概率与学习

高 阳，李文斌

http://cs.nju.edu.cn/rl, 2021.03.25

大纲

相关概念

高斯混合模型

最大似然估计

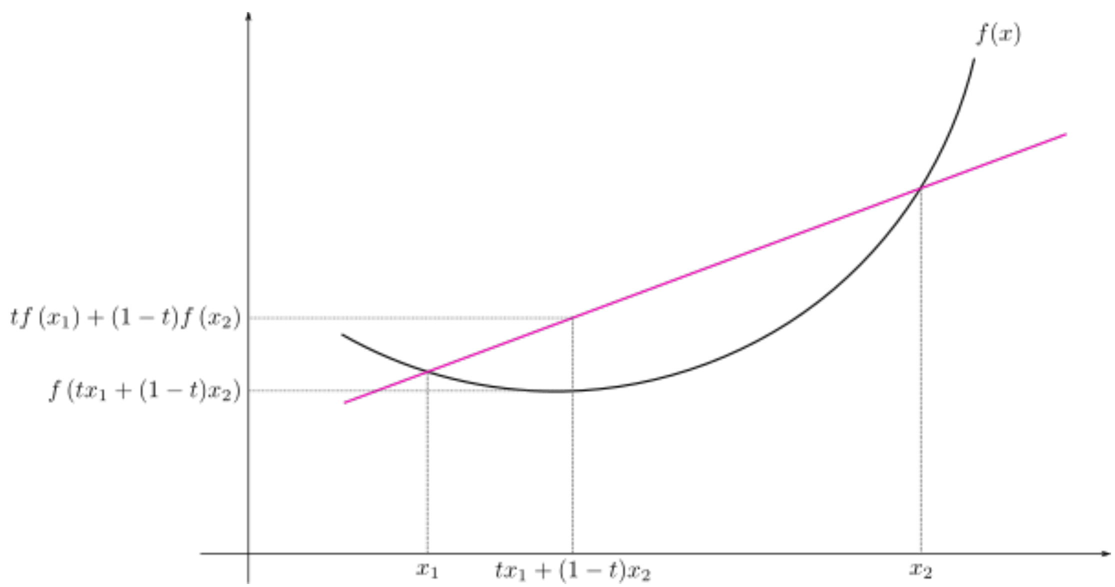
期望最大化算法

相关概念

- 凸函数

X是一个凸集合，f: $X \to \mathbb{R}$表示定义在 X上的一个函数

$$\forall x_1, x_2 \in X, \forall t \in [0,1]: \qquad f(tx_1 + (1-t)x_2) \le tf(x_1) + (1-t)f(x_2)$$

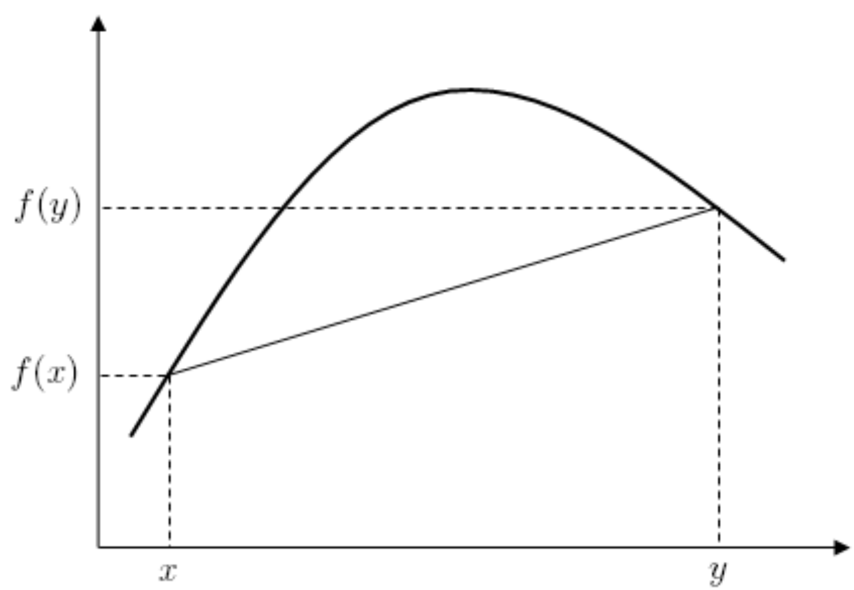


相关概念

- 凹函数

X是一个凸集合，$f: X \to \mathbb{R}$表示定义在X上的一个函数

$$\forall x_1, x_2 \in X, \forall t \in [0,1]: \quad f(tx_1 + (1-t)x_2) \geq tf(x_1) + (1-t)f(x_2)$$



相关概念

- 判断函数的凹凸

$x \in dom\ f, x \in \mathbb{R}$

如果二阶导数 $f''(x) \geq 0$ $f(x)$是凸函数

$\boldsymbol{x} \in dom\ f, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$

如果Hessian矩阵是半正定的，即 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \succcurlyeq 0$ $f(\boldsymbol{x})$是凸函数

相关概念

- 判断函数的凹凸

$x \in dom\ f, x \in \mathbb{R}$

如果二阶导数 $f''(x) \leq 0$ $f(x)$是凹函数

$\boldsymbol{x} \in dom\ f, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$

如果Hessian矩阵是非半正定的，即 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \preccurlyeq 0$ $f(\boldsymbol{x})$是凹函数

相关概念

- 常见例子

- *Exponential.* e^{ax} is convex on $\mathbf{R}$, for any $a \in \mathbf{R}$.
- *Powers.* x^a is convex on $\mathbf{R}_{++}$ when $a \geq 1$ or $a \leq 0$, and concave for $0 \leq a \leq 1$.
- *Powers of absolute value.* $|x|^p$, for $p \geq 1$, is convex on $\mathbf{R}$.
- *Logarithm.* $\log x$ is concave on $\mathbf{R}_{++}$.
- *Norms.* Every norm on $\mathbf{R}^n$ is convex.
- *Max function.* $f(x) = \max\{x_1, \ldots, x_n\}$ is convex on $\mathbf{R}^n$.
- *Geometric mean.* The geometric mean $f(x) = \left(\prod_{i=1}^n x_i\right)^{1/n}$ is concave on $\mathbf{dom}\, f = \mathbf{R}^n_{++}$.
- *Log-determinant.* The function $f(X) = \log\det X$ is concave on $\mathbf{dom}\, f = \mathbf{S}^n_{++}$.
  - R实数；R_+ 非负实数；R_{++} 正实数；R^n 表示n维向量空间
  - S^n_{++}是$n \times n$对称正定矩阵构成的空间

相关概念

- 推荐阅读

Boyd, Stephen, Stephen P. Boyd, and Lieven Vandenberghe. *Convex optimization*. Cambridge university press, 2004.

相关概念

- 随机变量的期望

定理1：令X表示一个随机变量，存在某个函数g使得$Y = g(X)$

1. 假设X是连续的，pdf为$f_X(x)$。如果$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|f_X(x)dx < \infty$，那么$Y$的期望存在且为

$$E(Y) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f_X(x)dx$$

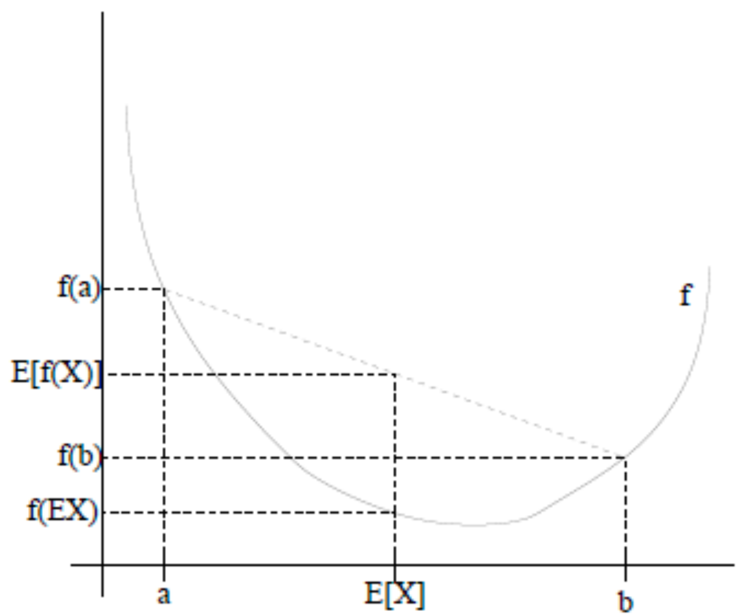
2. 假设X是离散的，pmf为$p_X(x)$。假设X的支撑用$\mathcal{S}_X$表示，如果$\Sigma_{x\in\mathcal{S}_X}|g(x)|p_X(x) < \infty$，那么$Y$的期望存在且为

$$E(Y) = \sum_{x\in\mathcal{S}_X} g(x)p_X(x)$$

相关概念

- Jensen's inequality

  ✓ 如果X是随机变量，并且$f(X)$是凸函数，则$\mathrm{E}[f(X)] \geq f(E[X])$
  ✓ 如果X是随机变量，并且$f(X)$是凹函数，则$\mathrm{E}[f(X)] \leq f(E[X])$



X有0.5的概率是a，有0.5的概率是b，那么$E[X] = \frac{a+b}{2}$

相关概念

- 高斯分布/正态分布

（**Gaussian distribution /Normal distribution**）

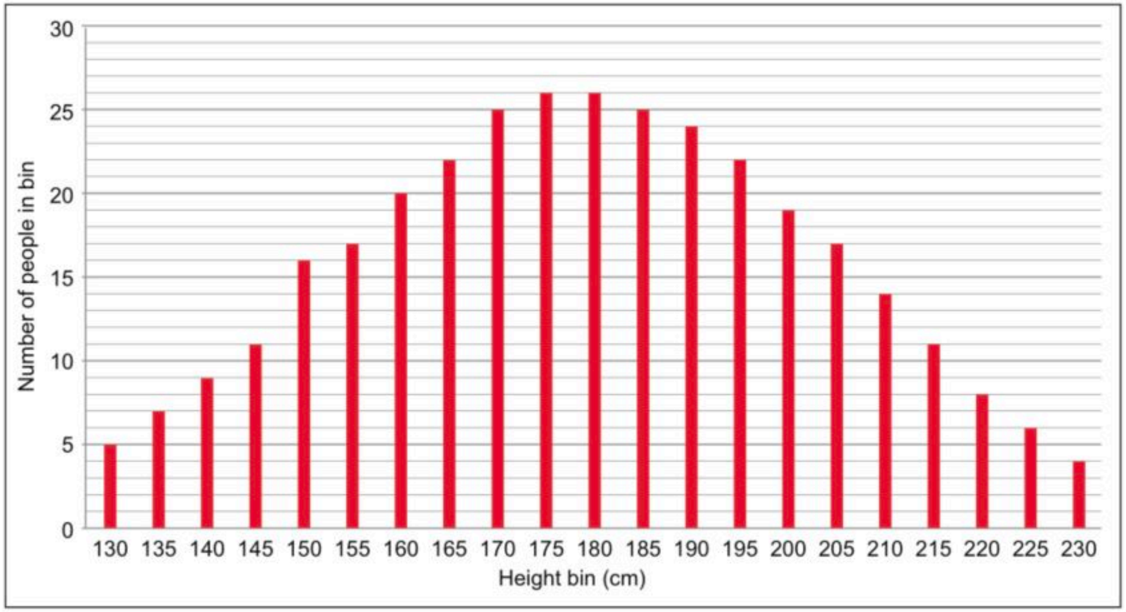


Figure 2.9 Histogram of a normal distribution, in this case the height of 334 fictitious people. The modal (most frequently occurring) bin is centered at 180 cm.

由334个人的身高数据构成的正态分布直方图

相关概念

- 高斯分布/正态分布

  (**Gaussian distribution /Normal distribution**)

  - ✓ 正态分布是在统计以及许多统计测试中最广泛应用的一类分布
  - ✓ 正态分布也是统计模式识别，计算机视觉和机器学习中使用最广泛的概率分布

相关概念

- 单变量高斯分布/正态分布

（**Univariate Gaussian distribution /Normal distribution**）

✓ 若一维随机变量X服从高斯分布，则记为

$$X \sim N(\mu, \sigma^2)$$

标准正态分布
$\mu = 0, \sigma = 1$

✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

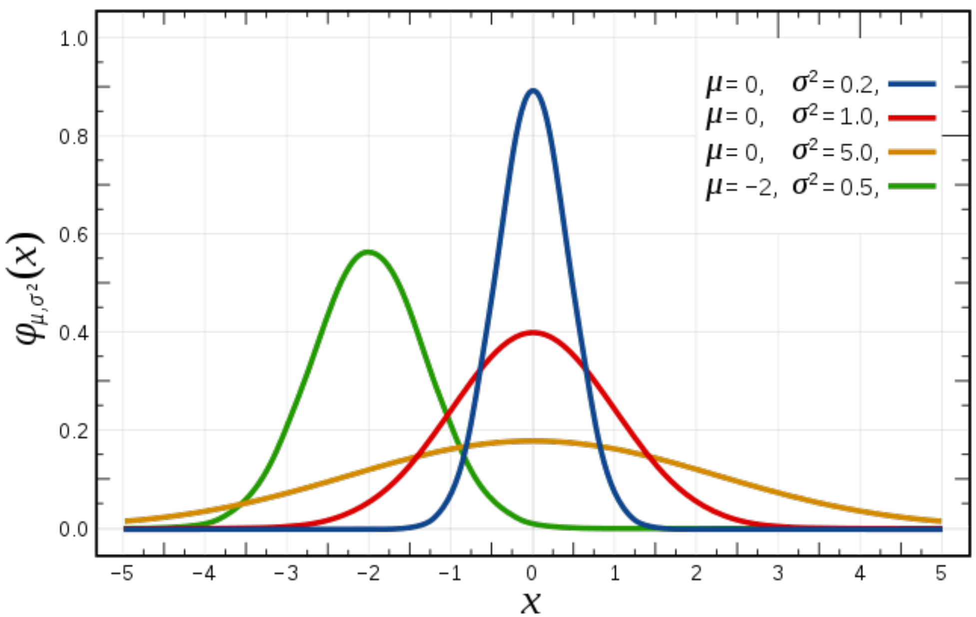
$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

○ μ 为随机变量X的均值，决定了分布的位置
○ σ为随机变量X的标准差，决定了分布的幅度

相关概念

- 单变量高斯分布/正态分布
  - ✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

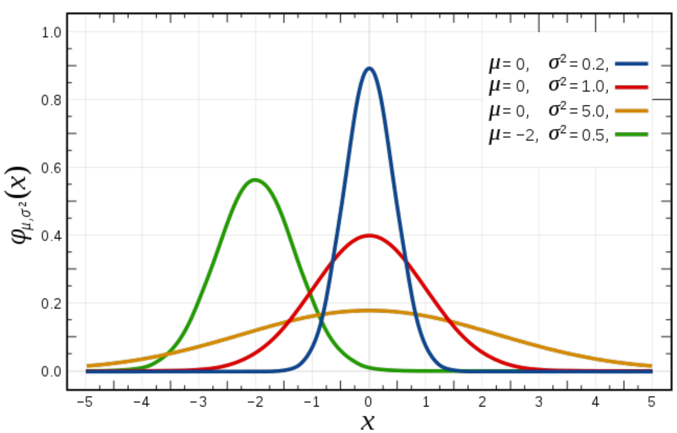
$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$



相关概念

- 单变量高斯分布/正态分布
  - ✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$



$$\forall -\infty < a < b < \infty,$$

$$\mathbb{P}[a < X \le b] = F_X(b) - F_X(a) = \int_a^b p(x)dx$$

在$(a,b]$范围概率

累积分布函数

相关概念

- 多变量高斯分布/正态分布
  （**Multivariate Gaussian distribution /Normal distribution**）

✓ 若d维随机变量$\boldsymbol{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ 服从高斯分布，则

$$\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

$$p_{\boldsymbol{X}}(x_1, \dots, x_k) = \frac{\exp(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}))}{\sqrt{(2\pi)^d|\Sigma|}}$$

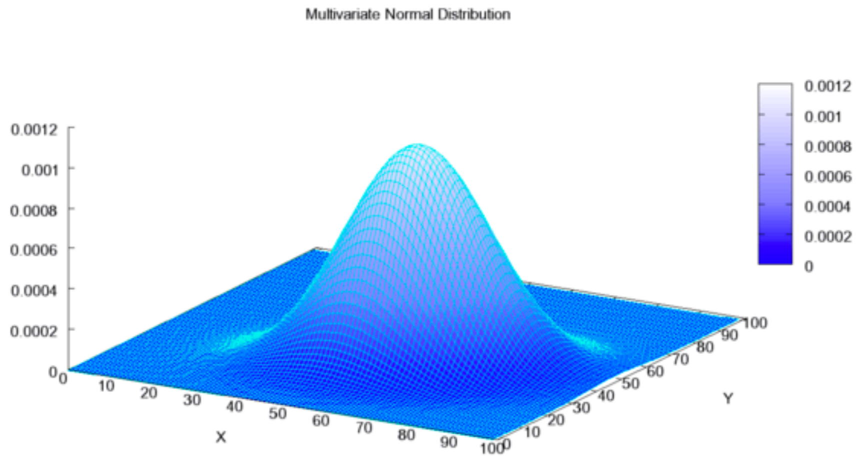
- ○ $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ 为随机变量$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^d$的均值向量
- ○ $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{d\times d}$为随机变量$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^d$的协方差矩阵

相关概念

- 多变量高斯分布/正态分布
（**Multivariate Gaussian distribution /Normal distribution**）

  ✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

$$p_{\boldsymbol{X}}(x_1,\ldots,x_k)=\frac{\exp(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}))}{\sqrt{(2\pi)^d|\Sigma|}}$$



2变量正态分布

相关概念

- 多变量高斯分布/正态分布（**Multivariate Gaussian distribution /Normal distribution**）

  ✓ 若d维随机变量$\boldsymbol{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ 服从高斯分布，则

$$\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

  ✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

$$p_{\boldsymbol{X}}(x_1, \dots, x_k) = \frac{\boxed{\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right) \quad \text{马氏距离}}}{\sqrt{(2\pi)^d|\Sigma|}}$$

计算了$\boldsymbol{x}$和$\boldsymbol{\mu}$之间的距离

  - $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ 为随机变量$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^d$的均值向量
  - $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{d\times d}$为随机变量$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^d$的协方差矩阵

大纲

相关概念

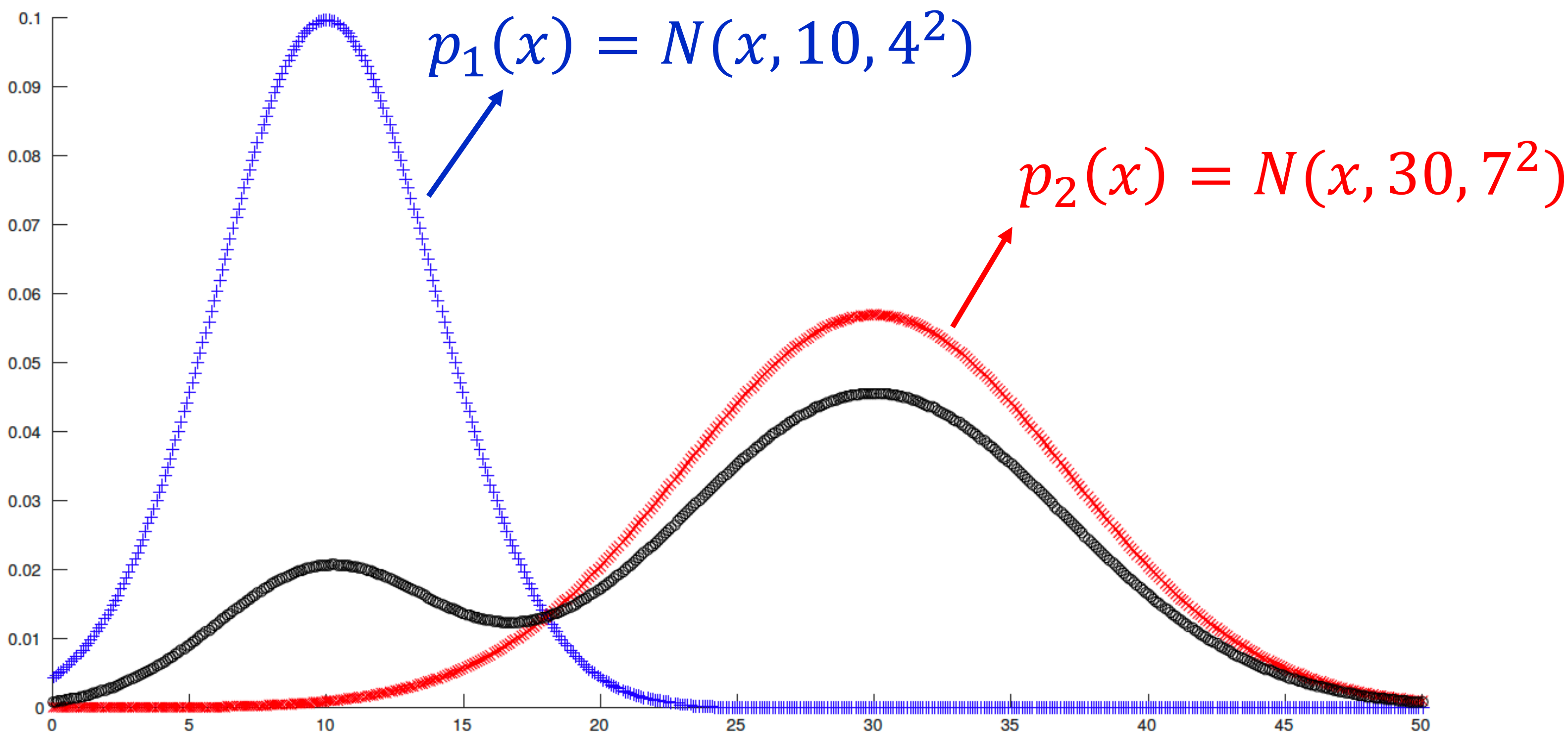
高斯混合模型

最大似然估计

期望最大化算法

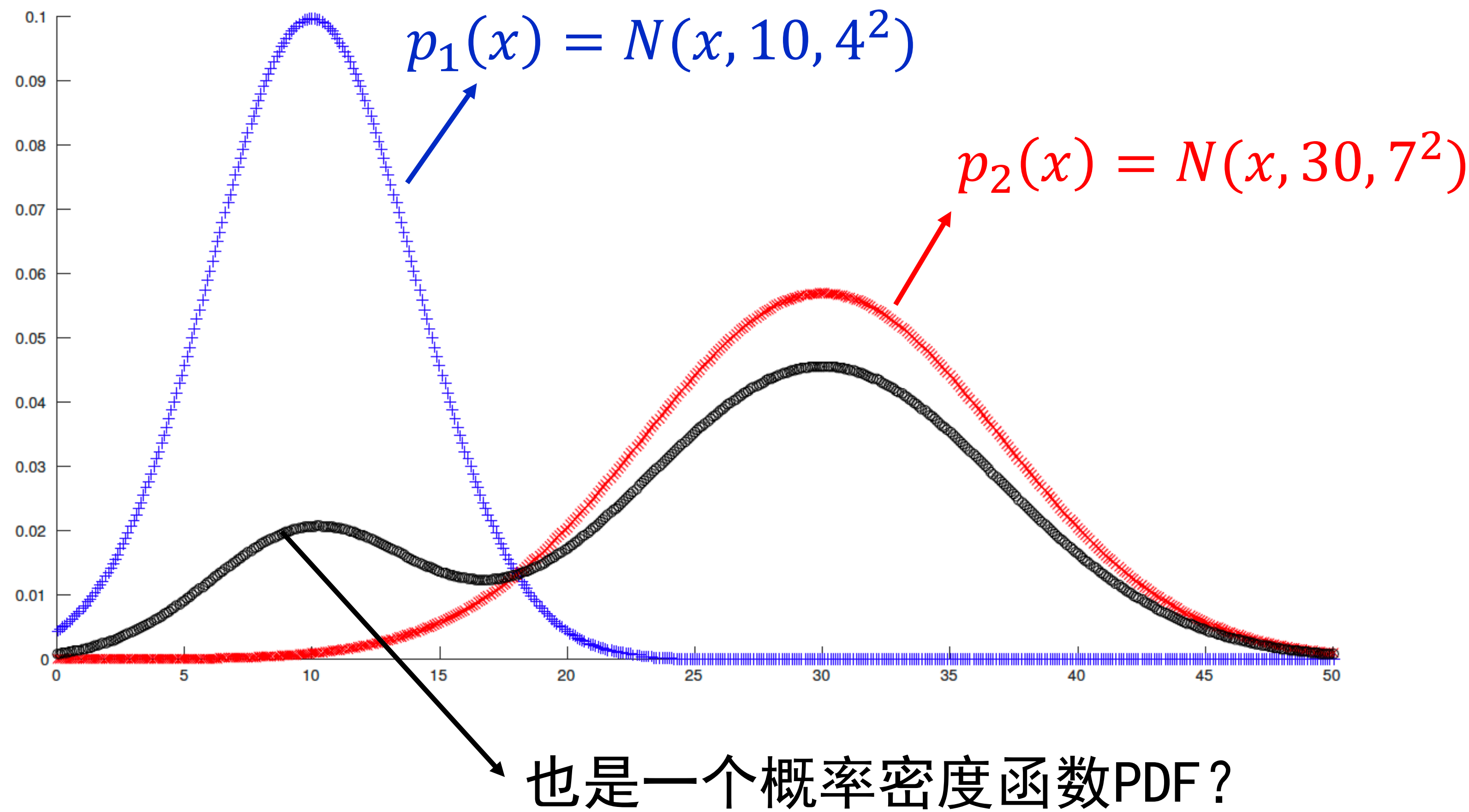
高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）



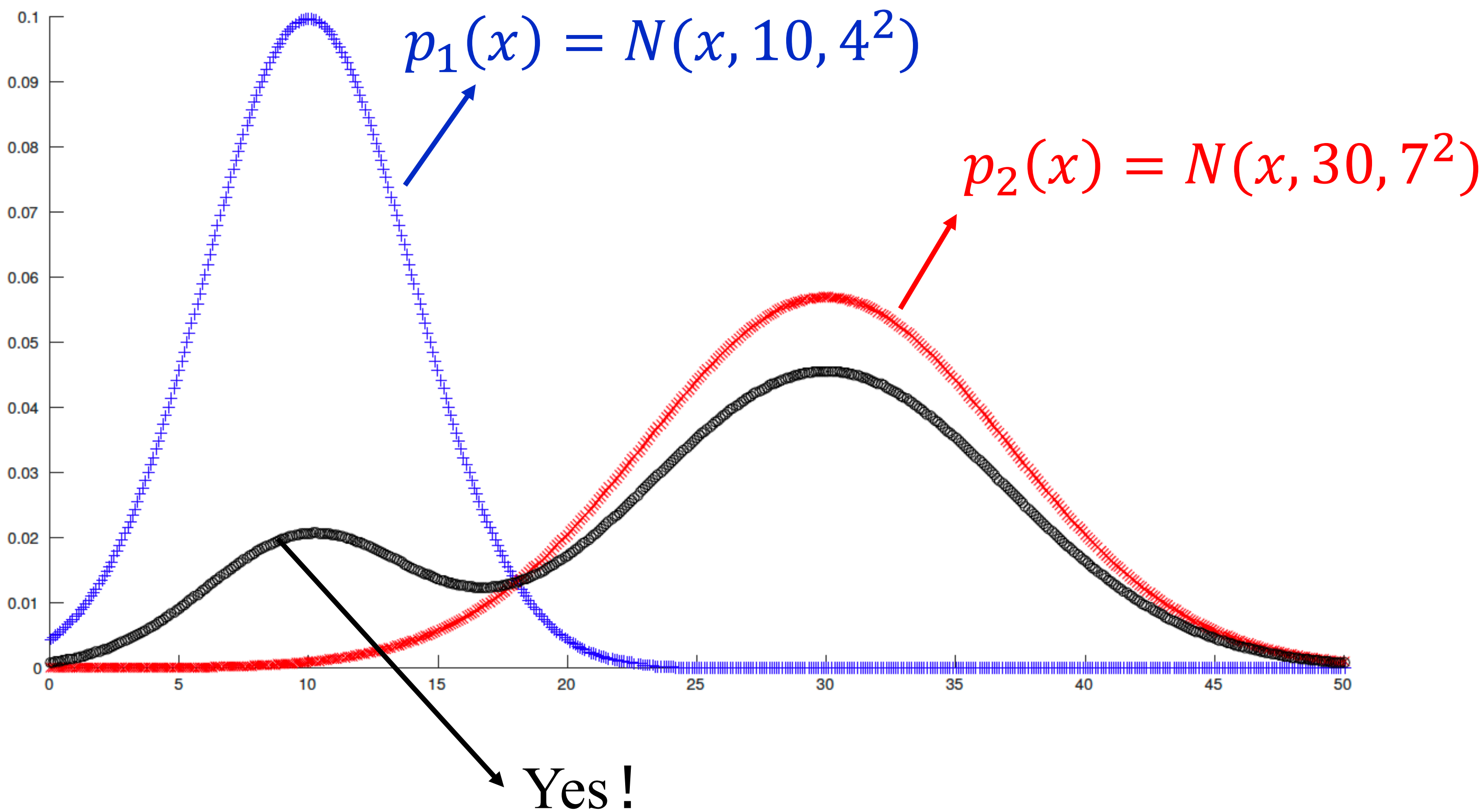
高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）



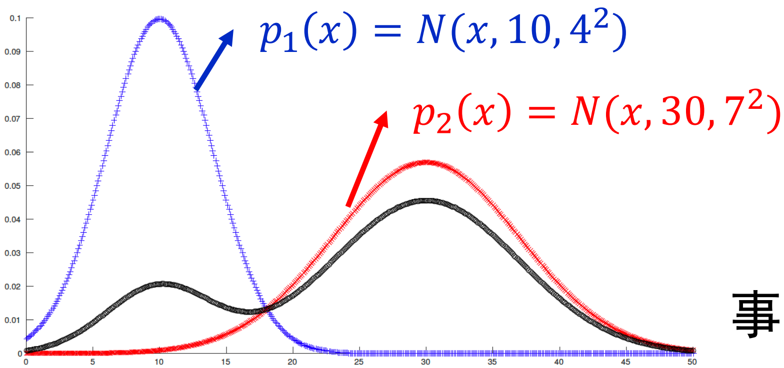
高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）



高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）



事实上，$p_3(x)$是这两个高斯分布的一个加权：

$$p_3(x) = 0.2p_1(x) + 0.8p_2(x)$$

高斯混合模型

高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）
  - ✓ 概率密度函数(probability density function, PDF)

$$
\begin{aligned}
p(x) &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i N(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma_i|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^T \Sigma_i^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\right)
\end{aligned}
$$

- ○ 随机变量$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^d$
- ○ N表示有N个高斯分布组成成分
- ○ $\forall i,\ \alpha_i \geq 0,\quad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i = 1$

高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）

$$
\begin{aligned}
p(x) &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i N(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma_i|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^T \Sigma_i^{-1} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\right)
\end{aligned}
$$

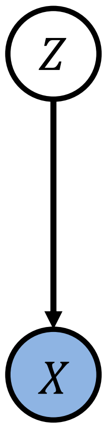
$$\downarrow$$

参数：$\boldsymbol{\theta} = \{\alpha_i, \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i\}_{i=1}^{N}$

高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）

  ✓ 将GMM看成一个图模型



  ○ 假设随机变量$\mathcal{Z} \in \{1,2,\ldots,N\}$符合多项式离散分布

  ○ $\mathcal{Z}$取值为i的概率为：

$$Pr(\mathcal{Z}=i)=\alpha_i$$

  ✓ Two-step sampling，从GMM里采样一个样本x

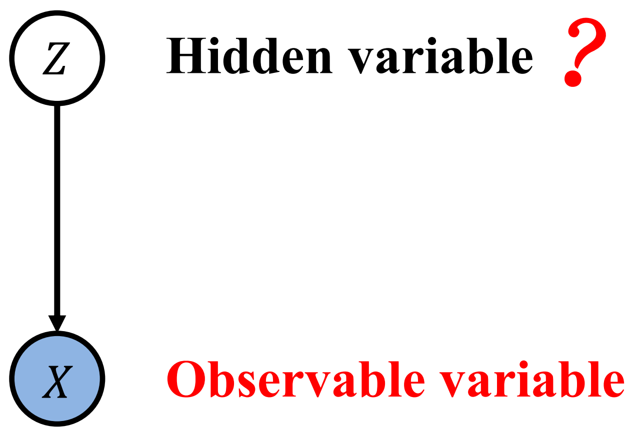
  ○ 从$\mathcal{Z}$中采样，得到一个值i，其中$(1 \le i \le N)$

  ○ 从第i个高斯分布$N(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)$里采样$x$

高斯混合模型

- **高斯混合模型（Gaussian Mixture Model, GMM）**

  ✓ 将GMM看成一个图模型



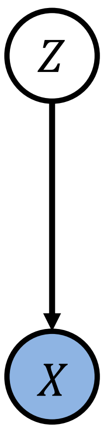
  ✓ Two-step sampling，从GMM里采样一个样本x

  - 从$\mathcal{Z}$中采样，得到一个值i，其中$(1 \leq i \leq N)$
  - 从第i个高斯分布$N(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)$里采样$x$

高斯混合模型

- 高斯混合模型（**Gaussian Mixture Model, GMM**）

✓ 将GMM看成一个图模型



Hidden variable → $\mathcal{Z} = \{\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \ldots, \boldsymbol{z}_M\}$

One-hot vector: $z_i = [0,1, \ldots, 0] \in \mathbb{R}^N$

Observable variable → $\mathcal{X} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_M\}$

估计

参数：$\boldsymbol{\theta} = \{\alpha_i, \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i\}_{i=1}^{N}$

- $\boldsymbol{z}_i$和 $\boldsymbol{x}_i$一一对应
- N表示GMM中高斯成分的个数

大纲

相关概念

高斯混合模型

最大似然估计

期望最大化算法

最大似然估计

- 最大似然估计 (Maximum likelihood estimation，MLE)
  - ✓ **定义**：MLE是通过最大化一个似然函数来估计一个概率分布的参数，使得在假设的统计模型下，观测数据最有可能出现。
  - ✓ **单高斯模型为例**：

似然函数（**Likelihood function**）：

$$\mathcal{L}(\theta|X) = p(X|\theta)$$

- θ值固定，$p(X|\theta)$看作是X的函数，即为PDF
- X固定，$\mathcal{L}(\theta|X)$看作是θ的函数，即为似然函数

最大似然估计

- 最大似然估计 (Maximum likelihood estimation，MLE)
  - ✓ **单高斯模型为例**：

似然函数（**Likelihood function**）：$\mathcal{L}(\theta|X) = p(X|\theta)$

最大似然估计MLE：$\hat{\theta} = \underset{\theta\in\Theta}{\operatorname{argmax}}\,\mathcal{L}(\theta|X)$

假设数据点i.i.d $\mathcal{L}(\theta|X) = \prod_{j=1}^{M} p(x_j|\theta)$ 乘积很小

$$\ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_{j=1}^{M} \ln p(x_j|\theta)$$

最大似然估计

- 最大似然估计 (Maximum likelihood estimation，MLE)

  ✓ **单高斯模型为例**：

最大似然估计MLE：

$$\hat{\theta} = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \mathcal{L}(\theta|X)$$

$$\Downarrow$$

最大对数似然估计MLE：

$$\hat{\theta} = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \ln \mathcal{L}(\theta|X)$$

$$= \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{j=1}^{M} \ln p(x_j|\theta)$$

求解：

- ○ 求导，令导数为0
- ○ 求解方程，得到最优θ^*

$$\theta = (\mu, \sigma)$$

$$\theta^* = (\mu^*, \sigma^*)$$

最大似然估计

- 最大似然估计 (Maximum likelihood estimation，MLE)

  ✓ **高斯混合模型**：

最大对数似然估计MLE： $\hat{\theta} = \underset{\theta\in\Theta}{\operatorname{argmax}} \ln \mathcal{L}(\theta|X)$

$$\ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_{j=1}^{M} \ln p\left(\boldsymbol{x}_j\middle|\theta\right) = \sum_{j=1}^{M} \ln \sum_{i=1}^{N} \alpha_i N(\boldsymbol{x}_j; \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)$$

$$= \sum_{X} \ln \sum_{\mathcal{Z}} p(\mathcal{Z}|\alpha)\, p(X|\mathcal{Z}; \boldsymbol{\mu}, \Sigma)$$

$$= \sum_{X} \ln \sum_{\mathcal{Z}} p(X, \mathcal{Z}|\theta)$$

$$Pr(\mathcal{Z} = i) = \alpha_i$$

$$\theta = \{\alpha, \boldsymbol{\mu}, \Sigma\}$$

大纲

相关概念

高斯混合模型

最大似然估计

期望最大化算法

期望最大化(EM)算法

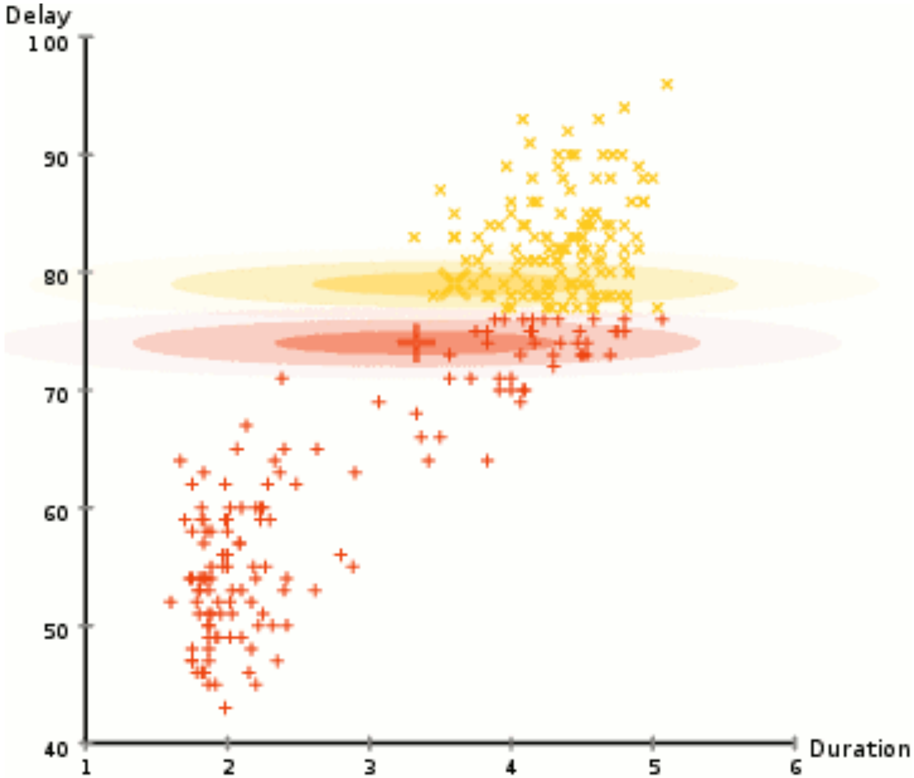
- EM算法（Expectation-Maximization algorithm）
  - ✓ **核心思想**：

EM算法是一个迭代的方法，采用最大似然估计MLE对统计模型中的参数进行估计，特别是针对包含无法观测隐变量的模型。

通常引入隐含变量后会有两个参数，EM算法首先会固定其中的第一个参数，然后使用MLE计算第二个变量值；接着通过固定第二个变量，再使用MLE估测第一个变量值，依次迭代，直至收敛到局部最优解。

期望最大化(EM)算法

- EM算法（Expectation-Maximization algorithm）

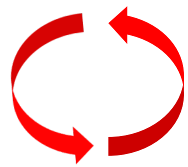


Wiki: EM clustering of Old Faithful eruption data

期望最大化(EM)算法

- EM算法（Expectation-Maximization algorithm）

E-Step: 利用可观测数据$\mathcal{X}$和当前的参数估计为$\boldsymbol{\theta}^{(t)}$，估计更好的隐藏变量$\mathcal{Z}$



M-Step: 利用可观测数据$\mathcal{X}$和当前估计的隐藏变量$\mathcal{Z}$，估计更好的参数$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$

Repeat: 重复上述两个步骤，直至收敛

期望最大化(EM)算法

- EM优化分析

✓ **假设隐变量$\mathcal{Z}$的分布$Q(\mathcal{Z}|\theta)$是一个任意的离散分布**

满足： $$\sum_{\mathcal{Z}} Q(z|\theta) = 1, Q(z|\theta) \geq 0$$

✓ **高斯混合模型：**

$$\ell(\theta) = \ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_{X} \ln \sum_{\mathcal{Z}} p(X, \mathcal{Z}|\theta)$$

$$= \sum_{X} \ln \sum_{\mathcal{Z}} Q(\mathcal{Z}|\theta) \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}$$

$$= \sum_{X} \ln E_{Q}[\frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}]$$

定理1：令X表示一个随机变量，存在某个函数g使得$Y = g(X)$

1. 假设X是连续的，pdf为$f_X(x)$。如果$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|f_X(x)dx < \infty$，那么$Y$的期望存在且为

$$E(Y) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f_X(x)dx$$

2. 假设X是离散的，pmf为$p_X(x)$。假设X的支撑用$\mathcal{S}_X$表示，如果$\Sigma_{x\in\mathcal{S}_X} |g(x)|p_X(x) < \infty$，那么$Y$的期望存在且为

$$E(Y) = \sum_{x\in\mathcal{S}_X} g(x)p_X(x)$$

✓ **高斯混合模型：**

$$\ell(\theta) = \ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_X \ln \sum_{\mathcal{Z}} p(X,\mathcal{Z}|\theta)$$

$$= \sum_X \ln \sum_{\mathcal{Z}} Q(\mathcal{Z}|\theta) \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}$$

$$= \sum_X \ln E_Q[\frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}]$$

期望最大化(EM)算法

- EM优化分析
  - ✓ **高斯混合模型：**

$$\ell(\theta) = \ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_{X} \ln \sum_{\mathcal{Z}} p(X, \mathcal{Z}|\theta)$$

$$= \sum_{X} \ln \sum_{\mathcal{Z}} Q(\mathcal{Z}|\theta) \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}$$

$$= \sum_{X} \ln E_{Q}[\frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}]$$

$$\geq \sum_{X} E_{Q}[\ln \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}]$$

利用Jensen不等式，因为 ln(·)函数是凹函数，所以 $\ln(E[X]) \geq E[\ln(X)]$

$$= \sum_{X} \sum_{\mathcal{Z}} Q(\mathcal{Z}|\theta) \ln \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}$$

$E[\ln g(Z)] = \sum_{Z} p(Z) \ln g(Z)$

期望最大化(EM)算法

- EM优化分析
  - ✓ **高斯混合模型：**

$$\ell(\theta) \geq \sum_{X} \sum_{\mathcal{Z}} Q(\mathcal{Z}|\theta) \ln \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}$$

下界？

什么时候上述不等式可以取等号？

$$X = E[X] \quad \checkmark$$

也就是说X为常数时，即：

$$\frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)} = c$$

期望最大化(EM)算法

- EM优化分析
  - ✓ **高斯混合模型：**

$$\ell(\theta) \geq \sum_{X}\sum_{\mathcal{Z}} Q(\mathcal{Z}|\theta)\ln\frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)}$$

下界？

上式取等号，即 $$\frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)} = c$$

$$Q(\mathcal{Z}|\theta) = \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{c} = \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{c\cdot\sum_{Z} Q(\mathcal{Z}|\theta)} \longrightarrow \sum_{\mathcal{Z}} Q(z|\theta) = 1$$

$$= \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{\sum_{Z} c\cdot Q(\mathcal{Z}|\theta)} = \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{\sum_{Z} p(X,\mathcal{Z}|\theta)} \longrightarrow \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{Q(\mathcal{Z}|\theta)} = c$$

$$= \frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{p(X|\theta)} = p(\mathcal{Z}|X,\theta)$$ ⟶ 固定θ，即为$\mathcal{Z}$的后验概率

期望最大化(EM)算法

- EM优化分析
  - ✓ **高斯混合模型：**

$$\ell(\theta) = \sum_{X}\sum_{\mathcal{Z}} p(\mathcal{Z}|X,\theta)\ln\frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{p(\mathcal{Z}|X,\theta)}$$

下界

固定θ，计算$Q(\mathcal{Z}|\theta) = p(\mathcal{Z}|X,\theta)$，就可以得到$\ell(\theta)$的下界 → E-Step

  - ✓ 然后继续优化这个下界

$$\theta^* = \underset{\theta\in\Theta}{\operatorname{argmax}}\,\ell(\theta)$$

$$= \underset{\theta\in\Theta}{\operatorname{argmax}}\sum_{X}\sum_{\mathcal{Z}} p(\mathcal{Z}|X,\theta)\ln\frac{p(X,\mathcal{Z}|\theta)}{p(\mathcal{Z}|X,\theta)}$$

→ M-Step

期望最大化(EM)算法

- 算法流程

Initialization: $t \leftarrow 0$; $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$

E-Step: 根据观测数据$\mathcal{X}$和上一次迭代的参数$\boldsymbol{\theta}^{(t)}$，计算隐藏变量$\mathcal{Z}$的后验概率，或者称为隐变量的期望值；

$$Q^t = p(\mathcal{Z}|X, \theta^t) = \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta^t)}{\sum_{Z} p(X, \mathcal{Z}|\theta^t)}$$

M-Step: 在上述$\mathcal{Z}$的后验概率的基础上，进行最大化似然估计，估计新的参数$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{X} \sum_{\mathcal{Z}} Q^t \ln \frac{p(X, \mathcal{Z}|\theta)}{Q^t}$$

Repeat: 重复上述两个步骤，直至收敛

期望最大化(EM)算法

- E-Step
  - ✓ **计算每个样本x_j来自第i个高斯分布的期望：**

$$\gamma_{ij} = \mathbb{E}\left[z_{ij}|\boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{\theta}^{(t)}\right] = \frac{\alpha_i^{(t)} N(\boldsymbol{x}_j; \boldsymbol{\mu}_i^{(t)}, \Sigma_i^{(t)}))}{\sum_{k=1}^{N} \alpha_k^{(t)} N(\boldsymbol{x}_j; \boldsymbol{\mu}_k^{(t)}, \Sigma_k^{(t)})}$$

其中， $1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq M$

z_{ij}取值为0或者1； $z_{ij} = 1$，当且仅当$\boldsymbol{x}_j$由第i个高斯分布产生

期望最大化(EM)算法

- M-Step
  - ✓ **计算新一轮迭代的模型参数$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$：**

$$m_i = \sum_{j=1}^{M} \gamma_{ij} \, ,$$

$$\boldsymbol{\mu}_i^{(t+1)} = \frac{\sum_{j=1}^{M} \gamma_{ij} \boldsymbol{x}_j}{m_i} \, ,$$

$$\Sigma_i^{(t+1)} = \frac{\sum_{j=1}^{M} \gamma_{ij} \left(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i^{(t+1)} \right) \left(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i^{(t+1)} \right)^T}{m_i}$$

$$\alpha_i = \frac{\sum_{j=1}^{M} \gamma_{ij}}{M} = \frac{m_i}{M}$$

期望最大化(EM)算法

- 思考一下

K-means算法与EM算法的关系？

期望最大化(EM)算法

- K-means算法背后的EM思想

聚类准则函数：
$$J=\sum_{j=1}^{c}\sum_{x\in S_j}\left\|x-m_j\right\|^2$$

  - 样本$\boldsymbol{x}_i$是可观测变量X ；
  - 类别标签（簇）S_j看作是隐藏变量Z
  - 簇中心/聚类均值m_j看作参数θ
  - 聚类准则函数看作θ的似然函数

期望最大化(EM)算法

- K-means算法背后的EM思想

- Step1：选择一个聚类数量k
- Step2：初始化聚类中心$\mu_1, \dots \mu_k$
  - 随机选择k 个样本点，设置这些样本点为中心
- Step3：对每个样本点, 计算样本点到k个聚类中心的距离（使用某种距离度量方法），将样本点分距离它最近的聚类中心所属的聚类
- Step4：重新计算聚类中心，聚类中心为属于这一个聚类的所有样本的均值
- Step5：如果没有发生样本所属的聚类改变的情况，则退出，否则，返回Step3继续。

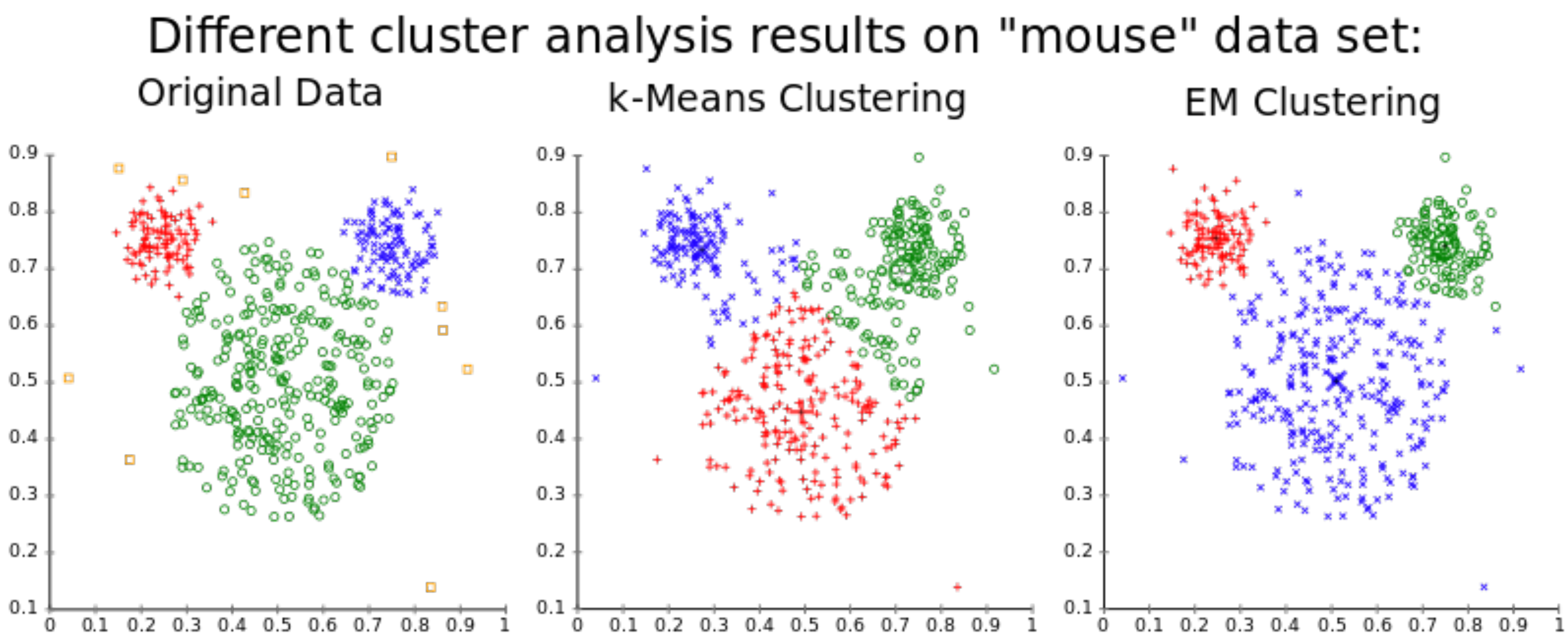
初始化

E-Step

M-Step

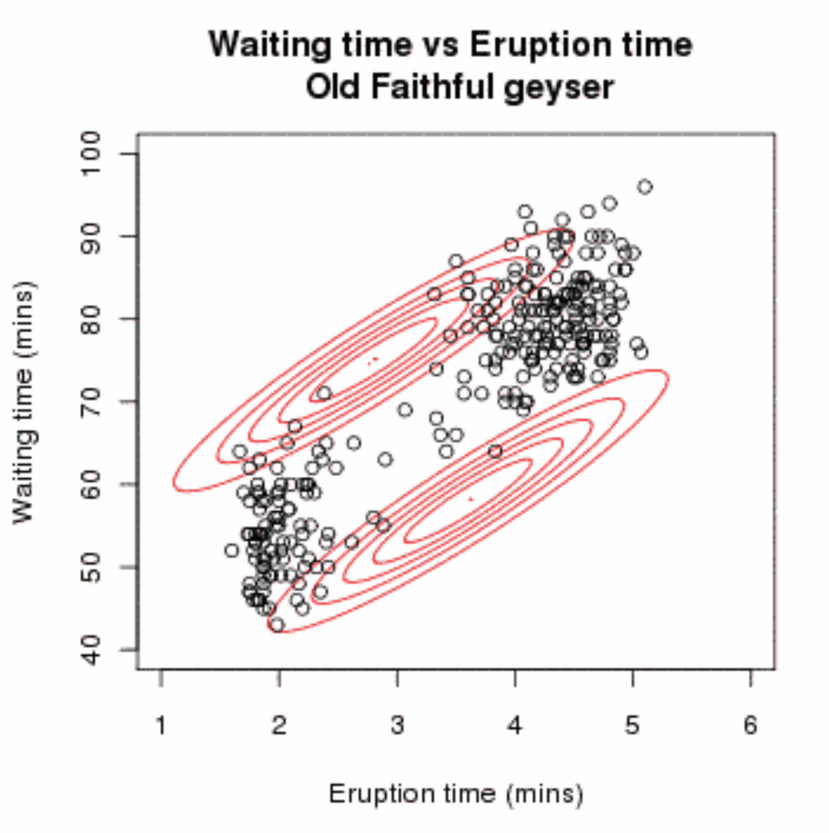
期望最大化(EM)算法

- 应用



期望最大化(EM)算法

- 应用



使用EM算法来拟合包含两个
高斯分布的高斯混合模型

谢 谢 ！