混合分布

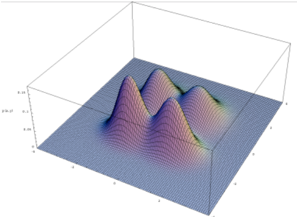
正田 備也

masada@rikkyo.ac.jp

Contents

これまでのモデリングの問題点

- これまでは、データ集合 $\mathcal{D} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}$ 全体に対して、一つの確率分布を使うモデリングだけ議論していた
- しかし、多くのデータ集合は、たった一つの分布ではモデリングし切れない多様性を含んでいる
- 例えば、数値データの集合であれば、その周辺の数値が頻繁に出現するという数値が、複数あったりする
  - 例：多峰性をもつデータ集合



混合分布

- これまでは、全てのデータ $\boldsymbol{x}_i$ for $i = 1, \ldots, N$ を、同じ一つの分布から draw していた
  - 全ての確率変数 $\boldsymbol{x}_i$ for $i = 1, \ldots, N$ が同じ分布に従うと考えていた
- 一方、混合分布によるモデリングでは、同じ種類の分布だがパラメータの値が違うだけの分布を、K 個用意する
  - これらの分布をコンポーネントと呼ぶ
- そして、各データ $\boldsymbol{x}_i$ について、まず、カテゴリカル分布 Cat$(\boldsymbol{\theta})$ にしたがって、K 個のコンポーネントから一つ選ぶ
  - θ_k は k 番目のコンポーネントが選ばれる確率
    - もちろん $\sum_k \theta_k = 1$ が成り立つ
- そして、$\boldsymbol{x}_i$ がその選ばれた分布に従うと考える。

Contents

混合正規分布

- 混合正規分布を使ったモデリングでは、データ集合 $\mathcal{D} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}$ が以下のように生成されると仮定する
- i 番目のデータ $\boldsymbol{x}_i$ を生成するために、まず、カテゴリカル分布 $\mathsf{Cat}(\boldsymbol{\theta})$ から、確率変数 z_i の値を draw する
  - $z_i = k$ は、k 番目のコンポーネントが選ばれたことを意味する
- その z_i の値に対応する確率分布から、$\boldsymbol{x}_i$ を draw する

$$
\begin{aligned}
z_i &\sim \mathsf{Cat}(\boldsymbol{\theta}) \\
\boldsymbol{x}_i &\sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{z_i}, \boldsymbol{\Sigma}_{z_i})
\end{aligned}
\tag{1}
$$

単変量正規分布の混合分布の場合

- K 個のコンポーネントからひとつを選ぶカテゴリカル分布のパラメータは $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_K)$
  - θ_k は k 番目のコンポーネントが選ばれる確率
  - $\sum_{k=1}^{K} \theta_k = 1$ が成り立つ
- どのコンポーネントも単変量正規分布で、k 番目のコンポーネントのパラメータは平均 μ_k と標準偏差 σ_k
  - その確率密度関数は

$$p(x; \mu_k, \sigma_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_k^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2} \right) \tag{2}$$

観測データの尤度

- 単変量正規分布の混合分布でモデリングされた観測データの尤度は

$$
\begin{aligned}
p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma}) &= \prod_{i=1}^{N} p(x_i; \theta_{z_i}, \sigma_{z_i}) \\
&= \prod_{i=1}^{N} \left[\theta_{z_i} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{z_i}^2}} \exp\left(- \frac{(x_i - \mu_{z_i})}{2\sigma_{z_i}^2} \right) \right]
\end{aligned}
\tag{3}
$$

  - 個々のデータは、同じ分布からではないにせよ、独立に生成されると仮定している

教師ありの設定の場合

- 教師ありの設定の場合、各データ x_i について、それがどのコンポーネントから生成されたかは、すでに分かっている
- 言い換えれば、z_i の値も観測データに含まれる
  - つまり、$\mathcal{D} = \{(x_1, z_1), \ldots, (x_N, z_N)\}$
- このとき、観測データ $\mathcal{D}$ の尤度は

$$
\begin{aligned}
&p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\theta}, \mu_1, \ldots, \mu_K, \sigma_1, \ldots, \sigma_K) \\
&= \prod_{k=1}^{K} \left[\theta_k^{c_k} \times \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma_k^2})^{c_k}} \exp\left(-\frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} (x_i - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2} \right) \right] \quad (4)
\end{aligned}
$$

  - c_k は、k 番目のコンポーネントから生成されたデータの個数

$$L(\boldsymbol{\theta}, \mu_1, \ldots, \mu_K, \sigma_1, \ldots, \sigma_K) = \ln p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\theta}, \mu_1, \ldots, \mu_K, \sigma_1, \ldots, \sigma_K) + \lambda\left(1 - \sum_{k=1}^{K} \theta_k\right)$$

$$= \sum_{k=1}^{K} c_k \ln \theta_k - \sum_{k=1}^{K} c_k \ln \sigma_k - \sum_{k=1}^{K} \frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} (x_i - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2} + \lambda\left(1 - \sum_{k=1}^{K} \theta_k\right) + const. \tag{5}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mu_k} = \frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} (x_i - \mu_k)}{\sigma_k^2} = \frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} x_i - c_k \mu_k}{\sigma_k^2} \tag{6}$$

$\frac{\partial L}{\partial \mu_k} = 0$ より、$\mu_k = \frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} x_i}{c_k} = \bar{x}_k$ を得る。

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma_k} = -\frac{c_k}{\sigma_k} + \frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} (x_i - \mu_k)^2}{\sigma_k^3} \tag{7}$$

$\frac{\partial L}{\partial \sigma_k} = 0$ より、$\sigma_k^2 = \frac{\sum_{\{i:z_i=k\}} (x_i - \bar{x}_k)^2}{\sigma_k^2}$ を得る。

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_k} = \frac{c_k}{\theta_k} - \lambda\ , \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 1 - \sum_{k=1}^{K} \theta_k \tag{8}$$

$\frac{\partial L}{\partial \theta_k} = 0$ より、$\theta_k = \frac{c_k}{\lambda}$ を得る。
$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$ より、$1 - \sum_{k=1}^{K} \frac{c_k}{\lambda} = 0$ を得る。
つまり、$\lambda = \sum_k c_k$ が言えるので、$\theta_k = \frac{c_k}{\sum_k c_k}$ を得る。

まとめると、

- θ_k は、k 番目のコンポーネントから生成されたデータの割合となる。
- μ_k と σ_k は、k 番目のコンポーネントから生成されたデータだけの尤度をもとに最尤推定した値となる。

教師なしの設定の場合

- 教師なしの設定の場合、各データ x_i について、それがどのコンポーネントから生成されたかは、分からない！
- z_i は、値が観測されない確率変数、すなわち潜在変数
  - つまり、$\mathcal{D} = \{x_1, \ldots, x_N\}$
  - 一方、潜在変数の集合を $\mathcal{Z} = \{z_1, \ldots, z_N\}$ とする
- このとき、観測データ $\mathcal{D}$ の尤度は、どう書けばいいのか？
  - 下の式で与えられる $p(\mathcal{D}, \mathcal{Z})$ は、観測データの尤度 $p(\mathcal{D})$ ではない

$$
\begin{aligned}
& p(\mathcal{D}, \mathcal{Z}; \boldsymbol{\theta}, \mu_1, \ldots, \mu_K, \sigma_1, \ldots, \sigma_K) \\
&= \prod_{k=1}^{K} \left[\theta_k^{c_k} \times \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma_k^2})^{c_k}} \exp\left(- \frac{\sum_{\{i : z_i = k\}} (x_i - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2} \right) \right] \quad (9)
\end{aligned}
$$

周辺尤度

- 潜在変数を含むモデリングの場合、観測データの尤度 $p(\mathcal{D})$ は、潜在変数を周辺化 marginalize してはじめて得られる
  - 周辺化によって得られる尤度を周辺尤度 marginal likelihood と呼ぶ

$$p(\mathcal{D}) = \sum_{\mathcal{Z}} p(\mathcal{D}, \mathcal{Z}) = \sum_{z_1=1}^{K} \sum_{z_2=1}^{K} \cdots \sum_{z_{N-1}=1}^{K} \sum_{z_N=1}^{K} p(\mathcal{D}, \mathcal{Z}) \tag{10}$$

- 上の式で足し合わされている項は、K^N 個もあって、妥当な時間内では計算できない！
  - いわゆる、組合せ論的爆発 combinatorial explosion