演習問題 2.34

多変量ガウス分布の共分散行列の最尤推定解を求めるためには、共分散行列が対称で正定値である制約の下で、$\boldsymbol{\Sigma}$ について対数尤度関数 (2.118) を最大化しなくてはならない。ここでは、こうした制約を無視して、ただ最大化することにする。付録 C の (C.21), (C.26), および (C.28) の結果を用いて、対数尤度関数 (2.118) を最大化する共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ が、サンプル共分散 (2.122) となることを示せ。なお、(サンプル共分散が非特異なら) 最終結果は対称かつ、正定値である必要がある。

[多変量ガウス分布の**対数尤度関数**]

$$\ln p(\mathbf{X} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = -\frac{ND}{2}\ln(2\pi) - \frac{N}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})$$

… (2.118)

ある多変量ガウス分布から、観測値 $\{\mathbf{x}_n\}$ が、独立に得られたと仮定したデータ集合 $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N)^{\mathrm{T}}$ があるとき、その分布のパラメータは最尤推定法で推定できる。

[最尤推定による平均]

対数尤度関数 (2.118) の $\boldsymbol{\mu}$ についての導関数を 0 とおくことによって導かれる。

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{x}_n$$

… (2.121)

[最尤推定による共分散行列]

対数尤度関数 (2.118) を最大化する共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ は、以下のようなサンプル共分散となる。

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{ML}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}})(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}})^{\mathrm{T}}$$

… (2.122)

上記の式に平均 $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}}$ が含まれているのは、この結果が、$\boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{\Sigma}$ について同時に最大化したものであるためである。なお、この $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}}$ に対する解 (2.121) は、$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{ML}}$ には依存しないので、まず $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}}$ を求めてから、この式を用いて、$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{ML}}$ を求めることができる。

[解]

対数尤度関数 (2.118) を最大化する共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ が、サンプル共分散 (2.122) となることを示す。$\boldsymbol{\Sigma}$ について対数尤度関数 (2.118) を微分すると、以下の式が得られる。

$$\frac{\partial \ln p(\mathbf{X} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} = -\frac{N}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu})$$

… ※

ここで、上記の式の第一項については、式 (C.28) を用いて、

$$-\frac{N}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\ln|\ \boldsymbol{\Sigma}\ | = -\frac{N}{2}\left(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\ \right)^{\mathrm{T}}$$

… ※※

となる。第二項のサメーション部分については、 $\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu} = \mathbf{y}_n$, $\sum_{n=1}^{N}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ ) = \mathbf{Y}$ と置換することにより、

$$\sum_{n=1}^{N}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ )^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ ) = \mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Y}$$

と書き直せる。ここで、上記の二次形式は、トレースを用いて書き直せ、さらにトレースの循環性より、

$$= \mathrm{tr}(\ \mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Y}\ ) = \mathrm{tr}(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\ ) = \mathrm{tr}\left(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \right)$$

と整理できる。これを用いて、式 ※ の第二項は、

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\sum_{n=1}^{N}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ )^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ )$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\mathrm{tr}\left(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \right)$$

$$= -\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\ \left(\ \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\ \right)\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \right)$$

と変形することができる。上記の式は、逆行列の微分となるので、式 (C.21) を用いて、

$$= \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\ \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{\Sigma}\ \right)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \right)$$

$$= \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\ \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{\Sigma}\ \right)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \right)$$

となり、また、トレースの循環性より、

$$= \frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\ \left(\ \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{\Sigma}\ \right)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\ \right)$$

と整理できる。さらに、上記の式は、トレースの微分公式 (C.24) を用いて、

$$= \frac{1}{2}\left(\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{y}_n\mathbf{y}_n^{\mathrm{T}}\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\ \right)^{\mathrm{T}}$$

… ※※※

となる。以上より、式 ※ の第一項の微分の結果 ※※ と第二項の微分の結果 ※※※ より、対数尤度関数 (2.118) の $\boldsymbol{\Sigma}$ についての微分式 ※ は、以下のように表される。

$$\frac{\partial \ln p(\ \mathbf{X}\ |\ \boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\Sigma}\ )}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} = -\frac{N}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\ln|\ \boldsymbol{\Sigma}\ | - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}\sum_{n=1}^{N}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ )^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\ \mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\ )$$

$$= -\frac{N}{2}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} + \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{i}\mathbf{y}_i\,\mathbf{y}_i^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\right)^{\mathrm{T}}$$

目的は、この導関数における停留点 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{ML}}$ を求めることである。ゆえに、上記の式が 0 になるので、

$$-\frac{N}{2}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} + \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{i}\mathbf{y}_i\,\mathbf{y}_i^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\right)^{\mathrm{T}} = 0$$

と書き表せる。ここで、転置をとることができるので、上記の式は、

$$-\frac{N}{2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\sum_{i}\mathbf{y}_i\,\mathbf{y}_i^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = 0$$

と整理でき、$\boldsymbol{\Sigma}$ について求めると、

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{N}\sum_{i}\mathbf{y}_i\,\mathbf{y}_i^{\mathrm{T}} = \frac{1}{N}\sum_{i}\left(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\right)\left(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}\right)^{\mathrm{T}}$$

となる。結果的に、停留点 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{ML}}$ は、

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{ML}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}}\right)\left(\mathbf{x}_n - \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{ML}}\right)^{\mathrm{T}}$$

と書き表せる。よって、対数尤度関数 (2.118) を最大化する共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ が、サンプル共分散 (2.122) となることを示せた。

[行列式の対数の微分]

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}}\ln|\mathbf{A}| = \left(\mathbf{A}^{-1}\right)^{\mathrm{T}}$$

$\cdots$ (C.28)

証明：行列 $\mathbf{A}$ が 2 次の正方行列であるとき、

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

とすると、

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}}\ln|\mathbf{A}| = \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}}\ln\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}}\ln(ad - bc)$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial a}\ln(ad - bc) & \frac{\partial}{\partial b}\ln(ad - bc) \\ \frac{\partial}{\partial c}\ln(ad - bc) & \frac{\partial}{\partial d}\ln(ad - bc) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{d}{ad - bc} & \frac{-c}{ad - bc} \\ \frac{-b}{ad - bc} & \frac{a}{ad - bc} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -c \\ -b & a \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}^{-1} = \left(\begin{bmatrix} a & b \\ a & d \end{bmatrix}^{-1} \right)^{\mathrm{T}} = (\mathbf{A}^{-1})^{\mathrm{T}}$$

が成り立つ。

[逆行列の微分]

$$\frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{A}^{-1}) = - \mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \mathbf{A}^{-1}$$

…（ C.21 ）

証明： $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$ と行列の積の微分式 $\frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{AB}) = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \mathbf{B} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x}$ より、

$$\frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{I}) = \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A})$$

$$= \frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial x} \mathbf{A} + \mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}$$

となる。ここで、$\frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{I}) = 0$ であるので、上記の式は、

$$0 = \frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial x} \mathbf{A} + \mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial x} \mathbf{A} = - \mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}$$

と整理できる。ここで上記の式の両辺に対し、右から $\mathbf{A}^{-1}$ を掛けることで、最終的に逆行列の微分は、

$$\frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial x} = - \mathbf{A}^{-1} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \mathbf{A}^{-1}$$

となる。

[2 つの正方行列の積のトレースの微分]

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \mathrm{Tr}(\mathbf{AB}) = \mathbf{B}^{\mathrm{T}}$$

…（ C.24 ）

証明：行列 $\mathbf{A}$ と $\mathbf{B}$ が 2 次の正方行列であるとき、2 つの行列の積は、

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

より、

$$\mathbf{AB} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{bmatrix}$$

となる。このトレースは、

$$\mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ ) = A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} + A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22}$$

となるので、このトレースの微分は、

$$\frac{\partial\ \mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ )}{\partial\ A_{11}} = B_{11}\ ,\ \ \frac{\partial\ \mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ )}{\partial\ A_{12}} = B_{21}\ ,\ \ \frac{\partial\ \mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ )}{\partial\ A_{21}} = B_{12}\ ,\ \ \frac{\partial\ \mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ )}{\partial\ A_{22}} = B_{22}$$

となる。上記の結果から、

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}}\mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ ) = B_{ji}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}}\mathrm{Tr}(\ \mathbf{AB}\ ) = \mathbf{B}^{\mathrm{T}}$$

が成り立つ。これは、N 次の正方行列についても成り立つ。