(\mathbf{Z}) = \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i)$ を代入して、因子の一つ $q_j(\mathbf{Z}_j)$ に関する**依存項**を抜き出してみよう

$$\mathcal{L}(q) = \int q(\mathbf{Z}) \ln \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})}{q(\mathbf{Z})} d\mathbf{Z} \quad (8)$$

$$= \int \left(\prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) \right) \ln \frac{p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})}{q(\mathbf{Z})} d\mathbf{Z} \quad (9)$$

$$= \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) \left(\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) - \sum_i \ln q_i(\mathbf{Z}_i) \right) d\mathbf{Z} \quad (10)$$

$$= \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) d\mathbf{Z} - \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) \left(\sum_i \ln q_i(\mathbf{Z}_i) \right) d\mathbf{Z} \quad (11)$$

ここで第 1 項は

$$\begin{aligned} & \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) d\mathbf{Z} \\ &= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \left(\prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) \right) (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) d\mathbf{Z} \end{aligned} \quad (12)$$

$d\mathbf{Z} = d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M$ であるから

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \left(\prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) \right) (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M \quad (13)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) \left(\prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) \right) \left(\prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) d\mathbf{Z}_j \quad (14)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \left(\int (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) \prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z}_i \right) d\mathbf{Z}_j \quad (15)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j \quad (16)$$

- 但し、新しい分布 $\tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j)$ は以下の式で定義した (積分の結果であるため、定数項が出現する)

$$\ln \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] + \text{Const.} \quad (17)$$

- 記法 $\mathbb{E}_{i \neq j}$ は、 $i \neq j$ をみたす全ての分布 $q_i(\mathbf{Z}_i)$ による、期待値を取ることを表す

$$\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] = \int (\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})) \prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z} \quad (18)$$

- 第2項は

$$\begin{aligned} & \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) \left(\sum_i \ln q_i(\mathbf{Z}_i) \right) d\mathbf{Z} \\ &= \sum_i \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) (\ln q_i(\mathbf{Z}_i)) d\mathbf{Z} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_i \int \prod_k q_k(\mathbf{Z}_k) (\ln q_i(\mathbf{Z}_i)) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M \\ &= \int \prod_k q_k(\mathbf{Z}_k) (\ln q_j(\mathbf{Z}_j)) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M + \end{aligned} \quad (20)$$

$$\sum_{i \neq j} \int \prod_k q_k(\mathbf{Z}_k) (\ln q_i(\mathbf{Z}_i)) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M \quad (21)$$

但し

$$\int \prod_k q_k(\mathbf{Z}_k) (\ln q_j(\mathbf{Z}_j)) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M \quad (22)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) \left(\prod_{k \neq j} q_k(\mathbf{Z}_k) \right) \left(\prod_{k \neq j} d\mathbf{Z}_k \right) d\mathbf{Z}_j \quad (23)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) \left(\int \prod_{k \neq j} q_k(\mathbf{Z}_k) d\mathbf{Z}_k \right) d\mathbf{Z}_j \quad (24)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) \prod_{k \neq j} \underbrace{\left(\int q_k(\mathbf{Z}_k) d\mathbf{Z}_k \right)}_{=1} d\mathbf{Z}_j \quad (25)$$

$$= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j \quad (26)$$

であるほか

$$\begin{aligned} & \sum_{i \neq j} \int \prod_k q_k(\mathbf{Z}_k) (\ln q_i(\mathbf{Z}_i)) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M \\ &= \sum_{i \neq j} \int q_i(\mathbf{Z}_i) q_j(\mathbf{Z}_j) \left(\prod_{k \neq i, j} \ln q_k(\mathbf{Z}_k) \right) \\ & \quad (\ln q_i(\mathbf{Z}_i)) \left(\prod_{k \neq i, j} d\mathbf{Z}_k \right) d\mathbf{Z}_i d\mathbf{Z}_j \quad (27) \\ &= \sum_{i \neq j} \underbrace{\left(\int q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j \right)}_{=1} \left(\int \prod_{k \neq i, j} \ln q_k(\mathbf{Z}_k) d\mathbf{Z}_k \right) \end{aligned}$$

$$\int \ln q_i(\mathbf{Z}_i) q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z}_i \quad (28)$$

$$= \sum_{i \neq j} \prod_{k \neq i, j} \underbrace{\left(\int \ln q_k(\mathbf{Z}_k) d\mathbf{Z}_k \right)}_{=\text{Const.}} \underbrace{\int \ln q_i(\mathbf{Z}_i) q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z}_i}_{=\text{Const.}} \quad (29)$$

$$= \sum_{i \neq j} \text{Const.} = \text{Const.} \quad (30)$$

となるから結局

$$\begin{aligned} & \int \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) \left(\sum_i \ln q_i(\mathbf{Z}_i) \right) d\mathbf{Z} \\ &= \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j + \text{Const.} \end{aligned} \quad (31)$$

- 従って、下界 $\mathcal{L}(q)$ から $q_j(\mathbf{Z}_j)$ に依存する項を取り出すと

$$\mathcal{L}(q) = \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j - \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j + \text{Const.} \quad (32)$$

但し

$$\ln \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] = \int \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) \prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z}_i \quad (33)$$

- $\mathcal{L}(q)$ を、 $i \neq j$ である全ての $q_i(\mathbf{Z}_i)$ について **固定** した上で、 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ について最大化することになる
- $q_j(\mathbf{Z}_j)$ について可能な全ての分布の中で、 $\mathcal{L}(q)$ を最大にするようなものを選ぶ

- $\mathcal{L}(q)$ は次のように変形できる

$$\mathcal{L}(q) = \int q_j(\mathbf{Z}_j) \ln \frac{\tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j)}{q_j(\mathbf{Z}_j)} d\mathbf{Z}_j + \text{Const.} \quad (34)$$

$$= -\text{KL}(q_j(\mathbf{Z}_j) \parallel \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j)) + \text{Const.} \quad (35)$$

- これより、 $\mathcal{L}(q)$ は $q_j(\mathbf{Z}_j)$ と $\tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j)$ の間の、負の KL ダイバージェンスとなっている
- そして、 $\mathcal{L}(q)$ の $q_j(\mathbf{Z}_j)$ に関する最大化は、**KL ダイバージェンスの最小化**と等価
- KL ダイバージェンスを最小にするためには、 $q_j(\mathbf{Z}_j) = \tilde{p}(\mathbf{X}, \mathbf{Z}_j)$ とすればよい
- 従って、 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ の最適解は、次のように書ける

$$\ln q_j^*(\mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j}[\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] + \text{Const.} \quad (36)$$

- 下界 $\mathcal{L}(q)$ を最大化する $\ln q_j(\mathbf{Z}_j)$ の解
 - $q_j(\mathbf{Z}_j)$ の最適解は次のように書けた

$$\ln q_j^*(\mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] + \text{Const.} \quad (37)$$

- 上式は次のことを意味している
- 因子 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ の最適解の対数 $\ln q_j^*(\mathbf{Z}_j)$ は、観測データ \mathbf{X} と潜在変数 \mathbf{Z} の同時分布の対数 $\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ を考え、 $i \neq j$ である他の因子 $q_i(\mathbf{Z}_i)$ について期待値を取ったものである
- 定数項は、正規化することで得られるので、結局次のようになる

$$q_j^*(\mathbf{Z}_j) = \frac{\exp(\mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})])}{\int \exp(\mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})]) d\mathbf{Z}_j} \quad (38)$$

- 正規化定数は必要に応じて計算すればよいので、取り敢えず無視できる

変分推論

- 最適解の式は、 $q(\mathbf{Z})$ の分解の数だけ得られるので、 $\{q_i(\mathbf{Z}_i)\}$ に関する M 本の連立方程式となる
- この方程式は、分布 $q(\mathbf{Z})$ が M 個の因子に分解されるという仮定の下で、下界 $\mathcal{L}(q)$ の最大値が満たすべき条件である
- $\ln q_j^*(\mathbf{Z}_j)$ の右辺は、 $i \neq j$ である $q_i(\mathbf{Z}_i)$ の期待値に依存するため、 $q_j^*(\mathbf{Z}_j)$ を陽に求めることができない
- そこで、下界 $\mathcal{L}(q)$ は次のように最適化される (重要)
- $i \neq j$ である全ての $q_i(\mathbf{Z}_i)$ を固定した状態で、 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ を最適化することを、全ての $j = 1, \dots, M$ について繰り返す手続きを、座標降下法という

- 下界 $\mathcal{L}(q)$ の最適化 (座標降下法)

- 1 全ての因子 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ を適当に初期化する

- 2 各因子を、以下の式を使って更新する

$$\ln q_j(\mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] + \text{Const.} \quad (39)$$

$$\mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] = \int \ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) \prod_{i \neq j} q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z}_i \quad (40)$$

即ち、因子 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ を、他の全ての因子の現在の値 $q_i(\mathbf{Z}_i)$ を使って改良する

- 3 (2) を、下界 $\mathcal{L}(q)$ が収束するまで繰り返す

● ここまでの話の流れ

- 1 $\ln p(\mathbf{X}) = \mathcal{L}(q) + \text{KL}(q(\mathbf{Z})||p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}))$ であるから、エビデンス下界 $\mathcal{L}(q)$ を q について最大化すれば、 $\text{KL}(q||p) = 0$ とでき、従って $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を得る
- 2 $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ が分かれば、データ \mathbf{X} から、潜在変数やパラメータ \mathbf{Z} が得られる (パラメータは潜在変数 \mathbf{Z} に含まれている)
- 3 しかし、事後分布 $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ は計算不可能なので、何らかの方法で近似するしかない
- 4 近似するといっても、計算可能でなければならないので、 $q(\mathbf{Z})$ の形には、通常何らかの制限を課す
- 5 $q(\mathbf{Z})$ を、パラメトリックな分布 $q(\mathbf{Z}|\omega)$ と仮定することがある

- 6 または、 $q(\mathbf{Z})$ を、 $\prod_i q_i(\mathbf{Z}_i)$ のように分解できるとする (平均場近似)
 - 7 平均場近似を行うとき、各因子 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ の最適解は、 $\ln q_j^*(\mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] + \text{Const.}$ であった
 - 8 全ての因子 $\{q_j(\mathbf{Z}_j)\}$ を同時に最適化することはできない
 - 9 下界 $\mathcal{L}(q)$ を、各因子 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ について順番に最適化することはできる
- これからの話の流れ
 - MAP 推定と最尤推定は、変分推論の特殊な場合であることを確認する

- MAP 推定の変分推論からの導出



- これまでの話の流れ

1

- これからの話の流れ
 - 分解 $q(\mathbf{Z}) = \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i)$ によって $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を近似するときの、弊害を調べる

- $q(\mathbf{Z})$ の分解による近似の性質
 - 変分推論では、真の事後分布 $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を、分解により近似する
 - 分解で近似することによって、**どのような不正確さが生じるのか?**
- ガウス分布の分解による近似
 - ガウス分布を、**分解されたガウス分布**で近似することを考えてみよう
 - 分解による近似で、どのような問題が起こるのか考えてみよう
 - 2つの変数 $\mathbf{z} = (z_1, z_2)$ 間には、**相関がある**とする
 - \mathbf{z} はガウス分布 $p(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1})$ に従っているとする

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{bmatrix} \quad (41)$$

- 精度行列 $\boldsymbol{\Lambda}$ は対称行列であるから、 $\Lambda_{12} = \Lambda_{21}$

- この分布 $p(\mathbf{z})$ を、分解されたガウス分布 $q(\mathbf{z}) = q_1(z_1)q_2(z_2)$ で近似する
- 各因子 $q_1(z_1), q_2(z_2)$ の関数形については何の仮定も置いていないことに注意

- 最適な因子 $q_1(z_1), q_2(z_2)$ の計算

- 最適な因子 $q_1^*(z_1)$ を、先程の結果を使って求める

$$\ln q_j(\mathbf{Z}_j) = \mathbb{E}_{i \neq j} [\ln p(\mathbf{X}, \mathbf{Z})] + \text{Const.} \quad (42)$$

- 従って、 $q_1^*(z_1)$ を計算する式は次のようになる

$$\ln q_1^*(z_1) = \mathbb{E}_{z_2} [\ln p(\mathbf{z})] + \text{Const.} \quad (43)$$

$$\mathbb{E}_{z_2} [\ln p(\mathbf{z})] = \int \ln p(\mathbf{z}) q_2(z_2) dz_2 \quad (44)$$

- 上式の右辺では、 z_1 に依存する項だけを考えればよい

- z_1 の関数を求めようとしているため
- z_1 に依存しない項は、全て定数項 (正規化定数) に含まれてしまうため
- 従って $q_1^*(z_1)$ は

$$\ln q_1^*(z_1) = \mathbb{E}_{z_2} [\ln p(\mathbf{z})] + \text{Const.} \quad (45)$$

$$= \mathbb{E}_{z_2} [\ln \mathcal{N}(\mathbf{z} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1})] + \text{Const.} \quad (46)$$

但し

$$\begin{aligned} & \ln \mathcal{N}(\mathbf{z} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1}) \\ = & \ln \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{2}}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Lambda}^{-1}|^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T (\boldsymbol{\Lambda}^{-1})^{-1} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \right) \right) \\ = & \ln \left(\frac{1}{2\pi} \frac{1}{|\boldsymbol{\Lambda}|^{-\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \right) \right) \\ = & -\frac{1}{2} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) + \text{Const.} \end{aligned} \quad (47)$$

z_1 に依存する項だけを取り出せば

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \\ = & -\frac{1}{2} [z_1 - \mu_1, z_2 - \mu_2] \begin{bmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 - \mu_1 \\ z_2 - \mu_2 \end{bmatrix} \\ = & -\frac{1}{2} \left[\left\{ (\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1) + \Lambda_{21}(z_2 - \mu_2)) \right\} (z_1 - \mu_1) + \right. \\ & \left. \left\{ \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1) + \Lambda_{22}(z_2 - \mu_2) \right\} (z_2 - \mu_2) \right] \\ = & -\frac{1}{2} (\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 + 2\Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)(z_2 - \mu_2) + \\ & \Lambda_{22}(z_2 - \mu_2)^2) \quad (\because \Lambda_{21} = \Lambda_{12}) \\ = & -\frac{1}{2} \Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 - \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)(z_2 - \mu_2) + \text{Const.} \quad (48) \end{aligned}$$

これを代入して

$$\begin{aligned} & \ln \mathcal{N}(\mathbf{z} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1}) \\ = & -\frac{1}{2} \Lambda_{11} (z_1 - \mu_1)^2 - \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1) (z_2 - \mu_2) + \text{Const.} \quad (49) \end{aligned}$$

従って

$$\begin{aligned} & \ln q_1^*(z_1) \\ = & \mathbb{E}_{z_2} [\ln \mathcal{N}(\mathbf{z} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1})] + \text{Const.} \\ = & \mathbb{E}_{z_2} \left[-\frac{1}{2} \Lambda_{11} (z_1 - \mu_1)^2 - \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1) (z_2 - \mu_2) \right] + \text{Const.} \\ = & -\frac{1}{2} \Lambda_{11} z_1^2 + \Lambda_{11} \mu_1 z_1 - \Lambda_{12} z_1 (\mathbb{E}[z_2] - \mu_2) + \text{Const.} \quad (50) \end{aligned}$$

- これより、 $q_1^*(z_1)$ は次のように書ける

$$\begin{aligned} & q_1^*(z_1) \\ \propto & \exp \left(-\frac{1}{2} \Lambda_{11} z_1^2 + \Lambda_{11} \mu_1 z_1 - \Lambda_{12} z_1 (\mathbb{E}[z_2] - \mu_2) \right) \\ = & \exp \left(-\frac{1}{2} \Lambda_{11} \left(z_1 - (\mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (\mathbb{E}[z_2] - \mu_2)) \right)^2 + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \Lambda_{11} (\mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (\mathbb{E}[z_2] - \mu_2))^2 \right) \\ \propto & \exp \left(-\frac{1}{2 \Lambda_{11}^{-1}} \left(z_1 - (\mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (\mathbb{E}[z_2] - \mu_2)) \right)^2 \right) \\ = & \mathcal{N}(z_1 | m_1, \Lambda_{11}^{-1}) \end{aligned} \tag{51}$$

但し m_1 は次のようにおいた

$$m_1 = \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (\mathbb{E}[z_2] - \mu_2) \tag{52}$$

- 対称性から、 $q_2^*(z_2)$ も次のように求められる

$$\ln q_2^*(z_2) = \mathbb{E}_{z_2}[\ln p(z)] + \text{Const.} \quad (53)$$

$$= \mathbb{E}_{z_2}[\ln \mathcal{N}(z|\mu, \Lambda^{-1})] + \text{Const.} \quad (54)$$

$$q_2^*(z_2) = \mathcal{N}(z_2|m_2, \Lambda_{22}^{-1}) \quad (55)$$

但し m_2 は次のようにおいた

$$m_2 = \mu_2 - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{21}(\mathbb{E}[z_1] - \mu_1) \quad (56)$$

- これより $q_1^*(z_1), q_2^*(z_2)$ は

$$q_1^*(z_1) = \mathcal{N}(z_1|m_1, \Lambda_{11}^{-1}) \quad (57)$$

$$m_1 = \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12}(\mathbb{E}[z_2] - \mu_2) \quad (58)$$

$$q_2^*(z_2) = \mathcal{N}(z_2|m_2, \Lambda_{22}^{-1}) \quad (59)$$

$$m_2 = \mu_2 - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{21}(\mathbb{E}[z_1] - \mu_1) \quad (60)$$

- $\mathbb{E}[z_2]$ は、 z_2 の $q_2(z_2) = \mathcal{N}(z_2|m_2, \Lambda_{22}^{-1})$ による平均であるから、
 $\mathbb{E}[z_2] = m_2$ である (同様に、 $\mathbb{E}[z_1] = m_1$)
- これより m_1, m_2 を連立させれば

$$m_1 = \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (m_2 - \mu_2) \quad (61)$$

$$m_2 = \mu_2 - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{21} (m_1 - \mu_1) \quad (62)$$

であるから、 m_1 について解けば

$$m_1 = \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (m_2 - \mu_2) \quad (63)$$

$$= \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} (\mu_2 - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{21} (m_1 - \mu_1) - \mu_2) \quad (64)$$

$$= \mu_1 + \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{21} (m_1 - \mu_1) \quad (65)$$

$$= \mu_1 + \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2 (m_1 - \mu_1) \quad (66)$$

$$= (1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) \mu_1 + \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2 m_1 \quad (67)$$

従って

$$(1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) \mu_1 = (1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) m_1 \quad (68)$$

精度行列 Λ が正則であれば

$$\Lambda_{11} \Lambda_{12} - \Lambda_{12} \Lambda_{21} \neq 0 \quad (69)$$

$$\Rightarrow \Lambda_{11} \Lambda_{12} - \Lambda_{12}^2 \neq 0 \quad (70)$$

$$\Rightarrow (\Lambda_{11} \Lambda_{12}) (1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12}^{-1} \Lambda_{12}^2) \neq 0 \quad (71)$$

$$\Rightarrow (1 - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12}^{-1} \Lambda_{12}^2) \neq 0 \quad (72)$$

が成立するから、分布 $p(z)$ が非特異 (精度行列が正則) ならば

$$m_1 = \mu_1 \quad (73)$$

が唯一の解であるほか、対称性から、 m_2 についても以下を得る

$$m_2 = \mu_2 \quad (74)$$

- ゆえに、 $q_1^*(z_1), q_2^*(z_2)$ は

$$q_1^*(z_1) = \mathcal{N}(z_1 | \mu_1, \Lambda_{11}^{-1}) \quad (75)$$

$$q_2^*(z_2) = \mathcal{N}(z_2 | \mu_2, \Lambda_{22}^{-1}) \quad (76)$$

- 注意点 1

- $q_1^*(z_1)$ は、 $q_2^*(z_2)$ を使って計算される $p(z)$ の期待値 $\mathbb{E}[z_2]$ に依存 (逆も成り立つ)
- $q_1^*(z_1)$ と、 $q_2^*(z_2)$ は相互に依存しているため、2つを同時に求めることはできない
- その代わりに、次のように最適化すればよい
- $q_1(z_1), q_2(z_2)$ を適当に初期化したあと、 $q_1^*(z_1), q_2^*(z_2)$ の式を使って、交互に $q_1(z_1)$ と $q_2(z_2)$ を更新していく (収束するまでこれを繰り返す)

- 注意点 2

変分推論

- $q_1(z_1), q_2(z_2)$ の具体的な関数形については、何の仮定も置かなかった
- $q_i^*(z_i)$ がガウス分布だという仮定は置いていないが、 $\text{KL}(q||p)$ を最適化する変分推論によって、結果的にガウス分布が得られた

- $KL(q||p)$ の最適化と $KL(p||q)$ の最適化の比較

- 上記の結果は、 $KL(q||p)$ の最適化 (エビデンス下界 $\mathcal{L}(q)$ の最適化) によって得た
- $KL(q||p)$ ではなく、 $KL(p||q)$ を最適化したらどうなるか?
- 変分推論ではない、もう一つの近似推論の方法である、**EP 法**で使われる考え方
- $q(Z)$ を $p(Z|X)$ に近づけたいのであれば、 $KL(q||p)$ と $KL(p||q)$ のどちらを最小化してもよいはず
- なぜなら、KL ダイバージェンスは、確率分布間の (擬似的な) 距離を表すため

- $KL(p||q)$ の最適化

- $q(Z)$ が平均場近似によって分解できるとき、 $KL(p||q)$ を最適化したい

- KL ダイバージェンス $KL(p||q)$ は、次のように書ける

$$KL(p||q) \equiv KL(p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})||q(\mathbf{Z})) \quad (77)$$

$$= - \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln \frac{q(\mathbf{Z})}{p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})} d\mathbf{Z} \quad (78)$$

$$= - \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) (\ln q(\mathbf{Z}) - \ln p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})) d\mathbf{Z} \quad (79)$$

$$= - \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln q(\mathbf{Z}) d\mathbf{Z} - \underbrace{\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) d\mathbf{Z}}_{q \text{ には依存しない定数項}} \quad (80)$$

$$= - \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z} + \text{Const.} \quad (81)$$

$$= - \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \sum_i \ln q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z} + \text{Const.} \quad (82)$$

$$= - \sum_i \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z} + \text{Const.} \quad (83)$$

定数項は、 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ のエントロピーであり、 q には依存しない

- 各因子 $q_j(\mathbf{Z}_j)$ について $\text{KL}(p||q)$ を最適化したい
- このとき、 $i \neq j$ となる、全ての $q_i(\mathbf{Z}_i)$ は**固定する**
- $q_j(\mathbf{Z}_j)$ に依存する項を取り出せば、次のようになる

$$\begin{aligned} & \sum_i \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln q_i(\mathbf{Z}_i) d\mathbf{Z} \\ &= \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z} \end{aligned} \quad (84)$$

$$= \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_1 d\mathbf{Z}_2 \cdots d\mathbf{Z}_M \quad (85)$$

$$= \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j \left(\prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \quad (86)$$

$$= \int \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j \quad (87)$$

- $q_j(\mathbf{Z}_j)$ は確率分布であるから、以下の条件を満たさなければならない

$$\int q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j = 1 \quad (\text{規格化条件}) \quad (88)$$

$$q_j(\mathbf{Z}_j) \geq 0 \quad (89)$$

- 従って $\text{KL}(p||q)$ を $q_j(\mathbf{Z}_j)$ について最適化するとき、**ラグランジュの未定乗数法**を使って、規格化条件を組み込む必要がある

- $q_j(\mathbf{Z}_j) \geq 0$ という条件は、 $\ln q_i(\mathbf{Z}_i)$ という項が既にあるから、何もしなくても常に満たされる (ラグランジュ関数に、制約条件を改めて取り入れる必要がない)
- 結局、ラグランジュ汎関数 $\mathcal{L}[q_j]$ は、次のようになる

$$\begin{aligned}\mathcal{L}[q_j] = & - \int \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j + \\ & \lambda \left(\int q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j - 1 \right)\end{aligned}\tag{90}$$

- 上記は $q_j(\mathbf{Z}_j)$ についての汎関数となっていることに注意
- 次の公式を使って、 $\mathcal{L}[q_j]$ を変分最適化する

$$\frac{\delta}{\delta y(x)} \int G(y(x), x) dx = \frac{\partial}{\partial y} G(y(x), x)\tag{91}$$

- 従って

$$\begin{aligned}
 & \frac{\delta}{\delta q_j(\mathbf{Z}_j)} \mathcal{L}[q_j] \\
 = & -\frac{\delta}{\delta q_j(\mathbf{Z}_j)} \int \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j + \\
 & \frac{\delta}{\delta q_j(\mathbf{Z}_j)} \lambda \left(\int q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j - 1 \right) \quad (92)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & -\frac{\partial}{\partial q_j} \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \ln q_j(\mathbf{Z}_j) + \\
 & \lambda \frac{\partial}{\partial q_j} q_j(\mathbf{Z}_j) \quad (93)
 \end{aligned}$$

$$= - \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \frac{1}{q_j(\mathbf{Z}_j)} + \lambda = 0 \quad (94)$$

- これより、未定乗数 λ は

$$\lambda q_j(\mathbf{Z}_j) = \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \frac{1}{q_j(\mathbf{Z}_j)} \quad (95)$$

$$\Rightarrow \int \lambda q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j = \int \underbrace{\left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right)}_{=p(\mathbf{Z}_j|\mathbf{X})} d\mathbf{Z}_j \quad (96)$$

$$\Rightarrow \lambda \underbrace{\int q_j(\mathbf{Z}_j) d\mathbf{Z}_j}_{=1} = \underbrace{\int p(\mathbf{Z}_j|\mathbf{X}) d\mathbf{Z}_j}_{=1} \quad (97)$$

$$\Rightarrow \lambda = 1 \quad (98)$$

- 結局、最適解 $q_j^*(\mathbf{Z}_j)$ は次のようになる

$$- \left(\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i \right) \frac{1}{q_j(\mathbf{Z}_j)} + \lambda = 0 \quad (99)$$

$$\Rightarrow q_j^*(\mathbf{Z}_j) = \underbrace{\int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \prod_{i \neq j} d\mathbf{Z}_i}_{=p(\mathbf{Z}_j|\mathbf{X})} \quad (100)$$

$$\Rightarrow q_j^*(\mathbf{Z}_j) = p(\mathbf{Z}_j|\mathbf{X}) \quad (101)$$

- $q_j^*(\mathbf{Z}_j)$ の最適解は、 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を、 $i \neq j$ である全ての \mathbf{Z}_i について周辺化した分布
- これは閉じた解であり、繰り返しを必要としない

- 最適な因子 $q_1(z_1), q_2(z_2)$ の計算

- 今回は $p(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = p(\mathbf{z})$ の場合を考えており、かつ $p(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1})$ であった
- 従って、 $q_1^*(z_1)$ は、 $p(\mathbf{z})$ を z_2 について周辺化すればよいから

$$\begin{aligned} & q_1^*(z_1) \\ &= \int p(\mathbf{z}) dz_2 \\ &= \int \mathcal{N}(\mathbf{z}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1}) dz_2 \end{aligned} \tag{102}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{|\boldsymbol{\Lambda}|^{-\frac{1}{2}}} \int \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})\right) dz_2 \tag{103}$$

- ここで、指数の内側を、積分変数 z_2 に依存する項と、そうでない項に分ける

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \\ = & -\frac{1}{2}(\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 + \\ & 2\Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)(z_2 - \mu_2) + \Lambda_{22}(z_2 - \mu_2)^2) \quad (104) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} = & -\frac{1}{2}\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 + \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)\mu_2 + \\ & -\frac{1}{2}(2\Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)z_2 + \Lambda_{22}(z_2 - \mu_2)^2) \quad (105) \end{aligned}$$

そして

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}(2\Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)z_2 + \Lambda_{22}(z_2 - \mu_2)^2) \\ = & -\frac{1}{2}(\Lambda_{22}z_2^2 - 2\Lambda_{22}\mu_2z_2 + 2\Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)z_2 + \Lambda_{22}\mu_2^2) \quad (106) \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{2} (\Lambda_{22} z_2^2 - 2 (\Lambda_{22} \mu_2 - \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1)) z_2 + \Lambda_{22} \mu_2^2) \quad (107)$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\Lambda_{22} (z_2 - \Lambda_{22}^{-1} (\Lambda_{22} \mu_2 - \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1)))^2 - \Lambda_{22} (\Lambda_{22}^{-1} (\Lambda_{22} \mu_2 - \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1)))^2 + \Lambda_{22} \mu_2^2 \right) \quad (108)$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\Lambda_{22} (z_2 - \Lambda_{22}^{-1} m)^2 - \Lambda_{22}^{-1} m^2 + \Lambda_{22} \mu_2^2 \right) \quad (109)$$

ゆえ ($m = \Lambda_{22} \mu_2 - \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1)$ とおいた)

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \\ = & -\frac{1}{2} \Lambda_{11} (z_1 - \mu_1)^2 + \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1) \mu_2 - \frac{1}{2} \Lambda_{22} \mu_2^2 - \\ & \frac{1}{2} \Lambda_{22} (z_2 - \Lambda_{22}^{-1} m)^2 + \frac{1}{2} \Lambda_{22}^{-1} m^2 \end{aligned} \quad (110)$$

- これより、積分変数 z_2 の依存項だけを取り出せたので

$$\begin{aligned} & \int \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \right) dz_2 \\ &= \exp \left(-\frac{1}{2} \Lambda_{11} (z_1 - \mu_1)^2 + \Lambda_{12} (z_1 - \mu_1) \mu_2 - \right. \\ & \quad \left. \frac{1}{2} \Lambda_{22} \mu_2^2 + \frac{1}{2} \Lambda_{22}^{-1} m^2 \right) \\ & \quad \int \exp \left(-\frac{1}{2} \Lambda_{22} (z_2 - \Lambda_{22}^{-1} m)^2 \right) dz_2 \end{aligned} \quad (111)$$

であって、右側の積分は、中身が (正規化されていない) ガウス分布であるから

$$\int \exp \left(-\frac{1}{2} \Lambda_{22} (z_2 - \Lambda_{22}^{-1} m)^2 \right) dz_2$$

$$\begin{aligned}
 &= (2\pi\Lambda_{22}^{-1})^{\frac{1}{2}} \cdot \int \frac{1}{(2\pi\Lambda_{22}^{-1})^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\Lambda_{22}(z_2 - \Lambda_{22}^{-1}m)^2\right) dz_2 \\
 &= (2\pi\Lambda_{22}^{-1})^{\frac{1}{2}} \tag{112}
 \end{aligned}$$

となって、 z_2 を積分により消去できる

- また指数の残りの部分から、 z_1 に依存する項だけを取り出して

$$\begin{aligned}
 &-\frac{1}{2}\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 + \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)\mu_2 - \frac{1}{2}\Lambda_{22}\mu_2^2 + \frac{1}{2}\Lambda_{22}^{-1}m^2 \\
 = &-\frac{1}{2}\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 + \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)\mu_2 - \frac{1}{2}\Lambda_{22}\mu_2^2 + \\
 &\frac{1}{2}\Lambda_{22}^{-1}(\Lambda_{22}\mu_2 - \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1))^2 \\
 = &-\frac{1}{2}\Lambda_{11}(z_1 - \mu_1)^2 + \Lambda_{12}(z_1 - \mu_1)\mu_2 - \frac{1}{2}\Lambda_{22}\mu_2^2 + \\
 &\frac{1}{2}\Lambda_{22}\mu_2^2 - \mu_2\Lambda_{12}(z_1 - \mu_1) +
 \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2} \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2 (z_1 - \mu_1)^2 \quad (113)$$

$$= -\frac{1}{2} (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) (z_1 - \mu_1)^2 \quad (114)$$

$$= -\frac{1}{2} (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) z_1^2 + \frac{1}{2} (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) \mu_1 z_1 + \text{Const.} \quad (115)$$

- これより結局、 z_2 による積分は次のようになる

$$\begin{aligned} & \int \exp \left(-\frac{1}{2} (z - \mu)^T \Lambda (z - \mu) \right) dz_2 \\ &= (2\pi \Lambda_{22}^{-1})^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{1}{2} (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) (z_1 - \mu_1)^2 \right) \end{aligned} \quad (116)$$

- 従って、 $q_1^*(z_1)$ は次のようになる

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{\Lambda}|^{-\frac{1}{2}}} \int \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})\right) dz_2 \quad (117)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\Lambda_{11}\Lambda_{22} - \Lambda_{12}^2)^{-\frac{1}{2}}} (2\pi\Lambda_{22}^{-1})^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}^2)(z_1 - \mu_1)^2\right) \quad (118)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{(\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}^2)^{-\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}^2)(z_1 - \mu_1)^2\right) \quad (119)$$

$$= \mathcal{N}(z_1|\mu_1, (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}^2)^{-1}) \quad (120)$$

- 共分散行列 Σ を、精度行列 Λ を使って次のように定めれば

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{pmatrix} \quad (\Sigma_{12} = \Sigma_{21}) \quad (121)$$

次が成り立つから

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{pmatrix} = \mathbf{I} \quad (122)$$

各成分に注目すれば

$$\begin{cases} \Sigma_{11}\Lambda_{11} + \Sigma_{12}\Lambda_{21} = 1 \\ \Sigma_{11}\Lambda_{12} + \Sigma_{12}\Lambda_{22} = 0 \end{cases} \quad (123)$$

これを Σ_{11} について解けば

$$\Sigma_{11}\Lambda_{11} + (-\Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}\Sigma_{11})\Lambda_{21} = 1 \quad (124)$$

$$\Rightarrow \Sigma_{11}(\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}\Lambda_{21}) = 1 \quad (125)$$

$$\Rightarrow \Sigma_{11} (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) = 1 \quad (126)$$

$$\Rightarrow \Sigma_{11} = (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2)^{-1} \quad (127)$$

- これから、 $q_1^*(z_1)$ は次のようにも書ける

$$\begin{aligned} & q_1^*(z_1) \\ = & \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{(\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2)^{-\frac{1}{2}}} \\ & \exp\left(-\frac{1}{2} (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2) (z_1 - \mu_1)^2\right) \end{aligned} \quad (128)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{\Sigma_{11}^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \Sigma_{11}^{-1} (z_1 - \mu_1)^2\right) \quad (129)$$

$$= \mathcal{N}(z_1 | \mu_1, \Sigma_{11}) \quad (130)$$

- $q_2^*(z_2)$ は、対称性から次のようになる

$$q_2^*(z_2) = \mathcal{N}(z_2 | \mu_2, (\Lambda_{22} - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12}^2)^{-1}) = \mathcal{N}(z_2 | \mu_2, \Sigma_{22}) \quad (131)$$

- 2つの解の比較

- $\text{KL}(q||p)$ の最小化によって次の解を得た

$$q_1^*(z_1) = \mathcal{N}(z_1 | \mu_1, \Lambda_{11}^{-1}) \quad (132)$$

$$q_2^*(z_2) = \mathcal{N}(z_2 | \mu_2, \Lambda_{22}^{-1}) \quad (133)$$

- $\text{KL}(p||q)$ の最小化では、次の解を得た

$$q_1^*(z_1) = \mathcal{N}(z_1|\mu_1, \Sigma_{11}) \quad (134)$$

$$\Sigma_{11} = (\Lambda_{11} - \Lambda_{22}^{-1} \Lambda_{12}^2)^{-1} \quad (135)$$

$$q_2^*(z_2) = \mathcal{N}(z_2|\mu_2, \Sigma_{22}) \quad (136)$$

$$\Sigma_{22} = (\Lambda_{22} - \Lambda_{11}^{-1} \Lambda_{12}^2)^{-1} \quad (137)$$

- $p(z) = \mathcal{N}(z|\mu, \Sigma)$ の平均は $\mu = [\mu_1, \mu_2]^T$ であつたので、いずれの場合も、平均は正しく捉えている
- しかし、両者の間では、分散が異なっている
- また、変数 z_1 と z_2 の間の相関は消えてなくなっている
- 両者の違いを、次の図 3 に示す
- 緑色の線が真の分布 $p(z)$ を表す
- 左側の赤線は、 $\text{KL}(q||p)$ の最小化によって得られた分布 $q(z)$
- 右側の赤線は、 $\text{KL}(p||q)$ の最小化によって得られた分布 $q(z)$

Figure 10.2 Comparison of the two alternative forms for the Kullback-Leibler divergence. The green contours corresponding to 1, 2, and 3 standard deviations for a correlated Gaussian distribution $p(\mathbf{z})$ over two variables z_1 and z_2 , and the red contours represent the corresponding levels for an approximating distribution $q(\mathbf{z})$ over the same variables given by the product of two independent univariate Gaussian distributions whose parameters are obtained by minimization of (a) the Kullback-Leibler divergence $\text{KL}(q||p)$, and (b) the reverse Kullback-Leibler divergence $\text{KL}(p||q)$.

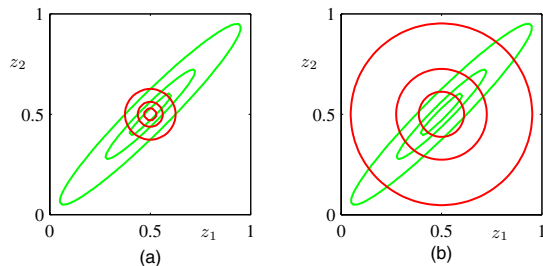


図 3: KL ダイバージェンスの 2 つの形の比較

- 2つの解の比較

- $\text{KL}(q||p)$ の最小化で得られる $q(z)$ は、分散が小さくなる方向に制御されていて、それと直交する方向の分散は、大きく過小評価されている
- 分解による近似では、一般に事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ をコンパクトに近似しすぎる
- $\text{KL}(p||q)$ の最小化で得られる $q(z)$ は、分散が大きくなる方向に制御されていて、それと直交する方向の分散は、過大評価されている
- 非常に低い確率しか持たないはずの領域にも、多くの確率質量が割り当てられている

- 違いが生じる理由

- KL ダイバージェンス $\text{KL}(q||p)$ は次のようであった

$$\text{KL}(q||p) = - \int q(\mathbf{Z}) \ln \frac{p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})}{q(\mathbf{Z})} d\mathbf{Z} \quad (138)$$

- $\text{KL}(q||p)$ が大きくなる主要因は、 $p(\mathbf{Z})$ がほとんど 0 で、 $q(\mathbf{Z})$ はそうでない領域
- 従って、 $\text{KL}(q||p)$ を最小化すると、 $q(\mathbf{Z})$ は、 $p(\mathbf{Z})$ が小さい領域を避けるようになる
- また、 $\text{KL}(p||q)$ は次のようであった

$$\text{KL}(p||q) = - \int p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}) \ln \frac{q(\mathbf{Z})}{p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})} d\mathbf{Z} \quad (139)$$

- $\text{KL}(p||q)$ が大きくなる主要因は、 $q(\mathbf{Z})$ がほとんど 0 で、 $p(\mathbf{Z})$ はそうではない領域
- 従って、 $\text{KL}(p||q)$ を最小化すると、 $q(\mathbf{Z})$ は、 $p(\mathbf{Z})$ が 0 でない領域にも、必ず確率を持たせるようになる
- 別の分布について、この両者の振舞いの違いを観察してみよう

- 多峰性のある分布を、単峰の分布で近似する場合
 - $KL(q||p)$ を最小化する変分近似では、**多数ある峰のうちの 1 つ**を再現
 - $KL(p||q)$ を最小化する変分近似では、**全ての峰を平均したような分布**が得られる
- 多峰性のある分布を平均してしまうと、**予測性能の悪化**をもたらす
- これらの比較を次の図 4 に示す

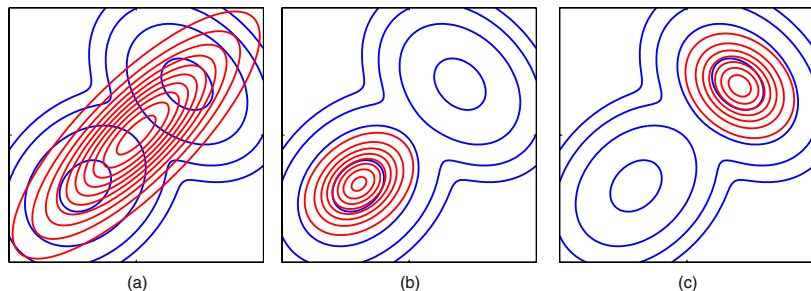


Figure 10.3 Another comparison of the two alternative forms for the Kullback-Leibler divergence. (a) The blue contours show a bimodal distribution $p(\mathbf{Z})$ given by a mixture of two Gaussians, and the red contours correspond to the single Gaussian distribution $q(\mathbf{Z})$ that best approximates $p(\mathbf{Z})$ in the sense of minimizing the Kullback-Leibler divergence $\text{KL}(p||q)$. (b) As in (a) but now the red contours correspond to a Gaussian distribution $q(\mathbf{Z})$ found by numerical minimization of the Kullback-Leibler divergence $\text{KL}(q||p)$. (c) As in (b) but showing a different local minimum of the Kullback-Leibler divergence.

図 4: KL ダイバージェンスの 2 つの形の別の比較

- ここまでの話の流れ

- 1 分解 $q(\mathbf{Z}) = \prod_i q_i(\mathbf{Z}_i)$ を使ったエビデンス下界 $\mathcal{L}(q)$ の最適化は、 $\text{KL}(q(\mathbf{Z})||p(\mathbf{Z}|\mathbf{X}))$ の最小化と等価である
- 2 $\text{KL}(q||p)$ と、 $\text{KL}(p||q)$ を最小化する変分近似を、2 変数のガウス分布を例として試した
- 3 $\text{KL}(q||p)$ の最小化を使って求めた $q(\mathbf{Z})$ は、事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を **コンパクトに近似**する傾向にあった
- 4 $\text{KL}(p||q)$ の最小化によって求めた $q(\mathbf{Z})$ は、事後分布 $p(\mathbf{Z}|\mathbf{X})$ を **大きく捉えて近似**する傾向にあった

- これからの話の流れ

