

14.26

$$p(x^t)T(x^{t-1}|x^t) = p(x^{t-1})T(x^t|x^{t-1})$$

[解析]: 假设变量 x 所在的空间有 n 个状态 (s_1, s_2, \dots, s_n) , 定义在该空间上的一个转移矩阵 $T(n \times n)$ 如果满足一定的条件则该马尔可夫过程存在一个稳态分布 π , 使得

$$\pi T = \pi \quad (1)$$

其中, π 是一个是一个 n 维向量, 代表 s_1, s_2, \dots, s_n 对应的概率. 反过来, 如果我们希望采样得到符合某个分布 π 的一系列变量 x_1, x_2, \dots, x_t , 应当采用哪一个转移矩阵 $T(n \times n)$ 呢?

事实上, 转移矩阵只需要满足马尔可夫细致平稳条件

$$\pi(i)T(i, j) = \pi(j)T(j, i) \quad (2)$$

即公式14.26, 这里采用的符号与西瓜书略有区别以便于理解. 证明如下

$$\pi T(j) = \sum_i \pi(i)T(i, j) = \sum_i \pi(j)T(j, i) = \pi(j) \quad (3)$$

假设采样得到的序列为 $x_1, x_2, \dots, x_{t-1}, x_t$, 则可以使用MH算法来使得 x_{t-1} (假设为状态 s_i)转移到 x_t (假设为状态 s_j)的概率满足式(2).

14.28

$$A(x^*|x^{t-1}) = \min \left(1, \frac{p(x^*)Q(x^{t-1}|x^*)}{p(x^{t-1})Q(x^*|x^{t-1})} \right)$$

[推导]: 这个公式其实是拒绝采样的一个trick, 因为基于式14.27只需要

$$\begin{aligned} A(x^*|x^{t-1}) &= p(x^*)Q(x^{t-1}|x^*) \\ A(x^{t-1}|x^*) &= p(x^{t-1})Q(x^*|x^{t-1}) \end{aligned} \quad (4)$$

即可满足式14.26, 但是实际上等号右边的数值可能比较小, 比如各为0.1和0.2, 那么好不容易才到的样本只有百分之十几得到利用, 所以不妨将接受率设为0.5和1, 则细致平稳分布条件依然满足, 样本利用率大大提高, 所以可以将(4)改进为

$$\begin{aligned} A(x^*|x^{t-1}) &= \frac{p(x^*)Q(x^{t-1}|x^*)}{norm} \\ A(x^{t-1}|x^*) &= \frac{p(x^{t-1})Q(x^*|x^{t-1})}{norm} \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$norm = \max(p(x^{t-1})Q(x^*|x^{t-1}), p(x^*)Q(x^{t-1}|x^*)) \quad (6)$$

即教材的14.28.

14.32

$$\ln p(x) = \mathcal{L}(q) + \text{KL}(q \| p)$$

[推导]: 根据条件概率公式 $p(x, z) = p(z|x) * p(x)$, 可以得到 $p(x) = \frac{p(x, z)}{p(z|x)}$

然后两边同时作用 \ln 函数，可得 $\ln p(x) = \ln \frac{p(x,z)}{p(z|x)}$ (1)

因为 $q(z)$ 是概率密度函数，所以 $1 = \int q(z)dz$

等式两边同时乘以 $\ln p(x)$ ，因为 $\ln p(x)$ 是不关于变量 z 的函数，所以 $\ln p(x)$ 可以拿进积分里面，得到 $\ln p(x) = \int q(z) \ln p(x) dz$

$$\begin{aligned}
 \ln p(x) &= \int q(z) \ln p(x) \\
 &= \int q(z) \ln \frac{p(x,z)}{p(z|x)} \quad (\text{带入公式(1)}) \\
 &= \int q(z) \ln \left\{ \frac{p(x,z)}{q(z)} \cdot \frac{q(z)}{p(z|x)} \right\} \\
 &= \int q(z) \left(\ln \frac{p(x,z)}{q(z)} - \ln \frac{p(z|x)}{q(z)} \right) \\
 &= \int q(z) \ln \left\{ \frac{p(x,z)}{q(z)} \right\} - \int q(z) \ln \frac{p(z|x)}{q(z)} \\
 &= \mathcal{L}(q) + \text{KL}(q \parallel p) \quad (\text{根据 } \mathcal{L} \text{ 和 KL 的定义})
 \end{aligned}$$

14.36

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(q) &= \int \prod_i q_i \left\{ \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) - \sum_i \ln q_i \right\} d\mathbf{z} \\
 &= \int q_j \left\{ \int p(x, z) \prod_{i \neq j} q_i d\mathbf{z}_i \right\} d\mathbf{z}_j - \int q_j \ln q_j d\mathbf{z}_j + \text{const} \\
 &= \int q_j \ln \tilde{p}(\mathbf{x}, \mathbf{z}_j) d\mathbf{z}_j - \int q_j \ln q_j d\mathbf{z}_j + \text{const}
 \end{aligned}$$

[推导]：

$$\mathcal{L}(q) = \int \prod_i q_i \left\{ \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) - \sum_i \ln q_i \right\} d\mathbf{z} = \int \prod_i q_i \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} - \int \prod_i q_i \sum_i \ln q_i d\mathbf{z}$$

公式可以看做两个积分相减，我们先来看左边积分 $\int \prod_i q_i \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) d\mathbf{z}$ 的推导。

$$\begin{aligned}
 \int \prod_i q_i \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} &= \int q_j \prod_{i \neq j} q_i \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} \\
 &= \int q_j \left\{ \int \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \prod_{i \neq j} q_i d\mathbf{z}_i \right\} d\mathbf{z}_j \quad (\text{先对 } \mathbf{z}_j \text{ 求积分，再对 } \mathbf{z}_i \text{ 求积分})
 \end{aligned}$$

这个就是教材中的14.36左边的积分部分。

我们现在看下右边积分的推导 $\int \prod_i q_i \sum_i \ln q_i d\mathbf{z}$ 的推导。

在此之前我们看下 $\int \prod_i q_i \ln q_k d\mathbf{z}$ 的计算

$$\begin{aligned}
 \int \prod_i q_i \ln q_k d\mathbf{z} &= \int q_{i'} \prod_{i \neq i'} q_i \ln q_k d\mathbf{z} \quad (\text{选取一个变量 } q_{i'}, i' \neq k) \\
 &= \int q_{i'} \left\{ \int \prod_{i \neq i'} q_i \ln q_k d\mathbf{z}_i \right\} d\mathbf{z}_{i'}
 \end{aligned}$$

$\left\{ \int \prod_{i \neq i'} q_i \ln q_k d\mathbf{z}_i \right\}$ 部分与变量 $q_{i'}$ 无关，所以可以拿到积分外面。又因为 $\int q_{i'} d\mathbf{z}_{i'} = 1$ ，所以

$$\begin{aligned} \int \prod_i q_i \ln q_k d\mathbf{z} &= \int \prod_{i \neq i'} q_i \ln q_k d\mathbf{z}_i \\ &= \int q_k \ln q_k d\mathbf{z}_k \quad (\text{所有 } k \text{ 以外的变量都可以通过上面的方式消除}) \end{aligned}$$

有了这个结论，我们再来看公式

$$\begin{aligned} \int \prod_i q_i \sum_i \ln q_i d\mathbf{z} &= \int \prod_i q_i \ln q_j d\mathbf{z} + \sum_{k \neq j} \int \prod_i q_i \ln q_k d\mathbf{z} \\ &= \int q_j \ln q_j d\mathbf{z}_j + \sum_{z \neq j} \int q_k \ln q_k d\mathbf{z}_k \quad (\text{根据上面结论}) \\ &= \int q_j \ln q_j d\mathbf{z}_j + \text{const} \quad (\text{这里我们关心的是 } q_j, \text{ 其他变量可以视为 const}) \end{aligned}$$

这个就是14.36右边的积分部分。

14.40

$$q_j^*(\mathbf{z}_j) = \frac{\exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))])}{\int \exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))]) d\mathbf{z}_j}$$

[推导]：由14.39去对数并积分

$$\begin{aligned} \int q_j^*(\mathbf{z}_j) d\mathbf{z}_j &= \int \exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))]) \cdot \exp(\text{const}) d\mathbf{z}_j \\ &= \exp(\text{const}) \int \exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))]) d\mathbf{z}_j \quad (7) \\ &= 1 \end{aligned}$$

所以

$$\exp(\text{const}) = \frac{1}{\int \exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))]) d\mathbf{z}_j} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} q_j^*(\mathbf{z}_j) &= \exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))]) \cdot \exp(\text{const}) d\mathbf{z}_j \\ &= \frac{\exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))])}{\int \exp(\mathbb{E}_{i \neq j}[\ln(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))]) d\mathbf{z}_j} \quad (9) \end{aligned}$$