从狭义EM到变分自编码器

1. 狭义EM

Reference：[统计学习方法 第二版 第九章]

EM算法是一种迭代算法，1977 年由 Dempster 等人总结提出，用于含有隐变量（hidden variable）的概率模型参数的极大似然估计，或极大后验概率估计。EM算法的每次迭代由两步组成：E 步，求期望（expectation）；M 步，求极大（maximization）。所以这一算法称为期望极大算法（expectation maximization algorithm），简称 EM 算法。

1.1 EM 算法的引入

概率模型有时既含有观测变量（observable variable），又含有隐变量或潜在变量（latent variable）。如果概率模型的变量都是观测变量，那么给定数据，可以直接用极大似然估计法，或贝叶斯估计法估计模型参数（**此时只有固定的参数未知**）。EM 算法就是含有隐变量的概率模型参数的极大似然估计法，或**极大后验概率估计法**。

例1（三硬币模型）：假设有 3 枚硬币，分别记作 A，B，C。这些硬币正面出现的概率分别是 π，p，q。进行如下掷硬币试验：先掷硬币 A，根据其结果选出硬币 B 或硬币 C，正面选硬币 B，反面选硬币 C；然后掷选出的硬币，掷硬币的结果，出现正面记作 1，出现反面记作 0；独立地重复 n 次试验（这里，$n=10$），观测结果如下，如何估计三硬币模型的参数：

$$1,1,0,1,0,0,1,0,1,1$$

三硬币模型可以写作

$$P(y\mid\theta)=\sum_z P(y,z\mid\theta)=\sum_z P(z\mid\theta)P(y\mid z,\theta)=\pi p^y(1-p)^{1-y}+(1-\pi)q^y(1-q)^{1-y} \tag{1}$$

这里随机变量 y 是观测变量，表示一次试验观测到的结果是 1 或 0；随机变量 z 是隐变量，表示未观测到的掷硬币 A 的结果；$\theta=(\pi,p,q)$ 是模型参数。则所有观测数据的似然函数为

$$P(Y\mid\theta)=\sum_Z P(Z\mid\theta)P(Y\mid Z,\theta)=\prod_{j=1}^n[\pi p^{y_j}(1-p)^{1-y_j}+(1-\pi)q^{y_j}(1-q)^{1-y_j}] \tag{2}$$

考虑求模型参数 $\theta=(\pi,p,q)$ 的极大似然估计，即

$$\hat\theta=\arg\max_\theta \log P(Y\mid\theta) \tag{3}$$

这个问题没有解析解，因为 log 中有相加的两项，只有通过迭代的方法求解。

下列算法为何是EM算法?

E 步：计算在模型参数 $\pi^{(i)},p^{(i)},q^{(i)}$ 下观测数据 y_j 来自掷硬币 B 的概率

$$\mu_j^{(i+1)}=\frac{\pi^{(i)}(p^{(i)})^{y_j}(1-p^{(i)})^{1-y_j}}{\pi^{(i)}(p^{(i)})^{y_j}(1-p^{(i)})^{1-y_j}+(1-\pi^{(i)})(q^{(i)})^{y_j}(1-q^{(i)})^{1-y_j}} \tag{4}$$

M 步：计算模型参数的新估计值

$$\begin{aligned}\pi^{(i+1)}&=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^n\mu_j^{(i+1)}\\ p^{(i+1)}&=\frac{\sum_{j=1}^n\mu_j^{(i+1)}y_j}{\sum_{j=1}^n\mu_j^{(i+1)}}\\ q^{(i+1)}&=\frac{\sum_{j=1}^n(1-\mu_j^{(i+1)})y_j}{\sum_{j=1}^n(1-\mu_j^{(i+1)})}\end{aligned} \tag{5}$$

按照上述迭代步骤直至收敛，若假设模型参数初值为 $\pi^{(0)}=0.5,p^{(0)}=0.5,q^{(0)}=0.5$，则模型参数的极大似然估计为 $\hat\pi=0.5,\hat p=0.6,\hat q=0.6$。若假设模型参数初值为 $\pi^{(0)}=0.4,p^{(0)}=0.6,q^{(0)}=0.6$，则模型参数的极大似然估计为 $\hat\pi=0.4064,\hat p=0.5368,\hat q=0.6432$。

一般地，用 Y 表示观测随机变量的数据，Z 表示隐随机变量的数据。Y 和 Z 连在一起称为完全数据（complete-data），观测数据 Y 又称为不完全数据（incomplete-data）。

首先写出所有观测的似然函数

$$P(Y\mid\theta)=\prod_{j=1}^n P(y_i\mid\theta)=\prod_{j=1}^n[\pi p+(1-\pi)q]^{y_i}[\pi(1-p)+(1-\pi)(1-q)]^{(1-y_i)} \tag{6}$$

计算 $P(z_j=1\mid y_j,\theta^{(i)})$：

$$\mu_j^{(i+1)}=P(z_j=1\mid y_j,\theta^{(i)})=\frac{P(y_j\mid z_j=1,\theta^{(i)})P(z_j=1\mid\theta^{(i)})}{P(y_j\mid\theta^{(i)})}=\begin{cases}\frac{\pi^{(i)}p^{(i)}}{\pi^{(i)}p^{(i)}+(1-\pi^{(i)})q^{(i)}} & \text{if } y_j=1\\ \frac{\pi^{(i)}(1-p^{(i)})}{\pi^{(i)}(1-p^{(i)})+(1-\pi^{(i)})(1-q^{(i)})} & \text{if } y_j=0\end{cases}\tag{7}$$

计算完全数据的对数似然函数的期望

$$\begin{aligned}Q(\theta\mid\theta^{(i)})=&\mathbb{E}_{P(Z|Y,\theta^{(i)})}[\log P(Y,Z\mid\theta)]\\=&\mathbb{E}_{P(Z|Y,\theta^{(i)})}[\sum_{j=1}^{n}\log P(y_j,z_j\mid\theta)]\\=&\sum_{j=1}^{n}\mathbb{E}_{P(z_j|y_j,\theta^{(i)})}[\log P(y_j,z_j\mid\theta)]\\=&\sum_{j=1}^{n}\sum_{z_j}P(z_j\mid y_j,\theta^{(i)})\log P(y_j,z_j\mid\theta)\\=&\sum_{j=1}^{n}\left[\mu_j^{(i+1)}\log\left(\pi p^{y_j}(1-p)^{(1-y_j)}\right)+(1-\mu_j^{(i+1)})\log\left((1-\pi)q^{y_j}(1-q)^{(1-y_j)}\right)\right]\end{aligned}\tag{8}$$

对各参数求导，并令其满足一阶条件可得公式（5）。

算法1 （EM 算法）：
输入：观测变量数据 Y，隐变量数据 Z，联合分布 $P(Y,Z\mid\theta)$，条件分布 $P(Z\mid Y,\theta)$；
输出：模型参数 θ。
（1）选择参数的初值 $\theta^{(0)}$，开始迭代；
（2）E 步：记 $\theta^{(i)}$ 为第 i 次迭代参数的估计值，在第 $i+1$ 次迭代的 E 步，计算

$$Q(\theta,\theta^{(i)})=E_Z[\log P(Y,Z\mid\theta)\mid Y,\theta^{(i)}]=\sum_Z P(Z\mid Y,\theta^{(i)})\log P(Y,Z\mid\theta)\tag{9}$$

（3）M 步：求使 $Q(\theta,\theta^{(i)})$ 极大化的 θ，确定第 $i+1$ 次迭代的参数的估计值 $\theta^{(i+1)}$

$$\theta^{(i+1)}=\arg\max_\theta Q(\theta,\theta^{(i)})\tag{10}$$

（4）重复第（2）步和第（3）步，直到收敛。

注意：参数的初值可以任意选择，但 EM 算法对初值是敏感的。

定义1：Q 函数（Q function）
完全数据的对数似然函数 $\log P(Y,Z\mid\theta)$ 关于在给定观测数据 Y 和当前参数 $\theta^{(i)}$ 下对未观测数据 Z 的条件概率分布 $P(Z\mid Y,\theta^{(i)})$ 的期望称为 Q 函数

$$Q(\theta,\theta^{(i)})=E_Z[\log P(Y,Z\mid\theta)\mid Y,\theta^{(i)}]\tag{11}$$

1.2 EM 算法的导出

1.2.1 方法一（正向推导，只需要有进步即可）

Reference：[统计学习方法 第二版 179页]
面对一个含有隐变量的概率模型，目标是极大化观测数据（不完全数据） Y 关于参数 θ 的对数似然函数，即极大化

$$L(\theta)=\log P(Y\mid\theta)=\log\sum_Z P(Y,Z\mid\theta)=\log\left(\sum_Z P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)\right)\tag{12}$$

上式极大化的主要困难在于未观测数据以及对数里的和（或者积分）。

EM 算法是通过迭代逐步近似极大化 $L(\theta)$ 的，假设在第 i 次迭代后 θ 的估计值是 $\theta^{(i)}$ 。我们希望新估计值 θ 能使 $L(\theta)$ 增加，即 $L(\theta)>L(\theta^{(i)})$ ，并逐步达到极大值。

$$L(\theta)-L(\theta^{(i)})=\log\left(\sum_Z P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)\right)-\log P(Y\mid\theta^{(i)})\tag{13}$$

利用 Jensen 不等式得到其下界：

$$\begin{aligned}L(\theta)-L(\theta^{(i)})=&\log\left(\sum_Z P(Z\mid Y,\theta^{(i)})\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P(Z\mid Y,\theta^{(i)})}\right)-\log P(Y\mid\theta^{(i)})\\\geq&\sum_Z P(Z\mid Y,\theta^{(i)})\log\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P(Z\mid Y,\theta^{(i)})}-\log P(Y\mid\theta^{(i)})\\=&\sum_Z P(Z\mid Y,\theta^{(i)})\log\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P(Z\mid Y,\theta^{(i)})}-\sum_Z P(Z\mid Y,\theta^{(i)})\log P(Y\mid\theta^{(i)})\\=&\sum_Z P(Z\mid Y,\theta^{(i)})\log\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P(Z\mid Y,\theta^{(i)})P(Y\mid\theta^{(i)})}\end{aligned}\tag{14}$$

令

$$B(\theta,\theta^{(i)}) = L(\theta^{(i)}) + \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log \frac{P(Y \mid Z,\theta)P(Z \mid \theta)}{P(Z \mid Y,\theta^{(i)})P(Y \mid \theta^{(i)})} \tag{15}$$

则 $L(\theta) \geq B(\theta,\theta^{(i)})$，即函数 $B(\theta,\theta^{(i)})$ 是 $L(\theta)$ 的一个下界，而且 $B(\theta^{(i)},\theta^{(i)}) = L(\theta^{(i)})$ 。因此，任何使 $B(\theta,\theta^{(i)})$ 相较于在 $\theta^{(i)}$ 处增大的 θ 也可以使相应的 $L(\theta)$ 增大，即 $L(\theta^{(i)}) = B(\theta^{(i)},\theta^{(i)}) \leq B(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) \leq L(\theta^{(i+1)})$ 。

$$\begin{aligned}
\theta^{(i+1)} &= \arg\max_\theta B(\theta,\theta^{(i)}) \\
&= \arg\max_\theta \left(L(\theta^{(i)}) + \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log \frac{P(Y \mid Z,\theta)P(Z \mid \theta)}{P(Z \mid Y,\theta^{(i)})P(Y \mid \theta^{(i)})} \right) \\
&= \arg\max_\theta \left(\sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log P(Y \mid Z,\theta)P(Z \mid \theta) \right) \\
&= \arg\max_\theta Q(\theta,\theta^{(i)})
\end{aligned} \tag{16}$$

下图给出 EM 算法的直观解释：

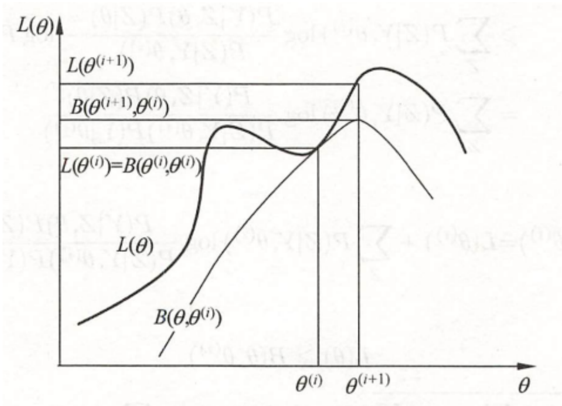


图 9.1　EM 算法的解释

1.2.2 方法二（通过条件概率公式引入隐变量）

Reference：[变分推断PPT]
对等式两边 $\log P(Y \mid \theta) = \log P(Y,Z \mid \theta) - \log P(Z \mid Y,\theta)$ 分别关于隐变量的后验分布求期望

左边得到

$$\begin{aligned}
\text{Left} &= \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log P(Y \mid \theta) \\
&= \log P(Y \mid \theta) \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \\
&= \log P(Y \mid \theta)
\end{aligned} \tag{17}$$

右边得到

$$\begin{aligned}
\text{Right} &= \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log P(Y,Z \mid \theta) - \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log P(Z \mid Y,\theta) \\
&= Q(\theta,\theta^{(i)}) - H(\theta,\theta^{(i)})
\end{aligned} \tag{18}$$

此处 $Q(\theta,\theta^{(i)})$ 即为 EM 算法中 M 步的优化目标，因此有 $Q(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) \geq Q(\theta^{(i)},\theta^{(i)})$ 。

而对于 $H(\theta,\theta^{(i)})$ ，可以证明

$$\begin{aligned}
& H(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) - H(\theta^{(i)},\theta^{(i)}) \\
=& \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log P(Z \mid Y,\theta^{(i+1)}) - \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \\
=& \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \log \frac{P(Z \mid Y,\theta^{(i+1)})}{P(Z \mid Y,\theta^{(i)})} \\
\leq& \log \sum_Z P(Z \mid Y,\theta^{(i)}) \cdot \frac{P(Z \mid Y,\theta^{(i+1)})}{P(Z \mid Y,\theta^{(i)})} \\
=& 0
\end{aligned} \tag{19}$$

从而得到

$$\begin{aligned}
& \log P(Y \mid \theta^{(i+1)}) - \log P(Y \mid \theta^{(i)}) \\
=& [Q(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) - H(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)})] - [Q(\theta^{(i)},\theta^{(i)}) - H(\theta^{(i)},\theta^{(i)})] \\
=& [Q(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) - Q(\theta^{(i)},\theta^{(i)})] - [H(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) - H(\theta^{(i)},\theta^{(i)})] \\
\geq& 0
\end{aligned} \tag{20}$$

1.2.3 方法三（引入隐变量的近似分布，承接变分推断内容）

Reference：[变分推断PPT]

引入隐变量 Z 的某种分布 $q_\phi(Z)$

$$\begin{aligned} \log P(Y \mid \theta) &= \log P(Y, Z \mid \theta) - \log P(Z \mid Y, \theta) \\ &= \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{q(Z)} - \log \frac{P(Z \mid Y, \theta)}{q(Z)} \end{aligned} \tag{21}$$

对上式两边分别关于分布 $q(Z)$ 求期望，左边得到

$$\begin{aligned} \text{Left } &= \sum_Z q(Z) \log P(Y \mid \theta) \\ &= \log P(Y \mid \theta) \end{aligned} \tag{22}$$

右边得到

$$\text{Right } = \sum_Z q(Z) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{q(Z)} - \sum_Z q(Z) \log \frac{P(Z \mid Y, \theta)}{q(Z)} \tag{23}$$

联立得到

$$\begin{aligned} \underbrace{\log P(Y \mid \theta)}_{\text{evidence}} &= \sum_Z q(Z) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{q(Z)} - \sum_Z q(Z) \log \frac{P(Z \mid Y, \theta)}{q(Z)} \\ &= \underbrace{\sum_Z q(Z) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{q(Z)}}_{\text{ELBO}} + \underbrace{\sum_Z q(Z) \log \frac{q(Z)}{P(Z \mid Y, \theta)}}_{\text{KL}(q(Z)) || P(Z \mid Y, \theta)} \end{aligned} \tag{24}$$

- $\log P(Y \mid \theta)$ 被称为证据（evidence）
- $\sum_Z q(Z) \log \frac{P(Y,Z|\theta)}{q(Z)}$ 被称为证据下界（evidence lower bound，ELBO）
- $\sum_Z q(Z) \log \frac{q(Z)}{P(Z|Y,\theta)} = KL(q(Z) \mid\mid P(Z \mid Y, \theta))$ 是分布 $q(Z)$ 相对于分布 $P(Z \mid Y, \theta)$ 的 KL散度（Kullback-Leibler divergence）

因为 KL 散度非负，从而得到下式，当且仅当 $q(Z) = P(Z \mid Y, \theta)$ 时取等号

$$\underbrace{\log P(Y \mid \theta)}_{\text{evidence}} \geq \underbrace{\sum_Z q(Z) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{q(Z)}}_{\text{ELBO}} \tag{25}$$

E 步：固定参数 $\theta^{(i)}$， 取 $q(Z) = P(Z \mid Y, \theta^{(i)})$，此时有（**不严谨，为何此时取等号**）

$$\underbrace{\log P(Y \mid \theta)}_{\text{evidence}} = \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})}}_{\text{ELBO}} \tag{26}$$

M 步：ELBO 关于参数 θ 求最大，更新参数

$$\begin{aligned} \theta^{(i+1)} &= \arg\max_\theta \sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})} \\ &= \arg\max_\theta \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log P(Y, Z \mid \theta)}_{Q(\theta, \theta^{(i)})} \end{aligned} \tag{27}$$

笔者更正：固定参数 $\theta^{(i)}$， 取 $q(Z) = P(Z \mid Y, \theta^{(i)})$，此时有

$$\log P(Y \mid \theta) = \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta)}{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})}}_{A} + \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})}{P(Z \mid Y, \theta)}}_{B} \tag{28}$$

而当$\theta = \theta^{(i)}$ 时有

$$\log P(Y \mid \theta^{(i)}) = \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y, Z \mid \theta^{(i)})}{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})}}_{C} + \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})}{P(Z \mid Y, \theta^{(i)})}}_{D} \tag{29}$$

由KL散度性质可知 $B \geq D = 0$：

$$\begin{aligned} \theta^{(i+1)} &= \arg\max_\theta \underbrace{\sum_Z P(Z \mid Y, \theta^{(i)}) \log P(Y, Z \mid \theta)}_{Q(\theta, \theta^{(i)})} \\ &= \arg\max_\theta A \\ \Rightarrow \quad & A(\theta^{(i+1)}) \geq C \\ \Rightarrow \quad & \log P(Y \mid \theta^{(i+1)}) \geq \log P(Y \mid \theta^{(i)}) \end{aligned} \tag{30}$$

1.3 EM 算法的收敛性

定理1：设 $L(\theta)=\log P(Y\mid\theta)$ 为观测数据的对数似然函数，$\theta^{(i)}(i=1,2,\cdots)$ 为 EM 算法得到的参数估计序列， $L\left(\theta^{(i)}\right)(i=1,2,\cdots)$ 为对应的对数似然函数序列。
(1) 如果 $P(Y\mid\theta)$ 有上界，则 $L\left(\theta^{(i)}\right)=\log P\left(Y\mid\theta^{(i)}\right)$ 收敛到某一值 L^*；
(2) **在函数 $Q\left(\theta,\theta'\right)$ 与 $L(\theta)$ 满足一定条件下**，由 EM 算法得到的参数估计序列 $\theta^{(i)}$ 的收敛值 θ^* 是 $L(\theta)$ 的稳定点。

证明：
(1) 由 $L(\theta)=\log P\left(Y\mid\theta^{(i)}\right)$ 的单调性及 $P(Y\mid\theta)$ 的有界性得到。
(2) 证明从略，参阅文献 [1983 On the convergence properties of the EM algorithm]。

1.4 EM 算法在高斯混合模型学习中的应用

定义2：高斯混合模型
高斯混合模型是指具有如下形式的概率分布模型：

$$P(y\mid\theta)=\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\cdot\phi(y\mid\theta_k) \tag{31}$$

其中，α_k 是系数，$\alpha_k\geq 0$，$\sum_{k=1}^{K}\alpha_k=1$；$\phi(y\mid\theta_k)$ 是高斯分布密度，$\theta_k=(\mu_k,\sigma_k^2)$，

$$\phi(y\mid\theta_k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(y-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right) \tag{32}$$

称为第 k 个分模型。一般混合模型可以由任意概率分布密度代替式（29）中的高斯分布密度，此处只介绍最常用的高斯混合模型。

1.4.1 高斯混合模型参数估计的 EM 算法

假设观测数据 $y_1,y_2,\ldots,y_N$ 由高斯混合模型生成，

$$P(y\mid\theta)=\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\cdot\phi(y\mid\theta_k) \tag{33}$$

其中，$\theta=(\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_K;\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_K)$。

观测数据的产生过程：首先依概率 $(\alpha_1,\ldots,\alpha_K)$ 选择第 k 个高斯分布模型，然后依第 k 个分模型的概率分布 $\phi(y\mid\theta_k)$ 生成观测数据 y_j。这时观测数据 y_j，$j=1,2,\ldots,N$ 是已知的；反映观测数据 y_j 来自第 k 个分模型的数据是未知的，$k=1,2,\ldots,K$，以隐变量 γ_{jk} 表示，其定义如下：

$$\gamma_{jk}=\begin{cases}1, & \text{第 } j \text{ 个观测来自第 } k \text{ 个分模型}\\ 0, & \text{否则}\end{cases} \tag{34}$$

有了观测数据 y_j 及未观测数据 γ_{jk}，那么完全数据是

$$(y_j,\gamma_{j1},\gamma_{j2},\ldots,\gamma_{jK}),\quad j=1,2,\ldots,N \tag{35}$$

于是可以写出完全数据的似然函数

$$\begin{aligned}P(y,\gamma\mid\theta)&=\prod_{j=1}^{N}P(y_j,\gamma_{j1},\gamma_{j2},\ldots,\gamma_{jK}\mid\theta)\\&=\prod_{k=1}^{K}\prod_{j=1}^{N}\left[\alpha_k\cdot\phi(y_j\mid\theta_k)\right]^{\gamma_{jk}}\\&=\prod_{k=1}^{K}\alpha_k^{n_k}\prod_{j=1}^{N}\left[\phi(y_j\mid\theta_k)\right]^{\gamma_{jk}}\\&=\prod_{k=1}^{K}\alpha_k^{n_k}\prod_{j=1}^{N}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(y_j-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)\right]^{\gamma_{jk}}\end{aligned} \tag{36}$$

式中，$n_k=\sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}$，$\sum_{k=1}^{K}n_k=N$。

那么，完全数据的对数似然函数为

$$\log P(y,\gamma\mid\theta)=\sum_{k=1}^{K}\left\{n_k\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\} \tag{37}$$

进一步计算 Q 函数

$$\begin{aligned}Q(\theta,\theta^{(i)})&=E\left[\log P(y,\gamma\mid\theta)\mid y,\theta^{(i)}\right]\\&=E\left\{\sum_{k=1}^{K}\left\{n_k\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\}\right\}\\&=\sum_{k=1}^{K}\left\{\sum_{j=1}^{N}(E[\gamma_{jk}])\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}(E[\gamma_{jk}])\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\}\end{aligned} \tag{38}$$

这里需要计算 $E(\gamma_{jk}\mid y,\theta)$，记为 $\hat{\gamma}_{jk}$ 。

$$\begin{aligned}
\hat{\gamma}_{jk} &= E\left(\gamma_{jk}\mid y,\theta\right)=P\left(\gamma_{jk}=1\mid y,\theta\right)\\
&=\frac{P\left(\gamma_{jk}=1,y_j\mid\theta\right)}{\sum_{k=1}^{K}P\left(\gamma_{jk}=1,y_j\mid\theta\right)}\\
&=\frac{P\left(y_j\mid\gamma_{jk}=1,\theta\right)P\left(\gamma_{jk}=1\mid\theta\right)}{\sum_{k=1}^{K}P\left(y_j\mid\gamma_{jk}=1,\theta\right)P\left(\gamma_{jk}=1\mid\theta\right)}\\
&=\frac{\alpha_k\phi\left(y_j\mid\theta_k\right)}{\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\phi\left(y_j\mid\theta_k\right)},\quad j=1,2,\cdots,N;\quad k=1,2,\cdots,K
\end{aligned}\tag{39}$$

$\hat{\gamma}_{jk}$ 是在当前模型参数下第 j 个观测数据来自第 k 个分模型的概率，称为分模型 k 对观测数据 y_j 的响应度。将$\hat{\gamma}_{jk}=E[\gamma_{jk}]$ 及 $\hat{n}_k=\sum_{j=1}^{N}E[\gamma_{jk}]$ 代入式（38），即得

$$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)=\sum_{k=1}^{K}\left\{\hat{n}_k\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}\left(y_j-\mu_k\right)^2\right]\right\}\tag{40}$$

迭代的 M 步是求函数 $Q(\theta,\theta^{(i)})$ 对 θ 的极大值，即求新一轮迭代的模型参数

$$\theta^{(i+1)}=\arg\max_{\theta}Q(\theta,\theta^{(i)})\tag{41}$$

用 $\hat{\mu}_k$，$\hat{\sigma}_k^2$ 及 $\hat{\alpha}_k$ ，$k=1,2,\ldots,K$，表示 $\theta^{(i+1)}$ 的各参数。求 $\hat{\mu}_k$，$\hat{\sigma}_k^2$ 只需将式（40）分别对 $\hat{\mu}_k$，$\hat{\sigma}_k^2$ 求偏导数并令其为 0， 即可得到；求 $\hat{\alpha}_k$ 是在 $\sum_{k=1}^{K}\alpha_k=1$ 条件下求偏导数并令其为 0 得到的（**为何不用检验函数的凹凸性**）。结果如下

$$\hat{\mu}_k=\frac{\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}\cdot y_j}{\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}},\quad k=1,2,\ldots,K\tag{42}$$

$$\hat{\sigma}_k^2=\frac{\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}(y_j-\mu_k)^2}{\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}},\quad k=1,2,\ldots,K\tag{43}$$

$$\hat{\alpha}_k=\frac{\hat{n}_k}{N}=\frac{\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}}{N},\quad k=1,2,\ldots,K\tag{44}$$

重复以上计算，直到对数似然函数值不再有明显的变化为止。

1.5 EM 算法的推广（可参考变分推断PPT更简单易理解）

1.5.1 F 函数的极大-极大算法

定义3：F 函数
假设隐变量数据 Z 的概率分布为 $\tilde{P}(Z)$，定义分布 $\tilde{P}$ 与参数 θ 的函数 $F(\tilde{P},\theta)$ 如下

$$F(\tilde{P},\theta)=E_{\tilde{P}}[\log P(Y,Z\mid\theta)]+H(\tilde{P})\tag{45}$$

称为 F 函数，式中 $H(\tilde{P})=-E_{\tilde{P}}\log\tilde{P}(Z)$ 是分布 $\tilde{P}(Z)$ 的熵。

在定义2中，通常假设 $P(Y,Z\mid\theta)$ 是 θ 的连续函数，因而 $F(\tilde{P},\theta)$ 是 $\tilde{P}$ 和 θ 的连续函数。函数 $F(\tilde{P},\theta)$ 还有以下重要性质。

引理1：
对于固定的 θ ，存在唯一的分布 $\tilde{P}_\theta$ 极大化 $F(\tilde{P},\theta)$，这时 $\tilde{P}_\theta$ 由下式给出

$$\tilde{P}_\theta(Z)=P(Z\mid Y,\theta)\tag{46}$$

并且 $\tilde{P}_\theta$ 随 θ 连续变化。

证明：
对于固定的 θ，可以求得使 $F(\tilde{P},\theta)$ 达到极大的分布 $\tilde{P}_\theta(Z)$。为此，引进拉格朗日乘子 λ，拉格朗日函数为

$$L=E_{\tilde{P}}\log P(Y,Z\mid\theta)-E_{\tilde{P}}\log\tilde{P}(Z)+\lambda\left(1-\sum_{Z}\tilde{P}(Z)\right)\tag{47}$$

将其对 $\tilde{P}$ 求偏导数（**求和符号怎么消去的？**）

$$\frac{\partial L}{\partial\tilde{P}(Z)}=\log P(Y,Z\mid\theta)-\log\tilde{P}(Z)-1-\lambda\tag{48}$$

令偏导数等于 0，得出

$$\lambda=\log P(Y,Z\mid\theta)-\log\tilde{P}_\theta(Z)-1\tag{49}$$

由此推出 $\tilde{P}_\theta(Z)$ 与 $P(Y,Z\mid\theta)$ 成比例

$$\frac{P(Y,Z\mid\theta)}{\tilde{P}_\theta(Z)}=\exp(1+\lambda) \tag{50}$$

再从约束条件 $\sum_Z \tilde{P}_\theta(Z)=1$ 得到式（46）。
由假设 $P(Y,Z\mid\theta)$ 是 θ 的连续函数，得到 $\tilde{P}_\theta$ 是 θ 的连续函数。

引理2：
若 $\tilde{P}_\theta(Z)=P(Z\mid Y,\theta)$，则

$$F(\tilde{P},\theta)=\log P(Y\mid\theta) \tag{51}$$

证明：

$$\begin{aligned}
F(\tilde{P},\theta)=&E_{\tilde{P}}[\log P(Y,Z\mid\theta)]+H(\tilde{P})\\
=&E_{\tilde{P}}[\log\frac{P(Y,Z\mid\theta)}{P(Z\mid Y,\theta)}]\\
=&\sum_Z P(Z\mid Y,\theta)\cdot\log\frac{P(Y,Z\mid\theta)}{P(Z\mid Y,\theta)}\\
=&\sum_Z P(Z\mid Y,\theta)\cdot\log P(Y\mid\theta)\\
=&\log P(Y\mid\theta)
\end{aligned} \tag{52}$$

由以上引理，可以得到关于 EM 算法用 F 函数的极大-极大算法的解释。
定理2：
设 $L(\theta)=\log P(Y\mid\theta)$ 为观测数据的对数似然函数，$\theta^{(i)},i=1,2,\ldots$，为 EM 算法得到的参数估计序列，函数 $F(\tilde{P},\theta)$ 由式（45）定义。如果 $F(\tilde{P},\theta)$ 在 $\tilde{P}^*$ 和 θ^* 有局部极大值，那么 $L(\theta)$ 也在 θ^* 有局部极大值。类似地，如果 $F(\tilde{P},\theta)$ 在 $\tilde{P}^*$ 和 θ^* 达到全局最大值，那么 $L(\theta)$ 也在 θ^* 达到全局最大值。
证明：
由引理1和引理2可知，$L(\theta)=\log P(Y\mid\theta)=F(\tilde{P}_\theta,\theta)$ **对任意 θ 成立**。特别地，对于使 $F(\tilde{P},\theta)$ 达到极大的参数 θ^*，有

$$L(\theta^*)=F(\tilde{P}_{\theta^*},\theta^*)=F(\tilde{P}^*,\theta^*) \tag{53}$$

为了证明 θ^* 是 $L(\theta)$ 的极大点，需要证明不存在接近 θ^* 的点 θ^{**}，使 $L(\theta^{**})>L(\theta^*)$。假如存在这样的点 θ^{**}，那么应有 $F(\tilde{P}^{**},\theta^{**})>F(\tilde{P}^*,\theta^*)$，这里 $\tilde{P}^{**}=\tilde{P}_{\theta^{**}}$。但因 $\tilde{P}_\theta$ 是随 θ 连续变化的，$\tilde{P}^{**}$ 应接近 $\tilde{P}^*$，这与 $\tilde{P}^*$ 和 θ^* 是 $F(\tilde{P},\theta)$ 的局部极大点的假设矛盾。
类似可以证明关于全局最大值的讨论。

定理3：
EM 算法的一次迭代可由 F 函数的极大-极大算法实现。
设 $\theta^{(i)}$ 为第 i 次迭代参数 θ 的估计, $\tilde{P}^{(i)}$ 为第 i 次迭代函数 $\tilde{P}$ 的估计。在第 $i+1$次迭代的两步为：
(1) 对固定的 $\theta^{(i)}$, 求 $\tilde{P}^{(i+1)}$ 使 $F\left(\tilde{P},\theta^{(i)}\right)$ 极大化;
(2) 对固定的 $\tilde{P}^{(i+1)}$, 求 $\theta^{(i+1)}$ 使 $F\left(\tilde{P}^{(i+1)},\theta\right)$ 极大化。

证明：
(1) 由引理 1, 对于固定的 $\theta^{(i)}$,

$$\tilde{P}^{(i+1)}(Z)=\tilde{P}_{\theta^{(i)}}(Z)=P(Z\mid Y,\theta^{(i)}) \tag{54}$$

使 $F(\tilde{P},\theta^{(i)})$ 极大化。此时，

$$\begin{aligned}
F(\tilde{P}^{(i+1)},\theta)&=E_{\tilde{P}^{(i+1)}}[\log P(Y,Z\mid\theta)]+H(\tilde{P}^{(i+1)})\\
&=\sum_Z\log P(Y,Z\mid\theta)P(Z\mid Y,\theta^{(i)})+H(\tilde{P}^{(i+1)})
\end{aligned} \tag{55}$$

由 $Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$ 的定义式 (9.11) 有

$$F\left(\tilde{P}^{(i+1)},\theta\right)=Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)+H\left(\tilde{P}^{(i+1)}\right) \tag{56}$$

(2) 固定 $\tilde{P}^{(i+1)}$，求 $\theta^{(i+1)}$ 使 $F\left(\tilde{P}^{(i+1)},\theta\right)$ 极大化。得到

$$\theta^{(i+1)}=\arg\max_\theta F\left(\tilde{P}^{(i+1)},\theta\right)=\arg\max_\theta Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right) \tag{57}$$

通过以上两步完成了 EM 算法的一次迭代。由此可知，由 EM算法与 F 函数的极大-极大算法得到的参数估计序列 $\theta^{(i)},i=1,2,\cdots$，是一致的。

1.5.2 GEM 算法

算法
输入：观测数据， F 函数；
输出：模型参数。
(1) 初始化参数 $\theta^{(0)}$，开始迭代；

(2) 第 $i+1$ 次迭代，第 1 步：记 $\theta^{(i)}$ 为参数 θ 的估计值，$\tilde{P}^{(i)}$ 为函数 $\tilde{P}$ 的估计，求 $\tilde{P}^{(i+1)}$ 使 $\tilde{P}$ 极大化 $F\left(\tilde{P}, \theta^{(i)}\right)$；
(3) 第 2 步：求 $\theta^{(i+1)}$ 使 $F\left(\tilde{P}^{(i+1)}, \theta\right)$ 极大化；
(4) 重复 (2) 和 (3)，直到收敛。

在 GEM 算法 1 中，有时求 $Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right)$ 的极大化是很困难的。下面介绍的 GEM 算法 2 和 GEM 算法 3 并不是直接求 $\theta^{(i+1)}$ 使 $Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right)$ 达到极大的 θ，而是找一个 $\theta^{(i+1)}$ 使得 $Q\left(\theta^{(i+1)}, \theta^{(i)}\right)>Q\left(\theta^{(i)}, \theta^{(i)}\right)$ 。

算法2：
输入：观测数据, Q 函数;
输出：模型参数。
(1) 初始化参数 $\theta^{(0)}$，开始迭代；
(2) 第 $i+1$ 次迭代，第 1 步：记 $\theta^{(i)}$ 为参数 θ 的估计值，计算

$$
\begin{aligned}
Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right) & =E_Z\left[\log P(Y, Z \mid \theta) \mid Y, \theta^{(i)}\right] \\
& =\sum_Z P\left(Z \mid Y, \theta^{(i)}\right) \log P(Y, Z \mid \theta)
\end{aligned} \tag{58}
$$

(3) 第 2 步：求 $\theta^{(i+1)}$ 使

$$
Q\left(\theta^{(i+1)}, \theta^{(i)}\right)>Q\left(\theta^{(i)}, \theta^{(i)}\right) \tag{59}
$$

(4) 重复 (2) 和 (3)，直到收敛。

当参数 θ 的维数为 $d(d \geqslant 2)$ 时，可采用一种特殊的 GEM 算法，它将 EM 算法的 M 步分解为 d 次条件极大化，每次只改变参数向量的一个分量，其余分量不改变。

算法3：
输入：观测数据，Q 函数；
输出：模型参数。
(1) 初始化参数 $\theta^{(0)}=\left(\theta_1^{(0)}, \theta_2^{(0)}, \cdots, \theta_d^{(0)}\right)$，开始迭代；
(2) 第 $i+1$ 次迭代，第 1 步：记 $\theta^{(i)}=\left(\theta_1^{(i)}, \theta_2^{(i)}, \cdots, \theta_d^{(i)}\right)$ 为参数 $\theta=\left(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_d\right)$的估计值，计算

$$
\begin{aligned}
Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right) & =E_Z\left[\log P(Y, Z \mid \theta) \mid Y, \theta^{(i)}\right] \\
& =\sum_Z P\left(Z \mid y, \theta^{(i)}\right) \log P(Y, Z \mid \theta)
\end{aligned} \tag{60}
$$

(3) 第 2 步：进行 d 次条件极大化：
首先，在 $\theta_2^{(i)}, \cdots, \theta_d^{(i)}$ 保持不变的条件下求使 $Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right)$ 达到极大的 $\theta_1^{(i+1)}$；然后，在 $\theta_1=\theta_1^{(i+1)}, \theta_j=\theta_j^{(i)}, j=3,4, \cdots, d$ 的条件下求使 $Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right)$ 达到极大的 $\theta_2^{(i+1)}$；
如此继续，经过 d 次条件极大化，得到 $\theta^{(i+1)}=\left(\theta_1^{(i+1)}, \theta_2^{(i+1)}, \cdots, \theta_d^{(i+1)}\right)$ 使得

$$
Q\left(\theta^{(i+1)}, \theta^{(i)}\right)>Q\left(\theta^{(i)}, \theta^{(i)}\right) \tag{61}
$$

(4) 重复 (2) 和 (3)，直到收敛。

2. 变分推断

Reference：[变分推断PPT]

2.1 变分推断介绍

变分推断（Variational Inference，VI）是贝叶斯学习中常用的、含有隐变量模型的学习和推断方法。变分推断和马尔科夫链蒙特卡洛法（MCMC）属于不同的技巧：

- MCMC通过随机抽样的方法近似地计算模型的后验概率（采样），适合小数据集以及精确度更重要的场景
- 变分推断通过解析的方法计算模型的后验概率的近似值（优化），适合大数据集以及想快速测试多种模型的场景

为什么关心后验概率 $P(\theta \mid X)$?

1. 推断（Beyesian Inference）：后验分布 $P(\theta \mid X)$ 包含了模型的重要信息，描述了数据样本产生的过程，例如从用户的观影历史评分信息 Y 中推断用户的偏好模型 θ
2. 决策（Beyesian Dicision Theory）：对于新样本 $\tilde{x}$，求 $P(\tilde{x} \mid X)$

$$
\begin{aligned}
P(\tilde{x} \mid X) & =\int_\theta P(\tilde{x}, \theta \mid X) \mathrm{d} \theta \\
& =\int_\theta P(\tilde{x} \mid \theta) P(\theta \mid X) \mathrm{d} \theta \\
& =E_{\theta \mid X}[P(\tilde{x} \mid \theta)]
\end{aligned} \tag{62}
$$

被称为后验预测分布（Posterior predictive distribution），例如根据用户的历史评分信息 X 预测用户对于新电影 $\tilde{x}$ 的评分

2.2 变分推断推导

贝叶斯参数学习问题的描述：

- X 观测数据
- Z 隐变量+参数
- θ 超参数
  注意，这里的符号表示和 EM 算法中的表述有区别，贝叶斯参数学习需要推断的是 Z 中的参数，及学习后验分布 $P(Z \mid \theta)$

首先是 evidence 的分解

$$\underbrace{\log P(X \mid \theta)}_{\text{evidence}} = \underbrace{\int_Z q(Z) \log \frac{P(X, Z \mid \theta)}{q(Z)} \, \mathrm{d}Z}_{\text{ELBO}} + \underbrace{\int_Z q(Z) \log \frac{q(Z)}{P(Z \mid X, \theta)} \, \mathrm{d}Z}_{\mathrm{KL}(q(Z) || P(Z|X,\theta))} \tag{63}$$

当我们知道超参数 θ 时，上式中 evidence 应是固定的，因为 $\log P(X \mid \theta) = \log \sum_Z P(X, Z \mid \theta)$，虽然这个值通常求不出来。

变分推断的目标是通过最小化 $\mathrm{KL}(q(Z) \mid\mid P(Z \mid X, \theta))$ 来寻找与后验分布 $P(Z \mid X, \theta)$ 最相似的变分分布 $q(Z)$。

$$q(Z)^* = \arg\min_{q(Z)} \mathrm{KL}(q(Z) \mid\mid P(Z \mid X, \theta)) \tag{64}$$

后验分布 $P(Z \mid X, \theta)$ 太复杂，直接估计其参数很困难，但利用 KL 散度和 ELBO 的和为常数，可以转而求

$$\begin{aligned} q(Z)^* =& \arg\min_{q(Z)} \mathrm{KL}(q(Z) \mid\mid P(Z \mid X, \theta)) \\ =& \arg\max_{q(Z)} \mathrm{ELBO} \\ =& \arg\max_{q(Z)} \int_Z q(Z) \log \frac{P(X, Z \mid \theta)}{q(Z)} \, \mathrm{d}Z \\ =& \arg\max_{q(Z)} \int_Z q(Z) \log P(X, Z \mid \theta) \, \mathrm{d}Z - \int_Z q(Z) \log q(Z) \, \mathrm{d}Z \\ =& \arg\max_{q(Z)} E_{q(Z)}[\log P(X, Z \mid \theta)] - E_{q(Z)}[\log q(Z)] \end{aligned} \tag{65}$$

变分分布 $q(Z)$ 有多种参数化方法，要求参数化后的 $q(Z)$ 使得上述优化问题容易求解，一种常用的方法是假设 $q(Z)$ 对 $Z = (Z_1, Z_2, \ldots, Z_d)$ 的所有分量 Z_j 都是相互独立的（实际是条件独立于参数），即满足

$$q(Z) = q(Z_1) \cdot q(Z_2) \cdots q(Z_d) \tag{66}$$

这时的变分分布被称为满足平均场（mean field）假设。

KL 散度的最小化或证据下界的最大化实际是在平均场的集合，即满足独立假设的分布集合 $Q = \{q(Z) \mid q(Z) = \prod_{j=1}^d q(Z_j)\}$ 之中进行的

$$q(Z)^* = \arg\max_{q(Z) \in Q} E_{q(Z)}[\log P(X, Z \mid \theta)] - E_{q(Z)}[\log q(Z)] \tag{67}$$

Reference：[intermediate_vb, PRML chapter 10]
现在我们将目标函数重新写为

$$\begin{aligned} \mathrm{ELBO} &= \int q_\phi(\mathbf{z}) \log \left(\frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{q_\phi(\mathbf{z})} \right) \mathrm{d}\mathbf{z} \\ &= \int q_\phi(\mathbf{z}) \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \mathrm{d}\mathbf{z} - \int q_\phi(\mathbf{z}) \log(q_\phi(\mathbf{z})) \mathrm{d}\mathbf{z} \\ &= \underbrace{\int \prod_{i=1}^M q_i(z_i) \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \mathrm{d}\mathbf{z}}_{-H(q,p)} + \underbrace{\left(-\int \prod_{i=1}^M q_i(z_i) \sum_{i=1}^M \log(q_i(z_i)) \mathrm{d}\mathbf{z} \right)}_{H(q)} \end{aligned} \tag{68}$$

首先考虑第一部分 $-H(q, p)$

$$\begin{aligned} -H(q, p) &= \int \prod_{i=1}^M q_i(z_i) \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \mathrm{d}\mathbf{z} \\ &= \int_{Z_1} \int_{Z_2} \cdots \int_{Z_M} \prod_{i=1}^M q_i(z_i) \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \mathrm{d}\mathbf{z}_1 \mathrm{d}\mathbf{z}_2 \cdots \mathrm{d}\mathbf{z}_M \end{aligned} \tag{69}$$

只考虑其中一项 $q_j(z_j)$

$$\begin{aligned} -H(q, p)_j &= \int_{Z_j} q_j(z_j) \left(\int_{Z_{i \neq j}} \cdots \int \prod_{i \neq j}^M q_i(z_i) \log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z})) \prod_{i \neq j}^M \mathrm{d}z_i \right) \mathrm{d}z_j \\ &= \int_{Z_j} q_j(z_j) \mathbb{E}_{\mathbf{z} \setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x}, \mathbf{z}))] \mathrm{d}z_j \end{aligned} \tag{70}$$

再考虑第二部分 $H(q)$

$$\begin{aligned} H(q) &= -\int \prod_{i=1}^{M} q_i(z_i) \sum_{i=1}^{M} \log(q_i(z_i)) \mathrm{d}\mathbf{z} \\ &= \sum_{i=1}^{M} \left(-\int_{Z_i} q_i(z_i) \log(q_i(z_i)) \mathrm{d}z_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^{M} H(q_i(z_i)) \end{aligned} \tag{71}$$

仅考虑其中一项 $q_j(z_j)$

$$\begin{aligned} H(q)_j =& -\int_{Z_j} q_j(z_j) \log(q_j(z_j)) \mathrm{d}z_j + \mathrm{Const.} \\ =& H(q_j(z_j)) + \mathrm{Const.} \end{aligned} \tag{72}$$

针对 ELBO 只考虑优化 q_j

$$\begin{aligned} \mathrm{ELBO}(q_j) &= -H(q,p)_j + H(q)_j \\ &= \int_{Z_j} q_j(z_j) \mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))] \mathrm{d}z_j - \int_{Z_j} q_j(z_j) \log(q_j(z_j)) \mathrm{d}z_j + \mathrm{Const.} \\ &= \int_{Z_j} q_j(z_j) \log \tilde{p}(\mathbf{x}, z_j) \mathrm{d}z_j - \int_{Z_j} q_j(z_j) \log(q_j(z_j)) \mathrm{d}z_j + \mathrm{Const.} \\ &= \int_{Z_j} q_j(z_j) \log \left[\frac{\tilde{p}(\mathbf{x}, z_j)}{q_j(z_j)} \right] \mathrm{d}z_j + \mathrm{Const.} \\ &= -\mathbb{KL}\left(q_j(z_j) \,||\, \tilde{p}(\mathbf{x}, z_j)\right) + \mathrm{Const.} \end{aligned} \tag{73}$$

这里我们定义了一个新分布 $\tilde{p}(\mathbf{x}, z_j)$

$$\log \tilde{p}(\mathbf{x}, z_j) = \mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))] + \mathrm{Const.} \tag{74}$$

因此我们可以通过最小化下述 KL 散度来最大化 ELBO，而 KL 散度的性质可知其值为零时最小，即 $q_j^* = \tilde{p}(\mathbf{x}, z_j)$

$$\log q_j^*(z_j) = \mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))] + \mathrm{Const.} \tag{75}$$

注意此处的 $\exp(\mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))])$ 是伪概率分布（pseudo distribution），只能满足概率分布的非负性而不能保证具有归一性，常数项为归一化常数 $\int \exp(\mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))]) \mathrm{d}z_j$，保证 $\tilde{p}$ 的归一性和非负性，因此有

$$q_j^*(z_j) = \frac{\exp(\mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))])}{\int \exp(\mathbb{E}_{\mathbf{z}\setminus z_j}[\log(p(\mathbf{x},\mathbf{z}))]) \mathrm{d}z_j} \tag{76}$$

2.3 Gaussian-Gamma

可观测变量为 $\mathcal{D} = \{x_1, \ldots, x_n\}$，似然为

$$\begin{aligned} p(\mathcal{D} \mid \mu, \tau) &= \prod_{i=1}^{n} \left(\frac{\tau}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-\tau}{2}(x_i - \mu)^2\right) \\ &= \left(\frac{\tau}{2\pi}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left(\frac{-\tau}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu)^2\right) \end{aligned} \tag{77}$$

假设先验为

$$\begin{aligned} p(\mu \mid \tau) &= \mathcal{N}(\mu_0, (\lambda_0 \tau)^{-1}) \propto \exp\left(\frac{-\lambda_0 \tau}{2}(\mu - \mu_0)^2\right) \\ p(\tau) &= \mathrm{Gamma}(\tau \mid a_0, b_0) \propto \tau^{a_0 - 1} \exp(-b_0 \tau) \end{aligned} \tag{78}$$

利用共轭性质可以计算解析后验

$$\begin{aligned} p(\mu, \tau \mid \mathcal{D}) \propto& p(\mathcal{D} \mid \mu, \tau) p(\mu \mid \tau) p(\tau) \\ =& \mathcal{N}(\mu_n, (\lambda_n \tau)^{-1}) \mathrm{Gamma}(\tau \mid a_n, b_n) \end{aligned} \tag{79}$$

此处

$$\begin{aligned} \mu_n &= \frac{\lambda_0 \mu_0 + n\bar{x}}{\lambda_0 + n} \\ \lambda_n &= \lambda_0 + n \\ a_n &= a_0 + \frac{n}{2} \\ b_n &= b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 + \frac{\lambda_0 n (\bar{x} - \mu_0)^2}{2(\lambda_0 + n)} \end{aligned} \tag{80}$$

但是如果我们不能计算其解析后验，可用变分推断来近似其后验。假设变分分布 $q(\mathbf{z})$ 为

$$q(\mu,\tau)=q_\mu(\mu)q_\tau(\tau) \tag{81}$$

利用式（75）得出的结论

$$\begin{aligned}
\log q_\mu^*(\mu) &= \mathbb{E}_{q_\tau(\tau)}\left[\log p(\mu,\tau,\mathcal{D})\right] \\
&= \mathbb{E}_{q_\tau(\tau)}\left[\log p(\mathcal{D}\mid\mu,\tau)+\log p(\mu\mid\tau)\right]+\text{Const.} \\
&= \mathbb{E}_{q_\tau(\tau)}\left[\frac{n}{2}\log\tau-\frac{\tau}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2-\frac{\lambda_0\tau}{2}(\mu-\mu_0)^2\right]+\text{Const.} \\
&= -\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q_\tau}[\tau]\underbrace{\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2+\lambda_0(\mu-\mu_0)^2\right]}_{\text{terms taking out of }\tau}+\text{Const.}
\end{aligned} \tag{82}$$

将中括号内式子展开，形成高斯分布 $\mathcal{N}(\mu;\mu^*,\tau^*)$ 的形式（为什么会想到能将其化为高斯分布的形式？因为其为 μ 的2次多项式）

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2+\lambda_0(\mu-\mu_0)^2 &= n\mu^2-2n\mu\bar{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu^2-2\lambda_0\mu_0\mu+\text{Const.} \\
&= (n+\lambda_0)\mu^2-2\mu\left(n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0\right)+\text{Const.} \\
&= (n+\lambda_0)\left(\mu^2-\frac{2\mu\left(n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0\right)}{n+\lambda_0}\right)+\text{Const.} \\
&= (n+\lambda_0)\left(\mu-\frac{n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0}{n+\lambda_0}\right)^2+\text{Const.}
\end{aligned} \tag{83}$$

因此我们有

$$\begin{aligned}
\log q_\mu^*(\mu) &= -\frac{\mathbb{E}_{q_\tau}[\tau]}{2}\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2+\lambda_0(\mu-\mu_0)^2\right]+\text{Const.} \\
&= -\frac{\mathbb{E}_{q_\tau}[\tau]\,(n+\lambda_0)}{2}\left(\mu-\frac{n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0}{n+\lambda_0}\right)^2+\text{Const.} \\
&= -\frac{1}{2}\underbrace{\mathbb{E}_{q_\tau}[\tau]\,(n+\lambda_0)}_{\tau^*}\left(\mu-\underbrace{\frac{n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0}{n+\lambda_0}}_{\mu^*}\right)^2+\text{Const.} \\
\Longrightarrow q_\mu^*(\mu) &= \mathcal{N}\left(\frac{n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0}{n+\lambda_0},\mathbb{E}_{q_\tau}[\tau]\,(n+\lambda_0)\right)\quad\because -\frac{\tau}{2}(x-\mu)^2
\end{aligned} \tag{84}$$

利用式（82），去掉期望符号 $\mathbb{E}_{q_\tau}[\cdot]$，我们还可以得到 $p(\mu\mid\mathcal{D},\tau)$（注意，删掉期望值就是原分布的后验，因为 $p(\mathcal{D},\tau)$ 在常数项里）

$$\begin{aligned}
\log p(\mathcal{D}\mid\mu,\tau)+\log p(\mu\mid\gamma) &= \underbrace{-\frac{\tau}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2}_{\log(p(\mathcal{D}\mid\mu,\tau))}\underbrace{-\frac{\lambda_0\tau}{2}(\mu-\mu_0)^2}_{\log p(\mu\mid\gamma)}+\text{Const.} \\
&= -\frac{\tau}{2}\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2+\lambda_0(\mu-\mu_0)^2\right]+\text{Const.} \\
&= -\frac{\tau\,(n+\lambda_0)}{2}\left(\mu-\frac{n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0}{n+\lambda_0}\right)^2+\text{Const.} \\
\Longrightarrow p(\mu\mid\mathcal{D},\tau) &= \mathcal{N}\left(\frac{n\overline{\mathbf{x}}+\lambda_0\mu_0}{n+\lambda_0},\tau\,(n+\lambda_0)\right)
\end{aligned} \tag{85}$$

同理我们可以计算 $\log q_\tau^*(\tau)$

$$\begin{aligned}
\log q_\tau^*(\tau) &= \mathbb{E}_{q_\mu}[\log p(\mu,\tau,\mathcal{D})] \\
&= \mathbb{E}_{q_\mu}[\log p(\mathcal{D}\mid\mu,\tau)+\log p(\mu\mid\tau)+\log p(\tau)]+\text{Const.} \\
&= \mathbb{E}_{q_\mu}[\underbrace{\frac{n}{2}\log(\tau)-\frac{\tau}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2}_{\log p(\mathcal{D}\mid\mu,\tau)}\underbrace{-\frac{\lambda_0\tau}{2}(\mu-\mu_0)^2}_{\log p(\mu\mid\gamma)}\underbrace{+(a_0-1)\log(\tau)-b_0\tau}_{\log p(\tau)}]+\text{Const.} \\
&= \frac{n}{2}\log\tau+(a_0-1)\log\tau-b_0\tau-\frac{\tau}{2}\mathbb{E}_{q_\mu(\mu)}\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2+\lambda_0(\mu-\mu_0)^2\right]+\text{Const.} \\
&= \left(\underbrace{\frac{n}{2}+a_0}_{a_n}-1\right)\log\tau-\tau\left(\underbrace{b_0+\frac{1}{2}\mathbb{E}_{q_\mu(\mu)}\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2+\lambda_0(\mu-\mu_0)^2\right]}_{b_n}\right)+\text{Const.}
\end{aligned} \tag{86}$$

$$\Longrightarrow q_\tau^*(\tau)=\text{Gamma}(a_n,b_n)$$

可以将 b_n 展开写为

$$
\begin{aligned}
b_n &= b_0 + \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q_\mu}\left[\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2 + \lambda_0(\mu-\mu_0)^2\right] \\
&= b_0 + \frac{1}{2}\mathbb{E}_{q_\mu}\left[-2\mu n\bar{x} + n\mu^2 + \lambda_0\mu^2 - 2\lambda_0\mu_0\mu\right] + \sum_{i=1}^{n}x_i^2 + \lambda_0\mu_0^2 \\
&= b_0 + \frac{1}{2}\left[(n+\lambda_0)\mathbb{E}_{q_\mu}\left[\mu^2\right] - 2\left(n\bar{x}+\lambda_0\mu_0\right)\mathbb{E}_{q_\mu}[\mu] + \sum_{i=1}^{n}x_i^2 + \lambda_0\mu_0^2\right]
\end{aligned} \tag{87}
$$

因为前面已经知道 $q_\mu(\mu)$ ，可以计算这里的 $\mathbb{E}_{q_\mu}[\mu^2]$ 和 $\mathbb{E}_{q_\mu}[\mu]$。

同样地，也可以轻易地获得原分布的后验 $p(\tau \mid \mathcal{D},\mu)$

$$
\begin{aligned}
&\log p(\tau \mid \mathcal{D},\mu) = \log(p(\mathcal{D} \mid \mu,\tau)) + \log p(\mu \mid \tau) + \log p(\tau) + \text{ Const.} \\
&= \underbrace{\frac{n}{2}\log(\tau) - \frac{\tau}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2}_{\log(p(\mathcal{D}\mid\mu,\tau))} \underbrace{- \frac{\lambda_0\tau}{2}(\mu-\mu_0)^2}_{\log p(\mu\mid\gamma)} \underbrace{+ (a_0-1)\log(\tau) - b_0\tau}_{\log p(\tau)} + \text{ Const.} \\
&= \underbrace{\left(\frac{n}{2}+a_0\right.}_{a_n} - 1)\log(\tau) - \tau\underbrace{(b_0 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2 + \lambda_0(\mu-\mu_0)^2)}_{b_n} + \text{ Const.} \\
&\Longrightarrow p(\tau \mid \mathcal{D},\mu) = \text{Gamma}\left(a_n, b_n\right) \\
&\qquad\qquad \begin{cases} a_n &= \frac{n}{2} + a_0 \\ b_n &= b_0 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-\mu\right)^2 + \lambda_0(\mu-\mu_0)^2 \end{cases}
\end{aligned} \tag{88}
$$

2.4 指数族分布

2.4.1 概览

给定先验和似然都是指数族分布，则他们形成一个共轭对，则变分推断（平均场近似）有下列更新公式

$$
\eta_j = \mathbb{E}_{q(\mathbf{z}\backslash z_j\mid\cdot)}[\eta_{\text{post}}(\mathbf{z}\backslash z_j)] \tag{89}
$$

这里的 $\eta_{\text{post}}(\mathbf{z}\backslash z_j)$ 是和后验分布 $p(z_j \mid \cdot)$ 相关的自然参数。

和通用的更新公式相比

$$
\log q_i^*(z_i) = \mathbb{E}_{i\neq j}[\log p(\mathbf{x},\mathbf{z})] \tag{90}
$$

使用指数族更新公式更加直接方便。

2.4.2 指数族

指数族分布通常用自然参数 η 表示为下列形式

$$
\begin{aligned}
&h(x)\exp(T(x)^\top\eta - A(\eta)) \\
&= \underbrace{\exp(-A(\eta))}_{\text{normalization}} h(x)\exp(T(x)^\top\eta) \\
&\Longrightarrow \exp(-A(\eta))\int_x h(x)\exp(T(x)^\top\eta) = 1 \\
&\Longrightarrow \int_x h(x)\exp(T(x)^\top\eta) = \exp(A(\eta))
\end{aligned} \tag{91}
$$

指数族分布具有易求最大似然估计的性质（可用下列高斯分布验证，其求解易于原参数形式）

$$
\begin{aligned}
&\arg\max_\eta\,[\log p(X \mid \eta)] \\
&= \arg\max_\eta\left[\log\prod_{i=1}^{n}p(x_i \mid \eta)\right] \\
&= \arg\max_\eta\left[\log\left\{\prod_{i=1}^{n}h(x_i)\exp\left(\sum_{i=1}^{n}T(x_i)^\top\eta - nA(\eta)\right)\right\}\right] \\
&= \arg\max_\eta\underbrace{\left[\sum_{i=1}^{n}T(x_i)^\top\eta - nA(\eta)\right]}_{\mathcal{L}(\eta)} \\
&\Longrightarrow \frac{\partial\mathcal{L}(\eta)}{\partial\eta} = \sum_{i=1}^{n}T(x_i) - nA'(\eta) = 0 \\
&\Longrightarrow A'(\eta) = \sum_{i=1}^{n}\frac{T(x_i)}{n}
\end{aligned} \tag{92}
$$

从另一个角度来看，指数分布族具有性质：对数规范化因子 $A(\eta)$ 对自然参数 η 的导数等于充分统计量 $T(x)$ 的数学期望，这是任何情况都成立的

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}A(\eta) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\log\int h(x)\exp\left\{\eta^{\mathrm{T}}T(x)\right\}\mathrm{d}x \\
&= \frac{\int T(x)\exp\left\{\eta^{\mathrm{T}}T(x)\right\}h(x)\mathrm{d}x}{\int h(x)\exp\left\{\eta^{\mathrm{T}}T(x)\right\}\mathrm{d}x} \\
&= \int T(x)\exp\left\{\eta^{\mathrm{T}}T(x)-A(\eta)\right\}h(x)\mathrm{d}x \\
&= \int T(x)p(x\mid\eta)\mathrm{d}x \\
&= E[T(X)]
\end{aligned} \tag{93}
$$

例如一维高斯分布，可以将其写为指数族分布的形式

$$
\begin{aligned}
\mathcal{N}\left(x;\mu,\sigma^2\right) &= \left(2\pi\sigma^2\right)^{-1/2}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= \exp\left(-\frac{x^2-2x\mu+\mu^2}{2\sigma^2}-\frac{1}{2}\log\left(2\pi\sigma^2\right)\right) \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2+\frac{\mu}{\sigma^2}x-\frac{\mu^2}{2\sigma^2}-\frac{1}{2}\log\left(2\pi\sigma^2\right)\right) \\
&= \exp\left(\begin{bmatrix}x & x^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\mu}{\sigma^2} & -\frac{1}{2\sigma^2}\end{bmatrix}^{\top}-\frac{\mu^2}{2\sigma^2}-\frac{1}{2}\log\left(2\pi\sigma^2\right)\right)
\end{aligned} \tag{94}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
T(x) &= \begin{bmatrix}x & x^2\end{bmatrix} \\
\boldsymbol{\eta} &= \begin{bmatrix}\eta_1 & \eta_2\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}\frac{\mu}{\sigma^2} & -\frac{1}{2\sigma^2}\end{bmatrix} \\
\theta &= \begin{bmatrix}\mu \\ \sigma^2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{-\eta_1}{2\eta_2} \\ \frac{-1}{2\eta_2}\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{95}
$$

现在我们可以移除 μ 和 σ 得到一维高斯分布的指数族分布形式

$$
\begin{aligned}
\mathcal{N}_{\text{nat}}(x,\boldsymbol{\eta}) &= \exp\left(\begin{bmatrix}x & x^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\eta_1 & \eta_2\end{bmatrix}^{\top}-\frac{\mu^2}{2\sigma^2}-\frac{1}{2}\log\left(2\pi\sigma^2\right)\right) \\
&= \exp\left(\begin{bmatrix}x & x^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\eta_1 & \eta_2\end{bmatrix}^{\top}-\frac{\left(\frac{-\eta_1}{2\eta_2}\right)^2}{2\left(\frac{-1}{2\eta_2}\right)}-\frac{1}{2}\log\left(2\pi\left(\frac{-1}{2\eta_2}\right)\right)\right) \\
&= \exp\left(T(x)^{\top}\boldsymbol{\eta}+\frac{\eta_1^2}{4\eta_2}-\frac{1}{2}\log\left(\frac{2\pi}{-2\eta_2}\right)\right) \\
&= \exp\left(T(x)^{\top}\boldsymbol{\eta}+\underbrace{\frac{\eta_1^2}{4\eta_2}+\frac{1}{2}\log\left(-2\eta_2\right)-\frac{1}{2}\log(2\pi)}_{A(\eta)}\right)
\end{aligned} \tag{96}
$$

2.4.3 共轭概率

共轭表示先验和后验是同种形式的概率分布，例如

$$
p_{\eta_{\text{post}}}(\theta\mid\mathbf{x})\propto p(\mathbf{x}\mid\theta)p_{\eta_{\text{prior}}}(\theta) \tag{97}
$$

使用指数族分布表示时，共轭的含义是先验和后验有相同的充分统计量 $T(\theta)$ 和 $h(\theta)$ （注意这里的 θ 是变量），不同的自然参数，即 $\eta_{\text{post}},\eta_{\text{prior}}$ 以及不同的对数归一化因子。

证明：一个指数族分布的先验必定有对应的似然使其拥有一个共轭的后验

$$
\begin{aligned}
p(\theta\mid x) &\propto p(x\mid\theta)p(\theta) \\
&= h(x)\exp\left\{T(x)\theta-A_l(\theta)\right\}\times h(\theta)\exp\left\{T(\theta)^{\top}\alpha-A(\alpha)\right\} \qquad T(\theta)=\begin{bmatrix}\theta \\ -g(\theta)\end{bmatrix},\alpha=\begin{bmatrix}\alpha_1 \\ \alpha_2\end{bmatrix} \\
&\propto h(\theta)\exp\left\{T(x)\theta-A_l(\theta)+\alpha_1\theta-\alpha_2 g(\theta)\right\} \\
&= h(\theta)\exp\left\{(T(x)+\alpha_1)\theta-(A_l(\theta)+\alpha_2 g(\theta))\right\} \qquad \text{assume } g(\theta)=A_l(\theta) \\
&= h(\theta)\exp\left\{(T(x)+\alpha_1)\theta-(1+\alpha_2)A_l(\theta)\right\} \\
&= h(\theta)\exp\left\{\begin{bmatrix}\hat{\alpha_1} & \hat{\alpha_2}\end{bmatrix}T(\theta)\right\}
\end{aligned} \tag{98}
$$

即似然函数的对数归一化因子等于先验的充分统计量的第二部分（不止两个参数的情况？），则它们共轭。

2.4.4 变分推断

隐变量 β 的后验分布，注意这里的 $h(\beta)$ 和 $T(\beta)$ 是相同的，因为设置变分分布是和原分布同一种分布

$$
\begin{aligned}
&p(\beta\mid z,x) \\
&= h(\beta)\exp\left(T(\beta)^{\top}\eta(z,x)-A_g(\eta(z,x))\right) \\
&\approx q(\beta\mid\lambda)=h(\beta)\exp\left(T(\beta)^{\top}\lambda-A_g(\lambda)\right)
\end{aligned} \tag{99}
$$

隐变量 z 的后验分布

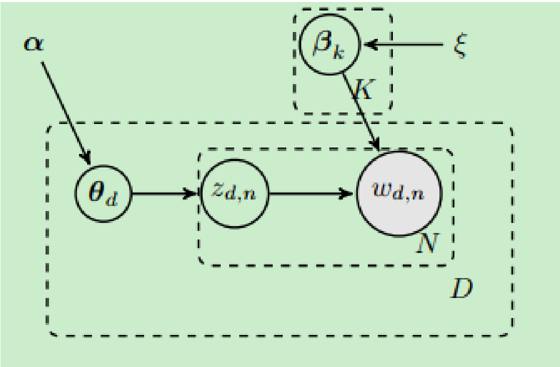
$$\begin{aligned}
&p(z \mid \beta, x) \\
&= h(z) \exp\left(T(z)^{\top} \eta(\beta, x) - A_l(\eta(\beta, x))\right) \\
&\approx q(z \mid \phi) = h(z) \exp\left(T(z)^{\top} \phi - A_l(\phi)\right)
\end{aligned} \tag{100}$$

固定 ϕ，优化 λ，每一步去除无关项

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\lambda, \phi) &= E_{q(z,\beta)}[\log p(x, z, \beta)] - E_{q(z,\beta)}[\log q(z, \beta)] \\
&= E_{q(z,\beta)}[\log p(\beta \mid x, z) + \log p(z, x)] - E_{q(z,\beta)}[\log q(\beta)] - E_{q(z,\beta)}[\log q(z)] \\
&= E_{q(z,\beta)}[\log p(\beta \mid x, z)] - E_{q(z,\beta)}[\log q(\beta)] \\
&= E_{q(z,\beta)}[\log h(\beta)] + E_{q(z,\beta)}[T(\beta)^{\top} \eta(z, x)] - E_{q(z,\beta)}[A_g(\eta(x, z))] - E_{q(z,\beta)}[\log h(\beta)] - E_{q(z,\beta)}[T(\beta)^{\top} \lambda] + E_{q(z,\beta)}[A_g(\lambda)] \\
&= E_{q(\beta)}[T(\beta)^{\top}] E_{q(z)}[\eta(z, x)] - E_{q(z)}[A_g(\eta(x, z))] - E_{q(\beta)}[T(\beta)^{\top} \lambda] + A_g(\lambda) \qquad \text{using } \frac{\partial A_l(\eta)}{\partial \eta} = E_{p(x|\eta)}[T(x)] \\
&= A'_g(\lambda)^{\top} E_{q(z)}[\eta(z, x)] - \lambda A'_g(\lambda)^{\top} + A_g(\lambda) \qquad \text{taking partial derivative with respect to } \lambda \\
&= A''_g(\lambda)^{\top} E_{q(z)}[eta(z, x)] - A'_g(\lambda)^{\top} - \lambda A'_g(\lambda)^{\top} + A'_g(\lambda) \\
&= A''_g(\lambda)^{\top} (E_{q(z)}[\eta(x, z)] - \lambda) = 0 \\
&\Longrightarrow \lambda = E_{q(z)}[\eta(x, z)] \qquad \text{where } q(z) = q(z \mid \phi)
\end{aligned} \tag{101}$$

同理，固定 λ，优化 ϕ，可得到更新公式 $\phi = E_{q(\beta|\lambda)}[\eta(\beta, x)]$

2.5 基于变分推断的LDA参数学习



For each topic k :

$$\boldsymbol{\beta}_k \sim \operatorname{Dir}(\xi, \ldots, \xi) \quad \text{for } k \in \{1, \ldots, K\} \tag{102}$$

For each document d :

$$\boldsymbol{\theta_d} \sim \operatorname{Dir}(\alpha, \ldots, \alpha) \tag{103}$$

For each word $w \in \{1, \ldots, N\}$:

$$\begin{aligned}
z_{d,n} &\sim \operatorname{Mult}(\boldsymbol{\theta}_d) \\
w_{d,n} &\sim \operatorname{Mult}(\beta_{z_{d,n}})
\end{aligned} \tag{104}$$

因为先验和似然是共轭的，而选取变分分布时应该选取和后验相同的分布有利于计算，因此此时选取和先验同样的分布（如上述通用公式，作者猜测选取不同的分布也能计算）

$$q(\boldsymbol{\beta}_k) = \operatorname{Dir}(\boldsymbol{\lambda}_k), \quad q(\boldsymbol{\theta}_d) = \operatorname{Dir}(\boldsymbol{\gamma}_d), \quad q(z_{d,n}) = \operatorname{Mult}(\boldsymbol{\phi}_{d,n}) \tag{105}$$

前两个变分分布选取易理解，最后一个的理由是什么呢？猜测是写出其后验是多项式分布形式

2.5.1 基于指数族分布的推断

2.5.1.1 更新 $\Phi_{D,N}$

首先找到后验 $p(z_{d,n} = k \mid \boldsymbol{\theta}_d, \boldsymbol{\varphi}_k, w_{d,n})$ 的自然参数

$$\begin{aligned}
p(z_{d,n} = k \mid \boldsymbol{\theta}_d, \boldsymbol{\beta}_{1:K}, w_{d,n}) &\propto p(z_{d,n} = k \mid \boldsymbol{\theta}_d) \cdot p(w_{d,n} \mid z_{d,n} = k, \boldsymbol{\beta}_{1:K}) \\
&= \theta_{d,k} \cdot \beta_{k, w_{d,n}} \\
&= \exp\left(\underbrace{(\log \theta_{d,k} + \log \beta_{k, w_{d,n}})}_{\eta_l(\boldsymbol{\theta}_{d,k}, \boldsymbol{\beta}_{1:K}, w_{d,n})} \cdot \underbrace{1}_{T(z_{d,n})}\right)
\end{aligned} \tag{106}$$

使用正常的多项式分布可以表达为

$$p(z_{d,n} \mid \boldsymbol{\theta}_d, \boldsymbol{\beta}_{1:K}, w_{d,n}) = \operatorname{Mult}(\theta_{d,1} \cdot \beta_{1, w_{d,n}}, \ldots, \theta_{d,k} \cdot \beta_{k, w_{d,n}}) \tag{107}$$

利用更新公式可知

$$
\begin{aligned}
\eta(\phi_{d,n}^k) &= \log(\phi_{d,n}^k) \\
&\propto E_{q(\boldsymbol{\theta}_d, \boldsymbol{\beta}_k)}[\eta_l(\boldsymbol{\theta}_d, \boldsymbol{\beta}_{1:K}, w_{d,n})] \quad \because \text{自然参数是正常参数的对数，为何正比？} \\
&= E_{q(\boldsymbol{\theta}_d)}[\log(\theta_{d,k})] + E_{q(\boldsymbol{\beta}_k)}[\log(\beta_{k,w_{d,n}})] \quad \text{迪利克雷分布的性质} \\
&= \Psi(\gamma_{d,k}) - \Psi\left(\sum_{k=1}^K \gamma_{d,k}\right) + \Psi(\lambda_{k,w_{d,n}}) - \Psi\left(\sum_{v=1}^V \lambda_{k,v}\right) \\
&\Longrightarrow \phi_{d,n}^k \propto \exp\left[\Psi(\gamma_{d,k}) - \Psi\left(\sum_{k=1}^K \gamma_{d,k}\right) + \Psi(\lambda_{k,w_{d,n}}) - \Psi\left(\sum_{v=1}^V \lambda_{k,v}\right)\right] \\
&\qquad \propto \exp\left[\Psi(\gamma_{d,k}) + \Psi(\lambda_{k,w_{d,n}}) - \Psi\left(\sum_{v=1}^V \lambda_{k,v}\right)\right]
\end{aligned} \tag{108}
$$

2.5.1.2 更新 $\boldsymbol{\Gamma}_D$

同样先推导后验 $p(\boldsymbol{\theta}_d \mid \mathbf{z}_d)$ 的表达式

$$
\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\theta}_d \mid \mathbf{z}_d) &= p(\boldsymbol{\theta}_d \mid \boldsymbol{\alpha}) \prod_{n=1}^N p(z_{d,n} \mid \boldsymbol{\theta}_d) \\
&= \prod_{k=1}^K \left(\theta_{d,k}^{\alpha_k - 1} \prod_{n=1}^N \theta_{d,k}^{\mathbb{1}(z_{d,n}=k)}\right) \\
&= \exp\left[\log\left(\prod_{k=1}^K \left(\theta_{d,k}^{\alpha_k-1} \prod_{n=1}^N \theta_{d,k}^{\mathbb{1}(z_{d,n}=k)}\right)\right)\right] \\
&= \exp\left[\sum_{k=1}^K \log\left(\theta_{d,k}^{\alpha_k-1} \prod_{n=1}^N \theta_{d,k}^{\mathbb{1}(z_{d,n}=k)}\right)\right] \\
&= \exp\left[\sum_{k=1}^K \left(\log \theta_{d,k}^{\alpha_k-1} + \sum_{n=1}^N \log\left(\theta_{d,k}^{\mathbb{1}(z_{d,n}=k)}\right)\right)\right] \\
&= \exp\left[\sum_{k=1}^K \left((\alpha_k - 1)\log\theta_{d,k} + \sum_{n=1}^N \mathbb{1}(z_{d,n}=k)\log\theta_{d,k}\right)\right] \\
&= \exp\left[\sum_{k=1}^K \left(\alpha_k - 1 + \sum_{n=1}^N \mathbb{1}(z_{d,n}=k)\right)\log\theta_{d,k}\right] \\
&= \exp\left(\underbrace{\begin{bmatrix}\alpha_1 - 1 + n_1 \\ \cdots \\ \alpha_K - 1 + n_K\end{bmatrix}^\top}_{\eta_l(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{z}_d)} \underbrace{\begin{bmatrix}\log\theta_{d,1} \\ \cdots \\ \log\theta_{d,K}\end{bmatrix}}_{T(\boldsymbol{\theta}_d)}\right) \quad \text{by letting } n_k = \sum_{n=1}^N \mathbb{1}(z_{d,n}=k) \\
&= \mathrm{Dir}(\alpha_1 + n_1, \ldots, \alpha_K + n_K)
\end{aligned} \tag{109}
$$

接下来用变分分布 $q(\eta(\boldsymbol{\gamma}_d)) = \mathrm{Dir}(\eta(\boldsymbol{\gamma}_d))$ 来近似 $p(\boldsymbol{\theta}_d \mid \mathbf{z}_d)$，利用更新公式

$$
\begin{aligned}
\eta(\boldsymbol{\gamma}_d) &= E_{q(\mathbf{z}_d|\boldsymbol{\phi}_d)}[\eta_l(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{z}_d)] \\
&= E_{q(\mathbf{z}_d|\boldsymbol{\phi}_d)}[(\alpha_1 - 1 + n_1)\ldots(\alpha_K - 1 + n_K)]
\end{aligned} \tag{110}
$$

计算这个期望

$$
\begin{aligned}
E_{q(\mathbf{z}_d|\boldsymbol{\phi}_d)}\left[\sum_{n=1}^N \mathbb{1}(z_{d,n}=k)\right] &= \sum_{n=1}^N E_{q(\mathbf{z}_d|\boldsymbol{\phi}_d)}[\mathbb{1}(z_{d,n}=k)] \\
&= \sum_{n=1}^N q(z_{d,n}=k) \\
&= \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^k
\end{aligned} \tag{111}
$$

因此有

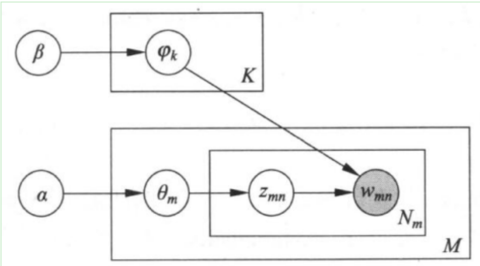
$$
\begin{aligned}
\eta(\boldsymbol{\gamma}_d) &= \left[\left(\alpha_1 - 1 + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^1\right)\ldots\left(\alpha_K - 1 + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^K\right)\right] \\
\Longrightarrow \boldsymbol{\eta} &= \left[\left(\alpha_1 + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^1\right)\ldots\left(\alpha_K + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^K\right)\right] \quad \text{迪利克雷分布的自然参数} \eta_i = \alpha_i - 1 \\
&= \boldsymbol{\alpha} + \sum_{n=1}^N \boldsymbol{\phi}_{d,n}
\end{aligned} \tag{112}
$$

2.5.1.3 更新 $\boldsymbol{\Lambda}_K$

与 $\boldsymbol{\gamma}_d$ 更新公式类似，有

$$
\boldsymbol{\lambda}_k = \xi + \sum_{d=1}^D \sum_{n=1}^N w_{d,n} \cdot \phi_{d,n}^k \tag{113}
$$

2.5.2 基于展开式的推断



当超参数给定时，$\log p(X \mid \theta)$ 是常数，因此

$$
\begin{aligned}
q(Z)^* &= \arg\min_{q(Z)} \mathrm{KL}(q(Z) \| p(Z \mid X, \theta)) \\
&= \arg\max_{q(Z)} \mathrm{ELBO} \\
&= \arg\max_{q(Z)} \int_Z q(Z) \log \frac{p(X, Z \mid \theta)}{q(Z)} \, \mathrm{d}Z \\
&= \arg\max_{q(Z)} \int_Z q(Z) \log p(X, Z \mid \theta) \, \mathrm{d}Z - \int_Z q(Z) \log q(Z) \, \mathrm{d}Z \\
&= \arg\max_{q(Z)} E_{q(Z)}[\log p(X, Z \mid \theta)] - E_{q(Z)}[\log q(Z)]
\end{aligned} \tag{114}
$$

KL 散度的最小化或证据下界的最大化实际是在平均场的集合，即满足独立假设的分布集合 $Q = \{q(Z) \mid q(Z) = \prod_{j=1}^{d} q(Z_j)\}$ 之中进行的

$$
\begin{aligned}
&\log p\left(\mathbf{w}, \mathbf{z}, \varphi_{1:K}, \theta_{1:M} \mid \alpha, \beta\right) \\
&= \log \left\{ \left[\prod_{m=1}^{M} p(\theta_m \mid \alpha) \right] \left[\prod_{k=1}^{K} p(\varphi_k \mid \beta) \right] \left[\prod_{m=1}^{M} \prod_{n=1}^{N_m} p(z_{mn} \mid \theta_m) \right] \left[\prod_{m=1}^{M} \prod_{n=1}^{N_m} p(w_{mn} \mid \varphi_{1:K}, z_{mn}) \right] \right\} \\
&= \sum_{m=1}^{M} \log p(\theta_m \mid \alpha) + \sum_{k=1}^{K} \log p(\varphi_k \mid \beta) + \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \log p(z_{mn} \mid \theta_m) + \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \log p(w_{mn} \mid \varphi_{1:K}, z_{mn})
\end{aligned} \tag{115}
$$

定义基于平均场的变分分布

$$
\begin{aligned}
q(\mathbf{z}, \varphi_{1:K}, \theta_{1:M} \mid \mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\}) &= \prod_{k=1}^{K} q(\varphi_k \mid \mu_k) \prod_{m=1}^{M} q(\theta_m \mid \gamma_m) \prod_{m=1}^{M} \prod_{n=1}^{N_m} q(z_{mn} \mid \eta_{mn}) \\
&= \prod_{k=1}^{K} \mathrm{Dir}(\varphi_k \mid \mu_k) \prod_{m=1}^{M} \mathrm{Dir}(\theta_m \mid \gamma_m) \prod_{m=1}^{M} \prod_{n=1}^{N_m} \mathrm{Mult}(z_{mn} \mid \eta_{mn})
\end{aligned} \tag{116}
$$

展开证据下界

$$
\begin{aligned}
\mathrm{ELBO} = {} & E_{q(\mathbf{z}, \varphi_{1:K}, \theta_{1:M} \mid \mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\})} \left[\log p(\mathbf{w}, \mathbf{z}, \varphi_{1:K}, \theta_{1:M} \mid \alpha, \beta)\right] \\
& - E_{q(\mathbf{z}, \varphi_{1:K}, \theta_{1:M} \mid \mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\})} \left[\log q(\mathbf{z}, \varphi_{1:K}, \theta_{1:M} \mid \mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\})\right] \\
= {} & \sum_{m=1}^{M} E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)} \left[\log p(\theta_m \mid \alpha)\right] + \sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)} \left[\log p(\varphi_k \mid \beta)\right] + \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}, \theta_m \mid \eta_{mn}, \gamma_m)} \left[\log p(z_{mn} \mid \theta_m)\right] \\
& + \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(\varphi_{1:K}, z_{mn} \mid \mu_{1:K}, \eta_{mn})} \left[\log p(w_{mn} \mid \varphi_{1:K}, z_{mn})\right] - \sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)} \left[\log q(\varphi_k \mid \mu_k)\right] \\
& - \sum_{m=1}^{M} E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)} \left[\log q(\theta_m \mid \gamma_m)\right] - \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn} \mid \eta_{mn})} \left[\log q(z_{mn} \mid \eta_{mn})\right]
\end{aligned} \tag{117}
$$

第一项：

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{M} E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)} \left[\log p(\theta_m \mid \alpha)\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)} \left[\log \left(\frac{\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right)}{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^{K} \theta_{mk}^{\alpha_k - 1} \right) \right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \mathbb{E}_{q(\theta_m \mid \gamma_m)} \left[\log \Gamma \left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \right) - \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma(\alpha_k) + \sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) \log \theta_{mk} \right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \log \Gamma \left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \right) - \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma(\alpha_k) + \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)} \left[\log \theta_{mk}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \log \Gamma \left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \right) - \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma(\alpha_k) + \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1) \left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi \left(\sum_{l=1}^{K} \gamma_{ml} \right) \right]
\end{aligned} \tag{118}
$$

此处用到迪利克雷分布作为指数族分布的性质：对数规范化因子对自然参数的导数等于充分统计量的数学期望，ψ 是 digamma 函数，即对数伽马函数的一阶导数。
第二项：

$$
\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)}\left[\log p\left(\varphi_k \mid \boldsymbol{\beta}\right)\right] \\
&= \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \beta_v\right) - \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} \log \Gamma\left(\beta_v\right) + \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V}\left(\beta_v - 1\right)\left[\psi\left(\mu_{kv}\right) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V} \mu_{ks}\right)\right]
\end{aligned} \tag{119}
$$

第三项:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}, \theta_m \mid \eta_{mn}, \gamma_m)}[\log p(z_{mn} \mid \theta_m)] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}, \theta_m \mid \eta_{mn}, \gamma_m)}\left[\log \prod_{k=1}^{K} (\theta_{mk})^{\mathbb{I}(z_{mn}=k)}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}, \theta_m \mid \eta_{mn}, \gamma_m)}\left[\sum_{k=1}^{K} \mathbb{I}(z_{mn}=k) \log \theta_{mk}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K} E_{q(z_{mn}, \theta_m \mid \eta_{mn}, \gamma_m)}[\mathbb{I}(z_{mn}=k) \log \theta_{mk}] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K} E_{q(z_{mn} \mid \eta_{mn})}[\mathbb{I}(z_{mn}=k)] E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)}[\log \theta_{mk}] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K} \eta_{mnk}\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K} \gamma_{ml}\right)\right]
\end{aligned} \tag{120}
$$

第四项:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(\varphi_{1:K}, z_{mn} \mid \mu_{1:K}, \eta_{mn})}\left[\log p\left(w_{mn} \mid \varphi_{1:K}, z_{mn}\right)\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(\varphi_{1:K}, z_{mn} \mid \mu_{1:K}, \eta_{mn})}\left[\log \prod_{k=1}^{K} \varphi_{k, i(w_{mn})}^{\mathbb{I}(z_{mn}=k)}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} E_{q(\varphi_{1:K}, z_{mn} \mid \mu_{1:K}, \eta_{mn})}\left[\sum_{k=1}^{K} \mathbb{I}\left(z_{mn}=k\right) \log \varphi_{k, i(w_{mn})}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k, z_{mn} \mid \mu_k, \eta_{mn})}\left[\mathbb{I}\left(z_{mn}=k\right) \log \varphi_{k, i(w_{mn})}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K} E_{q(z_{mn} \mid \eta_{mn})}\left[\mathbb{I}\left(z_{mn}=k\right)\right] E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)}\left[\log \varphi_{k, i(w_{mn})}\right] \\
&= \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N_m} \sum_{k=1}^{K} \eta_{mnk}\left[\psi\left(\mu_{k, i(w_{mn})}\right) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V} \mu_{ks}\right)\right]
\end{aligned} \tag{121}
$$

式中 $i(w_{mn}) \in \{1, \ldots, V\}$ 表示单词 w_{mn} 的索引。
第五项:

$$
\begin{aligned}
&-\sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)}\left[\log q\left(\varphi_k \mid \mu_k\right)\right] \\
&= -\sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)}\left[\log\left(\frac{\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mu_{kv}\right)}{\prod_{v=1}^{V} \Gamma\left(\mu_{kv}\right)} \prod_{v=1}^{V} \varphi_{kv}^{\mu_{kv}-1}\right)\right] \\
&= -\sum_{k=1}^{K} E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)}\left[\log \Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mu_{kv}\right) - \sum_{v=1}^{V} \log \Gamma\left(\mu_{kv}\right) + \sum_{v=1}^{V}\left(\mu_{kv} - 1\right) \log \varphi_{kv}\right] \\
&= -\sum_{k=1}^{K} \log \Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mu_{kv}\right) + \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} \log \Gamma\left(\mu_{kv}\right) - \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V}\left(\mu_{kv} - 1\right) E_{q(\varphi_k \mid \mu_k)}\left[\log \varphi_{kv}\right] \\
&= -\sum_{k=1}^{K} \log \Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mu_{kv}\right) + \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V} \log \Gamma\left(\mu_{kv}\right) - \sum_{k=1}^{K} \sum_{v=1}^{V}\left(\mu_{kv} - 1\right)\left[\psi\left(\mu_{kv}\right) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V} \mu_{ks}\right)\right]
\end{aligned} \tag{122}
$$

第六项:

$$
\begin{aligned}
&-\sum_{m=1}^{M} E_{q(\theta_m \mid \gamma_m)}\left[\log q\left(\theta_m \mid \gamma_m\right)\right] \\
&= -\sum_{m=1}^{M} \log \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \gamma_{mk}\right) + \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma\left(\gamma_{mk}\right) - \sum_{m=1}^{M} \sum_{k=1}^{K}\left(\gamma_{mk} - 1\right)\left[\psi\left(\gamma_{mk}\right) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K} \gamma_{ml}\right)\right]
\end{aligned} \tag{123}
$$

第七项:

$$
\begin{aligned}
&-\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}|\eta_{mn})}[\log q(z_{mn} \mid \eta_{mn})] \\
&= -\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}|\eta_{mn})}\left[\log \prod_{k=1}^{K} \eta_{mnk}^{\mathbb{I}(z_{mn}=k)}\right] \\
&= -\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m} E_{q(z_{mn}|\eta_{mn})}\left[\sum_{k=1}^{K} \mathbb{I}(z_{mn}=k)\log \eta_{mnk}\right] \\
&= -\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K} E_{q(z_{mn}|\eta_{mn})}[\mathbb{I}(z_{mn}=k)]\cdot \log \eta_{mnk} \\
&= -\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K} \eta_{mnk}\log \eta_{mnk}
\end{aligned} \tag{124}
$$

上述七项合并得到

$$
\begin{aligned}
&\text{ELBO}(\mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\}, \alpha, \beta) \\
&= \mathcal{L}(\mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\}, \alpha, \beta) \\
&= \sum_{m=1}^{M} \log \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \alpha_k\right) - \sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{K} \log \Gamma(\alpha_k) + \sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{K} (\alpha_k - 1)\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] \\
&+ \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \beta_v\right) - \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V} \log \Gamma(\beta_v) + \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V} (\beta_v - 1)\left[\psi(\mu_{kv}) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] \\
&+ \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K} \eta_{mnk}\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] \\
&+ \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K} \eta_{mnk}\left[\psi\left(\mu_{k,i(w_{mn})}\right) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] \\
&- \sum_{k=1}^{K} \log \Gamma\left(\sum_{v=1}^{V} \mu_{kv}\right) + \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V} \log \Gamma(\mu_{kv}) - \sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V} (\mu_{kv} - 1)\left[\psi(\mu_{kv}) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] \\
&- \sum_{m=1}^{M} \log \Gamma\left(\sum_{k=1}^{K} \gamma_{mk}\right) + \sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{K} \log \Gamma(\gamma_{mk}) - \sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{K} (\gamma_{mk} - 1)\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] \\
&- \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K} \eta_{mnk}\log \eta_{mnk}
\end{aligned} \tag{125}
$$

目标函数 $\mathcal{L}(\mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\}, \alpha, \beta)$ 中关于 μ_k 的部分：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}_{[\mu_k]} &= \sum_{v=1}^{V}(\beta_v - 1)\left[\psi(\mu_{kv}) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] + \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk}\left[\psi(\mu_{k,i(w_{mn})}) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] \\
&\quad - \log\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V}\mu_{kv}\right) + \sum_{v=1}^{V}\log\Gamma(\mu_{kv}) - \sum_{v=1}^{V}(\mu_{kv} - 1)\left[\psi(\mu_{kv}) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] \\
&= \sum_{v=1}^{V}\left[\psi(\mu_{kv}) - \psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right]\left(\beta_v + \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk}\mathbb{I}(i(w_{mn}) = v) - \mu_{kv}\right) \\
&\quad - \log\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V}\mu_{kv}\right) + \sum_{v=1}^{V}\log\Gamma(\mu_{kv})
\end{aligned} \tag{126}
$$

分别关于 μ_{kv}，$v = 1, \ldots, V$ 求偏导，得到

$$
\left[\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\mathbb{I}(i(w_{mn} = v))\cdot\eta_{mnk} + \beta_v - \mu_{kv}\right]\cdot\psi'(\mu_{kv}) + \left[\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk} + \sum_{s=1}^{V}(\mu_{ks} - \beta_s)\right]\cdot\psi'(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}) \tag{127}
$$

令偏导数为零，得到 μ_{kv} 的更新公式

$$
\mu_{kv} = \beta_v + \sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk}\mathbb{I}(i(w_{mn} = v)) \tag{128}
$$

目标函数 $\mathcal{L}(\mu_{1:K}, \gamma_{1:M}, \{\eta_{mn}\}, \alpha, \beta)$ 中关于 γ_m 的部分：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}_{[\gamma_m]} &= \sum_{k=1}^{K}(\alpha_k - 1)\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] + \sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K}\eta_{mnk}\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] \\
&\quad - \log\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\gamma_{mk}\right) + \sum_{k=1}^{K}\log\Gamma(\gamma_{mk}) - \sum_{k=1}^{K}(\gamma_{mk} - 1)\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] \\
&= \sum_{k=1}^{K}\left[\psi(\gamma_{mk}) - \psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right]\left(\alpha_k + \sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk} - \gamma_{mk}\right) \\
&\quad - \log\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\gamma_{mk}\right) + \sum_{k=1}^{K}\log\Gamma(\gamma_{mk})
\end{aligned} \tag{129}
$$

分别关于 γ_{mk}，$k = 1, \ldots, K$ 求偏导，得到

$$\left[\sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk}+\alpha_k-\gamma_{mk}\right]\cdot\psi'(\gamma_{mk})+\left[-\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{l=1}^{K}\eta_{mnl}-\sum_{l=1}^{K}(\alpha_l-1)+\sum_{l=1}^{K}(\gamma_{ml}-1)\right]\cdot\psi'(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}) \tag{130}$$

令偏导数为零，得到 γ_{mk} 的更新公式

$$\gamma_{mk}=\alpha_k+\sum_{n=1}^{N_m}\eta_{mnk} \tag{131}$$

目标函数中关于 η_{mn} 的部分：

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\{\eta_{mn}\}}=&\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K}\eta_{mnk}\left[\psi(\gamma_{mk})-\psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right]+\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K}\eta_{mnk}\left[\psi(\mu_{k,i(w_{mn})})-\psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right]\\&-\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N_m}\sum_{k=1}^{K}\eta_{mnk}\log\eta_{mnk}\end{aligned} \tag{132}$$

考虑约束 $\sum_{l=1}^{K}\eta_{mnl}=1$，构造约束优化问题的拉格朗日函数，并分别关于 η_{mnk}，$k=1,\ldots,K$ 求偏导，得到

$$\psi(\gamma_{mk})-\psi(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml})+\psi(\mu_{k,i(w_{mn})})-\psi(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks})-\log\eta_{mnk}-1+\lambda \tag{133}$$

令偏导数为零，得到 η_{mnk} 的更新公式

$$\eta_{mnk}=\frac{\exp\left\{\psi(\gamma_{mk}-\psi(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml})+\psi(\mu_{k,i(w_{mn})})-\psi(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks})\right\}}{\sum_{t=1}^{K}\left(\exp\left\{\psi(\gamma_{mt}-\psi(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml})+\psi(\mu_{t,i(w_{mn})})-\psi(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ts})\right\}\right)} \tag{134}$$

目标函数中关于 α 的部分：

$$\mathcal{L}_{[\alpha]}=\sum_{m=1}^{M}\log\Gamma\left(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\right)-\sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}\log\Gamma\left(\alpha_k\right)+\sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{K}(\alpha_k-1)\left[\psi(\gamma_{mk})-\psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right] \tag{135}$$

分别关于 α_k，$k=1,\ldots,K$ 求一阶和二阶偏导，得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\alpha_k}&=M\left[\psi\left(\sum_{l=1}^{K}\alpha_l\right)-\psi(\alpha_k)\right]+\sum_{m=1}^{M}\left[\psi(\gamma_{mk})-\psi\left(\sum_{l=1}^{K}\gamma_{ml}\right)\right]\\\frac{\partial^2\mathcal{L}}{\partial\alpha_k\partial\alpha_t}&=M\left[\psi'\left(\sum_{l=1}^{K}\alpha_l\right)-\mathbb{I}(k=t)\psi'(\alpha_k)\right]\end{aligned} \tag{136}$$

由此得到目标函数关于 α 的梯度 $g(\alpha)$ 和 Hessian 矩阵 $H(\alpha)$，应用牛顿法求目标函数关于 α 的最大化，根据以下公式迭代

$$\alpha_{\text{new}}=\alpha_{\text{old}}-H(\alpha_{\text{old}})^{-1}g(\alpha_{\text{old}}) \tag{137}$$

目标函数中关于 β 的部分：

$$\mathcal{L}_{[\beta]}=\sum_{k=1}^{K}\log\Gamma\left(\sum_{v=1}^{V}\beta_v\right)-\sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}\log\Gamma(\beta_v)+\sum_{k=1}^{K}\sum_{v=1}^{V}(\beta_v-1)\left[\psi(\mu_{kv})-\psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right] \tag{138}$$

分别关于 β_v，$v=1,\ldots,V$ 求一阶和二阶偏导，得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\beta_v}&=K\left[\psi\left(\sum_{s=1}^{V}\beta_s\right)-\psi(\beta_v)\right]+\sum_{k=1}^{K}\left[\psi(\mu_{kv})-\psi\left(\sum_{s=1}^{V}\mu_{ks}\right)\right]\\\frac{\partial^2\mathcal{L}}{\partial\beta_v\partial\beta_l}&=K\left[\psi'\left(\sum_{s=1}^{V}\beta_s\right)-\mathbb{I}(v=l)\psi'(\beta_v)\right]\end{aligned} \tag{139}$$

由此得到目标函数关于 β 的梯度 $g(\beta)$ 和 Hessian 矩阵 $H(\beta)$，应用牛顿法求目标函数关于 β 的最大化，根据以下公式迭代

$$\beta_{\text{new}}=\beta_{\text{old}}-H(\beta_{\text{old}})^{-1}g(\beta_{\text{old}}) \tag{140}$$

注意：超参数可以不进行更新，以及论文中推荐先更新局部参数至收敛再更新全局参数。

2.6 随机变分推断

Reference: [2013 Stochastic Variational Inference]

2.7 结构化随机变分推断

Reference: [2015 Structured Stochastic Variational Inference]

3. 变分自编码器