Subject: Stanford CS229 Machine Learning, Lecture 12, K-Means, GMM (non EM), Expectation Maximization

Date: from August 26, 2025 to August 28, 2025

Contents

A Proof of Eq. (1) **7**

B Proof of Theorem 1 **7**

Stanford CS229 Machine Learning, GMM (EM), 2022, Lecture 13

Link on YouTube: Stanford CS229 Machine Learning, GMM (EM), 2022, Lecture 13

Introduction

Introduction

本节内容介绍聚类算法中 *GMM* 算法及 *EM* 算法. 首先介绍两个基本工具：凸性和 Jensen 不等式，在此基础上，通过 *EM* algorithm as *MLE* 介绍 *EM* 算法原理，进一步通过 *GMM* as *EM* 介绍 *GMM*. 最后，对 factor analysis 进行简单介绍.

Convexity and Jensen's inequality

Convexity

Definition 1. *Convex and Nonconvex.* 称一个集合 Ω 是凸的(*convex*)，若对于集合 Ω 中任意两点 $a, b \in \Omega$，其二者之间的连线也均在该集合中. 数学上即:

$$\forall\, a, b \in \Omega, \quad (1-\lambda)a + b \in \Omega, \quad \lambda \in [0,1].$$

如图2 所示，图1a 中集合为凸的，但图1b 中集合为非凸的.

(a) Convex (b) Nonconvex

Figure 1: Comparison between convex and nonconvex.

Definition 2. *Convex Function.* 对于函数 f，定义其 *graph* 为 $G_f = \{(x,y) : y \geqslant f(x)\}$，则称 f 为凸函数(*convex function*) 若其 *graph* 是凸的. 数学上即（推导见附录*A*）:

$$\forall\, \lambda \in [0,1], \lambda f(a) + (1-\lambda) f(b) \geqslant f(z), \quad z = \lambda a + (1-\lambda) b \tag{1}$$

如图2*a* 中函数为凸函数，其中每一条弦（即两点连线）均在函数之上(*every chord is beyond the function*)；图2*b* 中为非凸函数，不能保证每一条弦均在函数之上.

(a) Convex function (b) Nonconvex function

Figure 2: Comparison between convex and nonconvex function

Theorem 1. 若函数 f 的二阶导恒大于等于 0，即 $f''(x) \geqslant 0, \forall\, x$，则 f 为凸函数.

Proof. 见附录B □

Definition 3. *Strictly Convex.* 称 f 是严格凸函数(*strictly convex*)，若 $f''(x) > 0, \forall\, x \in dom$.

Definition 4. *Concave Function.* 相对于凸函数，称函数 g 为凹函数(*concave function*) 若 $-g$ 为凸函数.

Jensen's inequality

Theorem 2. *Jensen's Inequality.* 若 f 为凸函数，则

$$\mathbb{E}[f(x)] \geqslant f(\mathbb{E}(x)). \tag{2}$$

例如，$P(x=a)=\lambda, P(x=b)=1-\lambda$，则 $\mathbb{E}[f(x)] = \lambda f(a) + (1-\lambda)f(b)$, $f(\mathbb{E}[x]) = f(\lambda a + (1-\lambda)b)$，因此结合凸函数定义，显然 Jensen's inequality 成立.

EM Algorithm as *MLE*

_EM_ Algorithm as _MLE_

给定数据 $\{x_i\}_{i=1}^n$ 和参数 θ，标准的最大似然估计(maximum likelihood estimation, *MLE*) 形式为：

$$l(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \log P(x_i;\theta), \tag{3}$$

在已知信息的基础上，若希望对问题引入一些特定（但可能未知）的结构时就会引入 latent variable，例如 Lecture 12 的光子接收器中对每一个光子的来源比例做出 Θ 的结构性假设. 此时 $P(x_i;\theta)$ 变为：

$$P(x;\theta) = \sum_z P(x,z;\theta). \tag{4}$$

_EM_ Algorithm: Idea

如图3 所示，由于原目标函数 $l(\theta)$ 较难优化（一般无凸、凹性），因此 *EM* 算法首先在 $\theta^{(t)}$ 处使用存在凸/凹性的新目标函数 $L_t(\theta)$ 替换 $l(\theta)$，因此比 $l(\theta)$ 更容易优化，接着再更新 $\theta^{(t+1)} = \arg\max_\theta L_t(\theta)$. 其中替代函数(surrogate) $L_t(\theta)$ 需要满足两点性质：

1. *Low bound:* $L_t(\theta) \leqslant l(\theta)$，即替代函数是原目标函数的下界
2. *Tight:* $L_t(\theta^{(t)}) = l(\theta^{(t)})$，即替代函数与原目标函数在当前迭代点的函数值相等

因此，*EM* 算法简单来说分为两步：

1. (*E*-step): 给定 $\theta^{(t)}$ 寻找 $L_t(\theta)$
2. (*M*-step): 给定 $L_t(\theta)$，更新 $\theta^{(t+1)} = \arg\max_\theta L_t(\theta)$

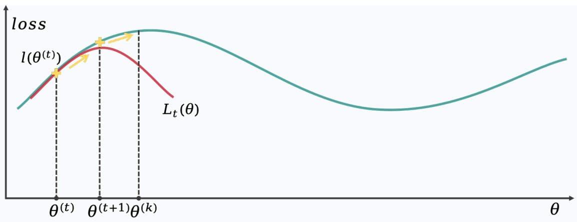

Figure 3: EM algorithm.

EM Algorithm: Select L_t

Lower bounds: 在引入 latent variable z 后，$\log P(x;\theta)$ 变为：

$$\log P(x;\theta) = \log \sum_z P(x,z;\theta) = \log \sum_z \frac{Q(z)\cdot P(x,z;\theta)}{Q(z)}, \forall\, Q(z), \tag{5}$$

其中 $Q(z)$ 为一离散分布，满足 $\sum_z Q(z) = 1, Q(z) \geqslant 0$.
式(5) 可以进一步改写，并应用 Jensen's inequality 可得：

$$\begin{aligned} \log \sum_z \frac{Q(z)\cdot P(x,z;\theta)}{Q(z)} &= \log \mathbb{E}_{z\sim Q(z)} \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)} \geqslant \mathbb{E}_{z\sim Q(z)} \left[\log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)}\right] \\ &= \sum_z Q(z)\cdot \log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)} \end{aligned} \tag{6}$$

Note 1. *注意此时满足* $\sum_z Q(z) = 1, Q(z) \geqslant 0$ *的* $Q(z)$ *都满足式(6)，这样我们就获得了* $l(\theta)$ *的下界集合，集合中的函数* L*均满足* $L(\theta) \leqslant l(\theta)$.

Note 2. *式(6)中* $\sum_z Q(z)\cdot \log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)}$ *被称为* ***Evidence-based lower bound (ELBO)***，*即*

$$ELBO(x,Q,z) = \sum_z Q(z)\cdot \log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)}. \tag{7}$$

因此有

$$l(\theta) \geqslant \sum_{i=1}^{n} ELBO(x^{(i)}, Q^{(i)};\theta). \tag{8}$$

在获得了 $l(\theta)$ 的下界集合后，符合要求的 L_t 还需要其满足 *Tight* 的性质.

Make it tight. 从式(6)可以看到，不等号是由求 $\log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)}$ 的期望产生的，因此为消除不等号可以令其为独立于 z 的常数，即令 $\log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)} = C$. 此时令 $Q(z) = P(z|x;\theta)$ 就有：

$$\log \frac{P(x,z;\theta)}{Q(z)} = \log \frac{P(z|x;\theta)\cdot P(x;\theta)}{P(z|x;\theta)} = \log P(x;\theta). \tag{9}$$

由于消除了关于 z 的随机性，此时就有

$$l(\theta^{(t)}) = \sum_{i=1}^{n} \log P(x_i;\theta^{(t)}) = \sum_{i=1}^{n} ELBO(x^{(i)}, Q^{(i)};\theta^{(t)}), \tag{10}$$

其中 $Q^{(i)} = P(z^{(i)}|x^{(i)};\theta^{(t)})$.

Note 3. 由于 $Q^{(i)}$ 的选取与 x, θ 相关，因此针对 $\theta^{(i)}$ 点处的替代函数而言，因为选取了 $Q^{(i)} = P(z|x^{(i)}; \theta^{(t)})$，因此只有 $\theta^{(t)}$ 处满足等式，而其他 θ_β 处只有 $Q = P(z|x^{(i)}; \theta_\beta)$ 才满足等式，因此只能满足不等式 $l(\theta_\beta) \geqslant \sum_{i=1}^n ELBO(x^{(i)}, Q^{(i)}; \theta^{(i)})$.

Note 4. $z^{(i)}$ 是对问题作一个潜在的结构假设，例如在 *Lecture 12* 的光子实验中，对于每个 *sample* i，$z^{(i)}$ 是对其来源的假设，例如如果目前有两种来源，那么可以假设 $P(z^{(i)} = 1) = \phi_1, P(z^{(i)} = 2) = \phi_2$，这就是对此问题的一种潜在的结构假设.

_EM_ Algorithm: Conclusion

综上所述 *EM* 算法分为如下两步：

1. (*E*-step): 给定 $\theta^{(t)}$，令 $Q^{(i)} = P(z^{(i)}|x^{(i)}; \theta), i = 1, \ldots, n$
2. (*M*-step): 给定 $L_t(\theta)$，更新 $\theta^{(t+1)} = \arg\max_\theta L_t(\theta) = \sum_{i=1}^n ELBO(x^{(i)}, Q^{(i)}; \theta)$

1. 由于 $\theta^{(t+1)} = \arg\max_\theta L_t(\theta) = \sum_{i=1}^n ELBO(x^{(i)}, Q^{(i)}; \theta)$，因此 $l(\theta^{(t+1)}) \geqslant l(\theta^{(t)})$，故 *EM* 算法一定会收敛/ 终止.
2. 但是由于每次更新都选择了更优的参数，因此并不能够跳出局部最优点，故不能保证最终能收敛至全局最优.

EM for *GMM*

_EM_ for _GMM_

Recall. 根据 Lecture 12 中 GMM 模型：

$$P(x^{(i)}, z^{(i)}) = P(x^{(i)}|z^{(i)}) \cdot P(z^{(i)}), \tag{11}$$

其中 $z^{(i)} \sim \text{Multinomial}(\Phi), \phi_i \geqslant 0, \sum_i \phi_i = 1, P(x^{(i)}|z^{(i)}) \sim \mathcal{N}(\mu_j, \sigma_j^2)$.

记 $Q^{(i)}(z^{(i)}) = P(z^{(i)}|x^{(i)}; \theta)$，则此时 *EM* 算法中 *M*-step 为：

$$\max_\Theta \sum_{i=1}^n \sum_{z^{(i)}} Q^{(i)}(z^{(i)}) \log \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q^{(i)}(z^{(i)})}, \tag{12}$$

其中 $\Theta = \{\Phi, \mu, \Sigma\}$.

Derivative for μ_j. 记 $f_i(\theta) = \sum_{z^{(i)}} Q^{(i)}(z^{(i)}) \log \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q^{(i)}(z^{(i)})}$，$w_j^{(i)} = Q^{(i)}(z^{(i)} = j) = P(z^{(i)} = j|x^{(i)}; \theta)$，则：

$$f_i(\theta) = \sum_j w_j^{(i)} \log \frac{\frac{1}{2\pi|\Sigma|^{1/2}} \exp\{-\frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu_j)^T \Sigma_j^{-1}(x^{(i)} - \mu_j)\}\phi_j}{w_j^{(i)}}, \tag{13a}$$

$$\nabla_{\mu_j} \sum_{i=1}^n f_i(\theta) = \sum_{i=1}^n \nabla_{\mu_j}(w_j^{(i)} - \frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu_j)^T \Sigma_j^{-1}(x^{(i)} - \mu_j)) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_j^{(i)} \Sigma_j^{-1}(x^{(i)} - \mu_j). \tag{13b}$$

令梯度 $\nabla_{\mu_j}\sum_{i=1}^n f_i(\theta)=0$，即可以得到：

$$\mu_j=-\frac{\sum_i w_j^{(i)}(x^{(i)}-\mu_j)}{\sum_i w_j^{(i)}}. \tag{14}$$

Derivative for ϕ_j. 由于 ϕ_j 需要满足约束条件 $\sum_j \phi_j=1, \phi_j\geqslant 0$，因此根据 Lagrangian，重新构造损失函数为[a]：

$$\sum_{i=1}^n f_i(\theta)=\sum_{i=1}^n w_j^{(i)}\log\phi_j+\lambda(\sum_j \phi_j-1) \tag{15}$$

再对 ϕ_j 求导可得：

$$\nabla_{\phi_j}\sum_{i=1}^n f_i(\theta)=\sum_{i=1}^n w_j^{(i)}\nabla_{\phi_j}\log\phi_j+\nabla_{\phi_j}\lambda(\sum_j\phi_j-1)=\sum_{i=1}^n\frac{w_j^{(i)}}{\phi_j}+\lambda. \tag{16}$$

令 $\nabla_{\phi_j}\sum_{i=1}^n f_i(\theta)=0$，得

$$\sum_j\phi_j=1=-\frac{1}{\lambda}\sum_{i,j}w_j^{(i)}=-\frac{n}{\lambda}\Rightarrow\lambda=-n. \tag{17}$$

[a]这里为方便书写，省略了一些与求导无关的项.

Last update: December 17, 2025

A Proof of Eq. (1)

Proof of Eq. (1)

Proof. 根据凸函数定义，有：

$$\forall \lambda \in [0,1], \lambda(a, f(a)) + (1-\lambda)(b, f(b)) \in \Omega \tag{18}$$

因此定义 $z = \lambda a + (1-\lambda) b$，则有

$$(z, \lambda f(a) + (1-\lambda) f(b)) \in \Omega \Rightarrow \lambda f(a) + (1-\lambda) f(b) \geqslant f(z) \tag{19}$$

□

B Proof of Theorem 1

Proof of Theorem 1

Proposition 1.

$$f''(x) \geqslant 0, \forall x \Rightarrow f \text{ is convex.} \tag{20}$$

Proof. 由 Taylor expansion 可得，$\forall z \in [a, b]$：

$$\begin{aligned} f(a) &= f(z) + f'(\alpha)(a-z) + f''(\alpha)(a-z)^2, \alpha \in [a, z] \\ f(b) &= f(z) + f'(\beta)(b-z) + f''(\beta)(b-z)^2, \beta \in [z, b], \end{aligned} \tag{21}$$

因此有

$$\lambda f(a) + (1-\lambda) f(b) = f(z) + O(z) + C \geqslant f(z) \tag{22}$$

□

References