

ОБ УНИМОДАЛЬНОСТИ И БИМОДАЛЬНОСТИ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ГАУССОВОЙ СМЕСИ

Н.Н. Апраушева¹, С.В. Сорокин²

Вычислительный центр им.А.А.Дородницына РАН,
119333, Москва, ул. Вавилова, 40

¹plat@ccas.ru

²www2007@ccas.ru

В работе сформулировано несколько достаточных условий унимодальности и бимодальности двухкомпонентной гауссовой смеси, составляющие которой имеют равные дисперсии σ^2 и различные средние значения μ_i , $i = 1, 2$. Обнаружено, что множество критических точек перегибов функции $f(x)$ является границей областей её унимодальности и бимодальности. Аналитическое выражение этой границы получено аппроксимационно-статистическим методом.

Введение

Широкое использование гауссовых смесей в различных областях науки и практики [1, 5, 6] вызывает необходимость определения числа их мод, зависящего от значений параметров распределения. В данной работе представлено решение этой задачи для двухкомпонентной смеси, составляющие которой имеют равные дисперсии σ^2 и различные средние значения μ_i , $i = 1, 2$.

Постановка задачи и методы решения

Плотность вероятности такой смеси выражается формулой

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

$$f_i(x) = \exp(-(x-\mu_i)^2(2\sigma^2)^{-1}),$$

$x \in R$, π_i — априорная вероятность i -й компоненты, $\pi_i \in (0, 1)$, $\pi_1 + \pi_2 = 1$.

Мода гладкой функции $f(x)$ является её критической точкой (КТ), т. е. является корнем уравнения

$$f'_x(x) = 0. \quad (2)$$

После дифференцирования функции $f(x)$ уравнение (2) приводится к равносильному уравнению

$$x = \varphi(x), \quad (3)$$
$$\varphi(x) = \left(\sum_{i=1}^k \pi_i \mu_i f_i(x) \right) \left(\sum_{i=1}^k \pi_i f_i(x) \right)^{-1}.$$

Доказано, что если оператор φ в (3) является сжимающим, то уравнение (2) имеет один корень и функция $f(x)$ унимодальна [2]. Приведём нужные нам результаты.

Теорема 1. При $k = 2$ функция $f(x)$ унимодальна, если $\rho^2 \leq 4$, $\rho^2 = (\mu_2 - \mu_1)^2 \sigma^{-2}$, ρ^2 — расстояние Махаланобиса.

Теорема 2. При $k = 2$ и $\rho^2 > 4$, $\pi_1 \neq \pi_2$ функция $f(x)$ унимодальна, если

$$|\ln(\pi_1 \pi_2^{-1})| \geq 2^{-1} \rho^2 + 2 \ln(2^{-1}(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4})). \quad (4)$$

Теорема 3. При $k = 2$ и $\rho^2 > 4$, $\pi_1 = \pi_2$ функция $f(x)$ бимодальна.

Если в (4) выполняется равенство, то имеем уравнение границы области сжатости оператора φ при $\rho^2 > 4$ и $\pi_1 \neq \pi_2$. Обозначив правую часть (4) через $\psi_1(\rho)$,

$$|\psi_1(\rho)| = 2^{-1}\rho^2 + 2 \ln(2^{-1}(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4})), \quad (5)$$

уравнение этой границы представим в виде

$$\ln(\pi_1\pi_2^{-1}) = \psi_1(\rho).$$

Многочисленные эксперименты показали, что если $k = 2$, $\rho^2 > 4$, $\pi_1 \neq \pi_2$ и

$$|\ln(\pi_1\pi_2^{-1})| < 2^{-1}\rho^2 + 2 \ln(2^{-1}(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4})),$$

то для числа КТ s функции $f(x)$ имеют место неравенства

$$1 \leq s \leq 3.$$

При $1 \leq s \leq 2$ функция $f(x)$ унимодальна, при $s = 3$ она бимодальна. Если $s = 2$, то одна из КТ функции $f(x)$ является точкой перегиба, т. е. удовлетворяет уравнению

$$f''_{xx}(x) = 0. \quad (6)$$

Критическая точка перегиба функции является вырожденной критической точкой (ВКТ) [3]. Из выражений $f'_x(x)$, $f''_{xx}(x)$ и уравнений (2), (6) получим уравнение всех ВКТ функции $f(x)$,

$$(x^2 + \sigma^2) \sum_{i=1}^2 \pi_i f_i(x) = \sum_{i=1}^2 \mu_i^2 \pi_i f_i(x).$$

Уравнение критических точек перегибов (КТП) функции $f(x)$ — это уравнение границы областей её унимодальности и бимодальности. Уравнение этой границы в виде $|\ln(\pi_1\pi_2^{-1})| = \psi_2(\rho)$ находим статистическим методом.

Экспериментальным путём было найдено 15 критических точек перегибов, в каждой из которых вычислялись значения параметров ρ и $\psi_2 = |\ln(\pi_1\pi_2^{-1})|$, представленные в таблице. В этой же таблице даны значения функций $|\ln(\pi_1\pi_2^{-1})| = \psi_1(\rho)$ и $\psi = \psi_1 - \psi_2$, выражение функции $\psi_1(\rho)$ даётся формулой

(5). На рисунке представлены графики этих функций.

Таблица. Значения функций ψ_1 , ψ_2 , ψ при различных значениях ρ

№	ρ	ψ_1	ψ_2	ψ
1	5.6467	19.3380	11.5129	7.8259
2	5.1894	16.6794	9.2102	7.4691
3	4.6787	13.9328	6.9068	7.0261
4	4.0857	11.0292	4.5951	6.4341
5	3.5807	8.7836	2.9444	5.8391
6	3.3146	7.6764	2.1972	5.4792
7	3.1314	6.9409	1.7346	5.2062
8	2.9807	6.3498	1.3863	4.9635
9	2.8448	5.8255	1.0986	4.7269
10	2.7146	5.3285	0.8473	4.4812
11	2.5631	4.8286	0.6190	4.2095
12	2.4427	4.2907	0.4055	3.8852
13	2.2791	3.6418	0.2007	3.4412
14	2.1522	2.0914	0.0800	3.0113
15	2.0606	2.6141	0.0200	2.5941

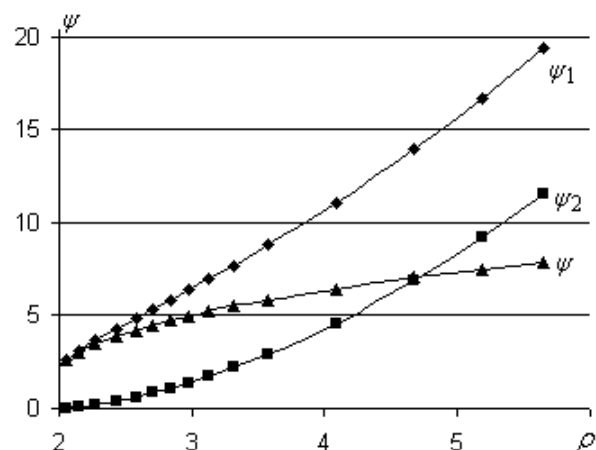


Рис. График функций $\psi_1(\rho)$, $\psi_2(\rho)$, $\psi(\rho)$.

Полученные результаты

Аппроксимировав функцию $\psi(\rho)$ параболой $\psi = a\rho^2 + b\rho + c$ и вычислив неизвестные коэффициенты a , b , c методом наименьших квадратов [4], получим

$$\tilde{\psi} = -0.327\rho^2 + 3.867\rho - 3.738. \quad (7)$$

При такой аппроксимации имеем: средняя абсолютная погрешность $\Delta = 0.101$, средняя относительная погрешность $\delta = 0.024$, средне-квадратическое отклонение $\sigma_1 = 0.124$, $\sigma_1^2 = 0.015$.

Используя смысл обозначений ψ_1, ψ_2, ψ и выражения (5), (7), получим приближённое уравнение всех вырожденных критических точек перегибов функции $f(x)$,

$$|\ln(\pi_1 \pi_2^{-1})| = 0.827\rho^2 - 3.867\rho + 2\ln[2^{-1}(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4})] + 3.738, \quad (8)$$

которое является приближенным уравнением границы областей унимодальности и бимодальности функции $f(x)$, при $\rho > 2$ и $\pi_1 \neq \pi_2$.

Используя неравенство Чебышева [4] для неизвестной функции ψ ,

$$P\{|\psi - \tilde{\psi}| < t \sigma_1\} \geq 1 - t^{-2},$$

получим для неё доверительный коридор при $t = 4$, $\sigma_1 = 0.124$,

$$P\{\tilde{\psi} - 0.496 < \psi < \tilde{\psi} + 0.496\} \geq 0.9375, \quad (9)$$

где $\tilde{\psi}$ выражается формулой (7).

Т. к. $\psi = \psi_1 - \psi_2$, $\tilde{\psi} = \psi_1 - \tilde{\psi}_2$, то для искомой функции $\psi_2(\rho) = |\ln(\pi_1 \pi_2^{-1})|$ на основании (8), (9) имеем

$$P\{d + 3.242 < \psi_2 < d + 4.234\} \geq 0.9375, \quad (10)$$

$$d = 0.827\rho^2 - 3.867\rho + 2\ln[2^{-1}(\rho + \sqrt{\rho^2 - 4})].$$

Выражение (10) с вероятностью ≥ 0.9375 даёт доверительный коридор для всех критических точек перегибов функции $f(x)$. Из наших рассуждений следует, что для $\rho > 2$ и $\pi_1 \neq \pi_2$ при выполнении неравенства

$$|\ln(\pi_1 \pi_2^{-1})| < d + 3.242$$

с вероятностью ≥ 0.9375 функции $f(x)$ бимодальна, а при выполнении неравенства

$$|\ln(\pi_1 \pi_2^{-1})| > d + 4.234$$

с той же вероятностью она унимодальна.

Заключение

Для плотности вероятности исследуемой смеси получены точное уравнение всех её вырожденных критических точек и приближённое уравнение её вырожденных критических точек перегибов. Выделены области унимодальности и бимодальности этой смеси.

Список литературы

1. Н. Н. Апраушева, М. Б. Раджабова. Классификация хлопка-сырца по статистическому алгоритму. — М.: ВЦ АН СССР, 1990.
2. Н. Н. Апраушева, С. В. Сорокин. Об унимодальности простейшей гауссовой смеси // ЖВМиМФ, 2004, 44, № 5, с. 838-846.
3. В. И. Арнольд, А. Н. Варченко, С. М. Гусейн-Заде. Особенности дифференцируемых отображений. М.: Наука, 1982.
4. Г. Крамер. Математические методы статистики. М.: Мир, 1975.
5. Я. А. Фомин, Г. Р. Тарловский. Статистическая теория распознавания образов. М.: «Радио и связь», 1986.
6. M. A. Carreira-Perpiñán, C. Williams. On the Number of Modes of a Gaussian Mixture. Inform. Res. Report EDI-INF-RR-0159. School of Inf. Univ. of Edinburg, 2003.