

正規分布

正田 備也

masada@rikkyo.ac.jp

Contents

単変量正規分布

単変量正規分布の最尤推定

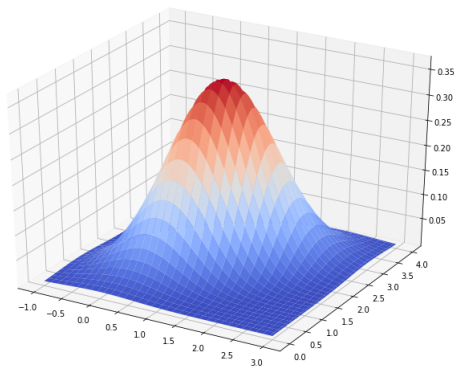
多変量正規分布

多変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布の最尤推定の応用

正規分布 normal distribution

- ▶ ガウス分布 Gaussian distribution と呼ばれる
- ▶ 連続量をモデル化するときによく使われる
 - ▶ 下図は2変量正規分布の確率密度関数の例



単変量正規分布 univariate normal distribution

- ▶ 単変量正規分布は、 $(-\infty, \infty)$ 上に定義される
- ▶ 単変量正規分布のパラメータは、平均 μ と標準偏差 σ
 - ▶ 平均 μ 、標準偏差 σ の単変量正規分布を、以下 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ と書く
 - ▶ 確率変数 x が $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ に従うことを、以下 $x \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ と書く
- ▶ 単変量正規分布 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ の確率密度関数 (pdf) は

$$p(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1)$$

- ▶ 「;」 は、その右側にある μ と σ が自由パラメータ（我々がその値を指定してはじめて分布が定まるパラメータ）であることを意味する

参考：ガウス積分

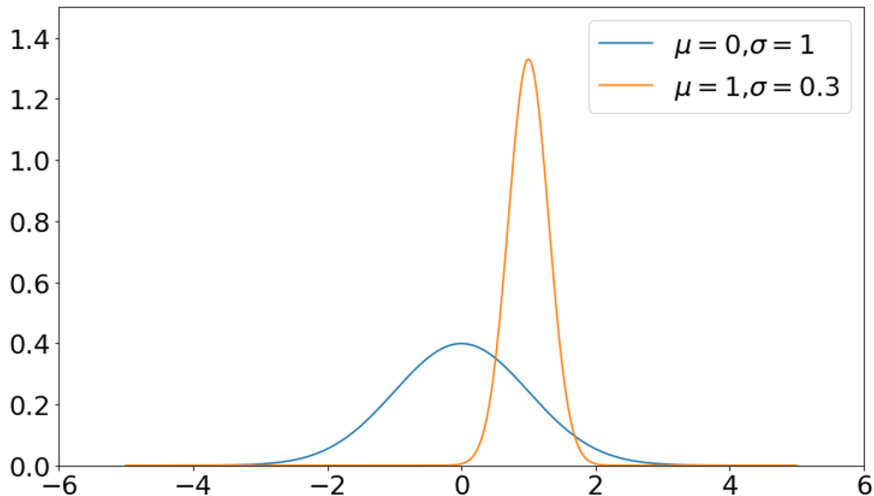
- ▶ $\sqrt{2\pi\sigma^2}$ って、何？
 - ▶ $-\infty$ から ∞ までの範囲で積分すると 1 になるようにするには、この値で割っておかないといけない、という意味
 - ▶ ひとことで言えば、規格化定数 (normalizing constant)
- ▶ つまり $\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx = \sqrt{2\pi\sigma^2}$ が成り立つ、ということ
 - ▶ こういう積分を、ガウス積分と呼ぶ
 - ▶ ガウス積分の公式 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x+b)^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

密度関数についての注意事項（再）

$$p(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2)$$

- ▶ 式(2)の x に特定の値を代入して得られる $p(x; \mu, \sigma)$ の値は、確率としての意味を持たない
 - ▶ そもそも、密度関数の値は1を超えることがいくらかでもある
- ▶ 密度関数を特定の範囲で積分すると、確率とみなすことのできる値が得られる
 - ▶ 当然、全範囲で積分すると1になる（つまり $\int_{-\infty}^{\infty} p(x; \mu, \sigma) dx = 1$ ）

単変量正規分布の密度関数の例



標準正規分布 standard normal distribution

- ▶ 平均が0で標準偏差が1の単変数正規分布 $\mathcal{N}(0, 1)$ のことを、標準正規分布と呼ぶ
- ▶ 標準正規分布に従う確率変数を x とする
- ▶ このとき、 $y = \sigma x + \mu$ は、平均が μ で標準偏差 σ の正規分布 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ にしたがう
 - ▶ つまり、 $x \sim \mathcal{N}(0, 1)$ ならば $\sigma x + \mu \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$
 - ▶ 一般に、正規分布にしたがう確率変数のアフィン変換はまた、正規分布にしたがう

正規分布に独立にしたがう確率変数の和

- ▶ 確率変数 x と y が、それぞれ独立に正規分布 $\mathcal{N}(\mu_x, \sigma_x^2)$ と $\mathcal{N}(\mu_y, \sigma_y^2)$ にしたがうとする
- ▶ このとき、 $x + y$ も正規分布にしたがうことを、以下、示す
 - ▶ $\mathcal{N}(\mu_x, \sigma_x^2)$ と $\mathcal{N}(\mu_y, \sigma_y^2)$ の密度関数を、それぞれ $p(x; \mu_x, \sigma_x)$ と $p(y; \mu_y, \sigma_y)$ と書く
 - ▶ x と y は独立なので、同時分布の確率密度関数 $p(x, y)$ は $p(x; \mu_x, \sigma_x)p(y; \mu_y, \sigma_y)$ と積で書ける
 - ▶ $z = x + y$ とおくと、 $y = z - x$
 - ▶ y を $z - x$ で置き換えて、 x について積分する

cf. <https://faculty.math.illinois.edu/~r-ash/Stat/StatLec1-5.pdf> の Sec. 3.11

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} p(x; \mu_x, \sigma_x) p(z - x; \mu_y, \sigma_y) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu_x)^2}{2\sigma_x^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \exp\left(-\frac{\{(z - x) - \mu_y\}^2}{2\sigma_y^2}\right) dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x - \mu_x)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{\{(z - x) - \mu_y\}^2}{2\sigma_y^2}\right) dx
\end{aligned} \tag{3}$$

ここで、 $\exp()$ の中身を x について平方完成すると

$$\begin{aligned}
& -\frac{(x - \mu_x)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{\{(z - x) - \mu_y\}^2}{2\sigma_y^2} = -\frac{\sigma_y^2(x - \mu_x)^2 + \sigma_x^2\{x - (z - \mu_y)\}^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \\
&= -\frac{(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)x^2 - 2\{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z - \mu_y)\}x + \sigma_y^2\mu_x^2 + \sigma_x^2(z - \mu_y)^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2}
\end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)x^2 - 2\{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z - \mu_y)\}x + \sigma_y^2\mu_x^2 + \sigma_x^2(z - \mu_y)^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \\
& = - \frac{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \left\{ x^2 - 2 \frac{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z - \mu_y)}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2} x \right\} - \frac{\sigma_y^2\mu_x^2 + \sigma_x^2(z - \mu_y)^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \\
& = - \frac{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \left\{ x - \frac{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z - \mu_y)}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2} \right\}^2 + \frac{\{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z - \mu_y)\}^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)} - \frac{\sigma_y^2\mu_x^2 + \sigma_x^2(z - \mu_y)^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2}
\end{aligned} \tag{5}$$

x を含まない後半の 2 つの項に注目して z について平方完成すると

$$\begin{aligned}
& \frac{\{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z - \mu_y)\}^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)} - \frac{\sigma_y^2\mu_x^2 + \sigma_x^2(z - \mu_y)^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \\
& = \frac{\sigma_y^4\mu_x^2 + 2\sigma_x^2\sigma_y^2\mu_x(z - \mu_y) + \sigma_x^4(z - \mu_y)^2 - (\sigma_x^2 + \sigma_y^2)\{\sigma_y^2\mu_x^2 + \sigma_x^2(z - \mu_y)^2\}}{2\sigma_x^2\sigma_y^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)} \\
& = \frac{2\mu_x(z - \mu_y) - \mu_x^2 - (z - \mu_y)^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)} = - \frac{1}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)} \{z - (\mu_x + \mu_y)\}^2
\end{aligned} \tag{6}$$

元に戻ると

$$\begin{aligned}& \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-\mu_x)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{\{(z-x)-\mu_y\}^2}{2\sigma_y^2}\right) dx \\&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}{2\sigma_x^2\sigma_y^2} \left\{x - \frac{\sigma_y^2\mu_x + \sigma_x^2(z-\mu_y)}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}\right\}^2 - \frac{\{z - (\mu_x + \mu_y)\}^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right] dx \\&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \exp\left[-\frac{\{z - (\mu_x + \mu_y)\}^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right] \sqrt{\pi \frac{2\sigma_x^2\sigma_y^2}{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}} \\&= \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}} \exp\left[-\frac{\{z - (\mu_x + \mu_y)\}^2}{2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)}\right] \tag{7}\end{aligned}$$

ただし、途中で**ガウス積分** $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x+b)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ を使った。

以上より、 $z \sim \mathcal{N}(\mu_x + \mu_y, \sigma_x^2 + \sigma_y^2)$ となることを示せた。

参考：変数変換

<http://nlp.dse.ibaraki.ac.jp/~shinnou/siryou/toukei-kentei/1-stat-var-trans.pdf>

▶ 1次元の場合

- ▶ 確率変数 X の確率密度関数を $f_X(x)$ とする
- ▶ X を $Y = g(X)$ と変数変換するとする
- ▶ 確率変数 Y の密度関数 $f_Y(y)$ は $f_Y(y) = f_X(x) \frac{dx}{dy}$ となる

▶ 2次元の場合

- ▶ 確率変数 X と Y の同時密度関数を $f_{X,Y}(x, y)$ とする
- ▶ X と Y を $(U, V) = (g_1(X, Y), g_2(X, Y))$ と変数変換するとする
- ▶ U と V の同時密度関数は $f_{U,V}(u, v) = f_{X,Y}(x, y) \|J\|$ となる

- ▶ J はヤコビアン $J = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1^{-1}}{\partial u} & \frac{\partial g_1^{-1}}{\partial v} \\ \frac{\partial g_2^{-1}}{\partial u} & \frac{\partial g_2^{-1}}{\partial v} \end{bmatrix}$

- ▶ $\|J\|$ はヤコビアン J の行列式の絶対値

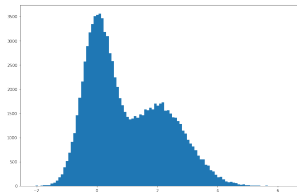
($U = X, V = X + Y$ の場合が、確率変数の和の場合に相当する)

確率変数の和がしたがる確率分布

- ▶ 正規分布の密度関数は、ラクダのコブのような形をしている
- ▶ ところで、たった今、異なる正規分布にしたがる独立な2つの確率変数の和が正規分布にしたがることを示した
- ▶ しかし、独立な2つの確率変数が、いずれもコブ状の密度関数をもつ分布にしたがるなら、それら確率変数の和がしたがる確率分布の密度関数には、2つのコブがあるのでは？
- ▶ …これはよくある勘違い。確率変数の足し算を考えると、密度関数の足し算を考えると、全く別のこと
- ▶ では、2つのコブがある分布はどのような場合に作られる？

混合分布

- ▶ 以下のようにして生成される観測データはどのような分布にしたがうか？
 - ▶ まずコインを投げる
 - ▶ 表が出たら $\mathcal{N}(\mu_x, \sigma_x^2)$ から値を生成
 - ▶ 裏が出たら $\mathcal{N}(\mu_y, \sigma_y^2)$ から値を生成
- ▶ このようにして生成される実数値がしたがう分布の密度関数には、コブが2つある
- ▶ このような分布を混合分布というが、詳細はまたいずれ



正規分布の再生性

- ▶ 再生性 reproductive property
 - ▶ 同じ分布だがパラメータが違うだけの分布に従う確率変数の和もまた、それら2つの分布とパラメータが違うだけの同じ分布に従うとき、この分布族は再生性を持つ、という。
- ▶ M 個の確率変数 x_1, \dots, x_M が、それぞれ独立に正規分布 $\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2), \dots, \mathcal{N}(\mu_M, \sigma_M^2)$ にしたがうとする
- ▶ このとき、 $\sum_{m=1}^M a_m x_m$ は、以下の正規分布にしたがう

$$\mathcal{N}\left(\sum_{m=1}^M a_m \mu_m, \sum_{m=1}^M a_m^2 \sigma_m^2\right) \quad (8)$$

Contents

単変量正規分布

単変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布

多変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布の最尤推定の応用

単変量正規分布に従う観測データの尤度

- ▶ 与えられている観測データを $\mathcal{D} = \{x_1, \dots, x_N\}$ とする
 - ▶ 各 x_i は、 $-\infty < x_i < \infty$ を満たす実数値とする
- ▶ 各 x_i は同じ正規分布 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ に独立にしたがうものとして、この観測データをモデル化することにする
- ▶ このときデータセット \mathcal{D} の尤度は、以下のような μ と σ の関数になる

$$p(\mathcal{D}; \mu, \sigma) = \prod_{i=1}^N p(x_i; \mu, \sigma) = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

単変量正規分布の最尤推定

- ▶ 観測データ \mathcal{D} の対数尤度は以下ようになる

$$\ln p(\mathcal{D}; \mu, \sigma) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \sum_{i=1}^N \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2} \quad (10)$$

- ▶ この対数尤度を最大化する μ と σ を、以下、求める

$$\frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \mu, \sigma)}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i - \mu}{\sigma^2} \quad (11)$$

$$\frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \mu, \sigma)}{\partial \mu} = 0 \text{ より } \mu = \frac{\sum_i x_i}{N} = \bar{x}$$

$$\frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \mu, \sigma)}{\partial \sigma} = -\frac{N}{\sigma} + \sum_{i=1}^N \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^3} \quad (12)$$

$$\frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \mu, \sigma)}{\partial \sigma} = 0 \text{ より } \sigma^2 = \frac{\sum_i (x_i - \mu)^2}{N} = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}{N}$$

Contents

単変量正規分布

単変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布

多変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布の最尤推定の応用

二変量正規分布 bivariate normal distribution

- ▶ パラメータ

- ▶ 平均ベクトル $\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}$

- ▶ 共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \end{bmatrix}$ (ただし $\boldsymbol{\Sigma}$ は正定値行列)

- ▶ 確率密度関数 (ただし $|\boldsymbol{\Sigma}| \equiv \det \boldsymbol{\Sigma}$)

$$p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2 |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp \left\{ - \frac{(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})}{2} \right\} \quad (13)$$

多変量正規分布

▶ パラメータ

▶ 平均ベクトル $\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_d \end{bmatrix}$

▶ 共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{1d} & \cdots & \sigma_{dd} \end{bmatrix}$ (ただし $\boldsymbol{\Sigma}$ は正定値行列)

▶ 確率密度関数 (ただし $|\boldsymbol{\Sigma}| \equiv \det \boldsymbol{\Sigma}$)

$$p(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp \left\{ -\frac{(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})}{2} \right\}$$

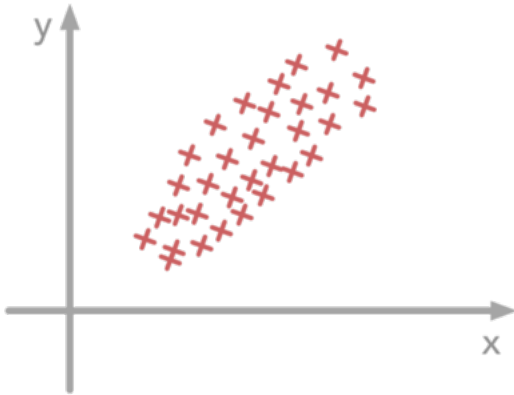
共分散行列 covariance matrix

- ▶ 二変量以上の場合、2つ以上成分をもつベクトルをモデル化
- ▶ ベクトルの第1成分、第2成分、等々について、各々単独での散らばり方は、当然考慮する
 - ▶ これが、共分散行列の対角成分、つまり分散に対応する
- ▶ これに加えて、第1成分と第2成分、第1成分と第3成分など、異なる成分間の関連も考慮する
 - ▶ これが、共分散行列の非対角成分、つまり共分散に対応する
- ▶ 共分散行列は分散共分散行列とも呼ばれる

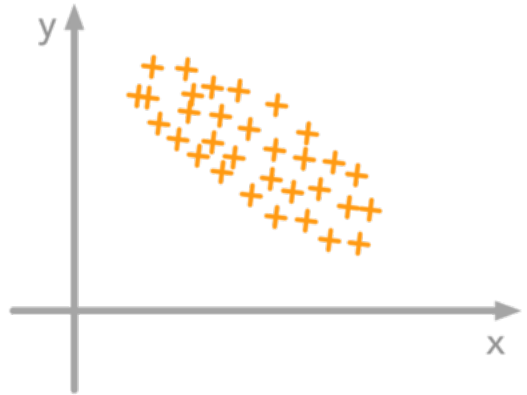
共分散 covariance の直感的な意味

- ▶ 共分散は共分散行列の非対角成分に現れている値
- ▶ ゼロだと、対応する二つの成分は独立に分布
- ▶ 正の値だと、一方の成分が平均より大きいとき、他方の成分も平均より大きくなることが多い
- ▶ 負の値だと、一方の成分が平均より大きいとき、他方の成分は平均より小さくなることが多い

Positive
covariance



Negative
covariance



$$\mu = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & -0.5 \\ -0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$$

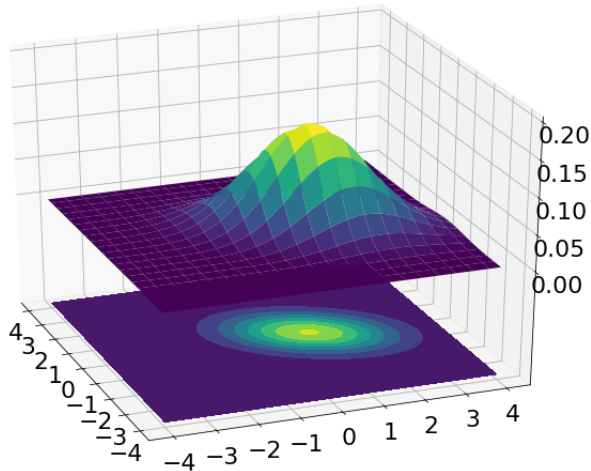


Figure: 二変量正規分布の密度関数の例 27 / 46

問題 4-1

- ▶ $\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$ の行列式 $\det \Sigma$ を求めよ。
- ▶ $\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$ の逆行列 Σ^{-1} を求めよ。

二変量正規分布の別のパラメータ化(1/2)

- ▶ 同じ確率分布でも、パラメータ化 parameterization の方法が複数あることがある
- ▶ 二変量正規分布では、共分散行列を以下のようにパラメータ化することがある

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \quad (15)$$

二変量正規分布の別のパラメータ化(2/2)

- ▶ このパラメータ化のもとでは、 Σ の行列式と逆行列は

$$\det \Sigma = \sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2) \quad (16)$$

$$\Sigma^{-1} = \frac{1}{\det \Sigma} \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & -\rho \sigma_1 \sigma_2 \\ -\rho \sigma_1 \sigma_2 & \sigma_1^2 \end{bmatrix} \quad (17)$$

Contents

単変量正規分布

単変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布

多変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布の最尤推定の応用

多変量正規分布の最尤推定

- ▶ 観測データ $\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ の各 \mathbf{x}_i が独立に同じ正規分布 $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ にしたがうと仮定すると、 \mathcal{D} の尤度は

$$\begin{aligned} p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) &= \prod_{i=1}^N p(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) \\ &= \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \right) \quad (18) \end{aligned}$$

- ▶ 最尤推定によって各パラメータを推定（次スライドから）

cf. [The Matrix Cookbook](#)

行列やベクトルの偏微分の基本を再確認

$$\frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{ik} \delta_{lj} \quad (19)$$

ただし、 $i = k$ ならば $\delta_{ik} = 1$ 、そうでなければ $\delta_{ik} = 0$

$$\left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y} \right]_i = \frac{\partial x_i}{\partial y} \quad (20)$$

$$\left[\frac{\partial x}{\partial \mathbf{y}} \right]_i = \frac{\partial x}{\partial y_i} \quad (21)$$

$$\left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{y}} \right]_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial y_j} \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
\ln p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) &= \sum_{i=1}^N \ln p(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) \\
&= -\frac{Nd}{2} \ln(2\pi) - \frac{N}{2} \ln(|\boldsymbol{\Sigma}|) - \frac{1}{2} \sum_i (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})
\end{aligned} \tag{23}$$

ここで、 $\bar{\mathbf{x}} = \frac{\sum_i \mathbf{x}_i}{N}$ として、

$$\sum_i (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) = \sum_i \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}_i - 2N\bar{\mathbf{x}}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} + N\bar{\mathbf{x}}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{x}} \tag{24}$$

より、

$$\frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})}{\partial \boldsymbol{\mu}} = -N\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{x}} + N\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} \tag{25}$$

$$\therefore \boldsymbol{\mu} = \bar{\mathbf{x}} \tag{26}$$

$\frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}$ の計算は、[The Matrix Cookbook](#) を見ながらおこなう。

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \ln(|\boldsymbol{\Sigma}|) = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) = -\boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \quad (28)$$

以上より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln p(\mathcal{D}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} &= -\frac{N}{2} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\sum_i (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\ &= -\frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left\{ N - \left(\sum_i (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right\} \end{aligned} \quad (29)$$

$$\therefore \boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{N} \sum_i (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \quad (30)$$

Contents

単変量正規分布

単変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布

多変量正規分布の最尤推定

多変量正規分布の最尤推定の応用

異常検知と 変化検知

Anomaly Detection
and
Change Detection

井手 剛
杉山 将

Machine Learning Professional Series

気になるところから するする読める

- 異常や変化を実際に検知する現実世界の分析者向け。
- アルゴリズムとその活用例を広範囲に紹介。
- 考え方やモデルの「気持ち」を丁寧に解説。

MLP 機械学習
プロフェッショナル
シリーズ

講談社

異常検知への応用：ホテリングの T^2 法の概要

- ▶ 異常値を含まない（あるいはほとんど含まない）データ集合を使って多変量正規分布のパラメータを最尤推定する
- ▶ 異常値かどうかを調べたいデータについて、最尤推定の結果を使って標本平均とのマハラノビス距離を求める
- ▶ マハラノビス距離が、あらかじめ計算しておいた閾値を超えたとき、警報を出す
- ▶ 解説付きの Python 実装例
 - ▶ https://gochikika.ntt.com/Application/anomaly_density_basic.html

観測データの異常度

- ▶ 最尤推定で求めた平均ベクトルを $\hat{\mu}$ 、共分散行列を $\hat{\Sigma}$ とする
- ▶ この推定値を使うと正規分布の密度関数は

$$p(\boldsymbol{x}; \hat{\mu}, \hat{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\hat{\Sigma}|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \hat{\mu})^\top \hat{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \hat{\mu}) \right\} \quad (31)$$

- ▶ そして、観測データ \boldsymbol{x} の異常度を $-\ln p(\boldsymbol{x}; \hat{\mu}, \hat{\Sigma})$ と定義する
 - ▶ 直感的には、推定された平均ベクトル $\hat{\mu}$ から遠いほど異常
 - ▶ ただし、ユークリッド距離を使っているのではない

マハラノビス距離 Mahalanobis distance

- ▶ x と $\hat{\mu}$ との間のマハラノビス距離 $a(x)$ は、以下のように定義される

$$a(x) = \sqrt{(x - \hat{\mu})^\top \hat{\Sigma}^{-1} (x - \hat{\mu})} \quad (32)$$

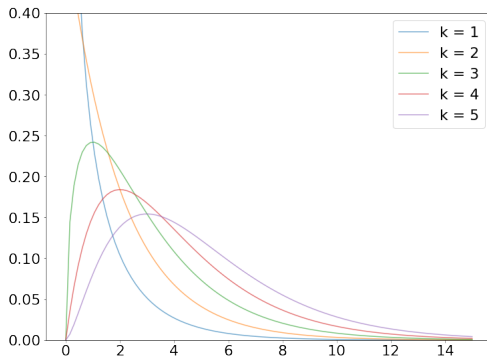
- ▶ マハラノビス距離の大小関係は、異常度 $-\ln p(x; \hat{\mu}, \hat{\Sigma})$ の大小関係に、一致する
- ▶ そこで、 $a(x)$ が大きいほど、 x はより一層異常だとみなすことにする
 - ▶ $\hat{\Sigma}$ を使っているので、観測データのベクトルの成分間の関連も考慮した距離になっている

ホテリングの T^2 法

- ▶ 同じ d 次元正規分布 $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ からの N 個の独立なサンプルだと仮定された観測データに基づき、最尤推定により平均ベクトルを $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 、共分散行列を $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ と、それぞれ推定したとする
- ▶ このとき、 $T^2 \equiv \frac{N-d}{(N+1)d} a(\boldsymbol{x})^2$ により定義される統計量 T^2 は、自由度 $(d, N-d)$ の F 分布にしたがう
- ▶ $N \gg d$ の場合、 $a(\boldsymbol{x})^2 \equiv (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}})^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}})$ は近似的に自由度 d のカイ 2 乗分布にしたがう

カイ2乗分布

- ▶ 独立に標準正規分布にしたがう k 個の確率変数の二乗和がしたがう分布を、自由度 k のカイ2乗分布とよぶ



導出

CDF X が標準正規分布に従うとして、 $Y = X^2$ より、 $y \geq 0$ で

$$P(Y \leq y) = P(-\sqrt{y} \leq X \leq \sqrt{y}) = \Phi(\sqrt{y}) - \Phi(-\sqrt{y}) \quad (33)$$

ただし、標準正規分布の CDF を $\Phi(\cdot)$ で表している。

PDF X の密度関数は $f(x) = (1/\sqrt{2\pi})e^{-x^2/2}$ であるから、変数変換の公式より

$$\begin{aligned} f_Y(y) &= f(\sqrt{y}) \frac{d\sqrt{y}}{dy} + f(-\sqrt{y}) \frac{d(-\sqrt{y})}{dy} \\ &= (f(\sqrt{y}) + f(-\sqrt{y})) \frac{1}{2\sqrt{y}} = f(\sqrt{y}) \frac{1}{\sqrt{y}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi y}} e^{-y/2} \end{aligned} \quad (34)$$

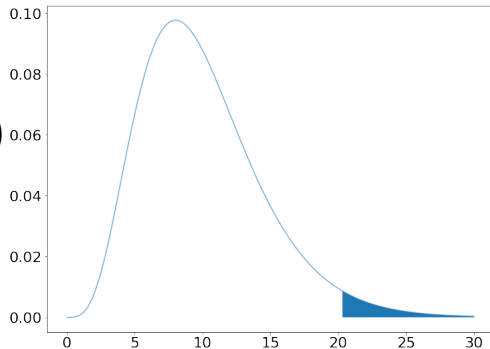
カイ二乗分布の密度関数は $f(x; \nu) = \frac{1}{2^{\nu/2} \Gamma(\nu/2)} x^{\nu/2-1} e^{-x/2}$ なので、 $\nu = 1$ に相当。

閾値の決め方

- ▶ あらかじめ誤報率 α を決めておく
- ▶ 下の等式を満たす a_0 を閾値として設定する

$$1 - \alpha = \int_0^{a_0} \chi^2(x; d) dx \quad (35)$$

- ▶ ただし、 $\chi^2(x; d)$ は自由度 d のカイ2乗分布の確率密度関数とする
- ▶ $a(\mathbf{x})^2$ と a_0 を比較して異常を検知



注意：共分散行列の推定

- ▶ マハラノビス距離の計算には、データ集合から推定された共分散行列を使う。
- ▶ この推定に最尤推定を使うのがベストとは限らない。
- ▶ 特に、データ集合に初めから外れ値が多く含まれる場合は、最尤推定以外の方法を使うほうが良い場合が多い。
- ▶ 例えば、scikit-learn の Web サイトの下記ページを参照。
 - ▶ https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/covariance/plot_mahalanobis_distances.html

課題: 二変量正規分布に従うランダムなベクトル

- ▶ 二変量の正規分布を適当に選ぼう。
 - ▶ 平均パラメータや共分散行列を適当に決める、ということ。
- ▶ 上で決めた正規分布に従うランダムなベクトルを発生させる Python のコードを書こう。
 - ▶ ただし、まず標準正規分布に従う乱数を発生させて、それを演算によって加工する。
- ▶ 発生させたたくさんの2次元ベクトルの散布図を描き、だいたい思った通りの散らばり方をしているか、確認しよう。

参考 https://github.com/tomonari-masada/course2024-stats1/blob/main/04_random_numbers_in_scipy.ipynb