О неморсовости гауссовой смеси

Апраушева Н. Н., Сорокин С. В.
plat@ccas.ru, www2007@ccas.ru
Москва, Вычислительный центр РАН

Широкое использование гауссовых смесей при решении задач классификации вызывает необходимость определения числа их мод, на чём основан модальный анализ [1, 2]. При этом в некоторых публикациях, например [2], среди свойств гауссовой смеси отмечается их морсовость. Но наши исследования функции плотности вероятности двухкомпонентной гауссовой смеси показали, что она имеет вырожденные критические точки (ВКТ). Получено уравнение геометрического места ВКТ, которое является уравнением границы областей её унимодальности и бимодальности.

Исследовалась смесь нормальных распределений с плотностью вероятности

$$f\left(x\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\sum_{i=1}^{k}\pi_i f_i(x),\quad f_i(x)=\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left(x-\mu_i\right)^2\right),$$

где $x\in R,\ k=2,\ \sigma^2$ — дисперсия компонент смеси, μ_i — математическое ожидание i-й компоненты, π_i — её априорная вероятность, $\pi_i\in(0,\ 1)$, $\sum_{i=1}^{k}\pi_i=1$.

Гладкая функция является функцией Морса, если все её критические точки (КТ) невырождены [3].

Вырожденные критические точки функции $f(x)$ являются решениями системы уравнений $f'_x(x)=0,\ f''_{xx}(x)=0$. Если функция $f(x)$ имеет вырожденную критическую точку, то при небольшом изменении параметров распределения наблюдается неустойчивость, т. е. меняется число её критических точек [3]. Поиск ВКТ функции $f(x)$ проводился на основе результатов [4]. Для определённости положим $\mu_1<\mu_2$.

Теорема 1. *При $k=2$ и $\rho\leqslant 2$ функция $f(x)$ унимодальна, где ρ — расстояние Махаланобиса, $\rho=(\mu_2-\mu_1)\sigma^{-1}$.*

Теорема 2. *При $k=2$ и $\rho>2,\ \pi_1=\pi_2$ функция $f(x)$ бимодальна и точка $x_c=\frac{1}{2}(\mu_1+\mu_2)$ является точкой её минимума.*

Из теорем 1 и 2 имеем: для $k=2$ и $\rho=2,\ \pi_1=\pi_2$ точка $x_{c_1}=\frac{1}{2}(\mu_1+\mu_2)$ является вырожденной модой функции $f(x)$, что проверяется подстановкой значений параметров $\pi_1=\pi_2,\ \mu_2=\mu_1+2\sigma,\ x_{c_1}=\mu_1+\sigma$ в выражения $f'_x(x)$ и $f''_{xx}(x)$. Вырожденная критическая точка минимума смеси x_{c_2} была найдена для $k=3,\ \mu_1=-2.446,\ \mu_2=0,\ \mu_3=2.446,\ \pi_1=0.4,\ \pi_2=0.2,\ x_{c_2}=0$.

Теорема 3. *При* $k = 2$ *и* $\rho > 2$, $\pi_1 \neq \pi_2$ *функция* $f(x)$ *унимодальна, если*

$$\left|\ln(\pi_1\pi_2^{-1})\right| \geqslant \tfrac{1}{2}\rho + 2\ln\left(\tfrac{1}{2}\left(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4}\right)\right). \tag{1}$$

Эксперименты показали, что при выполнении неравенства, противоположного неравенству (1), при фиксированном значении ρ и различных значениях π_1, π_2 для числа критических точек m функции $f(x)$ имеют место неравенства $1 \leqslant m \leqslant 3$. Если $m = 2$, то одна из КТ функции $f(x)$, точка перегиба, является вырожденной.

Для $k = 2$ при различных значениях параметров ρ, π_1, π_2 экспериментальным путём было найдено 15 критических точек перегиба, для каждой из которых вычислялись значения параметров ρ и $\psi_1(\rho) = |\ln(\pi_1\pi_2)^{-1}|$; при тех же значениях ρ вычислялись значения функции $\psi_2(\rho)$, представляющей собой правую часть неравенства (1), и функции $\psi = \psi_2 - \psi_1$. На Рис. 1 представлены графики функций ψ_1, ψ_2, ψ. Для получения 15 критических точек перегиба фиксировалось значение μ_1 и варьировались значения μ_2, π_1, π_2.

Аппроксимировав функцию ψ параболой, $\psi = a\rho^2 + b\rho + c$ и вычислив неизвестные коэффициенты a, b, c методом наименьших квадратов, получили уравнение регрессии

$$\tilde{\psi} = -0.327\rho^2 + 3.867\rho - 3.738, \tag{2}$$

средняя абсолютная погрешность $\Delta = 0.101$, средняя относительная погрешность $\delta = 0.024$, средне-квадратическое отклонение $\tilde{\sigma}_1 = 0.124$.

На основе введенных обозначений ψ_1, ψ_2, ψ и формул (1), (2) для функции $\tilde{\psi}_1$, $\tilde{\psi}_1 = \psi_2 - \tilde{\psi}$, имеем выражение

$$\left|\ln\left(\pi_1\pi_2^{-1}\right)\right| = 0.827\rho^2 + 2\ln[2^{-1}(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4})] - 3.867\rho + 3.738, \tag{3}$$

уравнение (3) является аппроксимационным уравнением границы унимодальности и бимодальности функции $f(x)$.

Оценим доверительный коридор для функции $\psi(\rho)$, используя неравенство Чебышева

$$\mathsf{P}\left\{|\psi - \tilde{\psi}| \leqslant t\tilde{\sigma}_1\right\} \geqslant 1 - t^{-2},$$

при $t = 3$, $\tilde{\sigma}_1 = 0.124$ имеем

$$\mathsf{P}\left\{\tilde{\psi} - 0.372 < \psi < \tilde{\psi} + 0.372\right\} > 0.888. \tag{4}$$

Поскольку $\tilde{\psi}_1 = \psi_2 - \tilde{\psi}$, то для искомой функции ψ_1 на основании (3), (4) имеем

$$\mathsf{P}\left\{d + 3.366 < \psi_1 < d + 4.110\right\} > 0.888. \tag{5}$$

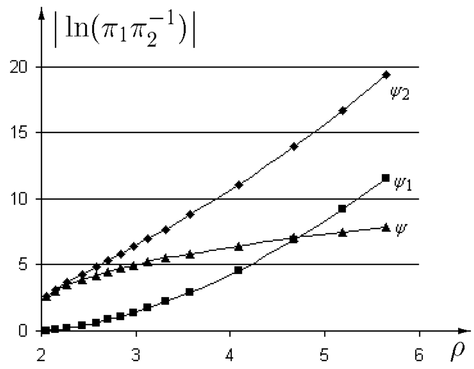

Рис. 1. Графики функций $\psi_1(\rho)$, $\psi_2(\rho)$ и $\psi(\rho)$.

Выражение (5) с вероятностью более 0.888 даёт доверительный коридор для всех ВКТ перегиба функции $f(x)$, в этом коридоре функция $f(x)$ может быть как унимодальной, так и бимодальной.

Таким образом, при $\rho > 2$ и $\pi_1 \neq \pi_2$ с вероятностью более 0.888 функция $f(x)$ унимодальна, если выполняется неравенство

$$\left|\ln(\pi_1\pi_2^{-1})\right| > d + 4.110,$$

и бимодальна, если выполняется неравенство

$$\left|\ln(\pi_1\pi_2^{-1})\right| < d + 3.366.$$

Итак, для исследуемой гауссовой смеси получены достаточные условия её унимодальности и бимодальности.

Литература

[1] *Дюран Б., Оделл П.* Кластерный анализ. — М.: Статистика, 1975.

[2] *Carreira-Perpiñán M.A., Williams C.* On the Number of Modes of a Gaussian Mixture. Inform. Res. Report EDI-INF-RR-0159. School of Inf. Univ. of Edinburg, 2003.

[3] *Арнольд В. И., Варченко А. Н., Гусейн-Заде С. М.* Особенности дифференцируемых отображений. — М.: Наука, 1982. — 304 с.

[4] *Апраушева Н. Н., Сорокин С. В.* Об унимодальности простейшей гауссовой смеси // ЖВМиМФ, 2004. — Т. 44, № 5. — С. 838–846.