5.2.5 について、詳細を見ていく。適宜、文献 [7](日本語版の書籍を参考にしている),[47], [83] (https://tminka.github.io/papers/ep/minka-thesis.pdf) も参照する。

(5.54)-(5.58) までは仮定なので良いとする。

5.2.5.3 から検討が始まる。

まず、 $m_{i,j}^{(l)}=0,v_{i,j}^{(l)}=\infty, \alpha_{\gamma_y}=1, \beta_{\gamma_y}=0, \alpha_{\gamma_w}=1, \beta_{\gamma_w}=0$ とする。これはガウス分布、ガンマ分布の係数となっているので、

$$\mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|m_{i,j}^{(l)}, v_{i,j}^{(l)}) = \frac{1}{2\pi\sqrt{v_{i,j}^{(l)}}} exp^{-\frac{1}{2v_{i,j}^{(l)}}(w_{i,j}^{(l)} - m_{i,j}^{(l)})^2}$$

$$\tag{1}$$

 $m_{i,j}^{(l)}$ が有限で $v_{i,j}^{(l)} = \infty$ なので、 $exp^{-\frac{1}{2v_{i,j}^{(l)}}(w_{i,j}^{(l)} - m_{i,j}^{(l)})^2}$ が 1 になる。つまり、一様分布となる。

$$Gam(\gamma|\alpha,\beta) = C_G(\alpha,\beta)\gamma^{\alpha-1}exp^{-\beta\gamma} = C_G(1,0)\gamma^0exp^0 = C_G(1,0)$$
(2)

となり、一様分布になる。

本文では仮定密度フィルタリングを利用して、パラメータを決めることとしているし、[47] でも同様の流れとなっている。しかし、[47] の supplemental material の 6 では EP 法を用いた方法が、記載されている。 [83] の (3.62) 式の下にあるように、仮定密度フィルタリングは EP 法を 1 サイクル実施したときと等価になるため、それを考慮する。 (本の仮定密度フィルタリングのところは $p(\theta|D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$ をもととしているが、p(W) について、p(D|W) に見えないので、EP 法を踏まえた方法をやってみた。)

(5.57) は [7] の (10.188) のような形式で表されていることがわかる。そのため、EP 法が適用できる。

[47] の supplemental material の 6 で (29),(30) 式はそのまま記載されている。

さて、(4.81),(4.84) を考慮すると、 $\theta = \{\{w_{i,j}^{(l)}\}, \gamma_w, \gamma_y\}, X = \{\}$ として、

$$p(W, \gamma_w, \gamma_y) = p(W|\gamma_w)p(\gamma_w)p(\gamma_y) = \left(\prod_l \prod_i \prod_j \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|0, \gamma_w^{-1})\right) Gam(\gamma_w|\alpha_{\gamma_{w0}}, \beta_{\gamma_{w0}}) Gam(\gamma_y|\alpha_{\gamma_{y0}}, \beta_{\gamma_{y0}})$$
(3)

一方で、(30) はそのままとなり、

$$q(W, \gamma_w, \gamma_y) = \left(\prod_l \prod_i \prod_j \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)} | m_{i,j}^{(l)}, v_{i,j}^{(l)}) \right) Gam(\gamma_w | \alpha_{\gamma_w}, \beta_{\gamma_w}) Gam(\gamma_y | \alpha_{\gamma_y}, \beta_{\gamma_y})$$
(4)

このとき、(4.81) を考慮すると、

$$p(W, \gamma_w, \gamma_y) = \prod_{l} \prod_{i} \prod_{j} f(w_{i,j}^{(l)}, \gamma_w) f_{\gamma_w}(\gamma_w) f_{\gamma_y}(\gamma_y)$$

$$f(w_{i,j}^{(l)}, \gamma_w) = p(w_{i,j}^{(l)} | \gamma_w) = \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)} | 0, \gamma_w^{-1})$$

$$f_{\gamma_w}(\gamma_w) = p(\gamma_w) = Gam(\gamma_w | \alpha_{\gamma_w}, \beta_{\gamma_w})$$

$$f_{\gamma_y}(\gamma_y) = p(\gamma_y) = Gam(\gamma_y | \alpha_{\gamma_y}, \beta_{\gamma_y})$$

$$(5)$$

同様に (4.84) を考慮して、[47], supplement material (32) を参考にして、以下のようにも仮定する。 (平均などは異なるが、(4) も成り立っていることに注意する。)

$$q(W, \gamma_w, \gamma_y) = \prod_{l} \prod_{i} \prod_{j} \tilde{f}(w_{i,j}^{(l)}, \gamma_w)$$

$$\tilde{f}(w_{i,j}^{(l)}, \gamma_w) = \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)} | \tilde{m}_{i,j}^{(l)}, \tilde{v}_{i,j}^{(l)}) Gam(\gamma_w | \tilde{\alpha}_{i,j}^{(l)}, \tilde{\beta}_{i,j}^{(l)})$$
(6)

EP 法では (4.86) を考慮する。

$$q^{\backslash i,j,k}(w_{i,j}^{(l)},\gamma_{w}) \equiv \prod_{l} \prod_{i} \prod_{j} \left(\mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|m^{\backslash i,j,l},v^{\backslash i,j,l}) Gam(\gamma_{w}|\alpha^{\backslash i,j,l},\beta^{\backslash i,j,l}) \right)$$

$$= \frac{q^{old}(w_{i,j}^{(l)},\gamma_{w})}{\tilde{f}(w_{i,j}^{(l)},\gamma_{w})} = \frac{\left(\prod_{l} \prod_{i} \prod_{j} \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|m_{i,j}^{old(l)},v_{i,j}^{old(l)}) \right) Gam(\gamma_{w}|\alpha_{\gamma_{w}^{old}},\beta_{\gamma_{w}^{old}}) Gam(\gamma_{y}|\alpha_{\gamma_{y0}},\beta_{\gamma_{y0}})}{\mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|\tilde{m}_{i,j}^{(l)},\tilde{v}_{i,j}^{(l)}) Gam(\gamma_{w}|\tilde{\alpha}_{i,j}^{(l)},\tilde{\beta}_{i,j}^{(l)})}$$

$$\propto \frac{\mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|m_{i,j}^{old(l)},v_{i,j}^{old(l)})}{\mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|\tilde{m}_{i,j}^{(l)},\tilde{v}_{i,j}^{(l)})} \frac{\gamma_{w}^{\alpha_{\gamma_{w}^{old}}-1}exp(-\beta_{\gamma_{w}^{old}}\gamma_{w})}{\gamma_{w}^{\tilde{\alpha}_{i,j}^{(l)}-1}exp(-\tilde{\beta}_{i,j}^{(l)}\gamma_{w})}}$$

$$= \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)}|(v_{i,j}^{old(l)}-1-(\tilde{v}_{i,j}^{(l)})^{-1})^{-1}(m_{i,j}^{old(l)}v_{i,j}^{old(l)}-1-\tilde{m}_{i,j}^{(l)}(\tilde{v}_{i,j}^{(l)})^{-1}), (v_{i,j}^{old(l)}-1-(\tilde{v}_{i,j}^{(l)})^{-1})^{-1}}$$

$$\gamma_{w}^{(\alpha_{\gamma_{w}^{old}}-\tilde{\alpha}_{i,j}^{(l)}+1)-1}exp(-(\beta_{\gamma_{w}^{old}}-\tilde{\beta}_{i,j})^{(l)}\gamma_{w})$$

これにより [47]supplement material の (36)(37) が求まる。

この $q^{\backslash i,j,k}$ を用いて、 q^{new} のパラメータを求める。

(4.87) を考慮して、

$$r(W, \gamma_w, \gamma_y) = \frac{1}{Z_0} f(w_{i,j}^{(l)}, \gamma_w) q^{\langle i,j,k}(w_{i,j}^{(l)}, \gamma_w)$$

$$= \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)} | 0, \gamma_w^{-1}) \mathcal{N}(w_{i,j}^{(l)} | m^{\langle i,j,l}, v^{\langle i,j,l} \rangle) Gam(\gamma_w | \alpha^{\langle i,j,l}, \beta^{\langle i,j,l} \rangle)$$
(8)

 Z_0 を求めると、

$$Z_{0} = \int f(w_{I,J}^{(L)}, \gamma_{w}) q^{\backslash I,J,L}(w_{I,J}^{(L)}, \gamma_{w}) \prod_{i} \prod_{j} \prod_{l} dw_{i,j}^{(l)} d\gamma_{w} d\gamma_{y}$$

$$= \int \mathcal{N}(w_{I,J}^{(L)}|0, \gamma_{w}^{-1}) q^{\backslash I,J,L}(w_{I,J}^{(L)}, \gamma_{w}) \prod_{i} \prod_{j} \prod_{l} dw_{i,j}^{(l)} d\gamma_{w} d\gamma_{y}$$

$$= \int \mathcal{N}(w_{I,J}^{(L)}|0, \gamma_{w}^{-1}) \mathcal{N}(w_{I,J}^{(L)}|m^{\backslash I,J,L}, v^{\backslash I,J,L}) Gam(\gamma_{w}|\alpha^{\backslash I,J,L}, \beta^{\backslash I,J,L}) dw_{I,J}^{(L)} d\gamma_{w}$$
(9)

I,J,L でないところは $q^{\setminus I,J,L}$ が分布のため、積分すると 1 になる。(というか、正規化定数に含まれる) 一般に (4.60)-(4.62) は成立しているので、

$$\mathbb{E}_r[w_{I,J}^{(L)}] = m_{i,j}^{new(l)} = m^{\backslash I,J,L} + v^{\backslash I,J,L} \frac{\partial}{\partial m^{\backslash I,J,L}} \ln Z_0$$
(10)

同様に(4.63),(4.64),(4.66)も成り立っているので、

$$v_{i,j}^{new(l)} = v^{\backslash I,J,L} - v^{\backslash I,J,L^2} \left(\left(\frac{\partial}{\partial m^{\backslash I,J,L}} \ln Z_0 \right)^2 - 2 \frac{\partial}{\partial v^{\backslash I,J,L}} \ln Z_0 \right)$$
(11)

更に、(4.67) に対して、(4.69)-(4.71) が成立するので、(4.72),(4.73) すなわち、(5.62),(5.63) が成り立つ。

$$\alpha_{\gamma_w}^{new} = \left(\frac{Z_2 Z_0(\alpha^{\backslash I,J,L} + 1)}{Z_1^2 \alpha^{\backslash I,J,L}} - 1\right)^{-1} \tag{12}$$

$$\beta_{\gamma_w}^{new} = \left(\frac{Z_2(\alpha^{\backslash I,J,L}+1)}{Z_1\beta^{\backslash I,J,L}} - \frac{Z_1\alpha^{\backslash I,J,L}}{Z_0\beta^{\backslash I,J,L}}\right)^{-1} \tag{13}$$

最後に \tilde{f} の更新を考える。

Z は正規化定数になる。(同じ値とは限らない。)

これにより、[47], supplement material (38), (39) が成り立っていることがわかる。

これが、公式のコードと一致していることを確認する。

ところで、Z は (5.64) のように計算でき、以下のようになる。(別資料のように本文に誤りがある。[47] の (11) も参照のこと。)

$$Z_0 = \mathcal{N}(m^{\backslash I,J,L}|0,,v^{\backslash I,J,L}) + \frac{\beta_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L)}}{\alpha_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L)} - 1}$$

$$(15)$$

よって、 $v=v^{\backslash I,J,L)}+rac{eta_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L)}}{lpha_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L)}-1}$ として、

$$\ln Z_0 = \ln \mathcal{N}(m^{\backslash I,J,L}|0, v^{\backslash I,J,L}) + \frac{\beta_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L}}{\alpha_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L} - 1})$$

$$= \ln \mathcal{N}(m^{\backslash I,J,L}|0,v) = -\ln v - \frac{1}{2}m^{\backslash I,J,L^2}v + C$$
(16)

これを考えると Z_1, Z_2 とこれらの微分が求まる。

theano 版のコード (prior.py) を確認すると、以下のようになっている。

import numpy as np

class Prior:

def __init__(self, layer_sizes, var_targets):

We refine the factor for the prior variance on the weights

 $n_{samples} = 3.0$

 $v_{observed} = 1.0$

$\alpha_\gamma w0$

$$self.a_w = 2.0 * n_samples$$

β_{γ} w0

self.b_w = 2.0 * n_samples * v_observed

```
# We refine the factor for the prior variance on the noise
       n_{samples} = 3.0
       a_sigma = 2.0 * n_samples
       b_sigma = 2.0 * n_samples * var_targets
       self.a_sigma_hat_nat = a_sigma - 1
       self.b_sigma_hat_nat = -b_sigma
       # We refine the gaussian prior on the weights
       self.rnd_m_w = []
       self.m_w_hat_nat = []
       self.v_w_hat_nat = []
       self.a_w_hat_nat = []
       self.b_w_hat_nat = []
       for size_out, size_in in zip(layer_sizes[ 1 : ], layer_sizes[ : -1 ]):
# 平均mを平均0,分散1でmをサンプリングする。
# 平均は 1/sqrt(size_in + 1) にしかなっていないので更に割る。
           self.rnd_m_w.append(1.0 / np.sqrt(size_in + 1) *
               np.random.randn(size_out, size_in + 1))
# \tilde{f}に関して\tilde{m}/\tilde{v}を0で初期化。
#これは\tilde{m}が (33) のように 0 なので、0 になる。
           self.m_w_hat_nat.append(np.zeros((size_out, size_in + 1)))
# \tilde{f}に関して 1/\tilde{v}を初期化 (33)
           self.v_w_hat_nat.append((self.a_w - 1) / self.b_w * \
               np.ones((size_out, size_in + 1)))
# \tilde{f}に関して (\tilde{α} - 1)を 0 で初期化
           self.a_w_hat_nat.append(np.zeros((size_out, size_in + 1)))
# \tilde{f}に関して\tilde{β}を 0 で初期化
           self.b_w_hat_nat.append(np.zeros((size_out, size_in + 1)))
   def get_initial_params(self):
       m_w = []
       v_w = []
       for i in range(len(self.rnd_m_w)):
           m_w.append(self.rnd_m_w[ i ])
           v_w.append(1.0 / self.v_w_hat_nat[ i ])
```

```
return { 'm_w': m_w, 'v_w': v_w , 'a': self.a_sigma_hat_nat + 1,
           'b': -self.b_sigma_hat_nat }
   def get_params(self):
       m_w = []
       v_w = []
       for i in range(len(self.rnd_m_w)):
           m_w.append(self.m_w_hat_nat[ i ] / self.v_w_hat_nat[ i ])
           v_w.append(1.0 / self.v_w_hat_nat[ i ])
       return { 'm_w': m_w, 'v_w': v_w , 'a': self.a_sigma_hat_nat + 1,
           'b': -self.b_sigma_hat_nat }
#params には q^{old}の m_{i, j}^{1}, v_{i, j}^{1}のデータが含まれる。
    def refine_prior(self, params):
# ここの i はレイヤの数→ 1
       for i in range(len(params[ 'm_w' ])):
# ここの j はレイヤの出力数→ i
           for j in range(params[ 'm_w' ][ i ].shape[ 0 ]):
# ここの k はレイヤの出力数→ j
               for k in range(params[ 'm_w' ][ i ].shape[ 1 ]):
                   # We obtain the parameters of the cavity distribution
# q^{old}に関して v_w が来るので 1 / v_w で逆数を取る。
                   v_w_nat = 1.0 / params[ 'v_w' ][ i ][ j, k ]
# q^{old}に関して mv^{-1}を計算する。
                   m_w_nat = params[ 'm_w' ][ i ][ j, k ] / \
                       params[ 'v_w' ][ i ][ j, k ]
# (36) Ø 1/v
                   v_w_cav_nat = v_w_nat - self.v_w_hat_nat[ i ][ j, k ]
# (36) Ø m/v
                   m_w_cav_nat = m_w_nat - self.m_w_hat_nat[ i ][ j, k ]
# (36) Ø v
                   v_w_cav = 1.0 / v_w_cav_nat
# (36) の m を求める。1/v_w_cav_nat = v_w_cav になる。
                   m_w_cav = m_w_cav_nat / v_w_cav_nat
# (37) に関して、-(\tilde{αγw^{old} - 1)
                   a_w_nat = self.a_w - 1
# (37) に関して、-(\tilde{βγw^{old})
```

 $b_w_n = -self.b_w$

(37) に関して左辺のマイナス (nat がついているので α-1 になっている。)

a_w_cav_nat = a_w_nat - self.a_w_hat_nat[i][j, k]

(37) に関して左辺のマイナス

(37) の左辺を求める。

$$a_w_cav = a_w_cav_nat + 1$$

(37) の左辺を求める。

よく見ていないが値が悪ければ、更新されなくなりそうな。

We obtain the values of the new parameters of the

posterior approximation

ZO の分散

$$v = v_w_cav + b_w_cav / (a_w_cav - 1)$$

Z1 の分散

$$v1 = v_w_cav + b_w_cav / a_w_cav$$

Z2 **の分**散

$$v2 = v_w_{cav} + b_w_{cav} / (a_w_{cav} + 1)$$

log ZO。定数項は無視。ZOはq^{\I,J,L}を見ている。

$$logZ = -0.5 * np.log(v) - 0.5 * m_w_cav**2 / v$$

log Z1。定数項は無視。Z1はq^{\I,J,L}を見ている。

$$logZ1 = -0.5 * np.log(v1) - 0.5 * m_w_cav**2 / v1$$

log Z2。定数項は無視。Z0は q^{\I,J,L}を見ている。

$$logZ2 = -0.5 * np.log(v2) - 0.5 * m_w_cav**2 / v2$$

log ZO を m_w_cav で偏微分

$$d_{\log Z_d_m_w_{av}} = -m_w_{av} / v$$

log Z0 を v_w_cav で偏微分。v に v_w_cav も含まれる。

$$d_{\log Z_d_v_w_{cav}} = -0.5 / v + 0.5 * m_w_{cav} * 2 / v * 2$$

本の(5.59) *_cav を使っていることに注意

$$m_w_new = m_w_cav + v_w_cav * d_logZ_d_m_w_cav$$

本の(5.60) *_cav を使っていることに注意

本の(5.62) *_cav を使っていることに注意

$$a_w_new = 1.0 / (np.exp(logZ2 - 2 * logZ1 + logZ) *$$

```
(a_w_cav + 1) / a_w_cav - 1.0)
# 本の(5.63) *_cav を使っていることに注意
                       b_w_new = 1.0 / (np.exp(logZ2 - logZ1) * 
                            (a_w_cav + 1) / (b_w_cav) - np.exp(logZ1 - \
                           logZ) * a_w_cav / b_w_cav)
# 新しい分散の逆数 (\tilde{f}の更新に備える。)
                       v_w_new_nat = 1.0 / v_w_new
# 新しい平均を v で割る。(\tilde{f}の更新に備える。)
                       m_w_new_nat = m_w_new / v_w_new
#α^{new}の-1(nat) を求める。
                       a_w_new_nat = a_w_new - 1
#\beta^{new}の nat は-にする。
                       b_w_new_nat = -b_w_new
                       # We update the parameters of the approximate factor,
                       # whih is given by the ratio of the new posterior
                       # approximation and the cavity distribution
# (38) m^{new}/v^{new}
                       self.m_w_hat_nat[ i ][ j, k ] = m_w_new_nat - \
                           m_w_cav_nat
# (38) 1/v^{new}
                       self.v_w_hat_nat[ i ][ j, k ] = v_w_new_nat - \
                           v_w_cav_nat
# (39) \alpha^{\text{new}}-1
                       self.a_w_hat_nat[ i ][ j, k ] = a_w_new_nat - \
                           a_w_cav_nat
# (39) -\beta^{new}
                       self.b_w_hat_nat[ i ][ j, k ] = b_w_new_nat - \
                           b_w_cav_nat
                       # We update the posterior approximation
                       params[ 'm_w' ][ i ][ j, k ] = m_w_new
                       params[ 'v_w' ][ i ][ j, k ] = v_w_new
                       self.a_w = a_w_new
                       self.b_w = b_w_new
```

return params

これまでの計算があっているように感じる。

なお、(4) のみを考慮して、 γ_y, γ_w については $p(\gamma_y), p(\gamma_w)$ をそのままにすると述べられている。これについては、[83] の演習 10.37 で一般的に確認されている。(公式の解答もあり、そこまで難しくなさそう。) よって、

$$\alpha_{\gamma_w} = \alpha_{\gamma_{w0}}
\beta_{\gamma_w} = \beta_{\gamma_{w0}}
\alpha_{\gamma_y} = \alpha_{\gamma_{y0}}
\beta_{\gamma_y} = \beta_{\gamma_{y0}}$$
(17)

本、[47],supplement material6 にあるように、

$$m_{i,j}^{(l)} = 0$$

$$v_{i,j}^{(l)} = \infty$$

$$\tilde{m}_{i,j}^{(l)} = 0$$

$$\tilde{v}_{i,j}^{(l)} = \infty$$

$$\tilde{\alpha}_{\gamma_w} = 1$$

$$\tilde{\beta}_{\gamma_w} = 0$$

$$(18)$$

こうしたときに、(33)(34) を考えると、最初の取り込みで、 $q^{\setminus I,J,L}$ は γ_w のガンマ分布になるため、

$$m^{\backslash I,J,L} = 0$$

$$v^{\backslash I,J,L} = \infty$$

$$\alpha_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L} = \alpha_{\gamma_{w0}}$$

$$\beta_{\gamma_w}^{\backslash I,J,L} = \beta_{\gamma_{w0}}$$
(19)

(9) で上記の値を代入すると

$$Z_{0} = \int \mathcal{N}(w_{I,J}^{(L)}|0,\gamma_{w}^{-1})Gam(\gamma_{w}|\alpha^{\backslash I,J,L},\beta^{\backslash I,J,L})dw_{I,J}^{(L)}d\gamma_{w} = \int p(w_{I,J}^{(L)}|\gamma_{w})p(\gamma_{w})dw_{I,J}^{(L)}d\gamma_{w}$$
(20)

となり、 Z_0 は常に 1 になり、 Z_1, Z_2 も 1 になる。(37) に対して、 $\alpha^{\backslash I,J,L} = \alpha_0, \beta^{\backslash I,J,L} = \beta_0$ になる。Z たちが 1 なので、 $\alpha^{new} = \alpha_0, \beta^{new} = \beta_0$ になり、(39) を使うと、 $\tilde{\alpha}^{new} = \tilde{\alpha}^{old} = 1, \tilde{\beta}^{new} = \tilde{\beta}^{old} = 0$

一方、上記の式で、 $w_{I,J}^{(L)}$ の関数だとするとスチューデントの t 分布の定義になる。(例えば、PRML の (2.158)-(2.166),(B.64)-(B.67), それに関する演習問題を参照のこと。)

直接平均を求めると、PRML の (B.65) から q^{new} の平均は 0 になり、 q^{new} の分散は P.100 の ν,λ を使い、(B.66) に代入すると q^{new} の分散 v は

$$v = \frac{1}{\lambda} \frac{\nu}{\nu - 2} = \frac{\beta_0}{\alpha_0} \frac{2\alpha_0}{2\alpha_0 - 2} = \frac{\beta_0}{\alpha_0 - 1}$$
 (21)

となり、(34)が求まる。(39)を考慮すると、(33)も求まる。