

2.3.3 ガウス変数に対する ベイズの定理

6月20日
鈴木直也

線形ガウスモデル

2.3.1節、2.3.2節においてベクトル x を2つの部分ベクトルに分割したガウス分布を考察してから、条件付分布と周辺分布を求めた*1

ここで、あるガウス周辺分布 $p(x)$ と、平均が x の線形関数で共分散は x とは独立であるようなガウス条件付分布 $p(y|x)$ が与えられたとき、周辺分布 $p(y)$ と条件付分布 $p(x|y)$ を求める問題を考える。

注1:ここで条件付分布の平均は x の線形関数である。

線形ガウスモデル2

周辺分布と条件付分布をそれぞれ

$$p(x) = N(x | \mu, \Lambda^{-1}) \quad (2.99)$$

$$p(y | x) = N(y | Ax + b, L^{-1}) \quad (2.100)$$

とする。ただし、 μ, A, b は平均に関係したパラメータで Λ, L は精度行列である

x が M 次元で y が D 次元なら
行列 A の大きさは $D \times M$ となる。
また行列 L の大きさは $D \times D$

同時分布の表現

x と y 上の同時分布の表現を
求めるため次のように定義する。

$$z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (2.101)$$

そして同時分布の対数を考える。

$$\begin{aligned} \ln p(z) &= \ln p(x) + \ln p(y|x) \\ &= -\frac{1}{2}(x-\mu)^\top \Lambda(x-\mu) - \frac{1}{2}(y-Ax-b)^\top L(y-Ax-b) + \text{const}^*1 \end{aligned} \quad (2.102)$$

注1:このときconstは x や y とは独立の定数である。

z上のガウス分布の精度行列

このガウス分布の精度行列を求めるために前式について考察する。

まず変形すると

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Lambda(x-\mu) - \frac{1}{2}(y-Ax-b)^T L(y-Ax-b) + const \\ & = -\frac{1}{2}(x^T \Lambda x - x^T \Lambda \mu - x \Lambda \mu^T + \mu^T \Lambda \mu) \\ & \quad - \frac{1}{2}(y^T L y - y^T L A x - y^T L b - x^T A^T L y \\ & \quad \quad + x^T A^T L A x + x^T A^T L b - b^T L y + b^T L A x + b^T L b) + const \end{aligned}$$

z上のガウス分布の精度行列(2)

この式の2次の項について注目すると

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}x^T(\Lambda + A^T L A)x - \frac{1}{2}y^T L y + \frac{1}{2}y^T L A x + \frac{1}{2}x^T A^T L y \\ & = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \Lambda + A^T L A & -A^T L \\ -L A & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}z^T R z \quad (2.103) \end{aligned}$$

よってz上のガウス分布の精度行列は

$$R = \begin{pmatrix} \Lambda + A^T L A & -A^T L \\ -L A & L \end{pmatrix} \quad (2.104)$$

となる。

z上のガウス分布の共分散行列

共分散行列は行列の逆行列に関する公式(2.76)を利用して精度行列の逆行列を求めることで得られる。

$$\begin{aligned}\text{cov}[z] = R^{-1} &= \begin{pmatrix} \Lambda + A^T L A & -A^T L \\ -L A & L \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} M & -M(-A^T L)L^{-1} \\ -L^{-1}(-L A)M & L^{-1} + L^{-1}(-L A)M(-A^T L)L^{-1} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

このとき

$$M = [\Lambda + A^T L A - (-A^T L)L^{-1}(-L A)]^{-1} = \Lambda^{-1}$$

のように定義される。

z上のガウス分布の共分散行列(2)

よって

$$\text{cov}[z] = \begin{pmatrix} \Lambda^{-1} & \Lambda^{-1} A^T \\ A \Lambda^{-1} & L^{-1} + A \Lambda^{-1} A^T \end{pmatrix} \quad (2.105)$$

となる。

z上のガウス分布の平均

同様に平均は(2.102)の線形の項を調べることで

$$x^T \Lambda \mu - x^T A^T L b + y^T L b = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \Lambda \mu - A^T L b \\ L b \end{pmatrix} \quad (2.106)$$

で与えられる。また、(2.71)によりzの平均は

$$E[z] = R^{-1} \begin{pmatrix} \Lambda \mu - A^T L b \\ L b \end{pmatrix} \quad (2.107)$$

z上のガウス分布の平均(2)

これに(2.105)を利用すると

$$\begin{aligned} E[z] &= \begin{pmatrix} \Lambda^{-1} & \Lambda^{-1}A^T \\ A\Lambda^{-1} & L^{-1}+A\Lambda^{-1}A^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda\mu - A^T Lb \\ Lb \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Lambda^{-1}(\Lambda\mu - A^T Lb) + \Lambda^{-1}A^T Lb \\ A\Lambda^{-1}(\Lambda\mu - A^T Lb) + (L^{-1}+A\Lambda^{-1}A^T)Lb \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mu \\ A\mu + b \end{pmatrix} \quad (2.108) \end{aligned}$$

を得る。

xの周辺分布

次にxを周辺化した周辺分布 $p(y)$ を求める。

(2.92)、(2.93)より周辺分布 $p(y)$ の平均と共分散は

$$E[y] = A\mu + b \quad (2.109)$$

$$\text{cov}[y] = L^{-1} + A\Lambda^{-1}A^T \quad (2.110)$$

条件付き分布

(2.73)(2.75)を(2.105)と(2.108)に利用すると

$$\begin{aligned} E[x|y] &= \mu - (\Lambda + A^T L A)^{-1} (-A^T L)(y - A\mu - b) \\ &= (\Lambda + A^T L A)^{-1} (\Lambda + A^T L A)\mu - (\Lambda + A^T L A)^{-1} (-A^T L y + A^T L A \mu + A^T L b) \\ &= (\Lambda + A^T L A)^{-1} (A^T L y - A^T L A \mu - A^T L b + \Lambda \mu + A^T L A \mu) \\ &= (\Lambda + A^T L A)^{-1} [A^T L (y - b) + \Lambda \mu] \end{aligned} \quad (2.111)$$

$$\text{cov}[x|y] = (\Lambda + A^T L A)^{-1} \quad (2.112)$$

で与えられる。

まとめ

xの周辺ガウス分布と、xが与えられたときのyの条件付きガウス分布が次式で与えられたとする

$$p(x) = \mathcal{N}(x | \mu, \Lambda^{-1}) \quad (2.113)$$

$$p(y | x) = \mathcal{N}(y | Ax + b, L^{-1}) \quad (2.114)$$

yの周辺分布と、yが与えられたときのxの条件付分布は

$$p(y) = \mathcal{N}(y | A\mu + b, L^{-1} + A\Lambda^{-1}A^T) \quad (2.115)$$

$$p(x | y) = \mathcal{N}(x | \Sigma \{ A^T L(y - b) + \Lambda \mu \}, \Sigma) \quad (2.116)$$

で与えられる。ただし、

$$\Sigma = (\Lambda + A^T L A)^{-1} \quad (2.117)$$