

# 第7章「ベイズ推論モデル」の補足資料

## –自由エネルギー原理，能動的推論–

### 概要

本稿では、「計算論的精神医学」の第7章で解説した能動的推論 (active inference) について補足的な解説をする。本書の初版が刊行された2019年の段階では、自由エネルギー原理における能動的推論は活発に議論されており、その計算方法も複数の方法が検討されている状況である。本稿ではそれらを概観し、本書で紹介した検査を選択する例について改めて考える。

## 1 問題設定

本書では能動的推論については具体的な数式を用いた解説は行わなかった。ここでは数式を用いた定式化をもとに議論する。ただし、議論を簡単にするため、本書で扱った、複数の検査から一つを選択するという簡単な状況に特化した問題設定を考える。

本書に従い、観測される変数を  $y$ ，潜在変数を  $x$  で表す。検査の例では、陰性は  $y = 0$ ，陽性は  $y = 1$ ，非罹患は  $x = 0$ ，罹患は  $x = 1$  とする。また、行動を  $a$  で表す。検査の例では、例えば検査1を採用するときは  $a = 1$ ，検査2を採用するときは  $a = 2$  とする。本稿で参照するFriston et al. (2015) やSchwöbel, Kiebel, and Marković (2018) では行動とともに状態 (潜在変数) が時々刻々と変化していくマルコフ決定過程についての能動的推論が議論されている。本稿では状況を簡単にして、潜在変数  $x$  の値は変化しないものとする。また、行動をとるのは1回限りとする。

行動  $a$  を選んだ際の、 $x$  と  $y$  の同時確率分布を表す生成モデルを

$$p(x, y|a) = p(y|x, a)p(x|a) \quad (1)$$

と表す。検査の問題設定ではどの検査を採用したか ( $a$ ) が罹患の有無 ( $x$ ) に影響することはないので、 $p(x|a) = p(x)$  となる。したがって、

$$p(x, y|a) = p(y|x, a)p(x) \quad (2)$$

である。 $p(x)$  は行動の結果を観測する前の潜在変数  $x$  についての事前分布である。

また、 $x$  についての信念を  $q(x)$  と表し、その信念に基づく  $x, y$  についての同時確率を

$$q(x, y|a) = p(y|x, a)q(x) \quad (3)$$

と表す。ここでは信念  $q(x)$  は事前分布に他ならず、これらを区別する必要はない。しかし、現在の  $x$  の信念が過去の経験に基づいて更新されたものである場合は、(過去の経験から見て) 事後

分布である  $p(x)$  と、その近似的な分布である信念は異なることも有り得るため、ここでは ‘ $q$ ’ を用いる。なお、 $p(y|x, a)$  は生成モデルとして仮定されているものであり、ここで扱う分布としての「信念」に依存するものではないので、これは ‘ $q$ ’ にはしない。

## 2 自由エネルギー

本書の内容と重複するが、準備のため、行動  $a$  をとり、観測  $y$  が得られた場合の自由エネルギー (変分自由エネルギー) を考える。以下では行動  $a$  に依存する項は条件を表す “ $|a$ ” が入っているが、それ以外は本書と同様である。

このときのサプライズ<sup>1</sup>は、 $x$  について周辺化した負の対数周辺尤度

$$\text{surprise} = -\log p(y|a) = -\log \sum_x p(y|x, a)p(x)$$

で与えられる。事前分布の信念を  $q(x)$  として

$$\text{surprise} = -\log p(y|a) = -\log \sum_x p(y|x, a)q(x)$$

と書くこともできる。

行動  $a$  をとり、 $y$  が与えられたときの自由エネルギーは

$$F(y, q, a) = \sum_x q(x) \log \frac{q(x)}{p(y, x|a)} \quad (4)$$

で与えられる<sup>2</sup>。この量の具体的な数値を代入しての計算例は本書第7章の付録を参照されたい。

$p(y, x|a) = p(x|y, a)p(y|a)$  を用いると、式 (4) は以下のように変形される。

$$F(y, q, a) = \sum_x q(x) \log \frac{q(x)}{p(x|y, a)p(y|a)} \quad (5)$$

$$= \underbrace{\sum_x q(x) \log \frac{q(x)}{p(x|y, a)}}_{=D_{KL}(q(x)||p(x|y, a))} - \underbrace{\log p(y|a)}_{=\text{surprise}} \quad (6)$$

カルバック・ライブラー情報量  $D_{KL}(q(x)||p(x|y, a))$  はゼロ以上の値を持つ量である (ゼロになるのは  $q(x) = p(x|y, a)$  のとき)。このことから、

$$F(y, q, a) \geq -\log p(y|a) \quad (7)$$

となり、自由エネルギー  $F(y, q, a)$  はサプライズ、 $-\log p(y|a)$  の上界 (upper bound) を与える。すなわち、サプライズを減らすには、自由エネルギーを最小とするように信念  $q(x)$  を更新するのが一つの方法となるということである。自由エネルギーは他の形にも変形でき、それぞれ異なる解釈をする際に役立つ。付録 B を参照されたい。

<sup>1</sup> 本書ではこれを「驚き」と表現したが、ここでのサプライズは情報理論に基づく量であり、主観的な「驚き」を指すものではない。そこで、ここでは「サプライズ」という表現を用いた。また、英語でもその点を明確にするため surprise ではなく ‘surprisal’ という表現が使われることもある。

<sup>2</sup> 本書では積分  $\int dx$  を使っているが、ここでは  $x$  は離散変数と考え、和をとっている。

### 3 能動的推論 (active inference)

能動的推論では、行動  $a$  をとる前、そして  $y$  を観測する前に将来の自由エネルギーを小さくするように行動  $a$  が選択されるとする<sup>3</sup>。そしてその行動も確率変数として扱われる。Friston の定式化 (Friston et al., 2015) では、後述する負の期待自由エネルギー (expected free energy) がそれぞれの行動の“事前分布”に対応すると仮定する。具体的には、将来選ばれる行動も確率変数と考え、その確率の対数が負の期待自由エネルギーに比例するものとする。期待自由エネルギーが小さいほどその行動は選ばれやすくなる。本稿では期待自由エネルギーの大小関係のみを興味の対象とする。

「期待自由エネルギー」というと、自由エネルギーの  $y$  についての期待値、すなわち  $y$  についての分布  $q(y|a) = \sum_x p(y|x, a)q(x)$  の重みを付けて和をとった値、 $\sum_y q(y|a)F(y, q, a)$  が想像されるかもしれないが、Friston の期待自由エネルギーはそれとは異なることに注意されたい<sup>4</sup>。

#### 3.1 期待自由エネルギー (expected free energy)

式 (4) では未知変数は  $x$  のみであったが、今度は  $y$  もまだ観測していない未知変数となる。そこで、期待自由エネルギーでは式 (4) の対数にかかる重みとして、 $q(x)$  の代わりに、 $x$  と  $y$  の同時確率分布についての信念を表す  $q(x, y|a)$  を用いる<sup>5</sup>：

$$F_{\text{expected}}(q, a) = \sum_y \sum_x q(y, x|a) \log \frac{q(x)}{p(y, x|a)}. \quad (8)$$

ここで、 $y$  と  $x$  の同時確率  $p(y, x|a)$  は  $p(y, x|a) = q(x|y, a)\tilde{p}(y)$  と分解できるものとする。ここで、 $q(x|y, a)$  は観測  $y$  が与えられたもとでの、 $x$  についての信念である。 $\tilde{p}(y)$  は  $y$  についての事前の期待を表す信念とする。Friston の能動的推論の枠組みでは  $\tilde{p}(y)$  は主体が持つ効用 (結果の望ましさを表現するとされる場合もある (Friston, Daunizeau, & Kiebel, 2009; Friston et al., 2015))。すなわち、報酬のような、望ましい結果に対しては高い確率を割り当てる分布とする。そのような結果の望ましさを仮定しない場合は、 $\tilde{p}(y)$  は現在の  $x$  の信念のもとでの  $y$  の周辺確率、 $q(y|a) = \sum_x p(y|x, a)q(x)$  とする。

---

<sup>3</sup> より一般的には、特定の行動についての自由エネルギーではなく行動の決め方をまとめた「方策」を考える。

<sup>4</sup> Gershman (2019) の式 (12) の左辺はそのような表記になっているが、おそらく誤解に基づくものと考えられる。

<sup>5</sup> なぜ対数の中は  $q(x)$  のままで外側の  $q(x)$  だけ  $q(x, y|a)$  に置き換えるのか、というのは著者としても疑問であった。後述のように、Katahira, Kunisato, Okimura, and Yamashita (2019) ではそれに対して一つの解釈を与えている。

期待自由エネルギーは以下のように変形できる (付録 D 参照) :

$$F_{\text{expected}}(q, a) = - \underbrace{\sum_y q(y|a) \sum_x q(x|y, a) \log \frac{q(x|y, a)}{q(x)}}_{= D_{KL}(q(x|y, a) || q(x))} - \underbrace{\sum_y q(y|a) \log \tilde{p}(y)}_{= \text{predicted surprise}}. \quad (9)$$

= epistemic value

KL 情報量  $D_{KL}(q(x|y, a) || q(x))$  は  $y$  が観測されることで  $x$  についての信念がどの程度更新されたかを表す。そしてそれを  $y$  の出方について期待値をとったものがエピステミック価値 (epistemic value) と呼ばれる。これが大きいほど期待自由エネルギーは小さくなる。すなわち、潜在変数  $x$  についての情報がより多く得られる行動ほど選ばれやすくなる。

式 (9) の第 2 項はサプライズの期待値 (予測値) であり, ここではこれを予測サプライズ (predicted surprise) と呼ぶ。この項からマイナスを除いた量は ‘extrinsic value’ (外在的価値) と呼ばれている (Friston et al., 2015)。この項は, 少ないサプライズが期待される行動ほど選ばれやすくする効果を持つ。  $\tilde{p}(y) = q(y|a)$  とする場合, 予測サプライズは  $y$  のエントロピーになっている。したがって, エントロピーを小さくする行動, すなわち  $y$  のばらつきがより小さい行動が期待自由エネルギーを小さくするため選択されやすくなる。したがって, この項はリスク回避の効果 (結果の分散が小さい行動が選好される) をもたらす。

$\tilde{p}(y)$  が所望の分布として与えられている場合, 例えば  $y$  は 1 になるのが望ましいとされ,  $\tilde{p}(y = 1) = 0.8, \tilde{p}(y = 0) = 0.2$  とする場合を考えよう。この時,  $q(y = 1|a)$  が  $q(y = 0|a)$  に比べて大きくなる行動ほど予測サプライズは小さくなり, 期待自由エネルギーは小さくなる (その場合,  $q(y = 1|a) = 1$  または  $q(y = 0|a) = 0$  で予測サプライズは最小になる)。

### 3.2 予測自由エネルギー (predicted free energy)

期待自由エネルギーとは異なる方法で将来の観測に関する自由エネルギーを定義したのが Schwöbel et al. (2018) による予測自由エネルギー (predicted free energy) である。予測自由エネルギーの定義は付録 F で与えている。本稿の問題設定においては, 基本的に予測自由エネルギーは予測サプライズと一致する。予測自由エネルギーは期待自由エネルギーと違って, エピステミック価値は含まれない。

## 4 レトロスペクティブ・サプライズ (Retrospective surprise, RS)

脚注 5 でも述べたが, 期待自由エネルギーがなぜ式 (8) のような形になるのかは自明ではない。著者の把握している範囲では, Friston 自身も論文では明確に述べていないようである。そこで, 期待自由エネルギーの一つの解釈のため, ここでは新たな計算論的要素であるレトロスペクティブ・サプライズ (retrospective surprise, または residual surprise, 以下 RS) を考える (Katahira et al., 2019)。

RS は、 $y$  が観測された後に  $x$  についての信念を更新し、改めて  $y$  を振り返って (回顧的に) 見たときのサプライズ

$$RS = -\log \sum_x p(y|x, a)q(x|y, a).$$

として定義する。この RS の  $y$  についての期待値 (predicted retrospective surprise, 予測 RS) は

$$\text{予測 RS} = -\sum_y q(y|a) \log \sum_x p(y|x, a)q(x|y, a).$$

となる。

イェンセン (Jensen) の不等式より期待自由エネルギーは予測 RS の上界を与えることが示される (付録 E):

$$F_{\text{expected}}(q, a) \geq \text{予測 RS}. \quad (10)$$

この事実は、期待自由エネルギーを小さくする行動を選択することは、結果として RS を小さくする行動の選択につながりやすいことを示している。期待自由エネルギーそのものの解釈は容易ではないが、RS は、「将来の感覚入力に基づいて自分が信念を更新し、その上でその感覚入力になお感じるサプライズ」という解釈ができる。RS を小さくするように行動をすることは、自分がそこから信念を更新でき、そして腑に落ちるような感覚入力を求めることにつながる。これが期待自由エネルギーに含まれるエピステミック価値にもつながる。以上のことから、式 (10) は期待自由エネルギーの新しい解釈を与えたものといえる。

なお、式 (10) において等号が成り立つ条件の一つは  $x$  と  $y$  が独立であるとき、すなわち  $q(y, x|a) = q(y|a)q(x)$  のときである。このとき、

$$F_{\text{expected}}(q, a) = \text{予測 RS} = -\sum_y q(y|a) \log q(y|a),$$

つまり、期待自由エネルギーと予測 RS は予測サプライズと等しくなる。

式 (10) において等号が成り立つもう一つの条件は、 $y$  の値から完全に  $x$  の値がわかる、という生成モデルを仮定するときである。二値の場合は、 $x$  と  $y$  の可能な組み合わせは、(i)  $y$  が 1 のとき  $x$  は 1,  $y$  が 0 のとき  $x$  は 0, または (ii)  $y$  が 1 のとき  $x$  は 0,  $y$  が 0 のとき  $x$  は 1, である。このとき期待自由エネルギーと予測 RS はゼロになる。

## 5 検査の例

次に、検査を選択する例をもとに、能動的推論の振る舞いを考えよう。ここでは、潜在変数に関する推論はベイズの定理に従い行われると考える。したがって、ここでの議論は自由エネルギー原理に特化したものではなく、ベイズ推論モデル全般に成り立つものである。潜在変数  $x$  に関する信念を  $q(x=1) = p_D$  および  $q(x=0) = 1 - p_D$  と表す ('D' は 'disease' の頭文字)<sup>6</sup>。

<sup>6</sup> 詳細な計算手順は付録に記した。本書の例と同様、関数電卓などを使って計算できるように記してあるので、興味のある読者は試されたい。

表 1 二つの検査の例と関連する量. ここでは  $x$  についての事前の信念は  $p_D = 0.6$  であるとする。予測 RS = predicted retrospective surprise.

	ヒット率 ( $p_H$ )	誤報率 ( $p_F$ )	予測 サプライズ	期待 自由エネルギー	エピステミック 価値	予測 RS
検査 A	0.8	0.2	0.686	0.5	0.186	0.387
検査 B	0.8	0.8	0.5	0.5	0	0.5

主体は候補となるテストについてヒット率,  $p_H = p(y = 1|x = 1)$ , と誤報率,  $p_F = p(y = 1|x = 0)$  を知っているとする。ただし, これは主体が持っている生成モデルがそのようになっているということであり, 必ずしも真実を反映している必要はない。

ここで, 主体は, 検査 A (表 1) を候補として考えているとしよう。主体の  $x$  についての事前分布は  $q(x = 1) = p_D = 0.6$ , そして  $q(x = 0) = 1 - p_D = 0.4$  であるとする。表 1 にある通り, 検査 A のヒット率は  $p_H = 0.8$ , 誤報率は  $p_F = 0.2$  であるという知識を生成モデルとして持っているとする。この信念と生成モデルのもとでは, 検査 A を選んだときに陽性が得られる確率は,

$$\begin{aligned}
 q(y = 1|a) &= p(y = 1|x = 1) \times q(x = 1) + p(y = 1|x = 0) \times q(x = 0) \\
 &= p_H p_D + p_F (1 - p_D) \\
 &= 0.8 \times 0.6 + 0.2 \times 0.4 \\
 &= 0.56
 \end{aligned}$$

となる (計算の詳細は付録 C を参照)。したがって, 主体は陽性となった結果には  $-\log(0.56) = 0.58$  のサプライズを経験すると予想する。一方, 結果が陰性になる確率は  $q(y = 0|a) = 1 - q(y = 1|a) = 0.44$  であると予測される。そのとき, サプライズは  $-\log(0.44) = 0.82$  となる。以上を合わせると, 予測サプライズは  $0.56 \times 0.58 + 0.44 \times 0.82 = 0.686$  となる。

結果を観測した後, 主体はベイズの定理に基づいて  $x$  の信念を更新する。結果が陽性 ( $y = 1$ ) であったときは, 信念は  $q(x = 1|y = 1) = p_H p_D / q(y = 1|a) = 0.8 \times 0.6 / 0.56 = 0.857$ , そして  $q(x = 0|y = 1) = 0.143$  となる (計算については付録 C を参照)。この信念に基づくとき, 陽性であるという結果への RS は  $-\log(p_H \times 0.857 + p_F \times 0.143) = 0.336$  となる。結果が陰性 ( $y = 0$ ) のときは, 信念は  $q(x = 1|y = 0) = (1 - p_H) p_D / q(y = 0|a) = 0.2 \times 0.6 / 0.44 = 0.273$  および  $q(x = 0|y = 0) = 0.727$  となる。このときの RS は  $-\log((1 - p_H) \times 0.273 + (1 - p_F) \times 0.727) = 0.452$  である。合わせると, 予測 RS は  $0.56 \times 0.336 + 0.44 \times 0.452 = 0.387$  となる。この値は予測サプライズ (= 0.664) より大幅に減少している。信念を更新してからその結果を改めて見ると, 「驚き」は小さくなるということである。

次に, 検査 B を考えよう (表 1)。この検査は患者が罹患しているが罹患してまいが陽性が出る確率は 0.8 という, 全く情報の得られない検査である (という生成モデルが仮定される)。この場合 (実際はどうであれ, 主体がそう仮定する場合), ベイズ推論によると検査の結果を得ても  $x$  に関する信念は何も更新されない。結果として, 予測 RS も予測サプライズと同じ 0.50 のままである。検査 B は, 検査 A より予測サプライズは小さい。したがって, 単純にサプライズを小

小さくする, という意味ではこの検査 B が選ばれることになる。しかし, 予測 RS を比較すると検査 A は 0.387, 検査 B は 0.5 であり, 検査 A の方が小さい。RS を小さくする, という点ではより情報が得られる検査 A が選択されることになる。

一方, 期待自由エネルギーは検査 A, 検査 B ともに 0.5 という値をとる (表 1)。したがって, 期待自由エネルギーでは検査 A, 検査 B に対する選好は中立である。このことは, 式 (9) にあるように, 期待自由エネルギーが情報を得る価値, すなわちエピステミック価値が含まれるということと考えると直観に反することにも思える。その理由を考えよう。たしかに, 表 1 からは検査 A のエピステミック価値は 0.186, 検査 B のエピステミック価値は 0 と, 得られる情報の違いを反映して検査 A の方がエピステミック価値は大きくなっている。しかし, 式 (9) より, 期待自由エネルギーは予測サプライズからエピステミック価値を引いたものとなっている。検査 A はエピステミック価値が検査 B より 0.186 だけ大きくなる分, 予測サプライズがちょうど 0.186 大きくなるため, それらの効果は完全にキャンセルされ, ゼロになるのである。したがって, この例では, エピステミック価値が得られる効果は予測サプライズが大きくなる効果と相殺される。この結果はモデルのパラメータには寄らない。他のパラメータ領域についての結果はKatahira et al. (2019) を参照されたい。

次に, 上記の定式化のもと, 本書で扱った検査 1, 検査 2 についての能動的推論を考えよう。検査 1 は,

$$p_H = \frac{2}{3}, p_F = \frac{1}{4} \quad (11)$$

検査 2 は,

$$p_H = \frac{11}{12}, p_F = \frac{1}{2} \quad (12)$$

と表される。

図 1 は, 検査 1 と検査 2 に関して,  $x$  に関する事前確率  $p_D$  の関数として各種の量の振る舞いをプロットしている。エピステミック価値は常に検査 2 の方が大きい, 検査 1 との差は大きくないため (図 1C), 期待自由エネルギー (図 1A) と予測サプライズ (図 1B) の振る舞いは大きくは変わらない。予測 RS も同様である (図 1D)。いずれも,  $p_D$  が大きい場合 (0.25 程度以上のとき) は検査 2 の方がそれらの値が小さくなり (選好され),  $p_D$  が小さい場合は検査 1 が選好される。この結果の理由は以下の通りである。 $p(y = 1|a) = p_H p_D + p_F(1 - p_D)$  であるため, 事前確率  $p_D$  が大きいときはヒット率  $p_H$  が支配的に,  $p_D$  が小さいときは誤報率  $p_F$  が支配的になる。 $p_H$  については  $2/3$  である検査 1 より  $11/12$  である検査 2 の方がエントロピーが小さく, こちらが支配的であるときは検査 2 の予測サプライズが小さくなる。 $p_F$  については  $1/2$  である検査 2 より  $1/4$  である検査 1 の方がエントロピーが小さく, こちらが支配的であるときは検査 1 の方が予測サプライズは小さくなる。

一方, 何らかの要因でもし主体が検査の結果が陽性になる確率が高い ( $\tilde{p}(y = 1) > 0.5$ ) と仮定しているとする。このとき, 図 1D に示されるように検査 2 の方が常に  $q(y = 1|a)$  の期待値を大きくする。したがって, 検査 2 が選好されることとなる。

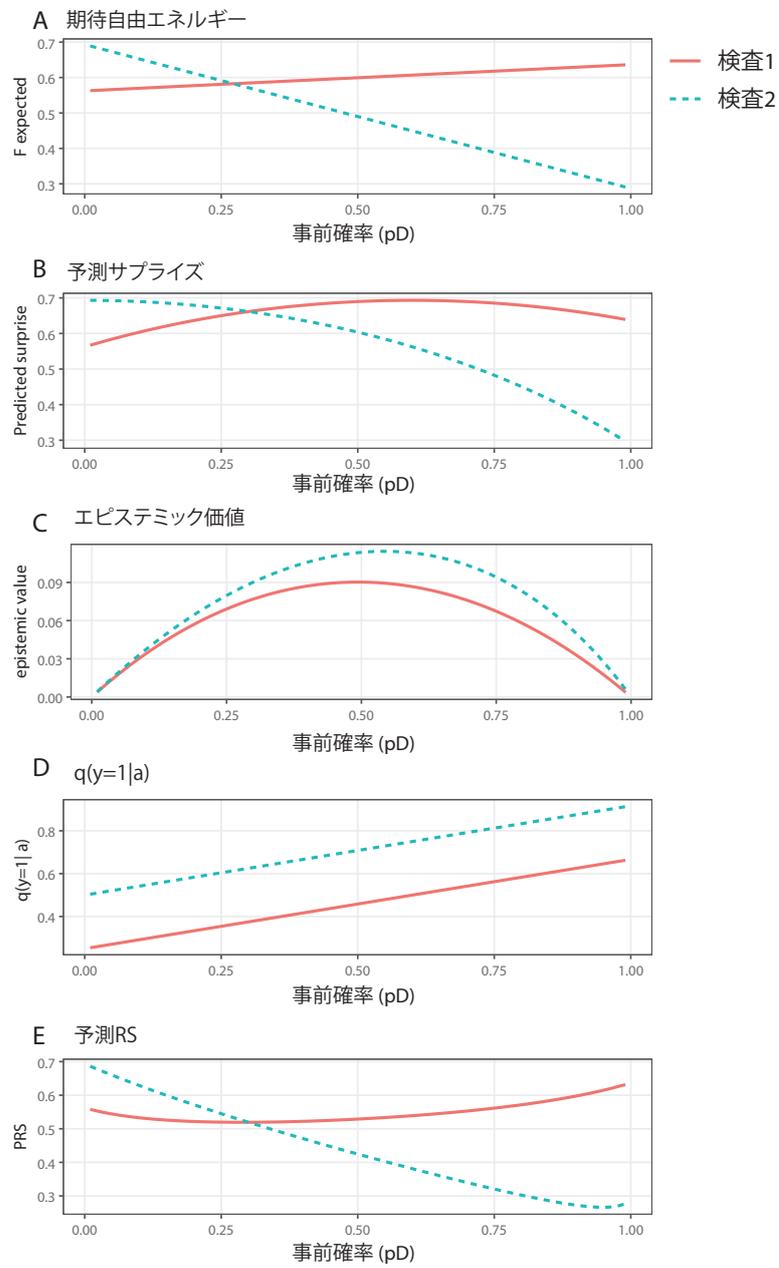


図 1 検査 1 と検査 2 の比較。(A) 期待自由エネルギー。(B) 予測サプライズ。(C) エピステミック価値。(D) 陽性の結果の周辺確率 ( $q(y = 1|a)$ )。 (E) 予測 RS。

## 付録 A 数学的基礎

本稿では  $x$  の自然対数を  $\log(x)$  で表す。自由エネルギー原理に関連する論文の多くは “log” の代わりに “ln” を使って表している。

対数の性質として、以下のものはよく用いられる。ここで、 $M > 0, N > 0$  とする。

$$\log 1 = 0, \quad (13)$$

$$\log MN = \log M + \log N, \quad (14)$$

$$\log M = -\log \frac{1}{M}, \quad (15)$$

$$\log \frac{M}{N} = \log M - \log N, \quad (16)$$

$$\log \frac{M}{N} = -\log \frac{N}{M}. \quad (17)$$

また、確率関数の和に関する以下の変形はよく行われる。

$$\sum_y p(x, y) = p(x), \quad (18)$$

$$\sum_x p(x) = 1, \quad (19)$$

$$\sum_x p(x)p(y) = p(y), \quad (20)$$

$$\sum_x \sum_y p(x, y)f(x, y) = \sum_x \sum_y p(x|y)p(y)f(x, y) \quad (21)$$

$$= \sum_y p(y) \sum_x p(x|y)f(x, y). \quad (22)$$

( $x$  を含まない項はくくり出せる)

## 付録 B 変分自由エネルギーの変形

式 (4) で与えられる自由エネルギーは以下のようにも変形される。

$$F(y, q, a) = \sum_x q(x) \log \frac{q(x)}{p(y, x|a)} \quad (23)$$

$$= \underbrace{-\sum_x q(x) \log p(y, x|a)}_{\text{=内部エネルギー}} + \underbrace{\sum_x q(x) \log q(x)}_{\text{=負のエントロピー}}. \quad (24)$$

ここで、最初の式へ変形には式 (17) を使用した。第 2 式への変形には式 (16) を使用した。この形は統計力学で知られる自由エネルギーの定義 (自由エネルギー = 内部エネルギー - エントロピー) と対応がつけられる。

また,  $p(y, x|a) = p(y|x, a)p(x)$  を用いると, 式 (4) は以下のようにも変形される。

$$F(y, q, a) = - \sum_x q(x) \log \frac{p(y|x, a)p(x)}{q(x)} \quad (25)$$

$$= \underbrace{\sum_x q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)}}_{\text{complexity}} - \underbrace{\sum_x q(x) \log p(y|x, a)}_{=\text{accuracy}}. \quad (26)$$

この式の第 1 項は信念  $q(x)$  と事前分布  $p(x)$  の KL 情報量,  $D_{KL}(q(x)||p(x))$  であり, **complexity** と呼ばれる。第 2 項は **accuracy** と呼ばれる。本稿で考えた例のように観測値  $y$  と潜在変数  $x$  が一つかつ二値変数の場合はこれらのように呼ぶ理由は明確ではないが, それらが複数または多値である場合はその違いがより明確になる。例えば潜在変数の取り得る値が 0 から 9 までの整数値の 10 個であると仮定する。観測された値  $y = 1$  を出力する確率は  $y = 8$  の場合が一番高いとしよう。ただし, 他の  $x$  の値でも  $y$  を出力される確率はゼロではない。その場合,  $q(x = 8) = 1$  とし, 他の  $x$  の値については  $q(x) = 0$  という極端な形状の分布にすれば “accuracy” は最も高くなる。一方, そのようなことをすると事前分布との乖離は大きくなる。つまり, **complexity** の項が大きくなる。自由エネルギーの最小化には, **complexity** と **accuracy** の駆け引きが働くということである。

## 付録 C 検査についての計算

検査の例について, 詳細な計算手順を以下に記す。 $p_H, p_F, p_D$  をパラメータとして任意の値を設定し, 以下に代入すると各種の量が計算される。ここでは, 本文に述べたように, 信念はベイズの定理に従い正確に更新されるとし,  $p$  と  $q$  を区別しない。つまり,  $q(x|y, a) = p(x|y, a)$  だとする。

$x$  の事後分布  $q(x|y, a)$  はベイズの定理に従い, 以下のように計算される。

$$\begin{aligned} q(x = 1|y = 1, a) &= \frac{p(y = 1|x = 1, a)q(x = 1)}{p(y = 1)} \\ &= \frac{p_H p_D}{p_H p_D + p_F(1 - p_D)}, \\ q(x = 1|y = 0, a) &= \frac{p(y = 0|x = 1, a)q(x = 1)}{p(y = 0)} \\ &= \frac{(1 - p_H)p_D}{(1 - p_H)p_D + (1 - p_F)(1 - p_D)}. \end{aligned}$$

$q(x = 0|y = 1, a) = 1 - q(x = 1|y = 1, a)$ ,  $q(x = 0|y = 0, a) = 1 - q(x = 1|y = 0, a)$  である。

$y$  の周辺確率は

$$\begin{aligned} q(y = 1|a) &= \sum_x p(y = 1|x, a)q(x) \\ &= p(y = 1|x = 0, a)q(x = 0) + p(y = 1|x = 1, a)q(x = 1) \\ &= p_F(1 - p_D) + p_{HPD}, \end{aligned}$$

そして  $q(y = 0|a) = 1 - q(y = 1|a)$  である。これを以下に代入すればエピステミック価値が計算できる。

$$\begin{aligned} \text{epistemic value} &= \sum_y p(y|a) \sum_x q(x|y, a) \log \frac{q(x|y, a)}{q(x)} \\ &= q(y = 0|a)q(x = 0|y = 0, a) \log \frac{q(x = 0|y = 0, a)}{q(x = 0)} \\ &\quad + q(y = 0|a)q(x = 1|y = 0, a) \log \frac{q(x = 1|y = 0, a)}{q(x = 1)} \\ &\quad + q(y = 1|a)q(x = 0|y = 1, a) \log \frac{q(x = 0|y = 1, a)}{q(x = 0)} \\ &\quad + q(y = 1|a)q(x = 1|y = 1, a) \log \frac{q(x = 1|y = 1, a)}{q(x = 1)}. \end{aligned}$$

結果  $y$  に選好を持たない場合の予測サプライズは以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \text{predicted surprise} &= - \sum_y q(y|a) \log q(y|a) \\ &= -q(y = 0|a) \log q(y = 0|a) - q(y = 1|a) \log q(y = 1|a). \end{aligned}$$

上記の量を用いて、期待自由エネルギーは

$$\text{expected free energy} = -\text{epistemic value} + \text{predicted surprise}$$

と計算できる。

結果に選好を持つ場合、例えば  $\tilde{p}(y = 1) = 0.8$  とする場合の外在的価値は

$$\begin{aligned} \sum_y p(y|a) \log \tilde{p}(y) &= p(y = 0|a) \log \tilde{p}(y = 0) + p(y = 1|a) \log \tilde{p}(y = 1) \\ &= p(y = 0|a) \log 0.2 + p(y = 1|a) \log 0.8 \end{aligned}$$

となり、 $p(y = 1|a)$  を 1 に近づける、そして  $p(y = 0|a)$  を 0 に近づけるほどこの値は大きくなるのがわかる。

予測 RS は以下で与えられる。

$$\begin{aligned}
\text{予測 RS} &= - \sum_y q(y|a) \log \sum_x p(y|x, a) q(x|y, a) \\
&= - (p_H p_D + p_F (1 - p_D)) \log \left( \frac{p_H^2 p_D + p_F^2 p_D}{p_H p_D + p_F (1 - p_D)} \right) \\
&\quad - ((1 - p_H) p_D + (1 - p_F) (1 - p_D)) \log \left( \frac{(1 - p_H)^2 p_D + (1 - p_F)^2 (1 - p_D)}{(1 - p_H) p_D + (1 - p_F) (1 - p_D)} \right).
\end{aligned}$$

## 付録 D 式 (9) の導出

期待自由エネルギーの変換 (式 (9)) は以下のように行われる。

$$\begin{aligned}
F_{\text{expected}}(q, a) &= \sum_y y \sum_x x q(y, x|a) \log \frac{q(x)}{p(y, x|a)} \\
&= \sum_y y \sum_x x q(y, x|a) \log \frac{q(x)}{q(x|y, a) \tilde{p}(y)} \\
&= \sum_y q(y|a) \sum_x q(x|y, a) \log \frac{q(x)}{q(x|y, a)} - \sum_{y, x} q(y, x|a) \log \tilde{p}(y) \\
&= - \sum_y q(y|a) \sum_x q(x|y, a) \log \frac{q(x|y, a)}{q(x)} - \sum_y q(y|a) \log \tilde{p}(y).
\end{aligned}$$

## 付録 E 不等式 (10) の証明

以下のように期待自由エネルギーが予測 RS の上界を与えることが示される。式 (8) より,

$$\begin{aligned}
F_{\text{expected}}(q, a) &= - \sum_y \sum_x q(y, x|a) \log \frac{p(y, x|a)}{q(x)} \\
&= - \sum_y q(y|a) \sum_x q(x|y, a) \log \frac{p(y|x, a) q(x)}{q(x)} \\
&= - \sum_y q(y|a) \sum_x q(x|y, a) \log p(y|x, a) \\
&\geq - \sum_y q(y|a) \log \sum_x p(y|x, a) q(x|y, a) = \text{予測 RS}.
\end{aligned}$$

ここで、イェンセンの不等式  $\sum_x q(x|y, a) \log p(y|x, a) \leq \log \sum_x q(x|y, a) p(y|x, a)$  を用いている。この不等式がどの  $y$  の値にも成り立ち、 $q(y|a) \geq 0$  であることから、上の不等式が得られる。

## 付録 F 予測自由エネルギー

ここでは本稿の問題設定に基づき予測自由エネルギー (Schwöbel et al., 2018) の定義をする。

本書の 7.5 節では潜在変数  $x$  の信念  $q(x)$  とその事後分布の  $p(x|y)$  のカルバック・ライブラー情報量から自由エネルギーを導出した。

今は  $y$  も未知変数であり， $x$  と同様の潜在変数と考えることができる。そこで，信念  $q(x, y|a)$  と同時分布  $p(x, y|a)$  のカルバック・ライブラー情報量

$$D_{KL}(q(y, x|a)||p(y, x|a)) = \sum_y \sum_x q(y, x|a) \log \frac{q(y, x|a)}{p(y, x|a)} \quad (27)$$

を考える。そして本書 7.5 節で自由エネルギーを導出した方法と同様に (式 (6) も参照)，このカルバック・ライブラー情報量がゼロになったときに  $y$  の対数周辺尤度  $\log \tilde{p}(y)$  が現れるよう式を変形する。

$$\begin{aligned} D_{KL}(q(y, x|a)||p(y, x|a)) &= \sum_y \sum_x q(y, x|a) \log \frac{q(y, x|a)q(y|a)}{p(y, x|a)\tilde{p}(y)} \\ &= \underbrace{\sum_y \sum_x q(y, x|a) \log \frac{q(y, x|a)}{p(y, x|a)\tilde{p}(y)}}_{=F_{\text{predicted}}(q, a)} + \sum_y q(y|a) \log \tilde{p}(y). \end{aligned}$$

最後の式の第 1 項を予測自由エネルギーとする：

$$F_{\text{predicted}}(q, a) = \sum_y \sum_x q(y, x|a) \log \frac{q(y, x|a)}{p(y, x|a)\tilde{p}(y)}. \quad (28)$$

すると，

$$F_{\text{predicted}}(q, a) = D_{KL}(q(y, x|a)||p(y, x|a)) - \sum_y q(y|a) \log \tilde{p}(y). \quad (29)$$

となり，全ての  $x$  と  $y$  に対して  $q(x, y|a) = p(x, y|a)$  のとき，すなわちカルバック・ライブラー情報量がゼロになったときに

$$F_{\text{predicted}}(q, a) = - \sum_y q(y|a) \log \tilde{p}(y). \quad (30)$$

となる。これは式 (9) の期待自由エネルギーからエピソード価値を除いた，予測サプライズに他ならない。つまり， $x$  と  $y$  に関する信念が真の分布と一致すれば，予測自由エネルギーを最小化する行動は予測サプライズを最小化する行動となる。

## References

- Friston, K., Daunizeau, J., & Kiebel, S. J. (2009). Reinforcement learning or active inference? *PLoS ONE*, 4(7), e6421.
- Friston, K., Rigoli, F., Ognibene, D., Mathys, C., Fitzgerald, T., & Pezzulo, G. (2015). Active inference and epistemic value. *Cognitive Neuroscience*, 6(4), 187–214.
- Gershman, S. J. (2019). What does the free energy principle tell us about the brain? *arXiv preprint arXiv:1901.07945*.

- Katahira, K., Kunisato, Y., Okimura, T., & Yamashita, Y. (2019). Retrospective surprise: a computational component for active inference. *PsyArXiv Preprints*. doi: 10.31234/osf.io/jtnqg
- Schwöbel, S., Kiebel, S., & Marković, D. (2018). Active inference, belief propagation, and the bethe approximation. *Neural Computation*, 30(9), 2530–2567.