式 (5.16) を見直してみる。

式 (4.21) の上を参考にすると、

$$-\mathcal{U}(z) = ln\,\tilde{p}(z) \quad (ln\,p(z) \propto ln\,\tilde{p}(z)) \tag{1}$$

このとき、$p(z)$ から z をサンプリングしたい。

さて、今回、P.117 にあるように $p(W|Y,X)$ から、W をサンプリングしたい。

よって、1 倍は比例でもあるので、$\tilde{p}(W|Y,X) = p(W|Y,X)$ として、

$$\mathcal{U}(W) = -ln\,\tilde{p}(W|Y,X) = -ln\,p(W|Y,X) = -ln\,\frac{p(W,Y|X)}{p(Y|X)} = -ln\,\frac{p(Y|W,X)p(W|X)}{p(Y|X)} = -ln\,\frac{p(Y|W,X)p(W)}{p(Y|X)} \tag{2}$$

ここで、(5.1) を考えると、W と X は独立で、$p(W|X) = p(W)$ となることに注意する。

(4.16),(4.17) を考慮すると、$\mathcal{U}(W)$ は微分だけで考慮されている。すると、(2) で $p(Y|X)$ は W を変数とすると、定数となり、無視できる。

よって、(2) は、以下のように考えられ、(5.16) が求まる。

$$\mathcal{U}(W) = -ln\,p(Y|W,X)p(W) = -\{ln\,p(Y|W,X) + ln\,p(W)\} \tag{3}$$

(2) を考え、(5.10) の導出過程を考慮すると、以下のようになる。

$$U = -ln\,p(Y|W,X)p(W) = \sum_{n=1}^{N}(-\frac{1}{{\sigma_y}^2}\frac{1}{2}(y_n - f(x_n;W))^2) + \frac{1}{{\sigma_w}^2}\frac{1}{2}w^T w + c = \frac{1}{{\sigma_y}^2}E(W) + \frac{1}{{\sigma_w}^2}\Omega_{L2}(W) + c \tag{4}$$

なお、c は W に影響しない項になっている。HMC のやり方 (2 のリープフロッグ法、3 の比率の計算) を考えると、定数部分は無視できる。

上記の式の偏微分を考慮すると、(5.8) が利用できることがわかる。

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial w_i} = -\frac{\partial ln\,p(W|Y,X)}{\partial w_i} = \frac{1}{{\sigma_y}^2}\frac{\partial}{\partial w_i}E(W) + \frac{1}{{\sigma_w}^2}\frac{\partial}{\partial w_i}\Omega_{L2}(W) \tag{5}$$

$$\nabla_w \mathcal{U}(W) = \frac{1}{{\sigma_y}^2}\nabla_w E(W) + \frac{1}{{\sigma_w}^2}W \tag{6}$$

なお、PRML の演習 11.15 を考慮すると、(4.14),(4.15) は以下のように、一部、偏微分になるはず。

$$\frac{dz_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial K}{\partial p_i} \tag{7}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial z_i} = -\frac{\partial U}{\partial z_i} \tag{8}$$

よって、(4.16) の該当部分の全微分は偏微分に変わる。