VAE でギブスサンプラーを作る

20B01392 松本侑真

2025 年 1 月 18 日

概要

目次

1　文字の定義

- x：入力データ
- z：潜在変数
- $\mu(x)$：入力データが従う確率分布
- $q_\theta(x)$：生成されるデータが従う確率分布
- $\pi(z)$：潜在変数が従う確率分布
- $Q_\theta(x|z)$：デコーダのモデル
- $P_\phi(z|x)$：エンコーダのモデル
- $Q_\theta(x,z)$：デコーダ側の同時分布
- $P_\phi(x,z)$：エンコーダー側の同時分布

入力データはギブス分布に従い、潜在変数は d 次元の標準正規分布に従う：

$$\mu(x) = \frac{1}{Z}\exp(-U(x)) \ , \tag{1.1}$$

$$\pi(z) = \mathcal{N}(z;0,I_d) \ 。 \tag{1.2}$$

エンコーダとデコーダは以下のようにモデル化している：

$$P_\phi(z|x) = \mathcal{N}(z;\mu_\phi(x),\Sigma_\phi(x)) \ , \tag{1.3}$$

$$Q_\theta(x|z) = p_D(x;\mu_\theta(z),\Sigma_\theta(z)) \ 。 \tag{1.4}$$

1.1　VAE の KL Divergence の上界

KL Divergence の左側に生成されるデータ、右側に入力データの分布を置くことに注意する。入力データはギブス分布に従うため、

$$\mathbb{E}_{\pi(z)Q_\theta(x|z)}[\log\mu(x)] = \mathbb{E}_{\pi(z)Q_\theta(x|z)}[\log(Z^{-1}e^{-U(x)})] = \log Z^{-1} - \mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)}[U(x)] \tag{1.5}$$

と計算されることを用いると、VAE の拡張の元で上界は以下のように計算される：

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}(q_\theta(x)||\mu(x)) \le D_{\mathrm{KL}}(Q_\theta(x,z)||P_\phi(x,z)) &= D_{\mathrm{KL}}(\pi(z)Q_\theta(x|z)||\mu(x)P_\phi(z|x)) \\ &= \mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)\pi(z)}\left[\log\frac{Q_\theta(x|z)\pi(z)}{P_\phi(z|x)}\right] + \mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)}[U(x)] - \log Z^{-1} \end{aligned} \tag{1.6}$$

定数部分を無視して右辺は以下のように計算される：

$$\mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)}[D_{\mathrm{KL}}(\pi(z)||P_\theta(z|x))] + \mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)\pi(z)}[\log Q_\theta(x|z) + U(x)] \ 。 \tag{1.7}$$

したがって、KL の上界最小化問題は

$$\operatorname*{argmin}_{\theta,\phi} D_{\mathrm{KL}}(Q_\theta(x,z)||P_\phi(x,z)) = \operatorname*{argmin}_{\theta,\phi}\left\{\mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)}[D_{\mathrm{KL}}(\pi(z)||P_\phi(z|x))] + \mathbb{E}_{Q_\theta(x|z)\pi(z)}[\log Q_\theta(x|z) + U(x)]\right\}$$

となる。

第一項目はガウス分布同士の KL Divergence であるため計算が進められる：

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}(\pi(z)||P_\phi(z|x)) &= D_{\mathrm{KL}}(\mathcal{N}(z;0,I_d)||\mathcal{N}(z;\mu_\phi(x),\sigma_\phi^2(x)I_d)) \\ &= \frac{1}{2}\left[\log\sigma_\phi(x)^2 - d + \frac{d}{\sigma_\phi(x)^2} + \frac{|\mu_\phi(x)|^2}{\sigma_\phi(x)^2}\right] 。 \end{aligned} \tag{1.8}$$

2 Appendix

2.1 ガウス分布同士の KL Divergence

ガウス分布同士の KL Divergence は以下のように計算される：

$$D_{\mathrm{KL}}(\mathcal{N}(x;\mu_x,\Sigma_x)||\mathcal{N}(y;\mu_y,\Sigma_y)) = \frac{1}{2}\left[\log\frac{|\Sigma_y|}{|\Sigma_x|} - d + \mathrm{Tr}(\Sigma_y^{-1}\Sigma_x) + (\mu_y-\mu_x)^\top\Sigma_y^{-1}(\mu_y-\mu_x)\right] \tag{2.9}$$

とくに、共分散行列が対角行列で表される場合、

$$D_{\mathrm{KL}}(\mathcal{N}(x;\mu_x,\sigma_x^2 I_d)||\mathcal{N}(y;\mu_y,\sigma_y^2 I_d)) = \frac{1}{2}\left[\log\frac{\sigma_y^2}{\sigma_x^2} - d + \frac{\sigma_x^2}{\sigma_y^2}d + \frac{1}{\sigma_y^2}|\mu_y-\mu_x|^2\right] \tag{2.10}$$

と計算される。