

6.1.1.2 の式展開を見直す。

そもそも、(6.4) のように KL ダイバージェンスを最小化する。q に関して、(6.4) のように、 $q(Z, W)$  を考慮するが、それらは  $X$  を引数としても良いし、その関数は  $\psi, \xi$  をパラメータとしている。よって、(6.9) の式を最小化する。

(3.10) の定義式に (6.5) を代入して、

$$\begin{aligned}
D_{KL}[q(Z, W; X, \psi, \xi) || p(Z, W | X)] &= - \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln \frac{p(Z, W | X)}{q(Z, W; X, \psi, \xi)} dZ dW \\
&= - \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln p(Z, W | X) dZ dW + \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln q(Z, W; X, \psi, \xi) dZ dW \\
&= - \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln \frac{p(Z, W, X)}{p(X)} dZ dW + \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln q(Z, ; X, \psi) q(W; \xi) dZ dW \\
&= - \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln p(Z, W, X) dZ dW + \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln p(X) dZ dW \\
&\quad + \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln q(Z, ; X, \psi) dZ dW + \int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln q(W; \xi) dZ dW \\
&= -\mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(Z, W, X)] + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(X)] + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(Z, ; X, \psi)] + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)] \\
&= -(\mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(Z, W, X)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(Z, ; X, \psi)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)]) + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(X)] \\
&\quad (1)
\end{aligned}$$

この様になり、(6.9) が求まった。この式が求まれば、(6.10) は自明。

(6.10) は (6.3), (6.7) を考慮して、以下ようになる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\psi, \xi) &= \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(Z, W, X)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(Z, ; X, \psi)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)] \\
&= \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(W) \prod_n [p(x_n | z_n, W) p(z_n)]] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln \prod_n q(z_n; x_n, \psi)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)] \\
&= \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(W)] + \sum_n \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(x_n | z_n, W)] + \sum_n \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(z_n)] \\
&\quad - \sum_n \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(z_n; x_n, \psi)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)] \\
&= \sum_n (\mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(x_n | z_n, W)] + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(z_n)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(z_n; x_n, \psi)]) \\
&\quad + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(W)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)] \\
&\quad (2)
\end{aligned}$$

これをもとに、ミニバッチの ELBO を考えると (6.11) のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\psi, \xi) &= \frac{N}{M} \sum_{n \in \mathcal{S}} (\mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(x_n | z_n, W)] + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(z_n)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(z_n; x_n, \psi)]) \\
&\quad + \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(W)] - \mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln q(W; \xi)] \\
&\quad (3)
\end{aligned}$$

ここで、以下の勾配を考える。

$$\begin{aligned}
\nabla_{\xi}(\mathbb{E}_{q(Z, W; X, \psi, \xi)}[\ln p(z_n)]) &= \nabla_{\xi}(\int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln p(z_n) dZ dW) = \nabla_{\xi}(\int \int q(Z; X, \psi) q(W, \xi) \ln p(z_n) dZ dW) \\
&= \nabla_{\xi}(\int q(W, \xi) dW \int q(Z; X, \psi) \ln p(z_n) dZ) = \nabla_{\xi}(\int q(Z; X, \psi) \ln p(z_n) dZ) = 0 \\
&\quad (4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \nabla_{\xi}(\mathbb{E}_{q(Z,W;X,\psi,\xi)}[\ln q(z_n; x_n, \psi)]) = \nabla_{\xi}(\int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln q(z_n; x_n, \psi) dZ dW) \\
& = \nabla_{\xi}(\int \int q(Z; X, \psi) q(W, \xi) \ln q(z_n; x_n, \psi) dZ dW) = \nabla_{\xi}(\int q(W, \xi) dW \int q(Z; X, \psi) \ln q(z_n; x_n, \psi) dZ) \\
& = \nabla_{\xi}(\int q(Z; X, \psi) \ln q(z_n; x_n, \psi) dZ) = 0
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
& \nabla_{\psi}(\mathbb{E}_{q(Z,W;X,\psi,\xi)}[\ln p(W)]) = \nabla_{\psi}(\int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln p(W) dZ dW) = \nabla_{\psi}(\int \int q(Z; X, \psi) q(W, \xi) \ln p(W) dZ dW) \\
& = \nabla_{\psi}(\int q(Z; X, \psi) dZ \int q(W, \xi) \ln p(W) dW) = \nabla_{\psi}(\int q(W, \xi) \ln p(W) dW) = 0
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
& \nabla_{\psi}(\mathbb{E}_{q(Z,W;X,\psi,\xi)}[\ln q(W; \xi)]) = \nabla_{\psi}(\int \int q(Z, W; X, \psi, \xi) \ln q(W; \xi) dZ dW) \\
& = \nabla_{\psi}(\int \int q(Z; X, \psi) q(W, \xi) \ln q(W; \xi) dZ dW) = \nabla_{\psi}(\int q(Z; X, \psi) dZ \int q(W, \xi) \ln q(z_n; x_n, q(W; \xi)) dW) \\
& = \nabla_{\psi}(\int q(W, \xi) \ln q(z_n; x_n, q(W; \xi)) dW) = 0
\end{aligned} \tag{7}$$

これらを踏まえると、(6.12),(6.13) が求まる。なお、上記と同様にすると (6.12),(6.13) の残った項は微分しても微分する変数が関数の中に残るため、すぐに 0 になるとは言えないことがわかる。