9.2

(9.1) $J = \sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} \gamma_{nk} \|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k\|^2$

$\boldsymbol{\mu}_k^T \boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{x}_n^T \boldsymbol{\mu}_k$ (スカラーなので)

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)^T(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} \boldsymbol{x}_n^T\boldsymbol{x}_n - 2\boldsymbol{\mu}_k^T\boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{\mu}_k^T\boldsymbol{\mu}_k$$
$$= -2\boldsymbol{x}_n + 2\boldsymbol{\mu}_k$$

(C.19)

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = \frac{\partial}{\partial x_i}(x_1^2 + x_2^2 + \cdots) = 2x_i$$
$$\therefore \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = 2\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 2\boldsymbol{x}$$

Jの極小点は

$$0 = \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\mu}_k} = \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k\|^2$$
$$= \sum_{n=1}^{N} \gamma_{nk}\{-2(\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{\mu}_k)\}$$

で与えられる。

$\gamma_{nk} = 1$ となる $\boldsymbol{x}_n$ を $\boldsymbol{x}_{ik}$ とし、$\gamma_{nk} = 1$ となる $\boldsymbol{x}_n$ の個数を N_k とすると

$$0 = \sum_{i=1}^{N_k}\{-2(\boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k)\} \quad \cdots ①$$

となる。①の右辺が $\boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k$ という形になってることから推測して

$$p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{I})$$

とする。このとき

$$-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\left\{\frac{1}{N_k}\sum_{i=1}^{N_k} \ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k)\right\}$$
$$= -\frac{1}{N_k}\sum_{i=1}^{N_k}\left\{\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k)\right\}$$
$$= -\frac{1}{N_k}\sum_{i=1}^{N_k}(\boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k)$$
$$= 0 \leftarrow ①$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{I})$$
$$= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k)^2\right\}$$
$$= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k)^2\right\}$$
$$= -\frac{1}{2}(-2)(\boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k) = \boldsymbol{x}_{ik} - \boldsymbol{\mu}_k \quad \cdots ②$$

(2.133)と同様の式が得られる。これより(2.134)に対応する式が得られる

$$-\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N_k}\sum_{i=1}^{N_k}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}\left[-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k)\right]$$

これより①の解は回帰関数 $\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}\left[-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k}\ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k)\right] = 0$ の根と同じであることがわかる

Robbins-Monro法を適用すると(2.135)に対応する式が得られる

$$\boldsymbol{\mu}_k^{(i)} = \boldsymbol{\mu}_k^{(i-1)} - a_{N-1}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\mu}_k^{(i-1)}}\left[-\ln p(\boldsymbol{x}_{ik}|\boldsymbol{\mu}_k^{(i-1)})\right]$$

これより

$$\mu_k^{(i)} = \mu_k^{(i-1)} + a_{N-1}(x_{ik} - \mu_k^{(i-1)})$$

②より

を得る。(i) を new とし、$(i-1)$ を old とし、また x_{ik} を x_n に戻すと

$$\mu_k^{new} = \mu_k^{old} + a_{N-1}(x_n - \mu_k^{old}) \cdots (9.5)$$

を得る。

Robbins-Monro法は、更新ステップ毎に μ_k^{new} が解 μ_k に確率的に近付く(酔歩っぽく近付く)アルゴリズムなので、確率的アルゴリズムという。