HW3 实验报告

2015011313 徐鉴劲 计54

Maximum Likelihood Estimate

问题描述：给定一个数据集进行无监督学习，确定一个产生数据的分布。类别数量是通过假设预先确定的。

理论基础

假设这个数据是由多个概率混合而成：$P(x) = \sum P(x|\omega_i)P(\omega_i)$。

其中每一个概率假设为高斯分布：$P(x|\omega_i) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d|\Sigma|}}e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)}$.

它实际上是一个关于μ和Σ可导的函数，其中μ是N维向量，Σ是$N \times N$矩阵。

所以将它表示成一个函数的形式：$P(x|\omega_i) = f(x;\mu,\Sigma)$。

那么整个概率分布就是$P(x) = \sum t_i \mathcal{N}(x;\mu_i,\Sigma_i)$，其中$t_i$是满足$0 \le t_i \le 1$且加起来为1的标量。

构造损失函数$l = -\sum_k lnP(x_k)$，然后我们可以对参数求导，进而进行优化。

实现方式

由于求导数的步骤比较麻烦，我采用了tensorflow中的自动求导功能。

为了将上述表达式实现在tensorflow中，需要做以下必要的处理：

1. 矩阵化$l = -\sum_k lnP(x_k)$中的求和部分。因为tensorflow不支持挨个求和的操作。
2. 将Σ参数限制为正定矩阵。
3. 将t_i参数的限制完成。

矩阵化

```
def lnp_x_mu_sigma(x, mu, sigma, t):
    res = 0
    N = mu.get_shape().as_list()[0]

    for i in range(N):
        m = mu[i:i+1, :]
        s = sigma[i, :, :]

        det = tf.matrix_determinant(s)
        inv = tf.matrix_inverse(s)
        n_sample = tf.cast(tf.shape(x)[0], tf.float64)

        a1 = tf.sqrt( (2 * np.pi) ** N * det)
        a2 =  -0.5 * tf.reduce_sum(tf.matmul(x - m, inv) * (x - m), axis=1)

        res += tf.exp(a2) / a1 * t[i]
    res = tf.reduce_sum(tf.log(res))
```

正定化

利用了A^TA是正定对称矩阵的事实。

```
sigma = tf.Variable(init_sigma)
psigma = tf.matmul(sigma, sigma, transpose_a=True)
```

t_i的限制

将实数范围内的变量通过函数x^2+1映射到$(1,+oo)$上，然后归一化。

```
t = tf.Variable(np.ones((N,), dtype="float64"))
et = (1+t*t) / tf.reduce_sum(1+t*t)
```

吉布斯采样优化

我发现同时优化t和μ和Σ容易导致t过早收敛到一个错误的直，所以我采用两步迭代优化：

在loss>8000的时候只优化μ和Σ，然后在loss<8000的时候交替优化μ, Σ，和t

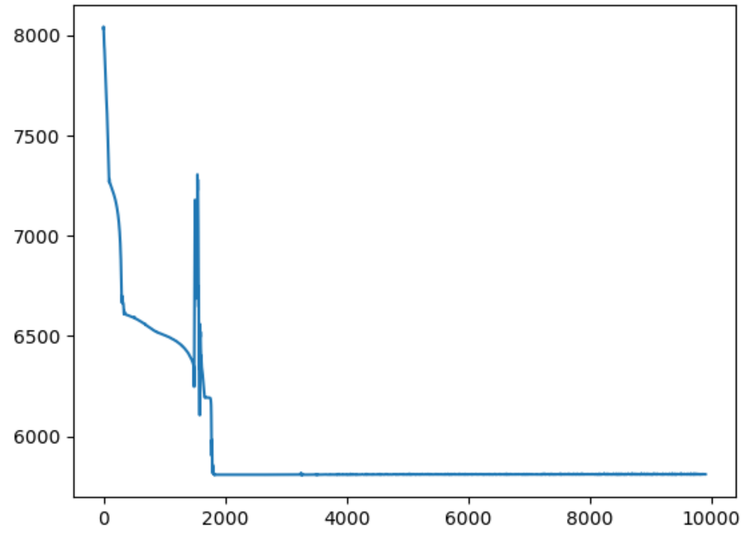
求导与优化器

最开始的时候我采用的是朴素的梯度下降法，但是学习率的设置是一个问题，所以我使用了一种自适应学习率算法：Adam.

然后我还对Adam的学习率进行了规划，根据不同loss的大小选择对应的学习率。

实验结果

训练loss图



可以看到loss的下降并不是很平滑，这说明了MLE并不是凸优化，而且tf存在一定的数值不稳定

参数估计结果（a）

先验权重	1	2	3
t_i	0.39054	0.33358	0.27588

先验权重与数据吻合，正确。

μ	x	y
μ_1	7.28943	7.06694
μ_2	15.00692	1.01494
μ_3	0.89612	1.01104

结果与(7, 7), (15, 1), (1, 1)十分接近，剩下不准确的原因可能是数据的随机性与算法未收敛到最优解。

Σ_0	
7.88187	2.79020
2.79020	1.87916
Σ_1	
2.17459	-0.10019
-0.10019	1.79766
Σ_2	
11.56872	0.11756

0.11756	0.92613

生成数据的Σ如下

Σ_0	
8	3
3	2
Σ_1	
2	0
0	2
Σ_2	
12	0
0	1

他们十分接近，同样说明了估计的有效性。

参数估计结果（b）

先验权重	1	2	3
t_i	0.30055	0.55747	0.14198

与设定的先验很接近。

μ	x	y
μ_1	6.88429	6.95063
μ_2	0.79475	1.04674
μ_3	15.04197	0.91565

结果与(7, 7), (15, 1), (1, 1)十分接近，剩下不准确的原因可能是数据的随机性与算法未收敛到最优解。

Σ_0	
7.62127	2.50899
2.50899	1.70573
Σ_1	
10.92268	-0.10753
-0.10753	1.01599
Σ_2	
2.20195	0.18426
0.18426	2.11459

生成数据的Σ如下

Σ_0	
8	3
3	2
Σ_1	
12	0
0	1
Σ_2	
2	0

0	2

有一定误差。

参数估计结果（c）

μ	x	y
μ_1	7.20120	0.37176
μ_2	9.39782	1.55818
μ_3	6.40659	6.78052

Σ_0	
59.41734	-5.46793
-5.46793	1.70666
Σ_1	
48.23648	4.50168
4.50168	1.80242
Σ_2	
7.60814	2.79271
2.79271	1.87219

在只有300个数据点的情况下，所有参数的估计差距均很大。

Bayesian Estimation

问题描述：给定了一个具有类别的数据集，估计产生它的高斯分布。

课上介绍了单元高斯分布建模参数，并学习μ的过程。

但是数据集产生分布中的Σ并没有进行学习。

而且这道题中要求进行二维高斯分布建模。

多元BE理论基础

我们的目的是得到参数的后验概率。

$P(\theta|\mathcal{D}) = \alpha \Pi_k P(x_k|\theta) p(\theta)$.

其中$P(x|\theta) \sim \mathcal{N}(x;\mu,\Sigma)$。

$p(\theta)$是一个先验假设，此处我们不知道任何情况，它是一个具有0均值和$+oo$方差的正态分布函数，$p(\theta_i) \sim \mathcal{N}(\theta_i; m_i, s_i^2)$，$m_i = 0$，$s_i = +oo$。

所以$P(\theta|\mathcal{D}) = \left[\alpha \Pi_k \mathcal{N}(x_k;\mu,\Sigma)\right] \left[\Pi_i \mathcal{N}(\theta_i; m_i, s_i^2)\right] = \left[\alpha \Pi_k \mathcal{N}(x_k;\mu,\Sigma)\right] \left[\mathcal{N}(\theta_i; Mm_i, Ms_i^2)\right]$.

其中M是参数的个数。因为参数的分布假设成一样的了。

对于前一项：$\Pi_k \mathcal{N}(x_k;\mu,\Sigma) = \Pi_k \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d|\Sigma|}} e^{-\frac{1}{2}(x_k-\mu)^T\Sigma^{-1}(x_k-\mu)} = (\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d|\Sigma|}})^N e^{-\frac{1}{2}\sum_k (x_k-\mu)^T\Sigma^{-1}(x_k-\mu)}$

我们需要化简指数项：
$\sum_k (x_k-\mu)^T\Sigma^{-1}(x_k-\mu) = \sum_k x_k^T\Sigma^{-1}x_k - x_k^T\Sigma^{-1}\mu - \mu^T\Sigma^{-1}x_k + \mu^T\Sigma^{-1}\mu = \sum_k \left[x_k^T\Sigma^{-1}x_k - 2x_k^T\Sigma^{-1}\mu\right] + N\mu^T\Sigma^{-1}\mu$

首先我们以μ为主元进行整理：

$\sum_k (x_k-\mu)^T\Sigma^{-1}(x_k-\mu) = N\mu^T\Sigma^{-1}\mu - 2(\sum_k x_k^T)\Sigma^{-1}\mu + \sum_k x_k^T\Sigma^{-1}x_k = (\mu - \frac{1}{N}\sum_k x_k)^T N\Sigma^{-1}(\mu - \frac{1}{N}\sum_k x_k) - \frac{1}{N}(\sum_k x_k$

所以：

$P(\mu|\mathcal{D}) = \alpha' p(\theta) e^{-\frac{1}{2}(\mu-\frac{1}{N}\sum_k x_k)^T N\Sigma^{-1}(\mu-\frac{1}{N}\sum_k x_k)} = \alpha' p(\theta)\mathcal{N}(\frac{1}{N}\sum_k x_k, N\Sigma^{-1}) = \alpha' \mathcal{N}(\theta_i; Mm_i, Ms_i^2)\mathcal{N}(\frac{1}{N}\sum_k x_k, N\Sigma^{-1}) = \alpha'$

然后我们对Σ为主元进行整理。

设$(\Sigma^{-1})_{ij} = b_{ij}$，同理设$(x_k)_i = x_{ki}$，再令$\sum_k x_k = c$

$$\sum_k (x_k-\mu)^T\Sigma^{-1}(x_k-\mu) = \sum_k\sum_j\sum_i (x_{ki}-\mu_i)b_{ij}(x_{kj}-\mu_j) = \sum_k\sum_j\sum_i b_{ij}(x_{ki}x_{kj} - x_{ki}\mu_j - x_{kj}\mu_i + \mu_i\mu_j) = \sum_{ij} b_{ij}(\sum_k x_k$$

$\sum_k x_{ki}x_{kj} = (X^TX)_{ij}$,

$c_i\mu_j = (c\mu^T)_{ij}, c_j\mu_i = (c\mu^T)_{ji}$,

$\mu_i\mu_j = (\mu\mu^T)_{ij}$

所以:

$$\sum_k (x_k-\mu)^T\Sigma^{-1}(x_k-\mu) = \sum_{ij} b_{ij}(X^TX + N\mu\mu^T - c\mu^T - \mu c^T)_{ij} = \sum_{ij} b_{ij}(X^TX + N\mu\mu^T - c\mu^T - \mu c^T + cc^T - cc^T)_{ij} = \sum$$

将$\sum_{ij}$从指数项目上拆解下来，可以化成:

$$P(\Sigma) = \alpha''\Pi_{ij}e^{-\frac{1}{2}\Sigma_{ij}^{-1}(X^TX - cc^T + \frac{1}{N}(N\mu - c)(N\mu - c)^T)_{ij}}$$

实验结果

参数估计结果（a)

μ	x	y
μ_1	0.94192	1.03805
μ_2	7.00880	6.92195
μ_3	15.05649	1.01704

Σ_0	
11.83856	-0.33173
-0.33173	0.99943
Σ_1	
7.73065	3.08681
3.08681	2.12755
Σ_2	
1.83321	-0.11916
-0.11916	1.97818

参数估计结果(b)

μ	x	y
μ_1	0.94192	1.03805
μ_2	7.00880	6.92195
μ_3	15.05649	1.01704

Σ_0	
11.83856	-0.33173
-0.33173	0.99943
Σ_1	
7.73065	3.08681
3.08681	2.12755
Σ_2	
1.83321	-0.11916
-0.11916	1.97818

参数估计结果(c)

μ	x	y
μ_1	1.08155	1.00883
μ_2	7.21747	7.19486
μ_3	14.96565	1.21260

Σ_0	
12.15760	-0.11317
-0.11317	0.97244
Σ_1	
8.02456	3.13810
3.13810	1.99747
Σ_2	
1.89756	0.04821
0.04821	1.80511

实验结果对比

BE在大、小数据量上表现都不错，但是它是一个有监督的方法。

MLE在大数据集上表现不错，在小数据集上误差较大，其优点在于是基本无监督的，只用设置一个类的数量，和KNN是类似的。

运行代码

有可能因为初始化太过极端，造成计算溢出（inf），此时重新运行一遍，问题一般就没有了。

运行命令：

python hw3.py