ベイズ本 4.2.2 節

ここでは，例として，2 次元ガウス分布に対する変分推論を行う．

$$p(z_1, z_2 \,|\, \mu_1, \mu_2, \Lambda) = \mathcal{N}\left(\left(\begin{array}{c} z_1 \\ z_2 \end{array} \right) \middle| \left(\begin{array}{c} \mu_1 \\ \mu_2 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{array} \right)^{-1} \right) \tag{1}$$

とする．ただし，

- μ_1, μ_2: 平均値
- Λ: 精度行列 $(\Lambda_{12} = \Lambda_{21})$

である．ここで，

$$\boldsymbol{z} \coloneqq \left(\begin{array}{c} z_1 \\ z_2 \end{array} \right), \quad \boldsymbol{\mu} \coloneqq \left(\begin{array}{c} \mu_1 \\ \mu_2 \end{array} \right), \quad \Lambda \coloneqq \left(\begin{array}{cc} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{array} \right)$$

を用いて (1) を整理し，対数をとると，

$$\ln p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\mu}, \Lambda) \propto -\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\Lambda(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}) \tag{2}$$

である．

この分布をある近似分布 $q(z_1, z_2)$ で推定する．

$$q(z_1, z_2) = q(z_1)q(z_2) \tag{3}$$

を仮定する．$q(z_2)$ が与えられた下で，KL ダイバージェンス

$$\mathrm{KL}[q(z_1)q(z_2) \| p(\boldsymbol{z})] \tag{4}$$

を最小にする $q(z_1)$ は，(3) の仮定の下では

$$\ln q(z_1) = \langle \ln p(\boldsymbol{z}) \rangle_{q(z_2)} + \mathrm{const.} \tag{5}$$

である [1, 2]．ただし，(5) の const. は，z_1 に関して定数という意味で用いている．(2) の下で，(5) を実際に計算する．

$$\begin{aligned} \ln q(z_1) &= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (\boldsymbol{z} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\Lambda(\boldsymbol{z} - \boldsymbol{\mu}) q(z_2) dz_2 + \mathrm{const.} \\ &= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \left(\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\Lambda(\boldsymbol{z} - 2\boldsymbol{\mu}) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\Lambda\boldsymbol{\mu} \right) q(z_2) dz_2 + \mathrm{const.} \end{aligned} \tag{6}$$

である．ここで，

$$\int_{\mathbb{R}} (\boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\Lambda\boldsymbol{\mu}) q(z_2) dz = \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\Lambda\boldsymbol{\mu} \tag{7}$$

は z_1 に関して定数である．また，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\Lambda(\boldsymbol{z}-2\boldsymbol{\mu}) &= \begin{pmatrix} z_1 & z_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 - 2\mu_1 \\ z_2 - 2\mu_2 \end{pmatrix} \\ &= \Lambda_{11} z_1^2 - 2\Lambda_{11}\mu_1 z_1 + 2\Lambda_{12} z_1 (z_2 - \mu_2) + \text{const.} \ (\because \Lambda_{12} = \Lambda_{21})\end{aligned}$$

より，

$$\int_{\mathbb{R}} \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\Lambda(\boldsymbol{z}-2\boldsymbol{\mu}) q(z_2) dz_2 = \Lambda_{11} z_1^2 - 2\Lambda_{11}\mu_1 z_1 + 2\Lambda_{12} z_1 (\langle z_2 \rangle - \mu_2) + \text{const.} \tag{8}$$

を得る．(6) – (8) より，

$$\ln q(z_1) = -\frac{1}{2}\left(\Lambda_{11} z_1^2 - 2z_1(\Lambda_{11}\mu_1 - \Lambda_{12}(\langle z_2 \rangle - \mu_2))\right) + \text{const.} \tag{9}$$

を得る．ここで，1 次元ガウス分布 $\mathcal{N}\left(z_1 \middle| \hat{\mu}_1, \hat{\lambda}_1^{-1}\right)$ の対数は，

$$\begin{aligned}\ln \mathcal{N}\left(z_1 \middle| \hat{\mu}_1, \hat{\lambda}_1^{-1}\right) &= -\frac{1}{2}\left(\hat{\lambda}_1 (z_1 - \hat{\mu}_1)^2\right) + \text{const.} \\ &= -\frac{1}{2}\left(\hat{\lambda}_1 z^2 - 2\hat{\lambda}_1 \hat{\mu}_1 z_1\right) + \text{const.}\end{aligned} \tag{10}$$

となる [1]．(9) と (10) を比較すると，

$$q(z_1) = \mathcal{N}\left(z_1 \middle| \hat{\mu}_1, \hat{\lambda}_1^{-1}\right) \tag{11}$$

である．ただし，

$$\hat{\lambda}_1 = \Lambda_{11} \tag{12}$$

$$\hat{\mu}_1 = \mu_1 - \Lambda_{11}^{-1}\Lambda_{12}(\langle z_2 \rangle - \mu_2)(= \langle z_1 \rangle) \tag{13}$$

である．$q(z_2)$ に関しても同様に，

$$q(z_2) = \mathcal{N}\left(z_2 \middle| \hat{\mu}_2, \hat{\lambda}_2^{-1}\right) \tag{14}$$

$$\hat{\lambda}_2 = \Lambda_{22} \tag{15}$$

$$\hat{\mu}_2 = \mu_2 - \Lambda_{22}^{-1}\Lambda_{12}(\langle z_1 \rangle - \mu_1)(= \langle z_2 \rangle) \tag{16}$$

となる．

このことから，近似分布の精度は Λ_{11} および Λ_{22} のまま更新されず，平均値のみ更新される．

以上を踏まえると，2 次元ガウス分布に対する変分推論は以下の疑似コードで表される [2]．

1. $\hat{\mu}_2$ をランダムに初期化する．
2. $\hat{\mu}_1$ を (13) で更新する．
3. $\hat{\mu}_2$ を (16) で更新する．
4. 2, 3 を十分な回数まで繰り返す．

参考文献

[1] A. Suyama, ベイズ推論による機械学習 入門, 講談社, 2017.

[2] A. Suyama, "変分近似（variational approximation）の基本（３） - 作って遊ぶ機械学習。." http://machine-learning.hatenablog.com/entry/2016/01/31/172500. (Accessed on 05/02/2021).