

5.2.5.5 の最初にある一般的な混合分布について確認してみる。

一般的に混合分布は以下のように表される。

$$p(x_{mix}) = \sum_k p(x_{mix}|k)p(k) = \sum_k \pi_k p(x_{mix}|k) \quad (1)$$

このとき、平均を求めると

$$\mathbb{E}[x_{mix}] = \int x_{mix} p(x_{mix}) dx_{mix} = \int x_{mix} \sum_k \pi_k p(x_{mix}|k) dx_{mix} = \sum_k \pi_k \int x_{mix} p(x_{mix}|k) dx_{mix} = \sum_k \pi_k \mu_k \quad (2)$$

同様に分散を求めると

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_{p(x_{mix})}[x_{mix}] &= \mathbb{E}_{p(x_{mix})}[x_{mix}^2] - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 = \int x_{mix}^2 p(x_{mix}) dx_{mix} - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 \\ &= \int x_{mix}^2 \sum_k \pi_k p(x_{mix}|k) dx_{mix} - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 = \sum_k (\pi_k \int x_{mix}^2 p(x_{mix}|k) dx_{mix}) - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 \\ &= \sum_k (\pi_k \mathbb{E}_{p(x_{mix}|k)}[x_{mix}^2]) - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 = \sum_k (\pi_k \mathbb{E}_{p(x_{mix}|k)}[x_{mix}^2]) - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 \\ &= \sum_k (\pi_k (\mathbb{E}_{p(x_{mix}|k)}[(x_{mix} - \mathbb{E}_{p(x_{mix}|k)}[x_{mix}])^2] + \mathbb{E}_{p(x_{mix}|k)}[x_{mix}]^2)) - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 \\ &= \sum_k (\pi_k (v_k + \mu_k^2)) - \mathbb{E}[x_{mix}]^2 \end{aligned} \quad (3)$$

上記になるが、本の記載は少し異なっているように思う。

活性の分布を考えてみる。

今回、活性化関数として ReLU を選択している。もともと、正規分布だったものを、0 以下を 0 にして、それ以外をそのままとするので、入力が正規分布だとすると、本にあるように ReLU を通ったあとの分布は、平均 0 と分散 0 の質点と 0 以上の部分の混合分布となる。

混合比はもとのガウス分布の 0 以下の部分の面積と 0 以上の部分の面積になる。0 以下の面積は (5.70) にかかっている内容になり、0 以上の部分は残りなので、(5.71) になる。

一般に平均と分散が μ, σ^2 で切断位置が a の場合、それぞれの混合係数は、

$$\pi_{low} = \int_{-\infty}^a \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = \int_{-\infty}^{\frac{a-\mu}{\sigma}} \mathcal{N}(y|0, 1) dy = \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) \quad (4)$$

ただし、 $y = \frac{x-\mu}{\sigma}$ で変数変換をしている。 Φ は (2.26) に定義がある。

残りの部分は、正規分布の形状を考えると、

$$\pi_{high} = 1 - \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) = \Phi\left(-\frac{a-\mu}{\sigma}\right) \quad (5)$$

切断ガウス分布の平均を愚直に求める。(変数はスカラ) そもそも、切断ガウス分布は以下ようになる。

$$p(x|x > a) = \frac{1}{Z} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma) \quad (6)$$

基本的にガウス分布だが、一部しか利用していないため、全体を積分すると 1 にならないため、正規化定数 Z が必要。

$$Z = \int_a^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma) dx = 1 - \Phi\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right) \quad (7)$$

これを踏まえて、平均値を計算する。

$$\begin{aligned}
Z\mathbb{E}[x|x > a] &= \int_a^\infty x\mathcal{N}(x|\mu, \sigma)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_a^\infty x \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_a^\infty (x-\mu+\mu) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(\int_a^\infty (x-\mu) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx + \int_a^\infty \mu \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_a^\infty \frac{x-\mu}{\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \sigma \frac{dx}{\sigma} + \int_a^\infty \mu \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \frac{dx}{\sigma} \right) \\
&\quad (8)
\end{aligned}$$

ここで、 $y = \frac{x-\mu}{\sigma}$ とすると、(5.48) の重積分の変数変換も参考にして、

$$\begin{aligned}
Z\mathbb{E}[x|x > a] &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\sigma \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy + \mu \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\sigma \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy + \mu \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy \right) \quad (9) \\
&= \sigma \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \right]_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty + \mu(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) = \sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + \mu(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma}))
\end{aligned}$$

両辺を Z で割ると、

$$\mu_t = \mathbb{E}[x|x > a] = \sigma \frac{\mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1)}{(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma}))} + \mu = \mu + \sigma \frac{\mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1)}{\Phi(-\frac{a-\mu}{\sigma})} \quad (10)$$

(5.72) が求まった。

同様に分散を求める。まず 2 次モーメントを求める。

$$\begin{aligned}
Z\mathbb{E}[x^2|x > a] &= \int_a^\infty x^2 \mathcal{N}(x|\mu, \sigma)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_a^\infty x^2 \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_a^\infty ((x-\mu)^2 + 2\mu x - \mu^2) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(\int_a^\infty (x-\mu)^2 \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx + \int_a^\infty 2\mu x \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx - \int_a^\infty \mu^2 \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)dx \right) \\
&\quad (11)
\end{aligned}$$

ここで、 $y = \frac{x-\mu}{\sigma}$ とすると、(5.48) の重積分の変数変換も参考にして、

$$\begin{aligned}
Z\mathbb{E}[x^2|x > a] &= \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sigma^2 y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy + 2\mu(\sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + \mu(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma}))) - \mu^2 \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \sigma^2 y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy + 2\mu(\sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + \mu(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma}))) - \mu^2(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \sigma^2 y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy + 2\mu\sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + \mu^2(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \\
&= \frac{\sigma^2}{\sqrt{2\pi}} \left(\left[-y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \right]_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty + \int_{\frac{a-\mu}{\sigma}}^\infty \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) dy \right) + 2\mu\sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + \mu^2(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \\
&= \sigma^2 \left(\frac{a-\mu}{\sigma} \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + (1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \right) + 2\mu\sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}|0, 1\right) + \mu^2(1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \\
&\quad (12)
\end{aligned}$$

よって、

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E}[(x - \mu_t)^2 | x > a] = \mathbb{E}[x^2 | x > a] - (\mathbb{E}[x | x > a])^2 \\
& = \frac{1}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \left(\sigma^2 \left(\frac{a-\mu}{\sigma} \mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1) + (1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \right) + 2\mu\sigma \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1\right) + \mu^2 (1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})) \right) \\
& \quad - \left(\mu + \sigma \frac{\mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1)}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \right)^2 \\
& = \left(\sigma^2 \left(\frac{1}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \frac{a-\mu}{\sigma} \mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1) + 1 \right) + \frac{2\mu\sigma}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \mathcal{N}\left(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1\right) + \mu^2 \right) \\
& \quad - \left(\mu^2 + 2\mu\sigma \frac{\mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1)}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} + \left(\sigma \frac{\mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1)}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \right)^2 \right) \\
& = \sigma^2 \left(\frac{1}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \frac{a-\mu}{\sigma} \mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1) + 1 \right) - \left(\sigma \frac{\mathcal{N}(\frac{a-\mu}{\sigma} | 0, 1)}{1 - \Phi(\frac{a-\mu}{\sigma})} \right)^2 = \sigma^2 \left(1 + \bar{\mu} \frac{\mathcal{N}(\bar{\mu} | 0, 1)}{\Phi(-\bar{\mu})} - \left(\frac{\mathcal{N}(\bar{\mu} | 0, 1)}{\Phi(-\bar{\mu})} \right)^2 \right) \\
& \hspace{15em} (13)
\end{aligned}$$

となる。これは本とは少し異なるが、wikipedia の記載 (<https://ja.wikipedia.org/wiki/切断正規分布>) には一致している。