

机器学习导论-高斯混合模型

Introduction to Machine Learning-GMM

李文斌

<https://cs.nju.edu.cn/liwenbin>

liwenbin@nju.edu.cn

2024年04月30日

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

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

□ 符号和术语

\mathbf{A}	Matrix
\mathbf{A}_{ij}	Matrix indexed for some purpose
\mathbf{A}_i	Matrix indexed for some purpose
\mathbf{A}^{ij}	Matrix indexed for some purpose
\mathbf{A}^n	Matrix indexed for some purpose or The n.th power of a square matrix
\mathbf{A}^{-1}	The inverse matrix of the matrix \mathbf{A}
\mathbf{A}^+	The pseudo inverse matrix of the matrix \mathbf{A} (see Sec. 3.6)
$\mathbf{A}^{1/2}$	The square root of a matrix (if unique), not elementwise
$(\mathbf{A})_{ij}$	The (i, j) .th entry of the matrix \mathbf{A}
A_{ij}	The (i, j) .th entry of the matrix \mathbf{A}
$[\mathbf{A}]_{ij}$	The ij -submatrix, i.e. \mathbf{A} with i.th row and j.th column deleted
\mathbf{a}	Vector (column-vector)
\mathbf{a}_i	Vector indexed for some purpose
a_i	The i.th element of the vector \mathbf{a}
a	Scalar

相关概念

□ 符号和术语

$\det(\mathbf{A})$	Determinant of \mathbf{A}
$\text{Tr}(\mathbf{A})$	Trace of the matrix \mathbf{A}
$\text{diag}(\mathbf{A})$	Diagonal matrix of the matrix \mathbf{A} , i.e. $(\text{diag}(\mathbf{A}))_{ij} = \delta_{ij}A_{ij}$
$\text{eig}(\mathbf{A})$	Eigenvalues of the matrix \mathbf{A}
$\text{vec}(\mathbf{A})$	The vector-version of the matrix \mathbf{A} (see Sec. 10.2.2)
\sup	Supremum of a set
$\ \mathbf{A}\ $	Matrix norm (subscript if any denotes what norm)
\mathbf{A}^T	Transposed matrix
\mathbf{A}^{-T}	The inverse of the transposed and vice versa, $\mathbf{A}^{-T} = (\mathbf{A}^{-1})^T = (\mathbf{A}^T)^{-1}$
\mathbf{A}^*	Complex conjugated matrix
\mathbf{A}^H	Transposed and complex conjugated matrix (Hermitian)
$\mathbf{A} \circ \mathbf{B}$	Hadamard (elementwise) product
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	Kronecker product
$\mathbf{0}$	The null matrix. Zero in all entries.
\mathbf{I}	The identity matrix
\mathbf{J}^{ij}	The single-entry matrix, 1 at (i, j) and zero elsewhere
Σ	A positive definite matrix
Λ	A diagonal matrix

相关概念

□ 一个带约束的数学优化问题

$$\begin{array}{ll}\text{minimize} & f_0(x) \\ \text{subject to} & f_i(x) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m.\end{array}$$

- 优化变量: $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$
- 目标函数: $f_0: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$
- 约束函数: $f_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, i = 1, \dots, m$
- 最优解 : $\mathbf{x}^* = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$

相关概念

□ 一个不带约束的数学优化问题

□ 最小二乘 (least-norm-squared) 问题

$$\text{minimize } f_0(x) = \|Ax - b\|_2^2 = \sum_{i=1}^k (a_i^T x - b_i)^2$$

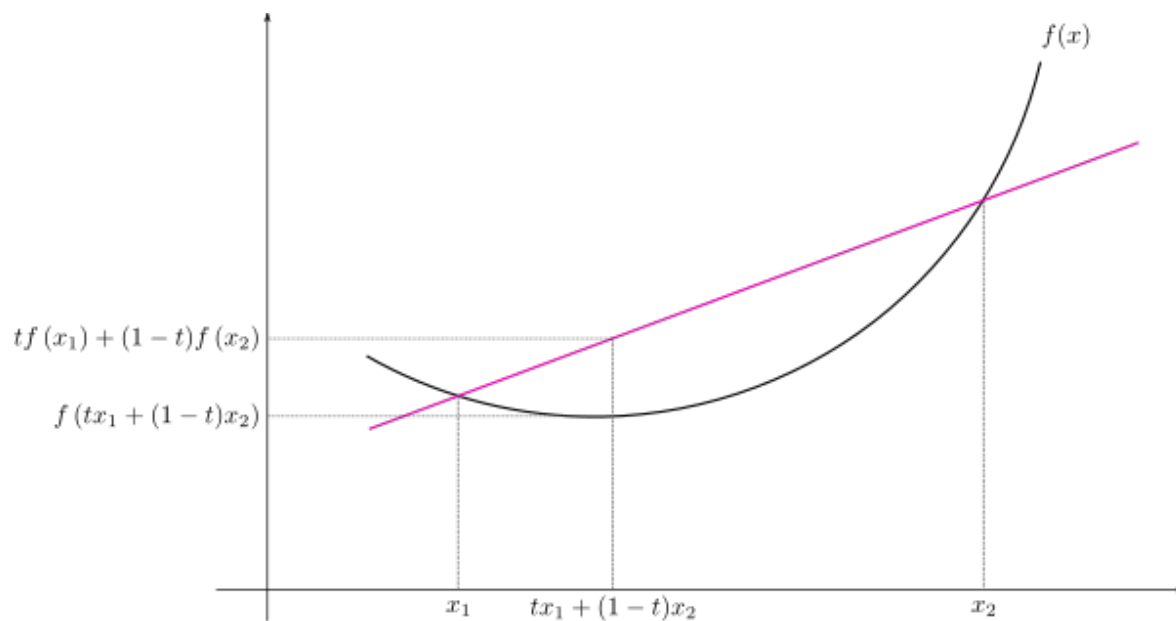
- 优化变量: $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$
- 系数矩阵: $A \in \mathbb{R}^{k \times n}$
- A 的第 i 行: $a_i^T \in \mathbb{R}^{1 \times n}$
- 最优解: $x^* = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$

相关概念

□ 凸函数

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

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

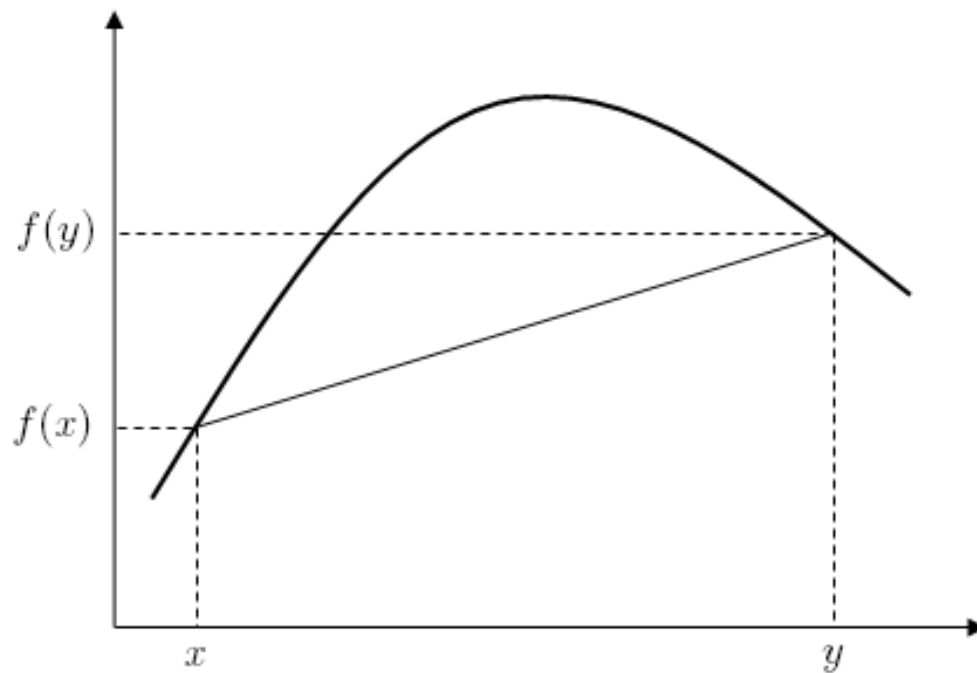


相关概念

□ 凹函数

X 是一个凸集合, $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ 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

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

如果二阶导数 $f''(x) \geq 0$

$f(x)$ 是凸函数

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

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

$f(x)$ 是凸函数

相关概念

□ 判断函数的凹凸

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

如果二阶导数 $f''(x) \leq 0$

$f(x)$ 是凹函数

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

如果Hessian矩阵是非半正定的, 即 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \not\leq 0$

$f(x)$ 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.* $f(x) = \max\{x_1, \dots, x_n\}$ is convex on \mathbf{R}^n .
 - *Geometric mean.* The geometric mean $f(x) = (\prod_{i=1}^n x_i)^{1/n}$ is concave on $\text{dom } f = \mathbf{R}_{++}^n$.
 - *Log-determinant.* The function $f(X) = \log \det X$ is concave on $\text{dom } f = \mathbf{S}_{++}^n$.
- \mathbf{R} 实数; \mathbf{R}_+ 非负实数; \mathbf{R}_{++} 正实数; \mathbf{R}^n 表示 n 维向量空间
 - \mathbf{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.

Kaare Brandt Petersen Michael Syskind Pedersen. *The Matrix Cookbook*. Technical University of Denmark. 2012

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 S_X 表示，如果 $\sum_{x \in S_X} |g(x)|p_X(x) < \infty$ ，那么 Y 的期望存在且为

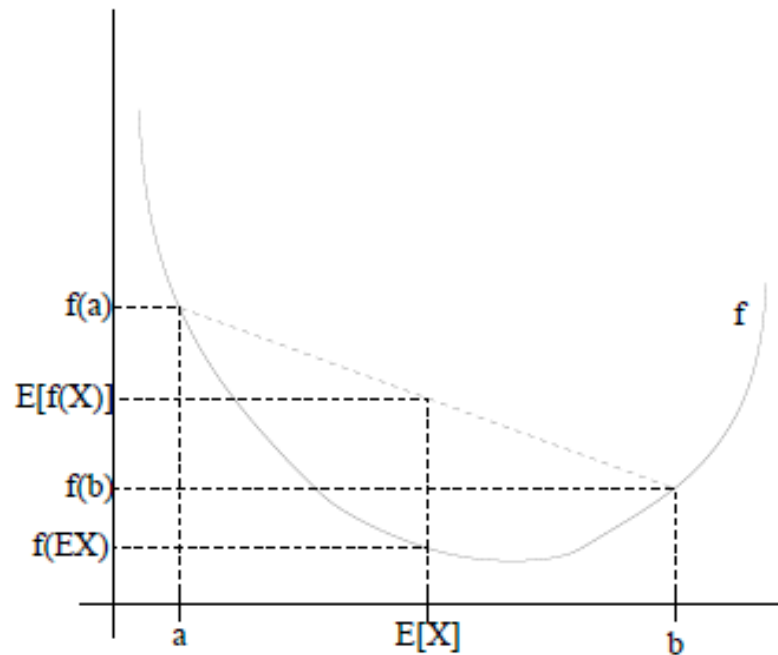
$$E(Y) = \sum_{x \in S_X} g(x)p_X(x)$$

- 概率密度函数：Probability density function (PDF)
- 概率质量函数：Probability mass function (PMF)

相关概念

□ Jensen's inequality

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



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)

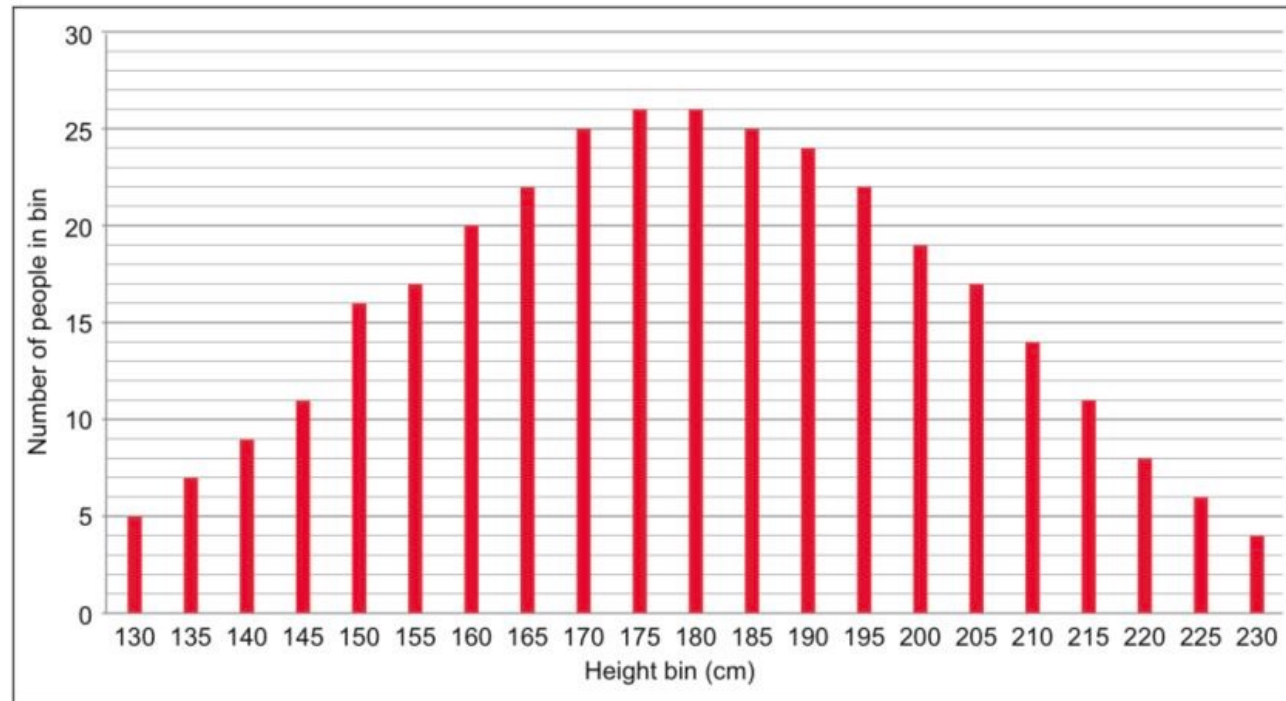


Figure 2.9 Histogram of a normal distribution, in this case the height of 334 fictitious people. The modal (most frequently occurring) bin is centered at 180 cm.

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
- ✓ 正态分布也是机器学习，统计模式识别和计算机视觉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)

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

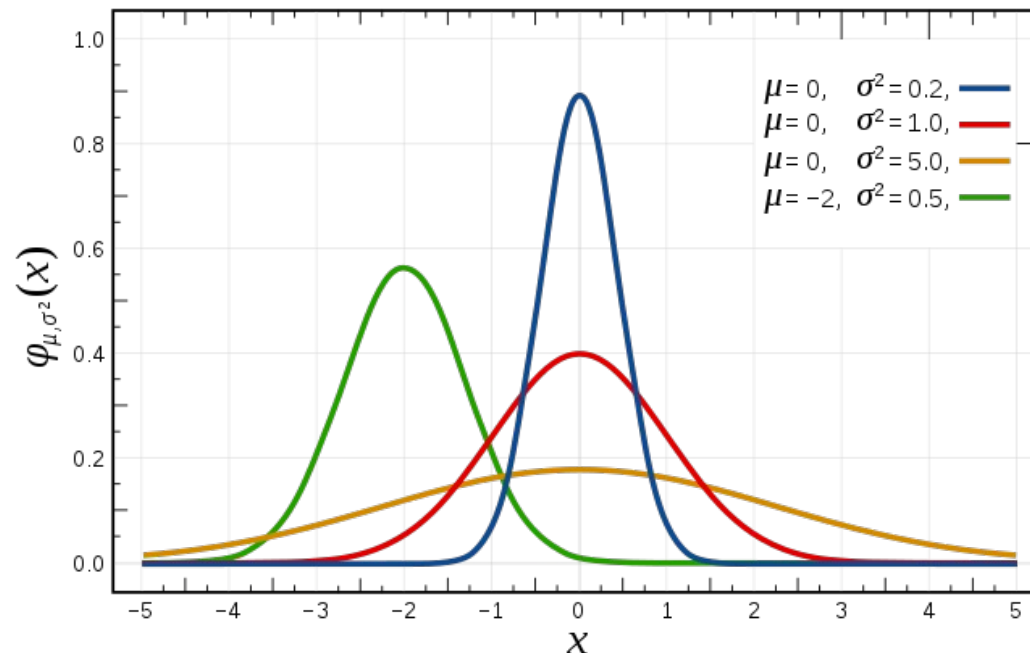
- μ 为随机变量 X 的均值，决定了分布的位置
- σ 为随机变量 X 的标准差，决定了分布的幅度

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)

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

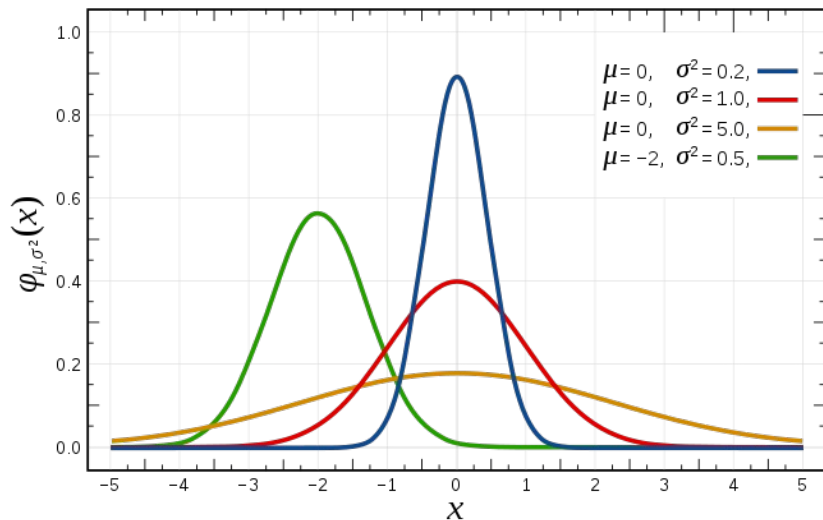


相关概念

□ 单变量高斯分布/正态分布

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

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



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

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

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 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ 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)

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

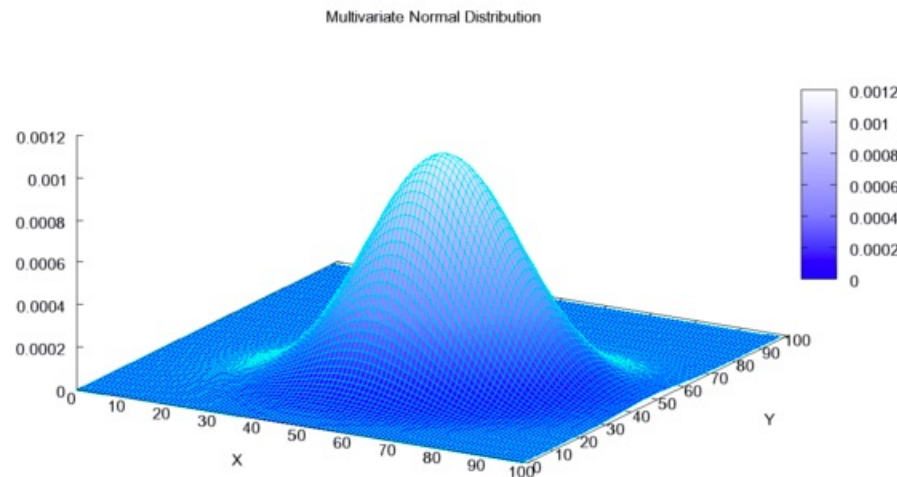
- $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ 为随机变量 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ 的均值向量
- $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ 为随机变量 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ 的协方差矩阵

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)

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



2变量的正态分布

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 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$ 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)

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

马氏距离的平方 计算了 \mathbf{x} 和 $\boldsymbol{\mu}$ 之间的距离

○ $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ 为随机变量 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ 的均值向量

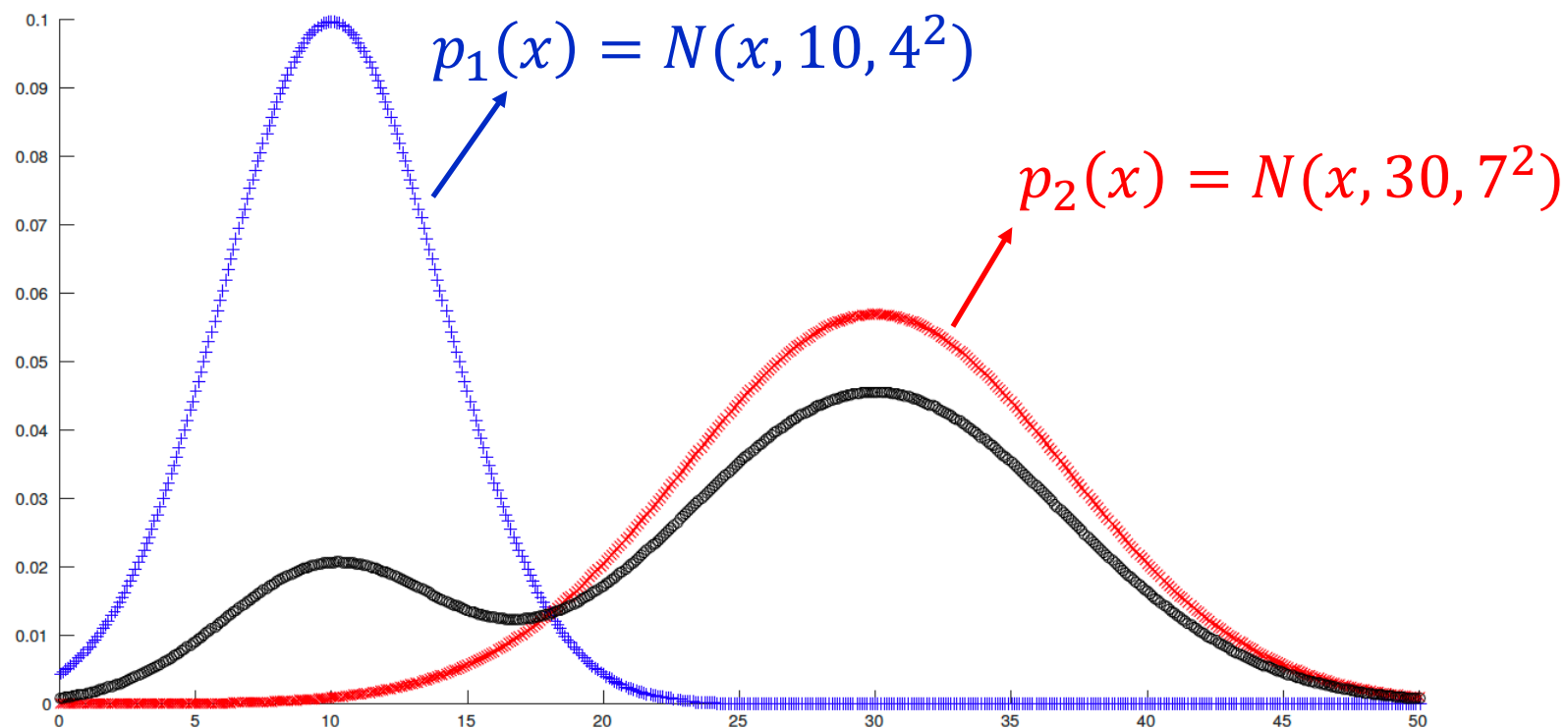
○ $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ 为随机变量 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ 的协方差矩阵

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

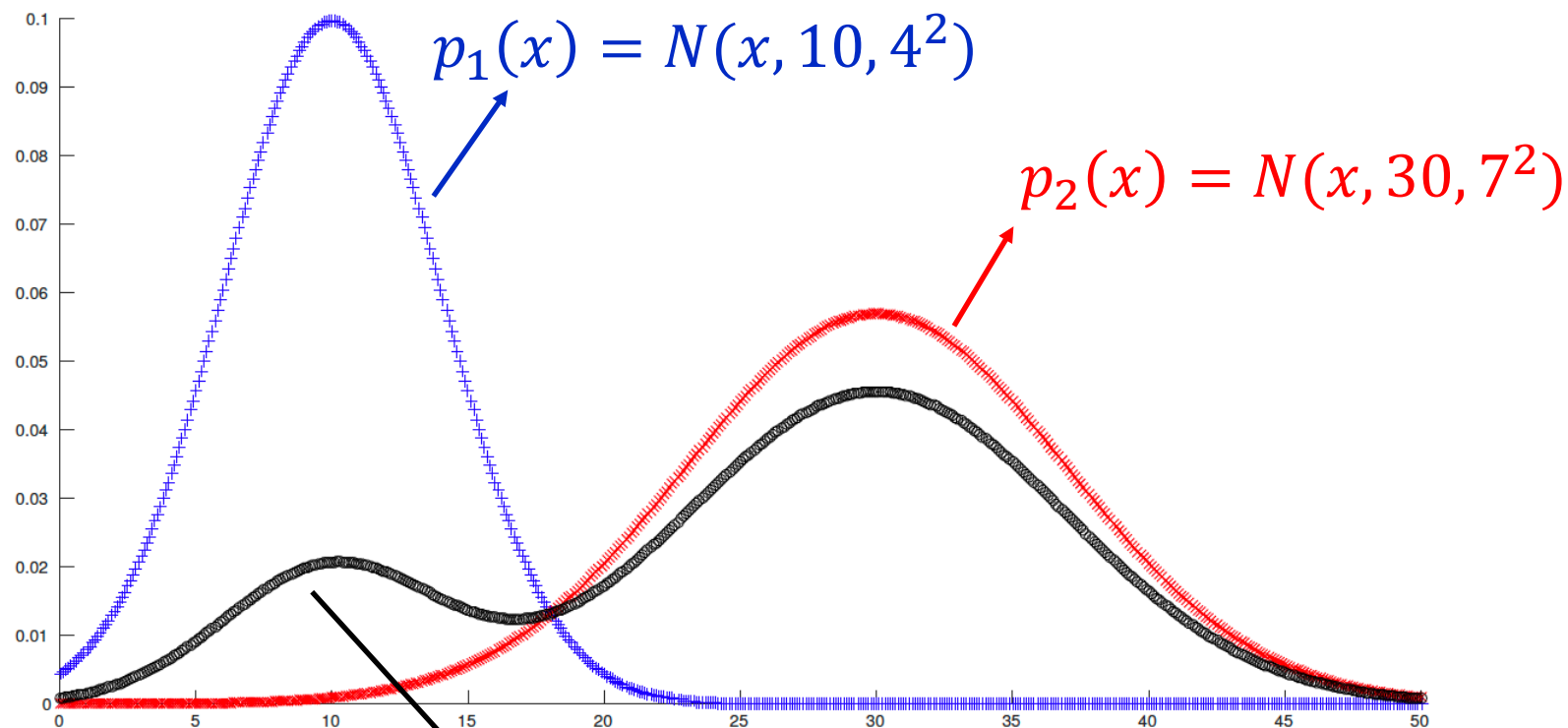
高斯混合模型

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



高斯混合模型

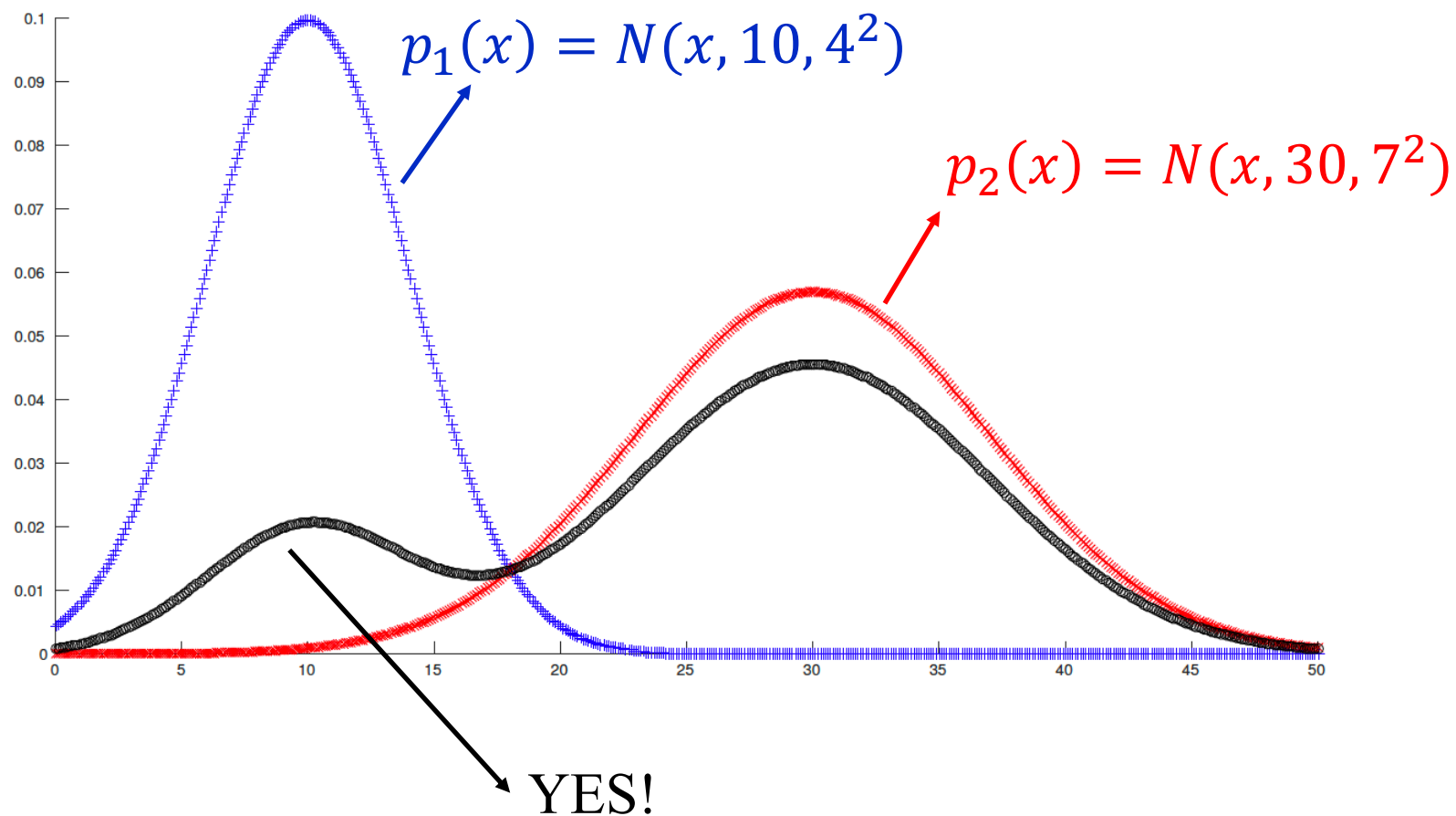
□ 高斯混合模型 (Gaussian Mixture Model, GMM)



也是一个概率密度函数PDF?

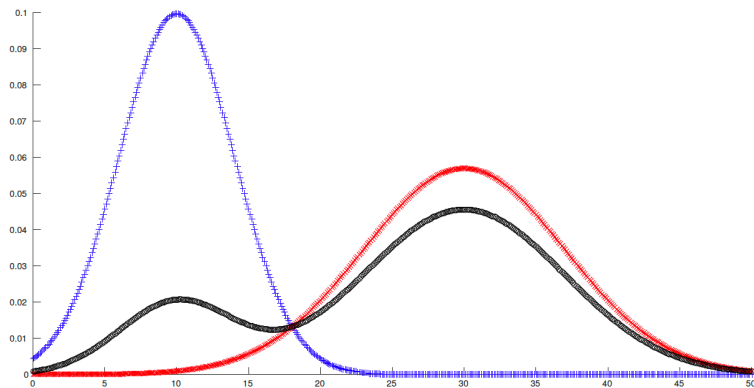
高斯混合模型

□ 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)

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

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

高斯混合模型

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

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



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

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

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 $Z \in \{1, 2, \dots, N\}$ 符合离散多项分布

○ Z 取值为 i 的概率为:

$$Pr(Z = i) = \alpha_i$$

✓ Two-step sampling, 从GMM里采样一个样本 x

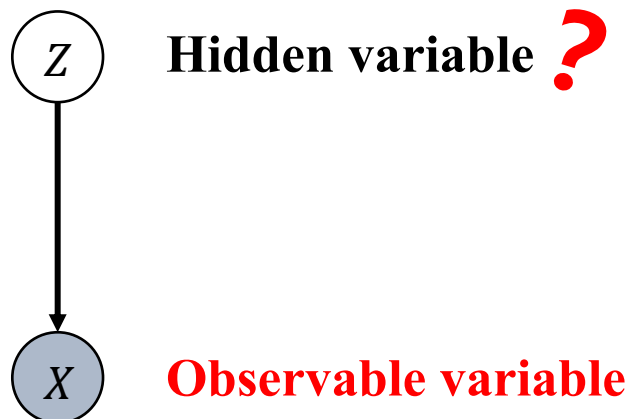
○ 从 Z 中采样, 得到一个值 i , 其中 $(1 \leq i \leq N)$

○ 从第 i 个高斯分布 $N(\mu_i, \Sigma_i)$ 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



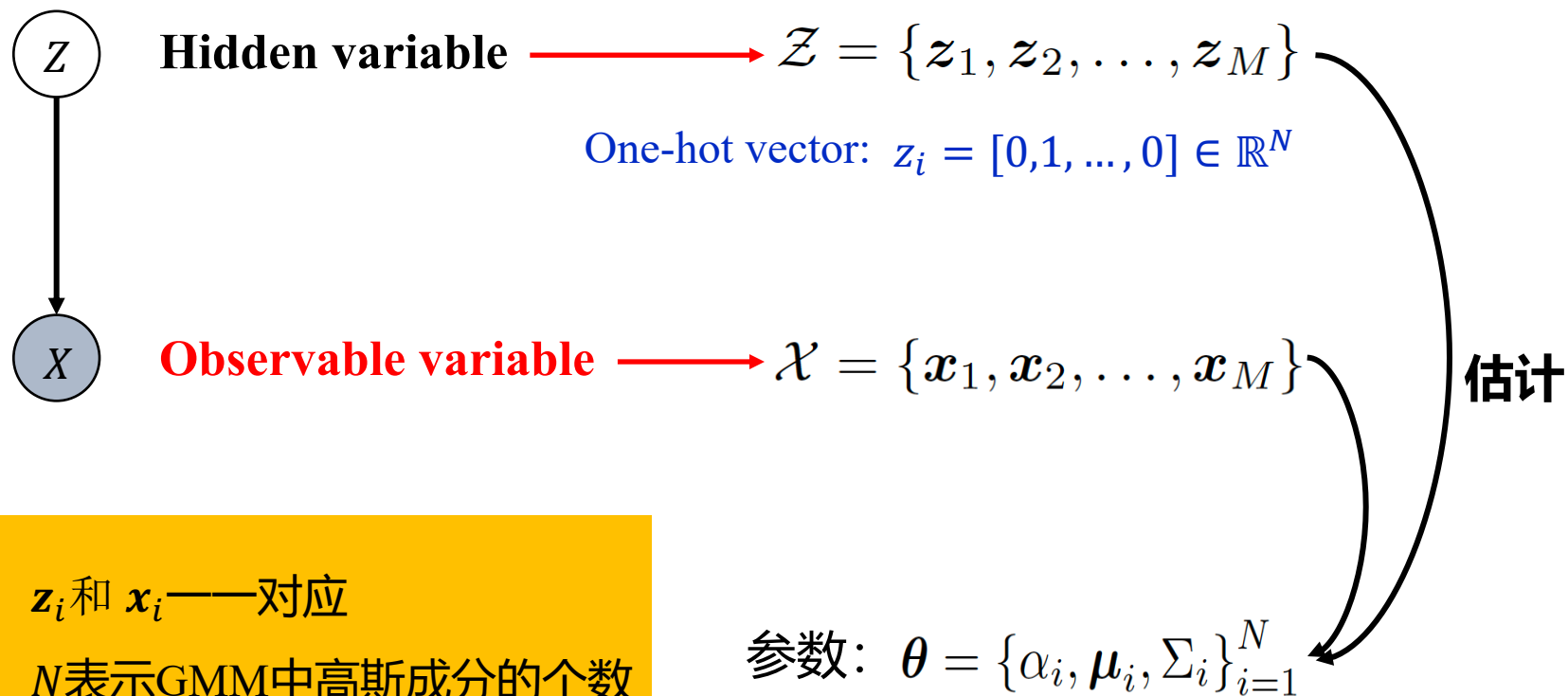
✓ Two-step sampling, 从GMM里采样一个样本 x

- 从 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 $N(\mu_i, \Sigma_i)$ 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



- z_i 和 x_i 一一对应
- N 表示GMM中高斯成分的个数

高斯混合模型

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

✓ 假设一个特殊情形: z 已知

z_i 和 x_i 一一对应, 如何估计参数 θ ?

高斯混合模型

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

✓ 假设一个特殊情形: z 已知

z_i 和 x_i 一一对应, 如何估计参数 θ ?

- 第一步: 找到所有从第 i 个高斯分量得到的采样, 构成子集 \mathcal{X}_i

$$\mathcal{X}_i = \{x_j | z_j = i, 1 \leq j \leq M\}$$

高斯混合模型

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

✓ 假设一个特殊情形: z 已知

z_i 和 x_i 一一对应, 如何估计参数 θ ?

- 第一步: 找到所有从第 i 个高斯分量得到的采样, 构成子集 \mathcal{X}_i

$$\mathcal{X}_i = \{\mathbf{x}_j | z_j = i, 1 \leq j \leq M\}$$

- 第二步: 统计和计算每个高斯分量的参数

$$\hat{\alpha}_i = \frac{m_i}{\sum_{j=1}^N m_j} = \frac{|\mathcal{X}_i|}{M}$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} \mathbf{x}$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_i = \frac{1}{m_i} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}_i} (\mathbf{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)(\mathbf{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_i)^T$$

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（单变量）**：

似然函数 (Likelihood function)：

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

- θ 固定（数据分布假设固定）， $p(X|\theta)$ 看作是 X 的函数，即为概率函数
- X 固定（观测数据固定）， $\mathcal{L}(\theta|X)$ 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 (单变量) :

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

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

假设数据点i.i.d

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

乘积很小



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

对数似然函数

最大似然估计

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

✓ 单高斯模型为例 (单变量) :

最大似然估计MLE:

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



最大对数似然估计MLE:

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \ln \mathcal{L}(\theta|X) \\ &= \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \sum_{j=1}^M \ln p(x_j|\theta)\end{aligned}$$

求解:

- 求导, 令导数为0
- 求解方程, 得到最优 θ^*

$$\theta = (\mu, \sigma^2)$$

$$\theta^* = (\mu^*, \sigma^{*2})$$

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:

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

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

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

$$= \sum_X \ln \sum_Z p(X, Z|\theta)$$

$$Pr(Z = i) = \alpha_i$$

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

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)

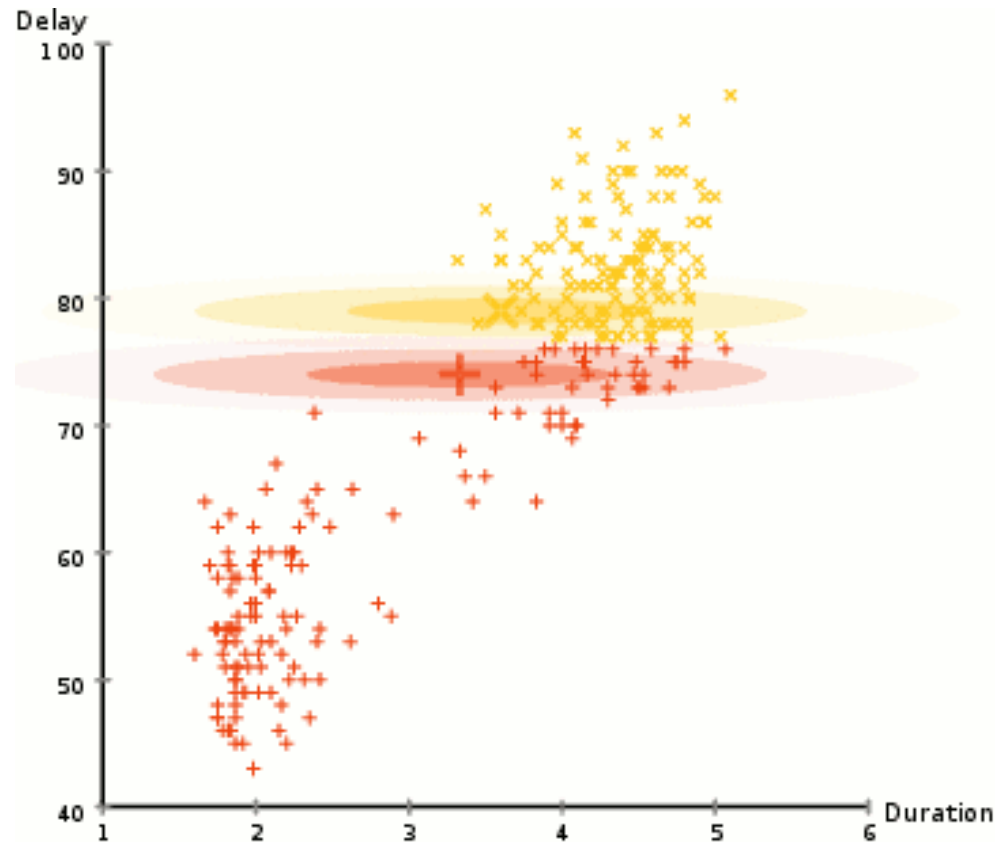
✓ 核心思想:

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计算第二个参数；
- 接着通过固定第二个参数，再使用MLE估测第一个参数，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)

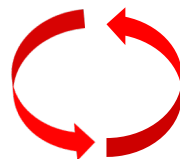


Wiki: EM clustering of Old Faithful eruption data

期望最大化(EM)算法

□ EM算法 (Expectation-Maximization algorithm)

E-Step: 利用可观测数据 x 和当前估计的参数为 $\theta^{(t)}$, 估计更好的隐藏变量 z



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

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 z 的分布 $Q(z|\theta)$ 是一个任意的离散分布

满足:
$$\sum_z Q(z|\theta) = 1, Q(z|\theta) \geq 0$$

- ✓ 高斯混合模型:

$$\begin{aligned}\ell(\theta) &= \ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_X \ln \sum_Z p(X, Z|\theta) \\ &= \sum_X \ln \sum_Z Q(Z|\theta) \frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} \\ &= \sum_X \ln E_Q \left[\frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} \right]\end{aligned}$$

定理1：令 X 表示一个随机变量，存在某个函数 g 使得 $Y = g(X)$

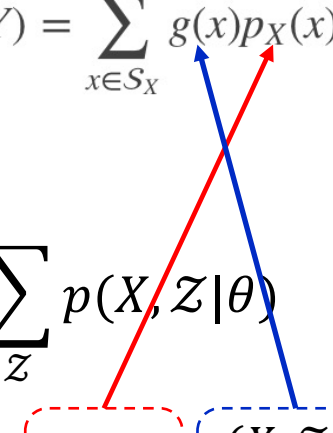
1. 假设 X 是连续的，pdf为 $f_X(x)$ 。如果 $\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|f_X(x)dx < \infty$ ，那么 Y 的期望存在且为

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

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

$$E(Y) = \sum_{x \in S_X} g(x)p_X(x)$$

✓ **高斯混合模型：**

$$\begin{aligned}\ell(\theta) &= \ln \mathcal{L}(\theta|X) = \sum_X \ln \sum_Z p(X, Z|\theta) \\ &= \sum_X \ln \sum_Z \underbrace{Q(Z|\theta)}_{\text{red dashed box}} \underbrace{\frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)}}_{\text{blue dashed box}} \\ &= \sum_X \ln E_Q \left[\frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} \right]\end{aligned}$$


期望最大化(EM)算法

□ EM优化分析

✓ 高斯混合模型:

$$\begin{aligned}\ell(\theta) = \ln \mathcal{L}(\theta|X) &= \sum_X \ln \sum_Z p(X, Z|\theta) \\ &= \sum_X \ln \sum_Z Q(Z|\theta) \frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)}\end{aligned}$$

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

$$\geq \sum_X E_Q \left[\ln \frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} \right]$$

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

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

$$E[\ln g(Z)] = \sum_Z p(Z) \ln g(Z)$$

期望最大化(EM)算法

□ EM优化分析

✓ 高斯混合模型:

$$\ell(\theta) \geq \sum_X \sum_Z Q(Z|\theta) \ln \frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} \quad \text{下界?}$$

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:

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

期望最大化(EM)算法

□ EM优化分析

✓ 高斯混合模型:

$$\ell(\theta) \geq \sum_X \sum_Z Q(Z|\theta) \ln \frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} \quad \text{下界?}$$

上式取等号, 即

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

$$\begin{aligned} Q(Z|\theta) &= \frac{p(X, Z|\theta)}{c} = \frac{p(X, Z|\theta)}{c \cdot \sum_Z Q(Z|\theta)} \longrightarrow \sum_Z Q(Z|\theta) = 1 \\ &= \frac{p(X, Z|\theta)}{\sum_Z c \cdot Q(Z|\theta)} = \frac{p(X, Z|\theta)}{\sum_Z p(X, Z|\theta)} \longrightarrow \frac{p(X, Z|\theta)}{Q(Z|\theta)} = c \\ &= \frac{p(X, Z|\theta)}{p(X|\theta)} = p(Z|X, \theta) \longrightarrow \text{固定}\theta, \text{即为}Z\text{的后验概率} \end{aligned}$$

期望最大化(EM)算法

□ EM优化分析

✓ 高斯混合模型:

$$\ell(\theta) = \sum_X \sum_Z p(Z|X, \theta) \ln \frac{p(X, Z|\theta)}{p(Z|X, \theta)} \quad \text{下界}$$

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

✓ 然后继续优化这个下界

$$\begin{aligned} \theta^* &= \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \ell(\theta) \\ &= \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \sum_X \sum_Z p(Z|X, \theta) \ln \frac{p(X, Z|\theta)}{p(Z|X, \theta)} \rightarrow \text{M-Step} \end{aligned}$$

期望最大化(EM)算法

□ 算法流程

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

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

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

M-Step: 在上述 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 $\theta^{(t+1)}$

$$\theta^{(t+1)} = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \sum_X \sum_Z Q^t \ln \frac{p(X, Z|\theta)}{Q^t}$$

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:

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

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 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 $\theta^{(t+1)}$:

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

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

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

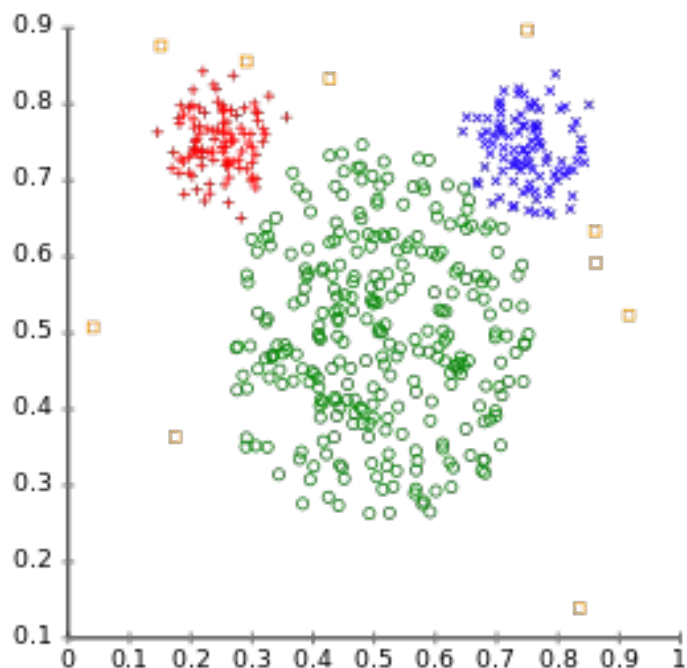
$$\alpha_i = \frac{\sum_{j=1}^M \gamma_{ij}}{M} = \frac{m_i}{M}$$

期望最大化(EM)算法

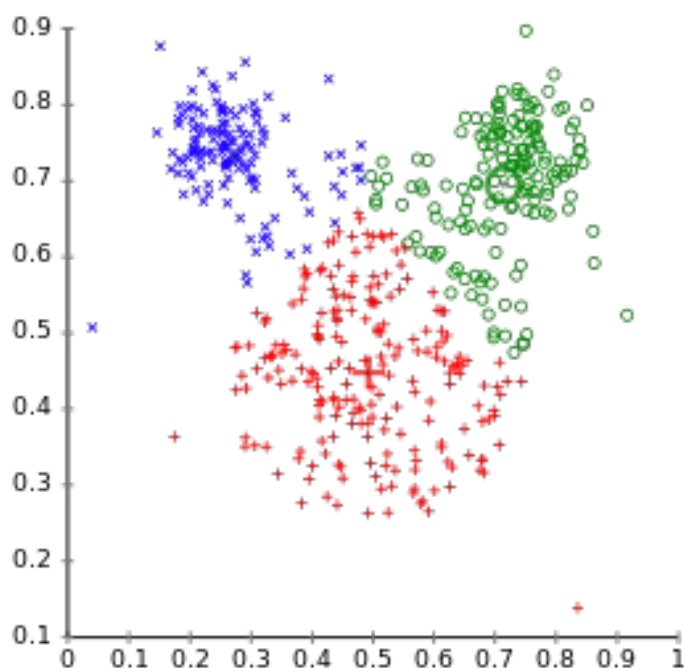
□ 应用

Different cluster analysis results on "mouse" data set:

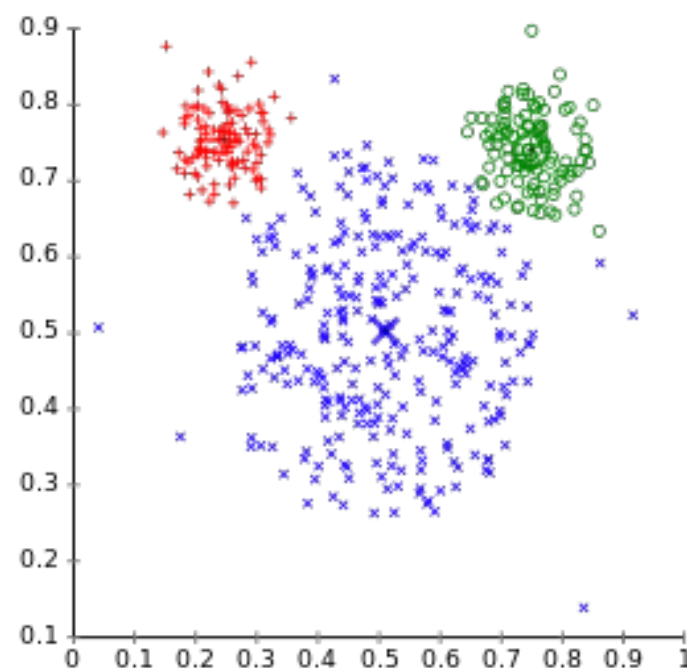
Original Data



k-Means Clustering

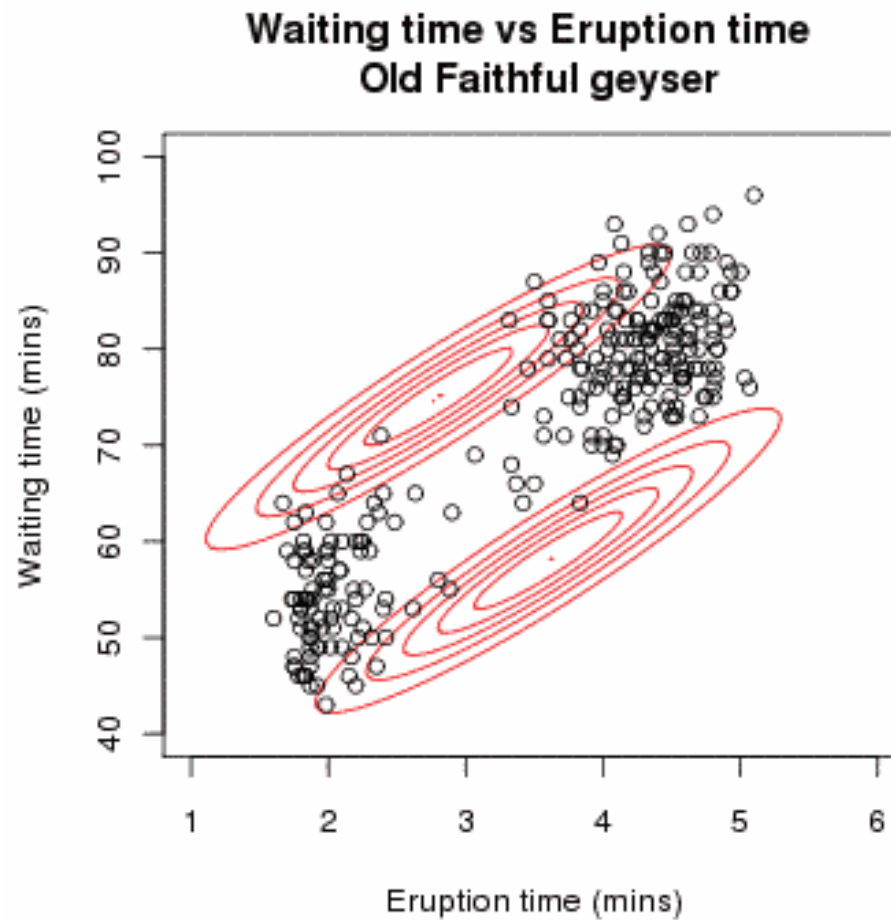


EM Clustering



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

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：

$$J = \sum_{j=1}^c \sum_{x \in S_j} \|x - m_j\|^2$$

- 样本 x_i 是可观测量 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 μ_1, \dots, μ_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), 将样本点分给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

谢谢!

联系方式: liwenbin@nju.edu.cn

更多信息: <https://cs.nju.edu.cn/liwenbin>