# 高斯混合模型

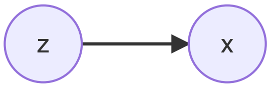
为了解决高斯模型的单峰性的问题，我们引入多个高斯模型的加权平均来拟合多峰数据：

$$p(x)=\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\mathcal{N}(\mu_k,\Sigma_k) \tag{1}$$

引入隐变量 $z$，这个变量表示对应的样本 $x$ 属于哪一个高斯分布，这个变量是一个离散的随机变量：

$$p(z=i)=p_i,\sum_{i=1}^{k}p(z=i)=1 \tag{2}$$

作为一个生成式模型，高斯混合模型通过隐变量 $z$ 的分布来生成样本。用概率图来表示：




其中，节点 $z$ 就是上面的概率，$x$ 就是生成的高斯分布。于是对 $p(x)$：

$$p(x)=\sum_z p(x,z)=\sum_{k=1}^{K}p(x,z=k)=\sum_{k=1}^{K}p(z=k)p(x|z=k) \tag{3}$$

因此：

$$p(x)=\sum_{k=1}^{K}p_k\mathcal{N}(x|\mu_k,\Sigma_k) \tag{4}$$

# 极大似然估计

样本为 $X=(x_1,x_2,\cdots,x_N)$，$(X,Z)$ 为完全参数，参数为
$\theta=\{p_1,p_2,\cdots,p_K,\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_K\Sigma_1,\Sigma_2,\cdots,\Sigma_K\}$。我们通过极大似然估计得到 $\theta$ 的值：

$$\begin{aligned}\theta_{MLE}&=\underset{\theta}{argmax}\log p(X)=\underset{\theta}{argmax}\sum_{i=1}^{N}\log p(x_i)\\&=\underset{\theta}{argmax}\sum_{i=1}^{N}\log\sum_{k=1}^{K}p_k\mathcal{N}(x_i|\mu_k,\Sigma_k)\end{aligned} \tag{5}$$

这个表达式直接通过求导，由于连加号的存在，无法得到解析解。因此需要使用 EM 算法。

# EM 求解 GMM

EM 算法的基本表达式为：$\theta^{t+1}=\underset{\theta}{argmax}\,\mathbb{E}_{z|x,\theta_t}[p(x,z|\theta)]$。套用 GMM 的表达式，对数据集来说：

$$
\begin{aligned}
Q(\theta,\theta^t)&=\sum_z[\log\prod_{i=1}^N p(x_i,z_i|\theta)]\prod_{i=1}^N p(z_i|x_i,\theta^t)\\
&=\sum_z[\sum_{i=1}^N\log p(x_i,z_i|\theta)]\prod_{i=1}^N p(z_i|x_i,\theta^t)
\end{aligned}\tag{6}
$$

对于中间的那个求和号，展开，第一项为：

$$
\begin{aligned}
\sum_z\log p(x_1,z_1|\theta)\prod_{i=1}^N p(z_i|x_i,\theta^t)&=\sum_z\log p(x_1,z_1|\theta)p(z_1|x_1,\theta^t)\prod_{i=2}^N p(z_i|x_i,\theta^t)\\
&=\sum_{z_1}\log p(x_1,z_1|\theta)p(z_1|x_1,\theta^t)\sum_{z_2,\cdots,z_K}\prod_{i=2}^N p(z_i|x_i,\theta^t)\\
&=\sum_{z_1}\log p(x_1,z_1|\theta)p(z_1|x_1,\theta^t)
\end{aligned}\tag{7}
$$

类似地，$Q$ 可以写为：

$$
Q(\theta,\theta^t)=\sum_{i=1}^N\sum_{z_i}\log p(x_i,z_i|\theta)p(z_i|x_i,\theta^t)\tag{8}
$$

对于 $p(x,z|\theta)$：

$$
p(x,z|\theta)=p(z|\theta)p(x|z,\theta)=p_z\mathcal{N}(x|\mu_z,\Sigma_z)\tag{9}
$$

对 $p(z|x,\theta^t)$：

$$
p(z|x,\theta^t)=\frac{p(x,z|\theta^t)}{p(x|\theta^t)}=\frac{p_z^t\mathcal{N}(x|\mu_z^t,\Sigma_z^t)}{\sum\limits_k p_k^t\mathcal{N}(x|\mu_k^t,\Sigma_k^t)}\tag{10}
$$

代入 $Q$：

$$
Q=\sum_{i=1}^N\sum_{z_i}\log p_{z_i}\mathcal{N}(x_i|\mu_{z_i},\Sigma_{z_i})\frac{p_{z_i}^t\mathcal{N}(x_i|\mu_{z_i}^t,\Sigma_{z_i}^t)}{\sum\limits_k p_k^t\mathcal{N}(x_i|\mu_k^t,\Sigma_k^t)}\tag{11}
$$

下面需要对 $Q$ 值求最大值：

$$
Q=\sum_{k=1}^K\sum_{i=1}^N[\log p_k+\log\mathcal{N}(x_i|\mu_k,\Sigma_k)]p(z_i=k|x_i,\theta^t)\tag{12}
$$

1. $p_k^{t+1}$：

$$
p_k^{t+1}=\underset{p_k}{argmax}\sum_{k=1}^K\sum_{i=1}^N[\log p_k+\log\mathcal{N}(x_i|\mu_k,\Sigma_k)]p(z_i=k|x_i,\theta^t)\ s.t.\ \sum_{k=1}^K p_k=1\tag{13}
$$

即：

$$p_k^{t+1}=\mathop{argmax}_{p_k}\sum_{k=1}^K\sum_{i=1}^N\log p_kp(z_i=k|x_i,\theta^t)\ s.t.\ \sum_{k=1}^Kp_k=1\tag{14}$$

引入 Lagrange 乘子：$L(p_k,\lambda)=\sum\limits_{k=1}^K\sum\limits_{i=1}^N\log p_kp(z_i=k|x_i,\theta^t)-\lambda(1-\sum\limits_{k=1}^Kp_k)$。所以：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial p_k}L=\sum_{i=1}^N\frac{1}{p_k}p(z_i=k|x_i,\theta^t)+\lambda=0\\\Rightarrow\sum_k\sum_{i=1}^N\frac{1}{p_k}p(z_i=k|x_i,\theta^t)+\lambda\sum_kp_k=0\\\Rightarrow\lambda=-N\end{aligned}\tag{15}$$

于是有：

$$p_k^{t+1}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^Np(z_i=k|x_i,\theta^t)\tag{16}$$

2. $\mu_k,\Sigma_k$，这两个参数是无约束的，直接求导即可。