# 第1章

# 補足資料

# 記号の用意

$\mathbb{R}$　実数全体の集合

$\mathbb{N}$　自然数全体の集合

$x$　スカラー

$\boldsymbol{x}$　ベクトル (デフォルトは縦ベクトル)

$X$　確率変数

$\boldsymbol{X}$　行列

$\mathrm{diag}(a_1, \ldots, a_n)$　対角成分が $a_1, \ldots, a_n$ であるような $n \times n$ 行列

$\mathcal{X}$　集合

$\boldsymbol{x}^\top$, $\boldsymbol{X}^\top$　ベクトル $\boldsymbol{x}$ や行列 $\boldsymbol{X}$ の転置

$\boldsymbol{X}^{-1}$　行列 $\boldsymbol{X}$ の逆行列

$|\boldsymbol{X}|$　行列 $\boldsymbol{X}$ の行列式

$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X})$　行列 $\boldsymbol{X}$ の跡（トレース）

$\|\boldsymbol{x}\|$　ベクトル $\boldsymbol{x}$ のユークリッドノルム

$\hat{x}$　推定値または近似値

$\mathbf{1}_A(\boldsymbol{x})$　事象 $A$ の指示関数

$X \sim P$　確率変数 $X$ が確率分布 $P$ に従う

$\mathbb{P}(A)$　事象 $A$ が成り立つ確率

$\mathbb{E}[X]$　確率変数 $X$ の期待値

$\mathrm{Cov}[X, Y]$　確率変数 $X$ と $Y$ の共分散

$\mathrm{H}(X)$　確率変数 $X$ の微分エントロピー

$\mathrm{KL}(X \| Y)$　確率変数 $X$ の確率変数 $Y$ に対するカルバック・ライブラー情報量

$x \propto y$　$x$ が $y$ に比例する

$\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$　平均ベクトル $\mu$, 共分散行列 $\Sigma$ の多変量正規分布

$\mathcal{GP}(\mu, k)$　平均関数 $\mu$, カーネル関数 $k$ のガウス過程

$\mathcal{D}_n$　$n$ 回の目的関数の観測の結果得られた入力と出力のペアのデータ $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$

## 1.1　線形代数の種々の結果

ここでは本文で用いる種々の結果のうち、線形代数の分野でよく知られているものを列挙します。

**定理 1.1.1** (逆行列の微分)**.** 行列 $\boldsymbol{A}$ は正則であって、かつ $|\boldsymbol{A}| > 0$ であるような $n \times n$ 行列とします。このとき、以下が成り立ちます。

- $\frac{\partial}{\partial t} \log |\boldsymbol{A}| = \mathrm{tr}\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1}\right)$
- $\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1} = -\boldsymbol{A}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1}$

*Proof.* 第一式は以下のように示すことができます。まず、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \log |\boldsymbol{A}| &= \frac{1}{|\boldsymbol{A}|} \frac{\partial}{\partial t} |\boldsymbol{A}| \\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{A}|} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial |\boldsymbol{A}|}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} \frac{\partial \boldsymbol{A}_{ij}}{\partial t} \end{aligned} \tag{1.1}$$

です。$\frac{\partial |\boldsymbol{A}|}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}}$ について考えるために、余因子展開を考えます。

$$|\boldsymbol{A}| = \sum_{k=1}^{n} \boldsymbol{A}_{ik} \tilde{\boldsymbol{A}}_{ik} \tag{1.2}$$

ただし $\tilde{\boldsymbol{A}}_{ik}$ は $\boldsymbol{A}$ の $(i, j)$ 余因子で、$\boldsymbol{A}$ の $i$ 行目と $k$ 列目削除して得られる行列の行列式に $(-1)^{i+k}$ をかけたものです。式 (1.2) の両辺を $A_{ij}$ で微分して以下を得ます。

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\boldsymbol{A}|}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} &= \sum_{k=1}^{n} \left( \frac{\partial \boldsymbol{A}_{ik}}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} \tilde{\boldsymbol{A}}_{ik} + \boldsymbol{A}_{ik} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{A}}_{ik}}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n} \left( \delta_{kj} \tilde{\boldsymbol{A}}_{ik} + \boldsymbol{A}_{ik} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{A}}_{ik}}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} \right) \\ &= \tilde{\boldsymbol{A}}_{ij} \end{aligned} \tag{1.3}$$

ここで、$\delta_{kj}$ は $k = j$ のときにのみ $1$ をとりそれ以外では $0$ をとる値であり、$(i, k)$ 余因子は $\boldsymbol{A}_{ij}$ に依存し得ないことを用いました。ここで、$(j, i)$ 余因子を $ij$ 成分とする余因子行列 $\tilde{\boldsymbol{A}}$ は、$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{|\boldsymbol{A}|} \tilde{\boldsymbol{A}}$ を満たしますか

ら、式 (1.3) は

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial |\boldsymbol{A}|}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} &= \tilde{\boldsymbol{A}}_{ij} \\
&= |\boldsymbol{A}|(\boldsymbol{A}^{-1})_{ji}
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

これを式 (1.1) に代入して、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \log |\boldsymbol{A}| &= \frac{1}{|\boldsymbol{A}|} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial |\boldsymbol{A}|}{\partial \boldsymbol{A}_{ij}} \frac{\partial \boldsymbol{A}_{ij}}{\partial t} \\
&= \frac{1}{|\boldsymbol{A}|} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |\boldsymbol{A}|(\boldsymbol{A}^{-1})_{ji} \frac{\partial \boldsymbol{A}_{ij}}{\partial t} \\
&= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial \boldsymbol{A}_{ij}}{\partial t} (\boldsymbol{A}^{-1})_{ji} \\
&= \sum_{i=1}^{n} \left( \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1} \right)_{ii} \\
&= \mathrm{tr} \left( \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1} \right)
\end{aligned}
\tag{1.5}
$$

よって示されました。

　第二式を示すには、$AA^{-1} = \boldsymbol{I}_n$ の両辺を微分します。

$$
\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1} + \boldsymbol{A} \frac{\partial \boldsymbol{A}^{-1}}{\partial t} = \boldsymbol{O} \tag{1.6}
$$

すなわち

$$
\boldsymbol{A} \frac{\partial \boldsymbol{A}^{-1}}{\partial t} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7}
$$

左から $\boldsymbol{A}^{-1}$ をかけて、所望の等式を得ます。

$$
\frac{\partial \boldsymbol{A}^{-1}}{\partial t} = -\boldsymbol{A}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.8}
$$

□

## 1.2　確率論の種々の結果

　ここでは本文で用いる種々の結果のうち、確率論の分野でよく知られて

いるものを列挙します。

**定理 1.2.1 (正規分布の積).** 確率密度関数 $p(\boldsymbol{z})$ が二つの正規分布 $\mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1), \mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2)$ の積に比例することが分かっているならば、$p(\boldsymbol{z})$ 自体も正規分布 $\mathcal{N}\left(\boldsymbol{z} \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right)$ となります。ただし、

$$
\begin{aligned}
\bar{\boldsymbol{\mu}} &= \bar{\Sigma}\left(\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right) \\
\bar{\Sigma} &= \left(\Sigma_1^{-1} + \Sigma_2^{-1}\right)^{-1}
\end{aligned}
\tag{1.9}
$$

です。

*Proof.* 単純に、$\boldsymbol{z}$ に関係のない定数倍を無視して計算していくと得られます。

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{z}) &\propto \mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1)\mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_1)^T\Sigma_1^{-1}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_1)\right) \times \\
&\qquad\qquad \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_2)^T\Sigma_2^{-1}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_2)\right) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left((\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_1)^T\Sigma_1^{-1}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_1) + (\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_2)^T\Sigma_2^{-1}(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\mu}_2)\right)\right) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{z}^T(\Sigma_1^{-1}+\Sigma_2^{-1})z^T - 2z^T\left(\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right)\right)\right) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{z} - \left(\Sigma_1^{-1}+\Sigma_2^{-1}\right)^{-1}\left(\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right)\right)^T\right. \\
&\qquad\qquad (\Sigma_1^{-1}+\Sigma_2^{-1}) \\
&\qquad\qquad\qquad \left.\left(\boldsymbol{z} - \left(\Sigma_1^{-1}+\Sigma_2^{-1}\right)^{-1}\left(\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right)\right)\right) \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{z}-\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)^T\bar{\Sigma}^{-1}\left(\boldsymbol{z}-\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right)
\end{aligned}
\tag{1.10}
$$

最左辺は $\boldsymbol{z}$ について確率密度関数であると分かっているので、$p(\boldsymbol{z}) = \mathcal{N}\left(\boldsymbol{z} \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right)$ です。 □

**定理 1.2.2 (正規分布の比).** 確率密度関数 $p(z)$ が二つの正規分布 $\mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1), \mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2)$ の比に比例することが分かっているならば、$p(z)$ 自体も正規分布 $\mathcal{N}\left(z \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right)$ となります。ただし、

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\mu}} &= \bar{\Sigma}\left(\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 - \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right) \\ \bar{\Sigma} &= \left(\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{1.11}$$

です。

*Proof.* $p(z) \propto \mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1)/\mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2)$ であるとき、$p(z)$ も正規分布になることは、指数部分が $z$ の二次式であって、かつこれ以外に $z$ への依存がないことから明らかです。そこで $p(z) = \mathcal{N}\left(z \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right)$ とおいて、$\bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}$ を求めます。

$$\begin{aligned} &\mathcal{N}\left(z \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right) \propto \mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1)/\mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2) \\ &\Leftrightarrow \mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1) \propto \mathcal{N}\left(z \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right)\mathcal{N}(z \mid \boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2) \end{aligned} \tag{1.12}$$

定理 1.2.1 より、以下が成り立ちます。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_1 &= \Sigma_1\left(\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}} + \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right) \\ \Sigma_1 &= \left(\bar{\Sigma}^{-1} + \Sigma_2^{-1}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{1.13}$$

これを整理して、以下を得ます。

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\mu}} &= \bar{\Sigma}\left(\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 - \Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2\right) \\ \bar{\Sigma} &= \left(\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{1.14}$$

□

**定理 1.2.3 (正規分布に対するカルバック・ライブラー情報量の最小化).** $\mathbb{R}$ 上の確率分布 $p(x)$ が与えられており、平均と分散が有限であるとします。$\mathbb{R}$ 上の正規分布 $q(x)$ の中で、$p(x)$ の $q(x)$ に対するカルバック・ライブラー情報量 $\mathrm{KL}(p(x)\|q(x))$ を最小化するものは、$p(x)$ と平均と分散が一致するものです。[a]

$a$ 　証明は省略しますが、この定理はより高次元でも成立します。

*Proof.* $p(x)$ の平均を $m$, 分散を $v^2$ とします。また $q(x) = \mathcal{N}(x \mid \mu, \sigma^2)$ と置きます。我々が最小化したい式は以下のように変形できます。

$$\begin{aligned}\mathrm{KL}\left(p(x) \| q(x)\right) &= \int p(x) \log\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right) dx \\ &= \int p(x) \log\left(p(x)\sqrt{2\pi\sigma^2} \exp\left(\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\right) dx \\ &= \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2) \\ &\qquad + \int \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} p(x) dx + \int p(x) \log p(x) dx\end{aligned} \tag{1.15}$$

最右辺を $\mu, \sigma^2$ でそれぞれ微分して以下を得ます。

$$\begin{cases} \int \frac{x-\mu}{\sigma^2} p(x) dx = \frac{1}{\sigma^2}(m-\mu) \\ \frac{1}{2\sigma^2} - \int \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^4} p(x) dx = \frac{1}{2\sigma^4}\left(\sigma^2 - v^2\right) \end{cases} \tag{1.16}$$

よってそれぞれ $\mu = m, \sigma^2 = v^2$ で 0 となり、これらを境に上式は負から正に符号変化するので、このとき最小値が達成されます。 □

**定理 1.2.4 (正規分布と標準正規分布の累積分布関数の積の積分).** $\sigma \neq 0, v \neq 0$ の時、以下の式が成り立ちます。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx = \Phi\left(\frac{\mu - m}{v\sqrt{1 + \frac{\sigma^2}{v^2}}}\right) \tag{1.17}$$

*Proof.* まず $v > 0$ とします。計算すべき左辺は以下のように変形されます。

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \int_{-\infty}^{\frac{x-m}{v}} \mathcal{N}\left(y \mid 0, 1\right) dydx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \int_{-\infty}^{x} \mathcal{N}\left(y \mid m, v^2\right) dydx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{2\pi\sigma v} \exp\left(-\frac{(y-m)^2}{2v^2} - \frac{(x-\mu)^2)}{2\sigma^2}\right) dydx
\end{aligned} \tag{1.18}
$$

$z = y - x + \mu - m, w = x - \mu$ と変数変換します。

$$
\begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - \mu \\ y - x + \mu - m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\mu \\ \mu - m \end{pmatrix} \tag{1.19}
$$

より、この変換のヤコビアンは

$$
\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} = 1 \tag{1.20}
$$

です。また、積分領域は $\{(x, y) \mid y \leq x\}$ であるので、

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \left(\begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\mu \\ \mu - m \end{pmatrix}\right) \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w + \mu \\ z - \mu + m \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} w + \mu \\ w + z + m \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{1.21}
$$

より、$\{(w, z) \mid \infty \leq w \leq \infty, -\infty \leq z \leq \mu - m\}$ と変換されます。よって、以下を得ます。

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{2\pi\sigma v} \exp\left(-\frac{(y-m)^2}{2v^2} - \frac{(x-\mu)^2)}{2\sigma^2}\right) dydx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\mu-m} \frac{1}{2\pi\sigma v} \exp\left(-\frac{(w+z)^2}{2v^2} - \frac{w^2}{2\sigma^2}\right) dzdw \\
&= \int_{-\infty}^{\mu-m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\sigma v} \exp\left(-\frac{(w+z)^2}{2v^2} - \frac{w^2}{2\sigma^2}\right) dwdz \\
&= \int_{-\infty}^{\mu-m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\sigma v} \exp\left(-\frac{1}{2}\begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \frac{1}{v^2}+\frac{1}{\sigma^2} & \frac{1}{v^2} \\ \frac{1}{v^2} & \frac{1}{v^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix}\right) dwdz
\end{aligned}
\tag{1.22}
$$

ここで、

$$
\begin{vmatrix} \frac{1}{v^2}+\frac{1}{\sigma^2} & \frac{1}{v^2} \\ \frac{1}{v^2} & \frac{1}{v^2} \end{vmatrix} = \left(\frac{1}{v^2}+\frac{1}{\sigma^2}\right)\frac{1}{v^2} - \frac{1}{v^2}\frac{1}{v^2} = \frac{1}{v^2\sigma^2} \tag{1.23}
$$

であるため、

$$
\begin{pmatrix} \frac{1}{v^2}+\frac{1}{\sigma^2} & \frac{1}{v^2} \\ \frac{1}{v^2} & \frac{1}{v^2} \end{pmatrix}^{-1} = v^2\sigma^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{v^2} & -\frac{1}{v^2} \\ -\frac{1}{v^2} & \frac{1}{v^2}+\frac{1}{\sigma^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma^2 & -\sigma^2 \\ -\sigma^2 & v^2+\sigma^2 \end{pmatrix} \tag{1.24}
$$

よって、式 (1.22) は以下のように変形されます。

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\mu-m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi\sigma v}\exp\left(-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}w\\z\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}\frac{1}{v^2}+\frac{1}{\sigma^2} & \frac{1}{v^2}\\ \frac{1}{v^2} & \frac{1}{v^2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}w\\z\end{pmatrix}\right)dwdz\\
&=\int_{-\infty}^{\mu-m}\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{N}\left(\begin{pmatrix}w\\z\end{pmatrix}\mid\mathbf{0},\begin{pmatrix}\sigma^2 & -\sigma^2\\ -\sigma^2 & v^2+\sigma^2\end{pmatrix}\right)dwdz\\
&=\int_{-\infty}^{\mu-m}\mathcal{N}\left(z\mid 0,v^2+\sigma^2\right)dz\\
&=\int_{-\infty}^{\frac{\mu-m}{\sqrt{v^2+\sigma^2}}}\mathcal{N}(z\mid 0,1)dz\\
&=\Phi\left(\frac{\mu-m}{\sqrt{v^2+\sigma^2}}\right)\\
&=\Phi\left(\frac{\mu-m}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}}\right)
\end{aligned}
\tag{1.25}
$$

以上から、$v>0$ の時に等式が示されました。$v<0$ の時は、$\Phi(-z)=1-\Phi(z)$ を用いると以下のように計算できます。

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{N}\left(x\mid\mu,\sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx\\
&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{N}\left(x\mid\mu,\sigma^2\right)\left(1-\Phi\left(\frac{x-m}{-v}\right)\right)dx\\
&=1-\Phi\left(\frac{\mu-m}{-v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}}\right)\\
&=\Phi\left(\frac{\mu-m}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}}\right)
\end{aligned}
\tag{1.26}
$$

□

**定理 1.2.5 (正規分布と標準正規分布の累積分布関数の積の一次モーメント).** $\sigma\neq 0, v\neq 0$ とします。また

$$z^* = \frac{\mu - m}{v\sqrt{1 + \frac{\sigma^2}{v^2}}} \tag{1.27}$$

と置きます。このとき、以下の式が成り立ちます。

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx = \mu\Phi(z^*) + \frac{\sigma^2\phi(z^*)}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}} \tag{1.28}$$

ただし、$\phi(z)$ は標準正規分布の確率密度関数です。

*Proof.* 示すべき等式の右辺を $I_1$ と置きます。定理 1.2.4 より、以下の式が成り立ちます。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx = \Phi(z^*) \tag{1.29}$$

両辺を $\mu$ で微分します。被積分関数は連続関数なので微分と積分は交換できて以下が成り立ちます。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial\mu}\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx = \frac{\partial\Phi(z^*)}{\partial\mu} \tag{1.30}$$

式 (1.30) の左辺は

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial\mu}\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x-\mu}{\sigma^2}\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx \\
&= \frac{1}{\sigma^2}\left(I_1 - \mu\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx\right) \\
&= \frac{1}{\sigma^2}\left(I_1 - \mu\Phi(z^*)\right)
\end{aligned} \tag{1.31}$$

となります。式 (1.30) の右辺は

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi(z^*)}{\partial \mu} &= \phi(z^*)\frac{\partial z^*}{\partial \mu} \\
&= \phi(z^*)\frac{1}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}} \\
&= \frac{\phi(z^*)}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}}
\end{aligned} \tag{1.32}
$$

よって式 (1.31) と式 (1.32) を合わせて以下を得ます。

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\sigma^2}\left(I_1 - \mu\Phi(z^*)\right) = \frac{\phi(z^*)}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}} \\
&\Leftrightarrow I_1 = \mu\Phi(z^*) + \frac{\sigma^2\phi(z^*)}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}}
\end{aligned} \tag{1.33}
$$

よって示されました。 □

**定理 1.2.6 (正規分布と標準正規分布の累積分布関数の積の二次モーメント).** $\sigma \neq 0, v \neq 0$ とします。また

$$
z^* = \frac{\mu - m}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}} \tag{1.34}
$$

と置きます。また定理 1.2.5 の左辺を $I_1$ と置きます。このとき、以下の式が成り立ちます。

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right)\Phi\left(\frac{x-m}{v}\right)dx \\
&= 2\mu I_1 + (\sigma^2 - \mu^2)\Phi(z^*) - \frac{\sigma^4 z^*\phi(z^*)}{v^2+\sigma^2}
\end{aligned} \tag{1.35}
$$

*Proof.* 示したい等式の左辺を $I_2$ と置きます。定理 1.2.5 の証明中の式 (1.30) より、

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \mu} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx = \frac{\partial \Phi(z^*)}{\partial \mu} \\
&\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x-\mu}{\sigma^2} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx = \frac{\phi(z^*)}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}}
\end{aligned} \tag{1.36}
$$

両辺をさらに $\mu$ で微分します。

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{x-\mu}{\sigma^2} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx = \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{\phi(z^*)}{v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}} \\
&\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{1}{\sigma^2} + \frac{(x-\mu)^2}{\sigma^4}\right) \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx \\
&\quad = \frac{\phi'(z^*)}{\left(v\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{v^2}}\right)^2} \\
&\Leftrightarrow \frac{1}{\sigma^4} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx \\
&\quad - \frac{2\mu}{\sigma^4} \int_{-\infty}^{\infty} x \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx \\
&\qquad + \left(\frac{\mu^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}\left(x \mid \mu, \sigma^2\right) \Phi\left(\frac{x-m}{v}\right) dx \\
&\quad = \frac{-z^* \phi(z^*)}{v^2+\sigma^2} \\
&\Leftrightarrow \frac{1}{\sigma^4} I_2 - \frac{2\mu}{\sigma^4} I_1 + \left(\frac{\mu^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2}\right) \Phi(z^*) = \frac{-z^* \phi(z^*)}{v^2+\sigma^2} \\
&\Leftrightarrow I_2 = 2\mu I_1 + (\sigma^2 - \mu^2)\Phi(z^*) - \frac{\sigma^4 z^* \phi(z^*)}{v^2+\sigma^2}
\end{aligned}
$$

よって示されました。 □

## 1.3　書籍 3.6 節の詳細

本章では、書籍の 3.6 節にて扱ったエントロピー探索関数の計算の詳細を説明します。

さて、我々が計算したかったエントロピー探索獲得関数の値は以下でし

た。

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n)}\left[\mathrm{KL}(p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))\|u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*))\right] \\
&= \mathbb{E}_{p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n)}\left[\int p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y)) \log \frac{p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))}{u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*)} d\boldsymbol{x}_*\right]
\end{aligned} \tag{1.37}
$$

式 (1.37) の期待値の中身 $\mathrm{KL}(p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))\|u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*))$ を Monte Carlo 法により近似することを考えましょう。我々は、目的関数の定義域を $\Delta$ 個の点 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_\Delta$ で近似しました。それらを用いて以下のように積分を近似します。

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{KL}(p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))\|u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*)) \\
&= \int p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y)) \log \frac{p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))}{u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*)} d\boldsymbol{x}_* \\
&\simeq \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{\Delta} p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y)) \log \frac{p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))}{u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_i)}
\end{aligned} \tag{1.38}
$$

$u_{\mathcal{X}}$ は $\mathcal{X}$ 上の一様分布なので、$u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_i) = 1/|\mathcal{X}|$ を代入して

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{KL}(p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))\|u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*)) \\
&\simeq \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{\Delta} p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y)) \log \left(|\mathcal{X}| p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x}, y))\right)
\end{aligned} \tag{1.39}
$$

これを式 (1.37) に代入すると以下を得ます。

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n)}\left[\mathrm{KL}(p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y)) \| u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*))\right] \\
&\simeq \mathbb{E}_{p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n)}\Big[\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{\Delta} p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y)) \\
&\qquad\qquad \log\left(|\mathcal{X}| p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y))\right)\Big] \\
&= \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{\Delta} \mathbb{E}_{p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n)}\Big[p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y)) \\
&\qquad\qquad \times \log\left(|\mathcal{X}| p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y))\right)\Big] \\
&= \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y)) \\
&\qquad\qquad \times \log\left(|\mathcal{X}| p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y))\right) p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n) dy
\end{aligned}
\tag{1.40}
$$

我々は、$p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y))$ を期待値伝播法を用いて $q(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}'_n, \boldsymbol{\kappa'}_n)$ として近似したのでした。この近似を用いると、さらに以下のように変形できます。

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n)}\left[\mathrm{KL}(p_{\min}(\boldsymbol{x}_*|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y)) \| u_{\mathcal{X}}(\boldsymbol{x}_*))\right] \\
&\simeq \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y)) \\
&\qquad\qquad \times \log\left(|\mathcal{X}| p_{\min}(\boldsymbol{x}_i|\mathcal{D}_n \cup (\boldsymbol{x},y))\right) p(y|\boldsymbol{x},\mathcal{D}_n) dy
\end{aligned}
\tag{1.41}
$$

また、期待値伝播法を用いることで、$q$ のパラメータ $\boldsymbol{\mu}'_n, \boldsymbol{\kappa'}_n$ による微分を計算することができました。すなわち、以下の値が計算できていることになります。

1. $\frac{\partial q}{\partial \boldsymbol{\mu}'_n}$: 第 $i$ 成分が $\frac{\partial q}{\partial \mu'_n(\boldsymbol{x}_i)}$ であるような $\Delta$ 次元ベクトル
2. $\frac{\partial^2 q}{\partial \boldsymbol{\mu'}^2_n}$: $ij$ 成分が $\frac{\partial^2 q}{\partial \mu'_n(\boldsymbol{x}_i)\mu'_n(\boldsymbol{x}_j)}$ であるような $\Delta \times \Delta$ 行列
3. $\frac{\partial q}{\partial \boldsymbol{\kappa'}_n}$: $ij$ 成分が $\frac{\partial q}{\partial \kappa'_n(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)}$ であるような $\Delta \times \Delta$ 行列

エントロピー探索の元論文 [1] では、$y$ の関数として $q(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}'_n, \boldsymbol{\kappa'}_n)$ を一次

近似[1] し、これを上式に代入することで積分を近似しています。以降の計算は省きますが、上記の $q$ のパラメータ $\boldsymbol{\mu}'_n, \boldsymbol{\kappa}'_n$ による微分だけでなく、パラメータ $\boldsymbol{\mu}'_n, \boldsymbol{\kappa}'_n$ の $y$ による微分などを計算する必要があり、非常に煩雑です。計算量としては $\Delta \times \Delta$ 行列の積計算が支配的で、$O(\Delta^3)$ です。

以上のように、エントロピー探索獲得関数の関数値の計算は、各点 $\boldsymbol{x}$ に対して、期待値伝播法による近似の部分が支配的で $O(\Delta^4)$ かかります。獲得関数の勾配の計算をしようと思えば、さらに近似計算が必要となり重い計算が必要となります。

## 1.4　書籍 3.7 節の詳細

### 1.4.1　書籍の式 (3.136) の計算

書籍の 3.7 節の 3.7.4 項における $p(\boldsymbol{f} \mid \mathcal{D}_n, C_1, C_2)$ を近似した式 (3.136) が $\boldsymbol{f}$ についての正規分布であることを計算によって示します。まず、$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}|\boldsymbol{w}=0,\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}}$ は $\boldsymbol{z}$ について線形であるため $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}|\boldsymbol{w}=0,\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}} = A\boldsymbol{z} + \boldsymbol{b}$ と置けます。さらに $\Sigma_{\boldsymbol{f}|\boldsymbol{w}=0,\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}}$ は $\boldsymbol{z}$ に依存しないので、簡単のため $\Sigma_{\boldsymbol{f}|\boldsymbol{w}=0,\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}} = C$ と置きます。

1　この近似計算には**伊藤の補題** [2] が用いられていますが、著者の確認した限りでは、添字空間が多次元のガウス過程に対して適用することは一般には不可能であるため、その正当性には疑念が残ります。

$$
\begin{aligned}
&\int \mathcal{N}\left(\boldsymbol{f} \mid \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}|\boldsymbol{w}=0,\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}}, \Sigma_{\boldsymbol{f}|\boldsymbol{w}=0,\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}}\right) \mathcal{N}\left(\boldsymbol{z} \mid \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\Sigma}\right) d\boldsymbol{z} \\
&\propto \int \exp\left(-\frac{1}{2}\left((\boldsymbol{f} - A\boldsymbol{z} - \boldsymbol{b})^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - A\boldsymbol{z} - \boldsymbol{b}) + (\boldsymbol{z} - \bar{\boldsymbol{\mu}})^T \bar{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{z} - \bar{\boldsymbol{\mu}})\right)\right) d\boldsymbol{z} \\
&\propto \int \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{z}^T(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})\boldsymbol{z}\right.\right. \\
&\qquad\qquad \left.\left. -2\left((\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})^T C^{-1} A + \bar{\boldsymbol{\mu}}^T \bar{\Sigma}^{-1}\right)\boldsymbol{z} + (\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})\right)\right) d\boldsymbol{z} \\
&\propto \left[\int \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\left(\boldsymbol{z} - (A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\left(A^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b}) + \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right)^T\right.\right.\right. \\
&\quad \left.\left.\left.(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})\left(\boldsymbol{z} - (A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\left(A^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b}) + \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right)\right)\right)\right] \\
&\times \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})\right. \\
&\left. +\frac{1}{2}\left(A^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b}) + \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)^T (A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\left(A^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b}) + \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b})\right. \\
&\left. +\frac{1}{2}\left(A^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b}) + \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)^T (A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\left(A^T C^{-1}(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{b}) + \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{f}^T(C^{-1} - C^{-1}A(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1} A^T C^{-1})\boldsymbol{f}\right.\right. \\
&\quad \left.\left. -2\left(C^{-1}\boldsymbol{b} - C^{-1}A(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}(A^T C^{-1}\boldsymbol{b} - \bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}})\right)^T \boldsymbol{f}\right)\right) \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{f}^T(C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\boldsymbol{f}\right.\right. \\
&\quad \left.\left. -2\left((C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\boldsymbol{b} + C^{-1}A(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)^T \boldsymbol{f}\right)\right) \\
&\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\left(\boldsymbol{f} - (C + A\bar{\Sigma}A^T)\left((C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\boldsymbol{b} + C^{-1}A(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right)^T\right.\right. \\
&\left.\left.(C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\left(\boldsymbol{f} - (C + A\bar{\Sigma}A^T)\left((C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\boldsymbol{b} + C^{-1}A(A^T C^{-1} A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right)\right)\right)\right)
\end{aligned}
$$

よって、書籍の式 (3.136) は $\boldsymbol{f}$ について確率分布なので、その分布は正規分布であり、平均ベクトルと共分散行列はそれぞれ

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}} &= (C + A\bar{\Sigma}A^T) \\
&\qquad \times \left((C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\boldsymbol{b} + C^{-1}A(A^TC^{-1}A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right) \\
\Sigma_{\boldsymbol{f}} &= C + A\bar{\Sigma}A^T
\end{aligned}
\tag{1.42}
$$

です。平均ベクトルは計算を行うとより簡単にできて以下のようになります。

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}} \\
&= (C + A\bar{\Sigma}A^T)\left((C + A\bar{\Sigma}A^T)^{-1}\boldsymbol{b} + C^{-1}A(A^TC^{-1}A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}}\right) \\
&= \boldsymbol{b} + (C + A\bar{\Sigma}A^T)C^{-1}A(A^TC^{-1}A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}} \\
&= \boldsymbol{b} + (A + A\bar{\Sigma}A^TC^{-1}A)(A^TC^{-1}A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}} \\
&= \boldsymbol{b} + A\bar{\Sigma}(\bar{\Sigma}^{-1} + A^TC^{-1}A)(A^TC^{-1}A + \bar{\Sigma}^{-1})^{-1}\bar{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{\mu}} \\
&= \boldsymbol{b} + A\bar{\boldsymbol{\mu}}
\end{aligned}
\tag{1.43}
$$

したがって、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}} &= A\bar{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{b} \\
\Sigma_{\boldsymbol{f}} &= C + A\bar{\Sigma}A^T
\end{aligned}
\tag{1.44}
$$

として、書籍の式 (3.136) は正規分布 $\mathcal{N}\left(\boldsymbol{f} \mid \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}}, \Sigma_{\boldsymbol{f}}\right)$ と近似されます。

### 1.4.2　書籍の式 (3.138) の計算

書籍の式 (3.138) が

$$
\frac{1}{Z}\Phi\left(\frac{f(\boldsymbol{x}) - m}{v}\right)\mathcal{N}\left(f(\boldsymbol{x}) \mid \mu, \sigma^2\right) \tag{1.45}
$$

の形の確率分布となることは、以下のような計算によって確かめることができます。簡単のため $\boldsymbol{f} = (f(\boldsymbol{x}), f(\boldsymbol{x}_*)) = (f_1, f_2)^T, \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}} = (\mu_{f1}, \mu_{f2})^T, \Sigma_{\boldsymbol{f}} = \begin{pmatrix} \Sigma_{f11} & \Sigma_{f12} \\ \Sigma_{f21} & \Sigma_{f22} \end{pmatrix}$ と置きます。すると

$$
\begin{aligned}
&\int_{f(\boldsymbol{x}_*)\leq f(\boldsymbol{x})} \mathcal{N}(\boldsymbol{f} \mid \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}}, \Sigma_{\boldsymbol{f}}) df(\boldsymbol{x}_*) \\
&= \int_{f_2\leq f_1} \mathcal{N}\left(\boldsymbol{f} \mid \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}}, \Sigma_{\boldsymbol{f}}\right) df_2 \\
&= \int_{f_2\leq f_1} \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \mu_{f1} \\ \mu_{f2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_{f11} & \Sigma_{f12} \\ \Sigma_{f21} & \Sigma_{f22} \end{pmatrix}\right) df_2 \\
&\propto \int_{-\infty}^{f_1} \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{f}-\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}})^T\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{f}-\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}})\right) df_2 \\
&\propto \int_{-\infty}^{f_1} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{f}^T\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}\boldsymbol{f} - 2\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}}^T\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}\boldsymbol{f}\right)\right) df_2
\end{aligned}
\tag{1.46}
$$

簡単のため $A = \Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \boldsymbol{b} = \Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}} = (b_1, b_2)^T$ と置きます。共分散行列の対称性より $A_{12} = A_{21}$ です。すると

$$
\begin{aligned}
&d\int_{-\infty}^{f_1}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{f}^T\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}\boldsymbol{f}-2\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}}^T\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}\boldsymbol{f}\right)\right)df_2\\
&=\int_{-\infty}^{f_1}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{f}^TA\boldsymbol{f}-2\boldsymbol{b}^T\boldsymbol{f}\right)\right)df_2\\
&=\int_{-\infty}^{f_1}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(A_{22}f_2^2+2A_{12}f_1f_2+A_{11}f_1^2-2b_1f_1-2b_2f_2\right)\right)df_2\\
&=\int_{-\infty}^{f_1}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(A_{22}f_2^2-2(b_2-A_{12}f_1)f_2+A_{11}f_1^2-2b_1f_1\right)\right)df_2\\
&=\left[\int_{-\infty}^{f_1}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(A_{22}\left(f_2-A_{22}^{-1}(b_2-A_{12}f_1)\right)^2\right)\right)df_2\right]\\
&\times\exp\left(-\frac{1}{2}(A_{11}f_1^2-2b_1f_1)+\frac{1}{2}A_{22}^{-1}(b_2-A_{12}f_1)^2\right)\\
&\propto\left[\int_{-\infty}^{f_1}\mathcal{N}\left(f_2\mid A_{22}^{-1}(b_2-A_{12}f_1),A_{22}^{-1}\right)df_2\right]\\
&\times\exp\left(-\frac{1}{2}\left((A_{11}-A_{22}A_{12}^2)f_1^2-2(b_1-A_{22}A_{12}b_2)f_1\right)\right)\\
&\propto\left[\int_{-\infty}^{\sqrt{A_{22}}(f_1-A_{22}^{-1}(b_2-A_{12}f_1))}\mathcal{N}\left(x\mid 0,1\right)dx\right]\\
&\times\mathcal{N}\left(f_1\mid (A_{11}-A_{22}^{-1}A_{12}^2)^{-1}(b_1-A_{22}^{-1}A_{12}b_2),(A_{11}-A_{22}^{-1}A_{12}^2)^{-1}\right)\\
&=\Phi\left(\sqrt{A_{22}}(f_1-A_{22}^{-1}(b_2-A_{12}f_1))\right)\\
&\qquad\times\mathcal{N}\left(f_1\mid (A_{11}-A_{22}^{-1}A_{12}^2)^{-1}(b_1-A_{22}^{-1}A_{12}b_2),\right.\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\left.(A_{11}-A_{22}^{-1}A_{12}^2)^{-1}\right)
\end{aligned}
$$

よって、以下のように$\mu,\sigma,m,v$を取れば、これは$\Phi(\left(\frac{f_1-m}{v}\right)\mathcal{N}(f_1\mid\mu,\sigma^2)$です。

$$
\begin{cases}
\mu &= (A_{11}-A_{22}^{-1}A_{12}^2)^{-1}(b_1-A_{22}^{-1}A_{12}b_2)\\
\sigma &= \sqrt{(A_{11}-A_{22}^{-1}A_{12}^2)^{-1}}\\
m &= \frac{A_{22}^{-1}}{1+A_{22}^{-1}A_{12}}b_2\\
v &= \frac{1}{\sqrt{A_{22}}(1+A_{22}^{-1}A_{12})}
\end{cases}
\tag{1.47}
$$

$A, \boldsymbol{b}$ はそれぞれ

$$\begin{aligned}
A &= \Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1} \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \begin{pmatrix} \Sigma_{f22} & -\Sigma_{f12} \\ -\Sigma_{f21} & \Sigma_{f11} \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{b} &= \Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{f}} \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \begin{pmatrix} \Sigma_{f22} & -\Sigma_{f12} \\ -\Sigma_{f21} & \Sigma_{f11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_{f1} \\ \mu_{f2} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \begin{pmatrix} \Sigma_{f22}\mu_{f1} - \Sigma_{f12}\mu_{f2} \\ -\Sigma_{f21}\mu_{f1} + \Sigma_{f11}\mu_{f2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{1.48}$$

であるため、$\mu, \sigma, m, v$ は以下のように計算されます。

$$
\begin{aligned}
\mu &= (A_{11} - A_{22}^{-1} A_{12}^2)^{-1}(b_1 - A_{22}^{-1} A_{12} b_2) \\
&= |A|^{-1}(A_{22} b_1 - A_{12} b_2) \\
&= |\Sigma_{\boldsymbol{f}}| \left( \frac{\Sigma_{f11}}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} b_1 + \frac{\Sigma_{f12}}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} b_2 \right) \\
&= \Sigma_{f11} b_1 + \Sigma_{f12} b_2 \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \left( \Sigma_{f11}(\Sigma_{f22}\mu_{f1} - \Sigma_{f12}\mu_{f2}) + \Sigma_{f12}(-\Sigma_{f12}\mu_{f1} + \Sigma_{f11}\mu_{f2}) \right) \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \left( \Sigma_{f11}\Sigma_{f22} - \Sigma_{f12}\Sigma_{f21} \right) \mu_{f1} \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} |\Sigma_{\boldsymbol{f}}| \mu_{f1} \\
&= \mu_{f1} \\
\sigma^2 &= (A_{11} - A_{22}^{-1} A_{12}^2)^{-1} \\
&= A_{22}(A_{11} A_{22} - A_{12}^2)^{-1} \\
&= A_{22} |A|^{-1} \\
&= \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \Sigma_{f11} |\Sigma_{\boldsymbol{f}}| \\
&= \Sigma_{f11} \\
m &= \frac{A_{22}^{-1}}{1 + A_{22}^{-1} A_{12}} b_2 \\
&= \frac{1}{A_{22} + A_{12}} b_2 \\
&= \frac{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|}{\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12}} \frac{1}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} (-\Sigma_{f12}\mu_{f1} + \Sigma_{f11}\mu_{f2}) \\
&= \frac{\Sigma_{f11}\mu_{f2} - \Sigma_{f12}\mu_{f1}}{\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12}} \\
v^2 &= \frac{1}{A_{22}(1 + A_{22}^{-1} A_{12})^2} \\
&= \frac{A_{22}}{(A_{22} + A_{12})^2} \\
&= \frac{\frac{\Sigma_{f11}}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|}}{\left( \frac{\Sigma_{f11}}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} - \frac{\Sigma_{f12}}{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|} \right)^2} \\
&= \frac{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}| \Sigma_{f11}}{(\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12})^2}
\end{aligned}
$$

$$(1.49)$$

よって、定理 1.2.4 を用いると正規化定数 $Z$ も計算できて、以下を得ます。

$$p(f(x) \mid \mathcal{D}_n, C_1, C_2, C_3) \simeq \frac{1}{Z}\Phi(\left(\frac{f_1 - m}{v}\right)\mathcal{N}(f_1 \mid \mu_{f1}, \Sigma_{f11}) \quad (1.50)$$

ただし、

$$\begin{cases} m &= \frac{\Sigma_{f11}\mu_{f2} - \Sigma_{f12}\mu_{f1}}{\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12}} \\ v &= \frac{\sqrt{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|\Sigma_{f11}}}{\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12}} \\ Z &= \Phi\left(\frac{\mu_{f1} - m}{v\sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}}\right) \end{cases} \quad (1.51)$$

です。

### 1.4.3　書籍の式 (3.142) の計算

書籍の式 (3.142) を定める $\mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*), \sigma_n^2(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*)$ はそれぞれ以下のようにして計算することができます。簡単のため $z_* = \frac{\mu_{f1} - m}{v\sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}}$ と置きます。書籍の式 (3.141) より $Z = \Phi(z_*)$ です。定理 1.2.5 より、

$$\begin{aligned} \mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*) &= \frac{1}{Z}\int f_1\Phi(\left(\frac{f_1 - m}{v}\right)\mathcal{N}(f_1 \mid \mu_{f1}, \Sigma_{f11})df_1 \\ &= \frac{1}{\Phi(z_*)}\left(\mu_{f1} + \Phi(z_*) + \frac{\Sigma_{f11}\phi(z_*)}{v\sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}}\right) \\ &= \mu_{f1} + \frac{\Sigma_{f11}\phi(z_*)}{\Phi(z_*)v\sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \end{aligned} \quad (1.52)$$

また、定理 1.2.6 より

$$
\begin{aligned}
&\sigma_n^2(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*) \\
&= \frac{1}{Z} \int f_1^2 \Phi \left( \frac{f_1 - m}{v} \right) \mathcal{N}(f_1 \mid \mu_{f1}, \Sigma_{f11}) df_1 - \mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*)^2 \\
&= \frac{1}{\Phi(z_*)} \bigl( 2\mu_{f1} \Phi(z_*) \mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*) + (\Sigma_{f11} - \mu_{f1}^2) \Phi(z_*) \\
&\qquad\qquad - \frac{\Sigma_{f11}^2 z_* \phi(z_*)}{v^2 + \Sigma_{f11}} \Biggr) - \mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*)^2 \\
&= 2\mu_{f1} \left( \mu_{f1} + \frac{\Sigma_{f11} \phi(z_*)}{\Phi(z_*) v \sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \right) + \Sigma_{f11} - \mu_{f1}^2 \\
&\quad - \frac{\Sigma_{f11}^2 z_* \phi(z_*)}{\Phi(z_*)(v^2 + \Sigma_{f11})} - \left( \mu_{f1} + \frac{\Sigma_{f11} \phi(z_*)}{\Phi(z_*) v \sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \right)^2 \\
&= \left( \mu_{f11} + \frac{\Sigma_{f11} \phi(z_*)}{\Phi(z_*) v \sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \right) \left( \mu_{f11} - \frac{\Sigma_{f11} \phi(z_*)}{\Phi(z_*) v \sqrt{1 + \frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \right) \\
&\qquad\qquad + \Sigma_{f11} - \mu_{f1}^2 - \frac{\Sigma_{f11}^2 z_* \phi(z_*)}{\Phi(z_*)(v^2 + \Sigma_{f11})} \\
&= \Sigma_{f11} - \frac{\Sigma_{f11}^2 \phi(z_*)^2}{\Phi(z_*)^2 (v^2 + \Sigma_{f11})} - \frac{\Sigma_{f11}^2 z_* \phi(z_*)}{\Phi(z_*)(v^2 + \Sigma_{f11})} \\
&= \Sigma_{f11} - \frac{\Sigma_{f11}^2}{v^2 + \Sigma_{f11}} \frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)} \left( \frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)} + z_* \right)
\end{aligned}
$$

ここで書籍の式 (3.141) を用いると

$$
\begin{aligned}
\frac{\Sigma_{f11}^2}{v^2+\Sigma_{f11}} &= \frac{\Sigma_{f11}^2}{\frac{\sqrt{|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|^2\Sigma_{f11}^2}}{(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2}+\Sigma_{f11}} \\
&= \frac{\Sigma_{f11}(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2}{|\Sigma_f|+(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2} \\
&= \frac{\Sigma_{f11}(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2}{\Sigma_{f11}\Sigma_{f22}-\Sigma_{f12}^2+(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2} \\
&= \frac{\Sigma_{f11}(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2}{\Sigma_{f11}\Sigma_{f22}+\Sigma_{f11}^2-2\Sigma_{f11}\Sigma_{f12}} \\
&= \frac{(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2}{\Sigma_{f11}+\Sigma_{f22}-2\Sigma_{f12}} \\
z_* &= \frac{\mu_{f1}-m}{v\sqrt{1+\frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \\
&= \mathrm{sign}(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})\frac{\mu_{f1}-m}{v^2+\Sigma_{f11}} \\
&= \mathrm{sign}(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})\frac{\mu_{f1}-\frac{\Sigma_{f11}\mu_{f2}-\Sigma_{f12}\mu_{f1}}{\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12}}}{\sqrt{\frac{\Sigma_{f11}^2(\Sigma_{f11}+\Sigma_{f22}-2\Sigma_{f12})}{(\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12})^2}}} \\
&= \frac{\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12}}{\Sigma_{f11}\sqrt{\Sigma_{f11}+\Sigma_{f22}-2\Sigma_{f12}}}\frac{\Sigma_{f11}(\mu_{f1}-\mu_{f2})}{\Sigma_{f11}-\Sigma_{f12}} \\
&= \frac{\mu_{f1}-\mu_{f2}}{\sqrt{\Sigma_{f11}+\Sigma_{f22}-2\Sigma_{f12}}}
\end{aligned}
\tag{1.53}
$$

よって、$\mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*)$ および $\sigma_n^2(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*)$ に代入して以下を得ます。

$$
\begin{aligned}
\mu_n(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*) &= \mu_{f1} + \frac{\Sigma_{f11}\phi(z_*)}{\Phi(z_*)v\sqrt{1+\frac{\Sigma_{f11}}{v^2}}} \\
&= \mu_{f1} + \mathrm{sign}(\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12})\sqrt{\frac{\Sigma_{f11}^2}{v^2+\Sigma_{f11}}}\frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)} \\
&= \mu_{f1} + \frac{\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12}}{\sqrt{\Sigma_{f11}+\Sigma_{f22}-2\Sigma_{f12}}}\frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)} \\
\sigma_n^2(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x}_*) &= \Sigma_{f11} - \frac{\Sigma_{f11}^2}{v^2+\Sigma_{f11}}\frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)}\left(\frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)} + z_*\right) \\
&= \Sigma_{f11} - \frac{(\Sigma_{f11} - \Sigma_{f12})^2}{\Sigma_{f11}+\Sigma_{f22}-2\Sigma_{f12}}\frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)}\left(\frac{\phi(z_*)}{\Phi(z_*)} + z_*\right)
\end{aligned}
\tag{1.54}
$$

## 参考文献

[1] Philipp Hennig and Christian Schuler. Entropy search for information-efficient global optimization. *Journal of Machine Learning Research*, 13, 12 2011.

[2] 伊藤 清. 確率論. 岩波書店, 1991.