

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスに関するメモ

松岡知洋^{*1}

Introductory Notes on Kullback-Leibler Divergence

Tomohiro Matsuoka^{*1}

Abstract - Kullback-Leibler divergence, also called as Kullback-Leibler information or Kullback-Leibler distance etc., is one of the fundamental concepts in statistics, information science, etc. It is a type of measure of difference between two probability distributions. However, its properties such as what type of difference it indicates, are not well-known. We present a brief introduction to Kullback-Leibler divergence in applied statistics with several examples. In those examples, we include ones with the Pareto distributions, one of the simplest "power-law" or "long-tail" distributions.

Keywords: Kullback-Leibler divergence, probability distributions, statistics, power-law

1. 前書き

1.1 はじめに

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスという、確率分布間の違いを表す量として知られているものがある(文献 [1] では「カルバック情報量」)。これは常に 0 以上の値をとり、0 となるのは二つの確率分布が一致するときであり、そのときに限る。そのため、距離に例えられることもあるが、通常の距離とは大きく異なる点がある。例えば、地上のある二地点 A、B 間の距離は、A 地点と B 地点の役割を入れ替えても変わらない。つまり、A 地点からみた B 地点までの距離と、B 地点からみた A 地点までの距離は同じである。ところが、カルバック・ライブラー・ダイバージェンスはその両者の値が異なっているような「距離」である。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスの名称はアメリカの数学者で暗号解読者だったソロモン・カルバックとリチャード・ライブラーにちなんだものである。彼らによって1951年の共著の論文[2]で、二つの確率分布の違いを定量化するために導入された。ただし、同論文ではカルバック・ライブラー・ダイバージェンスそのものではなく、それを二つの分布に関して対称化したものを主に扱っている。先の例で言えば、A 地点からの「距離」と B 地点からの「距離」を足し合わせたものを考えていることになる。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスのごく身近な例では次のようなものがある。何かデータが与えられたときに、その平均値や分散を計算することはごく普通に行われている。平均値や分散が正確には何を表しているのかは、やや分かり難い。しかし、データの平均値と分散を求めることには、データをガウス分布から得られた標本とみなし、ガウス分布のパラメータとしてカルバック・ライブラー・ダイバージェンスの意味で最適なものを選ぶことで

あるという解釈があり得る。

また、カルバック・ライブラー・ダイバージェンスは統計理論や機械学習など、情報科学の分野でよく用いられている。日本人研究者によって創始された情報幾何学にも登場する [3]。最近の例では、人間との対話(チャット)が可能な人工知能である chatGPT [4] で用いられている大規模言語モデル InstructGPT が、その機械学習の機構の中でカルバック・ライブラー・ダイバージェンスを利用している [5], [6]。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスがどのような意味で確率分布の差異をあわらしているか、また、なぜ、二つの確率分布に対して非対称であるのかは分かり難いと考えられていることが多いのだが、直感的で分かり易い解釈もある [7]。本稿ではなるべく簡単な例としてまずベルヌーイ分布を用いてカルバック・ライブラー・ダイバージェンスの性質について説明する。また、いくつかのよく用いられる確率分布に関するカルバック・ライブラー・ダイバージェンスの計算を例示した。

本文中、偏微分に関する各種の事柄やスターリングの公式による階乗の近似等は特に説明することなしに用いている。また、具体例を計算するにあたって指数積分と呼ばれる特殊関数を用いたため、一節を設けて指数積分の性質についてまとめた。

数値計算およびグラフの作成はすべて Julia 言語で行った。グラフの作成には Plots ライブラリを用いた。数値積分には QuadGK ライブラリを使用し、その他、Distributions、SpecialFunctions の各ライブラリを使用した。

1.2 パレート分布との関連について

本稿の計算例の中にはパレート分布と呼ばれる確率分布に関係するものも含めた。近年よく知られるように

^{*1}: 炎重工株式会社 製品開発部

^{*1}: PD Dept, Homura Heavy Industries Corporation