

PRML の 9 章の数式の補足

サイボウズ・ラボ 光成滋生

2011 年 7 月 23 日

1 概要

この文章は『パターン認識と機械学習』(以下 PRML) の 9 章の式変形を一部埋めたものです。間違い, 質問などございましたら herumi@nifty.com または [twitterID:herumi](https://twitter.com/herumi) までご連絡ください。面倒なので特に紛らわしいと思わない限り x を x と書いたりします。また対数尤度関数を F と書くことが多いです。

2 復習

よく使ういくつかの式を書いておく。どれも今までに既に表示したものである。

<https://github.com/herumi/prml/raw/master/prml2.pdf>,

<https://github.com/herumi/prml/raw/master/prml3.pdf> を参照。

2.1 行列の公式

$$\begin{aligned}x^T Ax &= \text{tr}(Axx^T), \\ \frac{\partial}{\partial A} \log |A| &= (A^{-1})^T, \\ \frac{\partial}{\partial x} \log |A| &= \text{tr}(A^{-1} \frac{\partial}{\partial x} A), \\ \frac{\partial}{\partial A} \text{tr}(A^{-1} B) &= -(A^{-1} B A^{-1})^T.\end{aligned}$$

2.2 微分

関数 f に対して対数関数の微分は

$$(\log f)' = \frac{f'}{f}.$$

よって逆に

$$f' = f \cdot (\log f)'.$$

ガウス分布など対数の微分が分かりやすいときによく使う。

2.3 ガウス分布

$$\mathcal{N} = \mathcal{N}(x|\mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} |\Sigma|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)^T \Sigma^{-1}(x - \mu)\right).$$

期待値と分散について

$$\begin{aligned} E[x] &= \mu, \\ \text{cov}[x] &= \Sigma, \\ E[xx^T] &= \mu\mu^T + \Sigma, \\ E[x^T x] &= \mu^T \mu + \text{tr}(\Sigma). \end{aligned}$$

最後の式は 3 番目から出る.

$$E[x_i^2] = (\mu\mu^T)_{ii} + \Sigma_{ii} = \mu_i^2 + \Sigma_{ii}.$$

よって

$$E[x^T x] = \sum_i E[x_i^2] = \mu^T \mu + \text{tr}(\Sigma).$$

3 混合ガウス分布

離散的な潜在変数を用いた混合ガウス分布の定式化. K 次元 2 値確率変数 z を考える (どれか一つの成分のみが 1 であとは 0). つまり

$$\sum_k z_k = 1.$$

z の種類は K 個である. $0 \leq \pi_k \leq 1$ という係数を用いて

$$p(z_k = 1) = \pi_k$$

という確率分布を与える.

$$p(z) = \prod_k \pi_k^{z_k}.$$

$$p(x|z_k = 1) = \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)$$

なので

$$P(x|z) = \prod_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)^{z_k}.$$

これらを合わせて

$$\begin{aligned} p(x) &= \sum_z p(z)p(x|z) \\ &= \sum_z \prod_k (\pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k))^{z_k} \\ &\quad z_k \text{ はどれか一つのみが 1 (そのとき } \pi_k \text{) であとは 0 なので} \\ &= \sum_k \pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k). \end{aligned}$$

x が与えられたときの z の条件付き確率 $p(z_k = 1|x)$ を $\gamma(z_k)$ とする.

$$\gamma(z_k) = \frac{p(z_k = 1)p(x|z_k = 1)}{\sum_j p(z_j = 1)p(x|z_j = 1)} = \frac{\pi_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}(x|\mu_j, \Sigma_j)}.$$

これを混合要素 k が観測値 x に対する負担率という.

4 混合ガウス分布の EM アルゴリズム

混合ガウス分布において観測したデータ集合を $X^T = \{x_1, \dots, x_N\}$, 対応する潜在変数を $Z^T = \{z_1, \dots, z_N\}$ とする. X は $N \times D$ 行列で Z は $N \times K$ 行列.

対数尤度関数の最大点の条件をもとめる.

$$F = \log p(X|\pi, \mu, \Sigma) = \sum_{n=1}^N \log \left(\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(x_n|\mu_j, \Sigma_j) \right)$$

とする.

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \log \mathcal{N}(x|\mu, \Sigma) = \frac{\partial}{\partial \mu} \left(-\frac{1}{2} (x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu) \right) = \Sigma^{-1} (x - \mu)$$

より

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \mathcal{N} = \mathcal{N} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mu} \log \mathcal{N} \right) = \mathcal{N} \cdot \Sigma^{-1} (x - \mu).$$

$\mathcal{N}_{nk} = \mathcal{N}(x_n|\mu_k, \Sigma_k)$ において

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu_k} F &= \sum_n \frac{\pi_k \frac{\partial}{\partial \mu_k} \mathcal{N}_{nk}}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}_{nj}} \\ &= \sum_n \left(\frac{\pi_k \mathcal{N}_{nk}}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}_{nj}} \right) \frac{\partial}{\partial \mu_k} \log \mathcal{N}_{nk} \\ &= \sum_n \gamma(z_{nk}) \frac{\partial}{\partial \mu_k} \log \mathcal{N}_{nk} \\ &= \Sigma_k^{-1} \left(\sum_n \gamma(z_{nk}) (x_n - \mu_k) \right) = 0. \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} \sum_n \gamma(z_{nk}) x_n - \left(\sum_n \gamma(z_{nk}) \right) \mu_k &= 0. \\ N_k &= \sum_n \gamma(z_{nk}) \end{aligned}$$

とおくと

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_n \gamma(z_{nk}) x_n.$$

これは μ_k が X の重みつき平均であることを示している.

次に Σ_k に関する微分を考える.

$$\mathcal{N} = \mathcal{N}(x|\mu, \Sigma)$$

のとき

$$\log \mathcal{N} = -\frac{D}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1}(x - \mu)(x - \mu)^T)$$

なので $\Sigma^T = \Sigma$ だから

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma}(\log \mathcal{N}) = -\frac{1}{2}(\Sigma^{-1}) + \frac{1}{2}(\Sigma^{-1}(x - \mu)(x - \mu)^T \Sigma^{-1}).$$

よって μ_k の微分と同様にして

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Sigma_k} F &= \sum_n \gamma(z_{nk}) \frac{\partial}{\partial \Sigma_k} \log \mathcal{N}_{nk} \\ &= \sum_n \gamma(z_{nk}) \left(-\frac{1}{2}(\Sigma_k^{-1}) + \frac{1}{2}(\Sigma_k^{-1}(x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1}) \right) = 0. \end{aligned}$$

よって

$$\sum_n \gamma(z_{nk}) (I - (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1}) = 0.$$

$$\Sigma_k = \frac{1}{N_k} \sum_n \gamma(z_{nk}) (x_n - \mu_k)(x_n - \mu_k)^T.$$

最後に π_k に関する微分を考える. $\sum_k \pi_k = 1$ の制約を入れる.

$$G = F + \lambda \left(\sum_k \pi_k - 1 \right)$$

とすると

$$\frac{\partial}{\partial \pi_k} G = \sum_n \frac{\mathcal{N}_{nk}}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}_{nj}} + \lambda = \sum_n \gamma(z_{nk}) / \pi_k + \lambda = N_k / \pi_k + \lambda = 0.$$

つまり

$$N_k = -\lambda \pi_k.$$

よって

$$N = \sum_k N_k = \sum_k (-\lambda \pi_k) = -\lambda.$$

よって

$$\pi_k = \frac{N_k}{-\lambda} = \frac{N_k}{N}.$$

5 混合ガウス分布再訪

$$p(z) = \prod_k \pi_k^{z_k},$$

$$p(x|z) = \prod_k \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma_k)^{z_k}$$

より

$$\begin{aligned} F &= \log p(X, Z | \mu, \Sigma, \pi) = \log \left(\prod_{n,k} \pi_k^{z_{nk}} \mathcal{N}(x_n | \mu_k, \Sigma_k)^{z_{nk}} \right) \\ &= \sum_{n,k} z_{nk} (\log \pi_k + \log \mathcal{N}_{nk}). \end{aligned}$$

z_n は $(0, 0, \dots, 1, 0, \dots, 0)$ の形で $\sum_k \pi_k = 1$ の制約条件を入れると上式の微分を考えると

$$G = F + \lambda \left(\sum_k \pi_k - 1 \right)$$

として

$$\frac{\partial}{\partial \pi_k} G = \sum_n z_{nk} \frac{1}{\pi_k} + \lambda = \left(\sum_n z_{nk} \right) / \pi_k + \lambda = 0.$$

よって

$$\begin{aligned} \pi_k &= -\frac{1}{\lambda} \sum_n z_{nk}. \\ \sum_k \pi_k &= -\frac{1}{\lambda} \sum_{n,k} z_{nk} = -\frac{N}{\lambda} = 1. \end{aligned}$$

よって $\lambda = -N$. つまり

$$\pi_k = \frac{1}{N} \sum_n z_{nk}.$$

完全データ集合についての対数尤度関数の最大化は解けるが、潜在変数が分からない場合の不完全データに関する対数尤度関数の最大化は困難。この場合は潜在変数の事後分布に関する完全データ尤度関数の期待値を考える。

$$p(Z | X, \mu, \Sigma, \pi) = \frac{p(X, Z | \mu, \Sigma, \pi)}{p(X | \mu, \Sigma, \pi)} \propto \prod_{n,k} (\pi_k \mathcal{N}_{nk})^{z_{nk}}.$$

$$E[z_{nk}] = \frac{\sum_{z_n} z_{nk} \prod_j (\pi_j \mathcal{N}_{nj})^{z_{nj}}}{\sum_{z_n} \prod_j (\pi_j \mathcal{N}_{nj})^{z_{nj}}} = \frac{\pi_k \mathcal{N}_{nk}}{\sum_j \pi_j \mathcal{N}_{nj}} = \gamma(z_{nk}).$$

よって

$$F = E_Z [\log p(X, Z | \mu, \Sigma, \pi)] = \sum_{n,k} \gamma(z_{nk}) (\log \pi_k + \log \mathcal{N}_{nk}).$$

まずパラメータ μ, Σ, π を適当に決めて負担率 $\gamma(z_{nk})$ を求め、それを fix して μ_k, Σ_k, π_k について F を最大化。今までと同様にできる。 $F' = F + \lambda (\sum_k \pi_k - 1)$ として

$$\frac{\partial}{\partial \pi_k} F' = \sum_n \gamma(z_{nk}) (1/\pi_k) + \lambda = 0$$

より

$$\begin{aligned} \sum_n \gamma(z_{nk}) &= \lambda \pi_k. \\ \sum_{n,k} \gamma(z_{nk}) &= -\lambda \left(\sum_k \pi_k \right) = -\lambda = N \end{aligned}$$

より

$$\pi_k = \frac{1}{N} \sum_n \gamma(z_{nk}) = \frac{N_k}{N}.$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu_k} F = \sum_n \gamma(z_{nk}) (-\Sigma_k^{-1} (x_n - \mu_k)) = \Sigma_k^{-1} (\sum_n \gamma(z_{nk}) x_n - (\sum_n \gamma(z_{nk})) \mu_k) = 0.$$

よって

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_n \gamma(z_{nk}) x_n.$$

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma_k} F = \sum_n \gamma(z_{nk}) \frac{\partial}{\partial \Sigma_k} \log \mathcal{N}_{nk} = 0$$

として同様（流石に略）.

6 K -means との関連

式 (9.43) は不正確. E ではなく ϵE を考えないと (9.43) の右辺にはならない. 式 (9.40) を E とおく.

$$E = \sum_{n,k} \gamma(z_{nk}) (\log \pi_k + \log \mathcal{N}(x_n | \mu_k, \Sigma_k)).$$

ϵE に

$$\mathcal{N}(x | \mu_k, \Sigma_k) = \frac{1}{(2\pi\epsilon)^{D/2}} \exp(-\frac{1}{2\epsilon} \|x - \mu_k\|^2)$$

を代入する.

$$\epsilon E = \sum_{n,k} \gamma(z_{nk}) (\epsilon \log \pi_k - \frac{D}{2} \epsilon \log(2\pi\epsilon) - \frac{1}{2} \|x_n - \mu_k\|^2).$$

$\epsilon \rightarrow 0$ で

$$\gamma(z_{nk}) \rightarrow r_{nk},$$

$$\epsilon \log \pi_k \rightarrow 0,$$

$$\epsilon \log(2\pi\epsilon) \rightarrow 0$$

より

$$\epsilon E \rightarrow -\frac{1}{2} \sum_{n,k} r_{nk} \|x_n - \mu_k\|^2 = -J.$$

よって期待完全データ対数尤度の最大化は J の最小化と同等.

7 混合ベルヌーイ分布

$x = (x_1, \dots, x_D)^T$, $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_D)^T$ とする.

$$p(x | \mu) = \prod_{i=1}^D \mu_i^{x_i} (1 - \mu_i)^{(1-x_i)}.$$

$E[x] = \mu$ は容易に分かる.

$$E[x_i x_j] = \begin{cases} \mu_i \mu_j & (i \neq j) \\ \mu_i & (i = j). \end{cases}$$

よって

$$\text{cov}[x]_{ij} = E[(x - \mu)(x - \mu)^T]_{ij} = E[x_i x_j] - (\mu \mu^T)_{ij} = (\mu_i - \mu_i^2) \delta_{ij}$$

より

$$\text{cov}[x] = \text{diag}(\mu_i(1 - \mu_i)).$$

$\mu = \{\mu_1, \dots, \mu_K\}$, $\pi = \{\pi_1, \dots, \pi_K\}$ として次の混合分布を考えよう.

$$p(x|\mu_k) = \prod_i \mu_{ki}^{x_i} (1 - \mu_{ki})^{(1-x_i)}.$$

$$E[x] = \int x p(x|\mu) dx = \sum_k \pi_k \int x p(x|\mu_k) dx = \sum_k \pi_k E_k[x] = \sum_k \pi_k \mu_k.$$

$$E_k[xx^T] = \text{cov}_k[x] + \mu_k \mu_k^T = \Sigma_k + \mu_k \mu_k^T$$

より

$$\text{cov}[x] = E[(x - E[x])(x - E[x])^T] = E[xx^T] - E[x]E[x]^T = \sum_k \pi_k (\Sigma_k + \mu_k \mu_k^T) - E[x]E[x]^T.$$

データ集合 $X = \{x_1, \dots, x_N\}$ が与えられたとき, 対数尤度関数は

$$\log p(X|\mu, \pi) = \sum_n \log(\sum_k \pi_k p(x_n|\mu_k)).$$

対数の中に和があるので解析的に最尤解をもとめられない. EM アルゴリズムを使う. x に対応する潜在変数を $z = (z_1, \dots, z_K)^T$ を導入する. どれか一つのみ 1 でその他は 0 のベクトルである. z の事前分布を

$$p(z|\pi) = \prod_k \pi_k^{z_k}$$

とする. z が与えられたときの条件付き確率は

$$p(x|z, \mu) = \prod_k p(x|\mu_k)^{z_k}.$$

$$p(x, z|\mu, \pi) = p(x|z, \mu)p(z|\pi) = \prod_k (\pi_k p(x|\mu_k))^{z_k}.$$

よって

$$p(x|\mu, \pi) = \sum_z p(x, z|\mu, \pi) = \sum_k \pi_k p(x|\mu_k).$$

完全データ対数尤度関数は $X = \{x_n\}$, $Z = \{z_n\}$ として

$$\begin{aligned} \log p(X, Z|\mu, \pi) &= \sum_{n,k} z_{nk} (\log \pi_k + \sum_i x_{ni} \log \mu_{ki} + (1 - x_{ni}) \log(1 - \mu_{ki})) \\ &= \sum_{n,k} z_{nk} A_{nk} \text{ とおく.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E[z_{nk}] &= \frac{\sum_{z_n} z_{nk} \prod_j (\pi_j p(x_n | \mu_j))^{z_{nj}}}{\sum_{z_n} \prod_j (\pi_j p(x_n | \mu_j))^{z_{nj}}} \\
&\quad (z_{nk} = 1 \text{ となるものだけとるので}) \\
&= \frac{\pi_k p(x_n | \mu_k)}{\sum_j \pi_j p(x_n | \mu_j)}
\end{aligned}$$

を $\gamma(z_{nk})$ とおく. すると

$$E_Z[\log p(X, Z) | \mu, \pi] = \sum_{n,k} \gamma(z_{nk}) A.$$

$$N_k = \sum_n \gamma(z_{nk}), \quad \bar{x}_k = \frac{1}{N_k} \sum_n \gamma(z_{nk}) x_n$$

とおく.

$$\begin{aligned}
F &= E_Z[\log p(X, Z | \mu, \pi)] \\
&= \sum_k (\log \pi_k) \left(\sum_n \gamma(z_{nk}) \right) + \sum_{k,i} \log \mu_{ki} \left(\sum_n \gamma(z_{nk}) x_{ni} \right) + \sum_{k,i} \log(1 - \mu_{ki}) \left(\sum_n \gamma(z_{nk}) (1 - x_{ni}) \right) \\
&= \sum_k N_k \log \pi_k + \sum_{k,i} N_k \bar{x}_{ki} \log \mu_{ki} + \sum_{k,i} \log(1 - \mu_{ki}) N_k (1 - \bar{x}_{ki}).
\end{aligned}$$

μ_{ki} に関する最大化.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mu_{ki}} F &= N_k \bar{x}_{ki} \frac{1}{\mu_{ki}} + \frac{-1}{1 - \mu_{ki}} N_k (1 - \bar{x}_{ki}) \\
&= \frac{N_k}{\mu_{ki}(1 - \mu_{ki})} (\bar{x}_{ki}(1 - \mu_{ki}) - (1 - \bar{x}_{ki})\mu_{ki}) = 0.
\end{aligned}$$

よって

$$\bar{x}_{ki} - \bar{x}_{ki}\mu_{ki} - \mu_{ki} + \bar{x}_{ki}\mu_{ki} = \bar{x}_{ki} - \mu_{ki} = 0.$$

よって

$$\mu_k = \bar{x}_k.$$

π_k に関する最適化. $G = F + \lambda(\sum_k \pi_k - 1)$ とすると

$$\frac{\partial}{\partial \pi_k} G = \frac{N_k}{\pi_k} + \lambda = 0.$$

よって

$$N_k = -\lambda \pi_k, \quad N = \sum_k N_k = -\lambda \sum_k \pi_k = -\lambda.$$

つまり $\lambda = -N$ となり

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}.$$

$0 \leq p(x_n | \mu_k) \leq 1$ より

$$\log p(X | \mu, \pi) = \sum_n \log \left(\sum_k \pi_k p(x_n | \mu_k) \right) \leq \sum_k \log \left(\sum_k \pi_k \right) = 0.$$

よって尤度関数が発散することはない.

8 ベイズ線形回帰に関する EM アルゴリズム

EM アルゴリズムに基づいてベイズ線形回帰を考えてみる. w を潜在関数と見なしそれを最大化する方針を採る.

$$p(w|t) = \mathcal{N}(w|m_N, S_N)$$

で w の事後分布が求まっているとする.

$$p(t|w, \beta) = \prod_n \mathcal{N}(t_n|w^T \phi(x_n), \beta^{-1}),$$

$$p(w|\alpha) = \mathcal{N}(w|0, \alpha^{-1}I)$$

であった. このとき完全データ対数尤度関数は

$$\log p(t, w|\alpha, \beta) = \log p(t|w, \beta) + \log p(w|\alpha).$$

なので

$$\begin{aligned} F &= E[\log p(t, w|\alpha, \beta)] \\ &= E\left[\sum_n \left(\frac{1}{2} \log\left(\frac{\beta}{2\pi}\right) - \frac{\beta}{2}(t_n - w^T \phi_n)^2\right) + \frac{M}{2} \log\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right) - \frac{\alpha}{2} w^T w\right] \\ &= \frac{M}{2} \log\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right) - \frac{\alpha}{2} E[w^T w] + \frac{N}{2} \log\left(\frac{\beta}{2\pi}\right) - \frac{\beta}{2} \sum_n E[(t_n - w^T \phi_n)^2]. \end{aligned}$$

α に関する最大化

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} F = \frac{M}{2} \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{2} E[w^T w] = 0.$$

よって

$$\alpha = \frac{M}{E[w^T w]} = \frac{M}{m_N^T m_N + \text{tr}(S_N)}.$$

β に関する最大化

$$\frac{\partial}{\partial \beta} F = \frac{N}{2} \frac{1}{\beta} - \frac{1}{2} \sum_n E[(t_n - w^T \phi_n)^2] = 0.$$

よって

$$\frac{1}{\beta} = \frac{1}{N} \sum_n E[(t_n - w^T \phi_n)^2].$$

9 一般の EM アルゴリズム

潜在変数をもつ確率モデルの最尤解を求めるための一般的手法. X を確率変数, Z を潜在変数, θ をパラメータとする. 完全データ対数尤度関数 $\log p(X, Z|\theta)$ の最適化は容易であるという仮定の元で目的は $p(X|\theta) = \sum_Z p(X, Z|\theta)$ の最大化.

Z に対する分布を $q(Z)$ とする

$$p(X, Z|\theta) = p(Z|X, \theta)p(X|\theta).$$

$$\mathcal{L}(q, \theta) = \sum_Z q(Z) \log \frac{p(X, Z|\theta)}{q(Z)},$$

$$\text{KL}(q||p) = - \sum_Z q(Z) \log \frac{p(Z|X, \theta)}{q(Z)}$$

とおく. $\text{KL}(q||p)$ は $q(Z)$ と事後分布 $p(Z|X, \theta)$ との距離なので常に 0 以上.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(q, \theta) + \text{KL}(q||p) &= \sum_Z q(Z) \log \frac{p(X, Z|\theta)}{p(Z|X, \theta)} \\ &= \sum_Z q(Z) \log p(X|\theta) \\ &= \log p(X|\theta). \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} \log p(X|\theta) &= \mathcal{L}(q, \theta) + \text{KL}(q||p) \\ &\geq \mathcal{L}(q, \theta). \end{aligned}$$

したがって $\mathcal{L}(q, \theta)$ は $\log p(X|\theta)$ の下界.

パラメータの現在の値が θ^o だったときに

E ステップでは θ^o を固定して $\mathcal{L}(q, \theta)$ を $q(Z)$ について最大化する. $\log p(X|\theta)$ は q によらないのでそれは $\text{KL} = 0$ のとき, つまり

$$q(Z) = p(Z|X, \theta^o)$$

のときである.

M ステップでは $q(Z)$ を固定して $\mathcal{L}(q, \theta)$ を θ について最大化する. その θ を θ^n とする.