

クラスタリングとノンパラメトリックベイズ

NIGG

Tokyo, Japan

June 8, 2016

Contents

- 1 準備と概要
- 2 無限次元のディリクレ分布を考える
- 3 無限混合ガウスモデル
- 4 周辺尤度からみるディリクレ分布の無限次元化
- 5 分割の確率モデル
- 6 ディリクレ過程
- 7 集中度パラメータ α の推定

ディリクレ過程混合モデル

無限混合モデルとも呼ばれる。

有限混合モデル

- クラスタ数を事前に定める必要がある。

ディリクレ過程混合モデル

- クラスタ数はディリクレ過程により決定される。
- 生成モデルは、

$$G \sim DP(\alpha, H_0)$$

$$\theta^k \sim \mathbf{G}(\theta_i)$$

$$\mathbf{x}_k | \theta_i \sim N(\theta_i, \sigma_0^2 \mathbf{I})$$

ディリクレ過程混合モデル

ディリクレ過程混合モデル

- ディリクレ過程混合モデルとは、 θ の確率分布である $G(\theta)$ を、 $G \sim p(G|\alpha, \eta)$ を用いて生成する。
- 次に、 $G(\theta)$ を用いて n 個のパターンに対応する $\theta_1, \dots, \theta_n$ を生成する。
- 最後に、これらをパラメータとする確率分布 $p(\mathbf{x}|\theta_i)$ を生成する。
- $G \sim p(G|\alpha, \eta)$ をディリクレ過程とよぶ。
- 上のモデルは $H_0(\theta|\eta)$ を用いて、

$$p(G|\alpha, \eta) = DP(\alpha, H_0)$$

と表現する。

- α は集中度パラメータ、 $H_0(\theta|\eta)$ は基底分布という。

クラスタリング

K 平均法

$$(z_{1:n}^*, \mu_{1:K}^*) = \operatorname{argmin}_{z_{1:n}, \mu_{1:K}} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \delta(z_i = k) ||x_i - \mu_k||^2$$

クラスタリング

有限混合モデル

$$(z_{1:n}^*, \mu_{1:K}^*) = \operatorname{argmin}_{z_{1:n}, \mu_{1:K}} \log \prod_{i=1}^n N(x_i | \mu_{z_i}, I)$$

(注) 上の変形は、

$$\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \delta(z_i = k) \|x_i - \mu_k\|^2$$

$$\propto - \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \delta(z_i = k) \left(-\frac{1}{2} \|x_i - \mu_k\|^2\right)$$

$$= -(nD \log(\sqrt{2\pi}) + \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K \delta(z_i = k) \log N(\mathbf{x}_i | \mu_k, \mathbf{I}))$$

$$= -(nD \log(\sqrt{2\pi}) + \log \prod_{i=1}^n N(\mathbf{x}_i | \mu_{z_i}, \mathbf{I}))$$

による。2 段目の変形は $\log(A \exp(B))$ を考えればよい。

ディリクレ分布の仮定

仮定付きのディリクレ分布

$\alpha_k = \alpha/K$ を仮定する。

$$z_i \sim \text{Multi}(\pi) (i = 1, \dots, n), \pi \sim \text{Dir}(\alpha), \alpha_k = \alpha/K$$

$\text{Dir}(\pi|\alpha/K)$ の二つの性質

- (1) 各 k で α_k が同じ値であるため、事前分布としては k に区別はない.
- (2) 次元 K が大きくなるにしたがって、ディリクレ分布のパラメータ α_k は小さくなる.

ディリクレ分布の説明

そもそもディリクレ分布とは。

例題

いま m 種の目 v_1, \dots, v_m をもつ仮想的なサイコロが一個与えられたとする。ここで k の目を v_k で表す。このサイコロは、投げて v_k が出る確率が θ_k となるような細工が施してあり、かつその値は未知とする。このサイコロを続けて n 回投げた結果が、 $x^n = \{x_1, \dots, x_t, \dots, x_n\}$ で、その内容は v_k が n_k であったとする。ただし、 $x_t \in \{v_1, \dots, v_m\}$ である。この結果をもとに、 θ_k の値をベイズ推定により推定せよ。

ディリクレ分布の説明

- このサイコロを投げて v_k が n_k 回出る確率を $P(\mathbf{n}; \theta)$ と記すと ($k=1, \dots, m$), $P(\mathbf{n}; \theta)$ は、

$$P(\mathbf{n}; \theta) = \frac{\mathbf{n}!}{n_1! \dots n_m!} \theta_1^{n_1} \dots \theta_m^{n_m}$$

- ベイズの定理より、

$$p(\theta | \mathbf{x}^{(n)}) = \frac{\Gamma(\mathbf{n} + \mathbf{m})}{\Gamma(n_1 + 1) \dots \Gamma(n_m + 1)} \theta_1^{n_1} \dots \theta_m^{n_m}$$

- 上式が多項分布、下式がディリクレ分布に対応。
- $p(\theta | \mathbf{x}^{(n)}) = \mathbf{Dir}(\mathbf{n}_1 + \mathbf{1}, \dots, \mathbf{n}_m + \mathbf{1})$

ディリクレ分布と多項分布の定義

ディリクレ分布

N次元確率ベクトルの集合を

$$\Delta^K = \left\{ \pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_K) \mid \sum_{k=1}^K \pi_k = 1, \pi_k \geq 0 \quad \forall k \right\}$$

とする。ディリクレ分布はこのような Δ^K 上の確率分布としてしばしば使われ、その密度関数は、

$$Dir(\pi|\alpha) \equiv \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\prod_{k=1}^K \Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^K \pi_k^{\alpha_k-1}$$

ディリクレ分布と多項分布の定義

多項分布

x を K 種類の値 $1, 2, \dots, K$ をとる確率変数とする. それぞれの値をとる確率を $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_K)$ ($\sum_{k=1}^K \pi_k = 1$) とする. n 回の独立した試行を考え、 $x_i = k$ により、 i 回目の試行における値が k であることを示すとする. n_k で k という値が出た回数を表現する. π が与えられたもとで、 $x_i = k$ である確率は $p(x_i = k | \pi) = \pi_k$ となる. このとき、 π が与えられたもとでの $x = x_1, x_2, \dots, x_n$ の確率は、

$$p(x | \pi) = \prod_{i=1}^n p(x_i | \pi) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{n_k}$$

と計算できる.

サンプリングと周辺化への動機

以上の仮定のもと、 $z_{1:n}(= \{z_1, \dots, z_n\})$ のサンプリングを考える。ただし、 π は $\sum_{k=1}^{\infty} \pi_k = 1$ という制約があり、この制約を満たしたままサンプリングを行うことは難しい。→周辺化をしてしまえば π を直接扱う必要はなくなる。

周辺化とは

結合分布から特定の変数を積分消去すること.

(例)

$$p(x_1, x_3) = \int p(x_1, x_2, x_3) dx_2$$

ベイズ推定では、観測データ $x_{1:n}$ の尤度 $p(x_{1:n}|\phi)$ を事前分布 $p(\phi|\eta)$ を事前分布 $p(\phi|\eta)$ で周辺化した

$$p(x_{1:n}|\eta) = \int p(x_{1:n}|\phi)p(\phi|\eta)d\phi = \int p(x_{1:n}, \phi|\eta)d\phi$$

を周辺尤度と呼ぶ.

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$$

$p(z_{n+1} = k | \{z_1, \dots, z_{i-1}, z_{i+1}, \dots, z_n\}, \alpha)$ の導出

(3.11) 参照

$$p(z_{n+1} = k | \{z_1, \dots, z_{i-1}, z_{i+1}, \dots, z_n\}, \alpha)$$

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) = \frac{n_k^{\setminus i} + \alpha/K}{n - 1 + \alpha}$$

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$$

$z_{1:n}^{\setminus i}$ に現れている $\{1, 2, \dots, K\}$ の集合を $K^+(z_{1:n}^{\setminus i})$ と表現する

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) = \begin{cases} \frac{n_k^{\setminus i} + \alpha/K}{n - 1 + \alpha} & \text{if } k \in K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) \\ \frac{\alpha/K}{n - 1 + \alpha} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

(2)

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$$

z_i として $k \notin K^+(z_{1:n}^{\setminus i})$ となるすべての値をとる確率

$$\begin{aligned} p(z_i \notin K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) &= \sum_{k \notin K^+} p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha/K) \\ &= (K - |K^+(z_{1:n}^{\setminus i})|) \frac{\alpha/K}{n-1+\alpha} \\ &= \left(1 - \frac{|K^+(z_{1:n}^{\setminus i})|}{K}\right) \frac{\alpha}{n-1+\alpha} \end{aligned}$$

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$$

以上より、 z_i がすでに存在しているクラスタに入る時の確率（各クラスタに定義される）と、そうでない場合（すべてのありうるクラスタから既存のクラスタを除いた補集合に z_i が含まれる場合をひとまとめにする。つまり未登場のクラスタのいずれか）とで場合分けできる。

$$p(z_i)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) = \frac{n_k^{\setminus i} + \alpha/K}{n - 1 + \alpha} \\ p(z_i \notin K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) = \left(1 - \frac{|K^+(z_{1:n}^{\setminus i})|}{K}\right) \frac{\alpha}{n - 1 + \alpha} \end{array} \right. \quad (3)$$

$$(4)$$

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$$

$K \rightarrow \infty$

$$\left\{ \begin{array}{l} p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) = \frac{n_k^{\setminus i}}{n - 1 + \alpha} \quad (5) \\ p(z_i \notin K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) = \frac{\alpha}{n - 1 + \alpha} \quad (6) \end{array} \right.$$

この式が意味することは、すでにサンプリングされた値は $\frac{n_k^{\setminus i}}{n-1+\alpha}$ の確率でサンプリングされ、それ以外の何らかの値は $\frac{\alpha}{n-1+\alpha}$ の確率でサンプリングされるということ。

$$\left(\frac{n_1^{\setminus i}}{n - 1 + \alpha}, \frac{n_2^{\setminus i}}{n - 1 + \alpha}, \frac{n_5^{\setminus i}}{n - 1 + \alpha}, \frac{\alpha}{n - 1 + \alpha} \right)$$

$z_{1:n} z_1, \dots, z_n$ の値をサンプリングするアルゴリズム

数値の付け替え

- $(z_1, z_2, z_3, z_4) = (2, 5, 1, 2)$ が意味していることは、データ 1 とデータ 4 が同じクラスで、その他は個別のクラス。
- $(z_1, z_2, z_3, z_4) = (2, 5, 1, 2)$ でも
 $(z_1, z_2, z_3, z_4) = (1, 2, 3, 1)$ としてもよい。
- 潜在変数の数値の取り替えを考えると常に $z_{1:n}$ に出現している潜在変数の数値を $\{1, 2, \dots, |K^+(z_{1:n}^{\setminus i})|\}$ のように連番にすることができる。

$$p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha) \begin{cases} \frac{n_k}{n - 1 + \alpha} \text{ if } k \in K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) & (7) \\ \frac{\alpha}{n - 1 + \alpha} \text{ if } k = |K^+(z_{1:n}^{\setminus i})| + 1 & (8) \end{cases}$$

ギブスサンプリング

ガウス分布の平均や分散をサンプリングしない場合

$$p(z_i = k | x_{1:n}, z_{1:n}^{\setminus i}, \mu_0, \rho_0, a_0, b_0, \alpha)$$

$$\propto p(x_i | z_i = k, x_{1:n}^{\setminus i}, z_{1:n}^{\setminus i}, \mu_0, \rho_0, a_0, b_0) \times p(z_i = k | z_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} \int p(x_i | \mu_k, \tau) p(\mu_k, \tau | x_{1:n}, z_{1:n}^{\setminus i}, \mu_0, & (9) \\ \rho_0, a_0, b_0) d\mu_k d\tau \times \frac{n_k^{\setminus i}}{n - 1 + \alpha} & (10) \\ \text{if } k \in K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) & (11) \\ \int p(x_i | \mu_k, \tau) p(\mu_k, \tau | \mu_0, \rho_0, a_0, b_0) d\mu_k d\tau & (12) \\ \times \frac{\alpha}{n - 1 + \alpha} & (13) \\ \text{if } k = |K^+(z_{1:n}^{\setminus i})| + 1 & (14) \end{array} \right.$$

ギブスサンプリング

ガウス分布の平均や分散をサンプリングする場合

$$p(z_i = k | x_{1:n}, z_{1:n}^{\setminus i}, \mu_0, \rho_0, a_0, b_0, \alpha)$$

$$= \begin{cases} p(x_i | \mu_k, \tau) \times \frac{n_k^{\setminus i}}{n - 1 + \alpha} & \mu_k \sim \mathbf{N}(\mu_0, (\tau \rho_0)^{-1} \mathbf{I}) \quad (15) \\ & \text{if } k \in K^+(z_{1:n}^{\setminus i}) \quad (16) \\ p(x_i | \mu_k, \tau) \times \frac{\alpha}{n - 1 + \alpha} & \mu_k \sim \mathbf{N}(\mu_0, (\tau \rho_0)^{-1} \mathbf{I}) \quad (17) \\ & \text{if } k = |K^+(z_{1:n}^{\setminus i})| + 1 \quad (18) \end{cases}$$

周辺尤度 $p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha) = \int \mathbf{p}(\mathbf{z}_i = \mathbf{k}|\mathbf{z}_{1:n}^{\setminus i}, \alpha)$

ディリクレ分布の無限次元化についてより詳細に分析するために、 $K \rightarrow \infty$ とした場合の周辺尤度 $p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha)$ について分析する。以下は混合ガウスモデルのデータも含めた周辺尤度であるが、ここではディリクレ分布の性質を分析したいので扱わない。

$$\begin{aligned} & p(\mathbf{x}_{1:n}, \mathbf{z}_{1:n}|\mu_0, \rho_0, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \alpha) \\ = & p(\mathbf{x}_{1:n}|\mathbf{z}_{1:n}, \mu_0, \rho_0, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \alpha) \times \mathbf{p}(\mathbf{z}_{1:n}|\mathbf{z}_{1:n}, \mu_0, \rho_0, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0, \alpha) \\ = & p(\mathbf{x}_{1:n}|\mathbf{z}_{1:n}, \mu_0, \rho_0, \mathbf{a}_0, \mathbf{b}_0) \times \mathbf{p}(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha) \end{aligned}$$

周辺尤度 $p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha)$ は 0

$$p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha) = \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\mathbf{n} + \alpha)} (\alpha/K)^{K_+} \prod_{k=1}^{K_+} \left[\left(\prod_{j=1}^{n_k-1} (j + \alpha/K) \right) \right]$$

ただし、この時、 $K \rightarrow \infty$ により $(\alpha/K)^{K_+} \rightarrow 0$ となり、 $p = 0$ になってしまう。そこで $p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha)$ に $\frac{K!}{(K-K_+)!}$ をかけると、

$$\frac{K!}{(K - K_+)!} p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha) \rightarrow \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\mathbf{n} + \alpha)} \alpha^{K_+} \prod_{k=1}^{K_+} (n_k - 1) \quad \text{as } K \rightarrow \infty$$

分割の確率

これは順列をすべて足しあわせたものの確率を表しており、例えば、(1, 2, 3, 1)、(3, 1, 5, 3)、(4, 2, 5, 4) のような 1 回目と 4 回目と同じで 2 回目と 3 回目がそれぞれ違うといった順列の集合の確率であり、このとき (1, 2, 3, 1) を代表して [1, 2, 3, 1] と表現することにする。より一般的には $z_{1:n}$ を $[z_{1:n}]$ とすることである。つまり、

$$p([z_{1:n}]|\alpha) = \frac{K!}{(K - K_+)!} p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha)$$

$$\rightarrow \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(n + \alpha)} \alpha^{K_+} \prod_{k=1}^{K_+} (n_k - 1) \quad \text{as } K \rightarrow \infty$$

まとめ

- ・ $\alpha_k = \alpha/K$ としたディリクレ分布と多項分布を組み合わせることで、データの分割に対して確率分布を定義することができる（第 1 章第 5 編）。ここで $z_{1:n}$ は数値そのものに意味があるわけではなく、分割の仕方を現しているに過ぎない（第 3 章）。例えば、 $(z_1, z_2, z_3, z_4) = (2, 5, 1, 2)$ が意味していることは、 $\{\{z_1, z_4\}, \{z_2\}, \{z_3\}\}$ という分割を意味している。
- ・ 分割に対する生成モデルでは、分割数 K を $K \rightarrow \infty$ としても、分割に対して確率が計算可能（第 3 章、分割の仕方に確率を定義できるのであって、特定の組の確率測度は 0）。

中華料理店過程

$t=i$ のときに z_i のとる値が k である確率

$$p(z_i = k | \mathbf{z}_{1:i-1}, \alpha) = \begin{cases} \frac{n_k}{n-1+\alpha} \text{ if } k \in K^+(z_{1:i-1}^{\setminus i}) \\ \frac{\alpha}{n-1+\alpha} \text{ if } k = |K^+(z_{1:i-1}^{\setminus i})| + 1 \end{cases}$$

(19)

(20)

※ CRP は確率過程であるため時系列的な確率変数※ n_k は $\mathbf{z}_{1:i-1}$ における k の出現回数

ディリクレ過程

定義

集合 ϕ とその部分集合を要素とする集合族 F からなる可測空間 (Φ, F) の基底分布を G_0 、集中度パラメータを $\alpha (>0)$ とする。確率測度 G が、 Φ のいかなる可測な排他的分割

$$U_{i=1}^C A_i = \phi \text{ and } A_i \cap A_j = \phi (i \neq j)$$

に対しても、 r 次元確率ベクトル $(G(A_1), \dots, G(A_r))$ がディリクレ分布 $Dir(G_0(\alpha A_1), \dots, \alpha G_0(A_r))$ に従うとき、すなわち、

$$(G(A_1), \dots, G(A_r)) \sim Dir(\alpha G_0(A_1), \dots, \alpha G_0(A_r))$$

のとき、 G はディリクレ過程に従うといい

$$G \sim DP(\alpha, G_0)$$

と記す。

ディリクレ過程混合モデル

ディリクレ過程混合モデル

- クラスタ数はディリクレ過程により決定される。
- 生成モデルは、

$$G \sim DP(\alpha, H_0)$$

$$\theta^k \sim \mathbf{G}(\theta_i)$$

$$\mathbf{x}_k | \theta_i \sim N(\theta_i, \sigma_0^2 \mathbf{I})$$

ディリクレ過程混合モデル

ディリクレ過程混合モデル

- ディリクレ過程混合モデルとは、 θ の確率分布である $G(\theta)$ を、 $G \sim p(G|\alpha, \eta)$ を用いて生成する。
- 次に、 $G(\theta)$ を用いて n 個のパターンに対応する $\theta_1, \dots, \theta_n$ を生成する。
- 最後に、これらをパラメータとする確率分布 $p(\mathbf{x}|\theta_i)$ を生成する。
- $G \sim p(G|\alpha, \eta)$ をディリクレ過程とよぶ。
- 上のモデルは $H_0(\theta|\eta)$ を用いて、

$$p(G|\alpha, \eta) = DP(\alpha, H_0)$$

と表現する。

- α は集中度パラメータ、 $H_0(\theta|\eta)$ は基底分布という。

準備：ベータ分布

α をギブスサンプリングにより推定する方法について説明する。まず、準備としてベータ分布を考える。 $\pi \in [0, 1]$ が a_1 および a_2 をパラメータとするベータ分布に従っているとすると、

$$1 = \frac{\Gamma(a_1 + a_2)}{\Gamma(a_1)\Gamma(a_2)} \int \pi^{a_1-1} (1 - \pi)^{a_2-1} d\pi$$

ここで、 $a_1 = \alpha + 1$, $a_2 = n$ を代入すると、

$$1 = \frac{\Gamma(\alpha + 1 + n)}{\Gamma(\alpha + 1)\Gamma(n)} \int \pi^{\alpha} (1 - \pi)^{n-1} d\pi$$

$$\Leftrightarrow 1 = \frac{(\alpha + n)\Gamma(\alpha + n)}{\alpha\Gamma(\alpha)\Gamma(n)} \int \pi^{\alpha} (1 - \pi)^{n-1} d\pi$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\alpha + n)} = \frac{(\alpha + n)}{\alpha\Gamma(\alpha)} \int \pi^{\alpha} (1 - \pi)^{n-1} d\pi$$

α の事後分布

次に、 α の事前分布を $p(\alpha|c_1, c_2) = Ga(\alpha|c_1, c_2)$ と仮定すると、 α の事後分布は、

$$\begin{aligned} p(\alpha|c_1, c_2) &\propto p(\alpha, \mathbf{z}_{1:n}|\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = \mathbf{p}(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha)\mathbf{p}(\alpha|\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \\ &= \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(\alpha + n)} \alpha^{K^+} \prod_{k=1}^{K^+} (n_k - 1)! \times \frac{c_2^{c_1}}{\Gamma(c_1)} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2\alpha) \\ &= \frac{(\alpha + n)}{\alpha\Gamma(\alpha)} \int \pi^\alpha (1 - \pi)^{n-1} d\pi \times \\ &\quad \alpha^{K^+} \prod_{k=1}^{K^+} (n_k - 1)! \times \frac{c_2^{c_1}}{\Gamma(c_1)} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2\alpha) \end{aligned}$$

α の事後分布導出の注意

$$p([z_{1:n}]|\alpha)$$

$$p([z_{1:n}]|\alpha) = \frac{K!}{(K - K_+)!} p(\mathbf{z}_{1:n}|\alpha)$$

$$\rightarrow \frac{\Gamma(\alpha)}{\Gamma(n + \alpha)} \alpha^{K_+} \prod_{k=1}^{K_+} (n_k - 1) \quad \text{as } K \rightarrow \infty$$

$$p(\alpha|c_1, c_2)$$

$$p(\alpha|c_1, c_2) = \frac{c_2^{c_1}}{\Gamma(c_1)} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2 \alpha)$$

$$p(\alpha, \pi | \mathbf{Z}_{1:n}, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2)$$

$p(\alpha | \mathbf{Z}_{1:n}, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2) = \int \mathbf{p}(\alpha, \pi | \mathbf{Z}_{1:n}, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2) d\pi$ に着目すると、上式を π に関して微分すれば $p(\alpha, \pi | \mathbf{Z}_{1:n}, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2)$ が得られるので、

$$\begin{aligned} & p(\alpha, \pi | \mathbf{Z}_{1:n}, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2) \\ &= \frac{(\alpha + n)}{\alpha} \alpha^{K^+} \pi^\alpha (1 - \pi)^{n-1} \times \frac{c_2^{c_1}}{\Gamma(c_1)} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2 \alpha) \end{aligned}$$

定数項を無視すれば、

$$\begin{aligned} & p(\alpha, \pi | \mathbf{Z}_{1:n}, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2) \\ & \propto \frac{(\alpha + n)}{\alpha} \alpha^{K^+} \pi^\alpha (1 - \pi)^{n-1} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2 \alpha) \\ &= \frac{(\alpha + n)}{\alpha} \pi^\alpha (1 - \pi)^{n-1} \alpha^{K^+} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2 \alpha) \\ &= \left(1 + \frac{n}{\alpha}\right) \pi^\alpha (1 - \pi)^{n-1} \alpha^{K^+} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2 \alpha) \end{aligned}$$

$$p(\alpha, \pi, s | \mathbf{z}_{1:n}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$$

さらに二値をとる確率変数 $s \in \{0, 1\}$ を導入して、

$$p(\alpha, \pi, s | \mathbf{z}_{1:n}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) \propto \left(\frac{n}{\alpha}\right)^s \pi^\alpha (1-\pi)^{n-1} \alpha^{K^+} \alpha^{c_1-1} \exp(-c_2 \alpha)$$

とすることができる。

(周辺化してみると、

$$p(\alpha, \pi | \mathbf{z}_{1:n}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = \sum_{s \in \{0,1\}} p(\alpha, \pi, s | \mathbf{z}_{1:n}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$$

となることが確認できる)

この結合分布から各パラメータの条件付き確率分布が導出できる。

ギブスサンプリング

π のサンプリング

$$\pi \sim \text{Beta}(\pi | \alpha + 1, n)$$

s のサンプリング

$$s \sim \text{Bernoulli}\left(s | \frac{\frac{n}{\alpha}}{1 + \frac{n}{\alpha}}\right)$$

α のサンプリング

$$\alpha \sim \text{Ga}(\alpha | c_1 + K^+ - s, c_2 - \log \pi)$$