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

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

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：

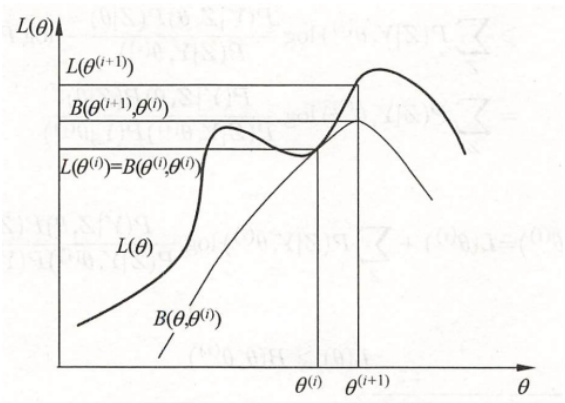


图 9.1　EM 算法的解释

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

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

- $\log P(Y\mid\theta)$ 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）
- $\sum_Z q(Z)\log\frac{q(Z)}{P(Z|Y,\theta)}=KL(q(Z)\,||\,P(Z\mid Y,\theta))$ 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 $B\geq D=0$：

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

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 $Q(\theta,\theta')$ 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

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

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

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

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

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

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

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

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 $\mathrm{KL}(q(Z) \,||\, P(Z \mid X, \theta))$ 来寻找与后验分布 $P(Z \mid X, \theta)$ 最相似的变分分布 $q(Z)$。

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

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

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

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 $q_j(z_j)$

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

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 $q_j(z_j)$

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

针对 ELBO 只考虑优化 q_j

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

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

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

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 $q_j^* = \tilde{p}(\mathbf{x}, z_j)$

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

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 $\mathcal{D} = \{x_1, \dots, x_n\}$，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

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

利用共轭性质可以计算解析后验

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

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）

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

因此我们有

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

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）

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

同理我们可以计算 $\log q_\tau^*(\tau)$

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

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 $p(\tau \mid \mathcal{D}, \mu)$

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

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）

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

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

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

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

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

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 $\eta_{\mathrm{post}},\eta_{\mathrm{prior}}$ 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

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

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

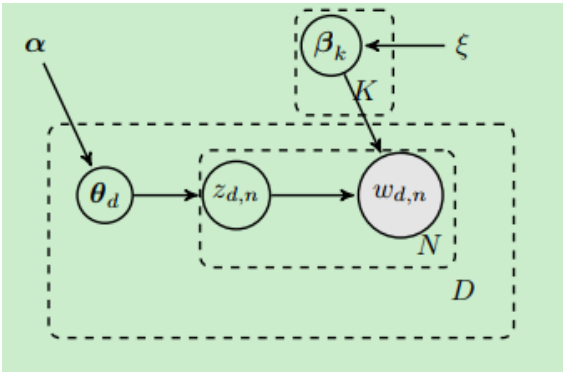
$$
\begin{aligned}
&p(z \mid \beta, x) \\
&= h(z) \exp\left(T(z)^{\top} \eta(\beta, x) - A_l(\eta(\beta, x))\right) \\
&\approx q(z \mid \phi) = h(z) \exp\left(T(z)^{\top} \phi - A_l(\phi)\right)
\end{aligned} \tag{100}
$$

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 $w \in \{1, \ldots, N\}$:

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

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 $\boldsymbol{\Phi}_{D,N}$

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

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

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

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

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

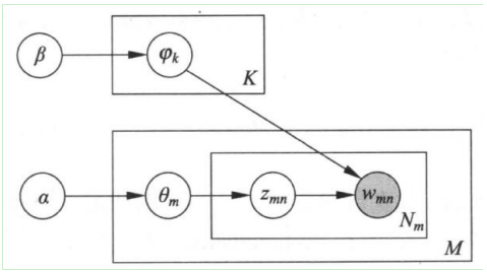
$$
\begin{aligned}
\eta(\boldsymbol{\gamma}_d) &= \left[\left(\alpha_1 - 1 + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^1\right)\ldots\left(\alpha_K - 1 + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^K\right)\right] \\
\Longrightarrow \boldsymbol{\eta} &= \left[\left(\alpha_1 + \sum_{n=1}^N \phi_{d,n}^1\right)\ldots\left(\alpha_K + \sum_{n=1}^N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

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：

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

第三项：

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

第四项：

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

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

第五项：

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

第六项：

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

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

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

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}，$k=1,\dots,K$ 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，$k=1,\dots,K$ 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，$v=1,\dots,V$ 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]

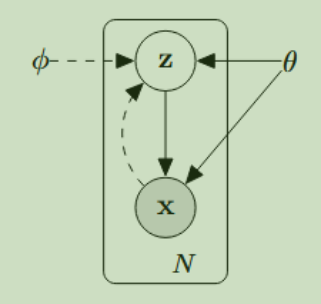
利用指数族分布的良好性质，采用自然梯度代替一般梯度，解决参数向量之间的欧氏距离与它们所代表的概率分布之间的实际统计差异不成比例的问题，并使用批量更新提高效率。

2.7 结构化随机变分推断

Reference: [2015 Structured Stochastic Variational Inference]

3. 变分自编码器

Reference:[2022 Auto-Encoding Variational Bayes]
标准的变分自编码器（Variational autoencoder）主要用于建模连续的隐变量，对离散隐变量的建模因为采样过程无法传递梯度信息存在问题，但可利用Gumbel-Softmax等技术扩展到离散隐变量，此外 VAE 支持对离散和连续的观测变量进行建模。



考虑 N 个独立同分布（i.i.d.）样本的数据集 $\{x^{(i)}\}_{i=1}^N$，样本 $x^{(i)}$ 是连续或离散的变量，假设数据由一个随机过程生成，该过程涉及一个未被观测到的连续随机变量 z，具体两步为：（1）从某个先验分布 $p_{\theta^*}(z)$ 中生成一个 $z^{(i)}$；（2）在给定条件分布 $p_{\theta^*}(x \mid z)$ 下生成观测样本 $x^{(i)}$。我们假设先验分布 $p_{\theta^*}(z)$ 和条件分布 $p_{\theta^*}(x \mid z)$ 来自参数化的分布族 $p_\theta(z)$ 和 $p_\theta(x \mid z)$，并且他们的概率密度函数（PDFs）或概率质量函数（PMFs）在几乎所有地方关于 θ 和 z 都是可微的。

VAE想解决两个挑战：
1、Intractability：边际似然 $p_\theta(x)$ 是棘手的，因此我们无法评估或微分边际似然，其中真实的后验分布 $p_\theta(z \mid x) = \frac{p_\theta(x|z)p_\theta(z)}{p_\theta(x)}$ 是难处理的，因此不能使用 EM 算法，并且用于任何合理的基于平均场的 VB 算法所需的积分也是难处理的。这些难处理性相当普遍，并出现在中等复杂的似然函数族 $p_\theta(x \mid z)$ 中，例如，带有非线性隐藏层的神经网络。
2、A large dataset： 我们有如此多的数据，以至于批量优化成本过高；我们希望使用小批量甚至单个数据点来更新参数。蒙特卡洛 EM 等采样方法通常会很慢，因为它涉及为每个数据点执行昂贵的采样循环。

3.1 变分下界

见式（24）或式（63），可以得到每个数据点的边际似然：

$$\begin{aligned}\log p_\theta(x^{(i)}) &= \int q_\phi(z \mid x^{(i)}) \log \frac{p_\theta(x^{(i)}, z)}{q_\phi(z \mid x^{(i)})} \mathrm{d}z - \int q_\phi(z \mid x^{(i)}) \log \frac{p_\theta(z \mid x^{(i)})}{q_\phi(z \mid x^{(i)})} \\ &= \mathcal{L}(\theta, \phi; x^{(i)}) + D_{KL}(q_\phi(z \mid x^{(i)}) \,||\, p_\theta(z \mid x^{(i)}))\end{aligned} \tag{141}$$

因为 KL 散度的非负性，所以

$$\log p_\theta(x^{(i)}) \geq \mathcal{L}(\theta, \phi; x^{(i)}) = \mathbb{E}_{q_\phi(z|x^{(i)})}[-\log q_\phi(z \mid x^{(i)}) + \log p_\theta(x^{(i)}, z)] \tag{142}$$

因此变分下界还可以写为

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; x^{(i)}) = -D_{KL}(q_\phi(z \mid x^{(i)}) \,||\, p_\theta(z)) + \mathbb{E}_{q_\phi(z|x^{(i)})}[\log p_\theta(x^{(i)} \mid z)] \tag{143}$$

我们想要针对变分参数 ϕ 和生成参数 θ 求导和优化变分下界 $\mathcal{L}(\theta, \phi; x^{(i)})$，然而下界关于变分参数 ϕ 的梯度计算存在一些问题。通常使用一般的蒙特卡洛梯度估计（求导和积分的互换见[2020 Monte Carlo Gradient Estimation in Machine Learning]：

$$\nabla_\phi \mathbb{E}_{q_\phi(z)}[f(z)] = \mathbb{E}_{q_\phi(z)}[f(z) \nabla_{q_\phi(z)} \log q_\phi(z)] \simeq \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} f(z) \nabla_{q_\phi(z^{(l)})} \log q_\phi(z^{(l)}) \tag{144}$$

此处 $z^{(l)} \sim q_\phi(z \mid x^{(i)})$，然而这样基于得分函数的蒙特卡洛估计方差非常大（见[2012 Variational Bayesian inference with Stochastic Search]），无法适用于此文研究。

3.2 Stochastic Gradient Variational Bayes (SGVB) estimator

注意作者假设的近似后验具有 $q_\phi(z \mid x)$ 的形式，但是同样可以假设 $q_\phi(z)$。

在相对温和的条件限制下，可以用一个可微分的转换 $g_\phi(\epsilon, z)$ 和一个辅助（噪声）变量 ϵ 为近似后验 $q_\phi(z \mid x)$ 重参数化变量 $\tilde{z} \sim q_\phi(z \mid x)$：

$$\tilde{z} = g_\phi(\epsilon, x) \quad \text{with } \epsilon \sim p(\epsilon) \tag{145}$$

然后我们可以获得 $q_\phi(z \mid x)$ 关于函数 $f(z)$ 的期望的蒙特卡洛估计：

$$\mathbb{E}_{q_\phi(z|x^{(i)})}[f(z)] = \mathbb{E}_{p(\epsilon)}\left[f(g_\phi(\epsilon, x^{(i)}))\right] \simeq \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} f(g_\phi(\epsilon^{(l)}, x^{(i)})) \quad \text{where } \epsilon^{(l)} \sim p(\epsilon) \tag{146}$$

将该技术作用于式（142），得到 SGVB 估计器 $\tilde{\mathcal{L}}^A(\theta, \phi; x^{(i)}) \simeq \mathcal{L}(\theta, \phi; x^{(i)})$：

$$\tilde{\mathcal{L}}^A(\theta, \phi; x^{(i)}) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} \left[\log p_\theta(x^{(i)}, z^{(i,l)}) - \log q_\phi(z^{(i,l)} \mid x^{(i)})\right] \quad \text{where } z^{(i,l)} = g_\phi(\epsilon^{(i,l)}, x^{(i)}), \epsilon^{(l)} \sim p(\epsilon) \tag{147}$$

通常式（143）中的 $D_{KL}(q_\phi(z \mid x^{(i)}) \mid\mid p_\theta(z))$ 可以解析的计算，因此只有期望的重构误差 $\mathbb{E}_{q_\phi(z|x^{(i)})}[\log p_\theta(x^{(i)} \mid z)]$ 需要使用采样进行估计，这个 KL 散度项可以被理解为规范变分参数 ϕ，促使估计后验尽量和先验 $p_\theta(z)$ 接近。因此针对式（143）可以得到第二种 SGVB 估计器 $\tilde{\mathcal{L}}^B(\theta, \phi; x^{(i)}) \simeq \mathcal{L}(\theta, \phi; x^{(i)})$，相较于通用估计器具有显著更小的方差：

$$\tilde{\mathcal{L}}^B(\theta, \phi; x^{(i)}) = -D_{KL}(q_\phi(z \mid x^{(i)}) \mid\mid p_\theta(z)) + \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L}\left[\log p_\theta(x^{(i)} \mid z^{(i,l)})\right] \quad \text{where } z^{(i,l)} = g_\phi(\epsilon^{(i,l)}, x^{(i)}), \epsilon^{(l)} \sim p(\epsilon) \tag{148}$$

给定具有 N 个数据点的数据集 X 中的多个数据点，我们可以基于小批量构造全数据集的边际似然的下界：

$$\mathcal{L}(\theta, \phi; X) \simeq \tilde{\mathcal{L}}^M(\theta, \phi; X^M) = \frac{N}{M}\sum_{i=1}^{M}\tilde{\mathcal{L}}(\theta, \phi; x^{(i)}) \tag{149}$$

作者在实验中发现每个数据点采样数 L 可以设置为1，只要小批量尺寸 M 足够大，例如 $M = 100$。

Algorithm 1:
Initialize parameters θ, ϕ
repeat
Draw random minibatch X^M of M datapoints (drawn from full dataset)
Draw random samples ϵ from noise distribution $p(\epsilon)$
Calculate gradients $g \leftarrow \nabla_{\theta,\phi}\tilde{\mathcal{L}}^M(\theta, \phi; X^M, \epsilon)$ (Gradients of minibatch estimator (149))
Update parameters θ, ϕ using gradients g (e.g. SGD or Adagrad)
until convergence of parameters (θ, ϕ)
return θ, ϕ

3.3 重参数化技巧

令 z 为一个连续的随机变量，并且 $z \sim q_\phi(z \mid x)$ 作为条件分布，通常可以将其表示为一个确定性变量 $z = g_\phi(\epsilon, x)$，其中 ϵ 是一个辅助变量，具有边际分布 $p(\epsilon)$，$g_\phi(\cdot)$ 是以 ϕ 为参数的向量函数。

这种重新参数化对我们的情况很有用，因为它可以用来改写关于 $q_\phi(z \mid x)$ 的期望，使得该期望的蒙特卡洛估计值关于 ϕ 可微。**详细推导需要补充**

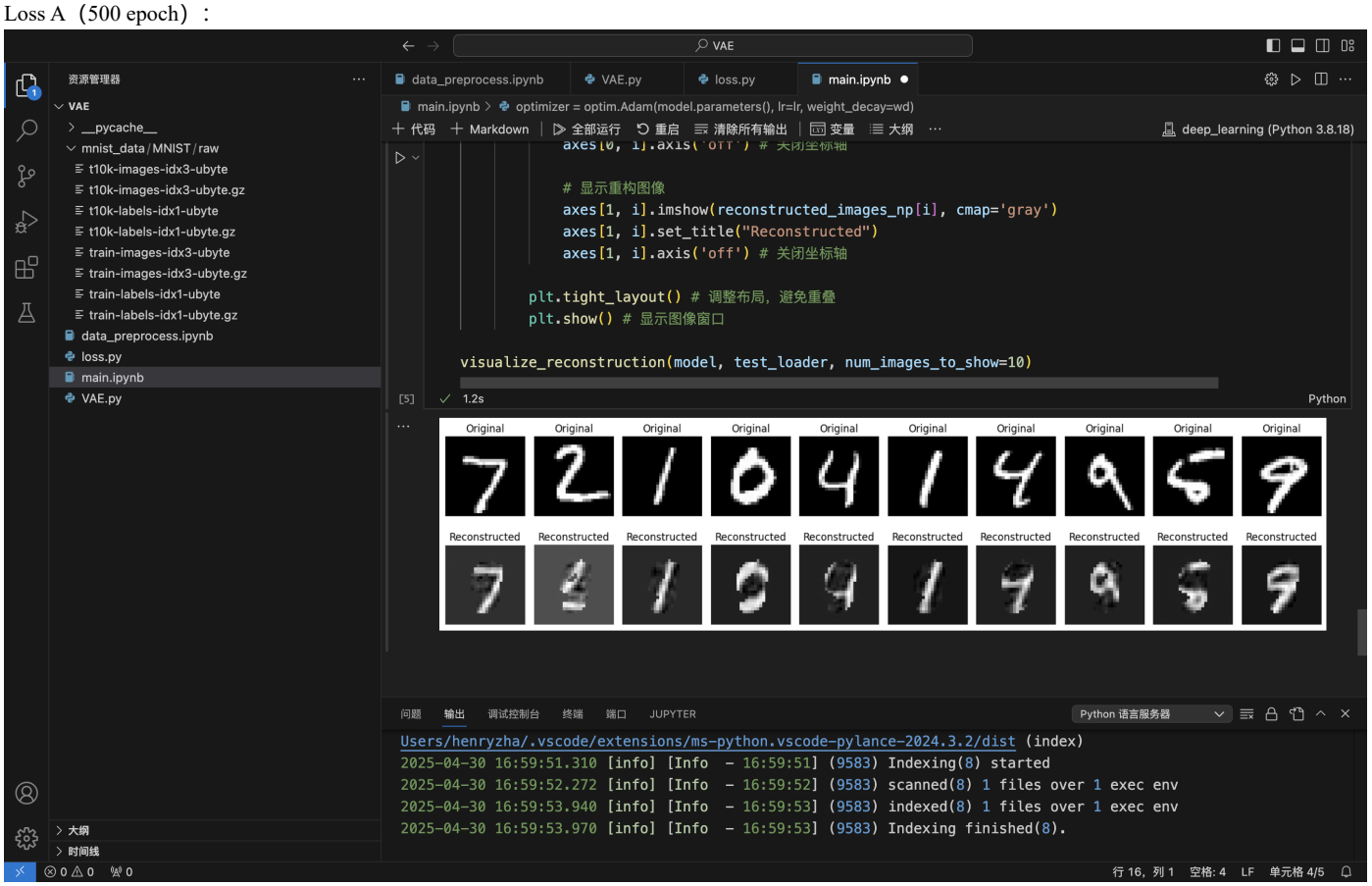
以单变量高斯分布举例：使 $z \sim p(z \mid x) = \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$，一个有效的重参数化是 $z = \mu + \sigma\epsilon$，其中 ϵ 是辅助的噪声变量 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, 1)$，因此

$$\mathbb{E}_{\mathcal{N}(z;\mu,\sigma^2)}[f(z)] = \mathbb{E}_{\mathcal{N}(\epsilon;0,1)}[f(\mu + \sigma\epsilon)] \simeq \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} f(\mu + \sigma\epsilon^{(l)}) \quad \text{where } \epsilon^{(l)} \sim \mathcal{N}(0, 1) \tag{150}$$

对于哪些 $q_\phi(z \mid x)$ 我们可以选择这样的可微变换 $g_\phi(\cdot)$ 和辅助变量 $\epsilon \sim p(\epsilon)$？有三种基本方法：
1、易处理的逆 CDF。在这种情况下，令 $\epsilon \sim \mathcal{U}(0, 1)$，并令 $g_\phi(\epsilon, x)$ 是 $q_\phi(z \mid x)$ 的逆 CDF。例如：指数分布、柯西分布、Logistic 分布、瑞利分布、帕累托分布、威布尔分布、倒数分布、Gompertz 分布、Gumbel 分布和 Erlang 分布。
2、类似于高斯分布的例子，对于任何“位置-尺度”（location-scale）分布族，我们可以选择标准分布（具有 location=0,scale=1）作为辅助变量 ϵ，并令 $g(\cdot) = \text{location} + \text{scale} \cdot \epsilon$。例如拉普拉斯分布、椭圆分布、学生 t 分布、Logistic 分布、均匀分布、三角分布和高斯分布。
3、组合，通常可以将随机变量表达为辅助变量的不同变换。例子：对数正态分布（正态分布变量的指数化）、伽马分布（指数分布变量的总和）、狄利克雷分布（伽马变量的加权总和）、贝塔分布、卡方分布和 F 分布。

当所有三种方法都失败时，存在对逆累积分布函数的良好近似，其计算的时间复杂度与概率密度函数相当。

Loss A（500 epoch）：



Loss B：