







# EM算法简介



- •期望最大化(Expectation Maximization)算法。
  - 迭代算法, 在概率模型中寻找参数极大似然估计的算法,
  - 概率模型依赖于无法观测的隐含变量。
  - 主要用于从含有隐含变量的数据中计算极大似然估计,是解决存在隐含变量优化问题的有效方法。



### 回顾



#### • 极大似然估计

似然函数
$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i; \theta)$$
是

参数 $\theta$ 的函数。显然随着 $\theta$ 在参数空间  $\Theta$ 的变化,似然函数的值也要发生变化。 
而极大似然估计的目的就是在样本点  $\{x_1,...x_n\}$ 固定的情况下,寻找最优的 $\theta$  
来极大化似然函数,即

$$\theta^* = \arg\max_{\theta \in \Theta} L(\theta)$$





### 回顾



#### • 极大似然估计

想要求 $\theta^*$ ,只需要使 $\theta$ 的似然函数 $L(\theta)$ 极大化,

极大值对应的 $\theta^*$ 就是我们的估计值。

因 $L(\theta)$ 与 $\ln L(\theta)$ 在同一 $\theta$ 处取到极值,

所以对数化似然函数

$$\ln(L(\theta)) = \sum_{i=1}^{n} \ln p(x_i; \theta)$$

因此 $\theta$ 的极大似然估计 $\theta$ \*也可从下述方程解得:

$$\frac{d}{d\theta}\ln L(\theta) = 0.$$



### 一个例子



•例1-1:考虑投硬币的实验,现在我们有两枚硬币A和B,这两枚硬币和普通的硬币不一样,他们投掷出正面的概率和投掷出反面的概率不一定相同。我们将A和B投掷正面的概率分别设为 $\theta_A$ 和 $\theta_B$ 。独立地做5次试验,随机的从这两枚硬币抽1枚,投掷10次,统计出现正面的概率,得到结果

有完整数据的参数估计

试验代号	投掷的硬币	出现正面的次数
1	В	5
2	A	9
3	A	8
4	В	4
5	A	7

### 一个例子



•例1-2:考虑投硬币的实验,现在我们有两枚硬币A和B,这两枚硬币和普通的硬币不一样,他们投掷出正面的概率和投掷出反面的概率不一定相同。我们将A和B投掷正面的概率分别设为 $\theta_A$ 和 $\theta_B$ 。独立地做5次试验,随机的从这两枚硬币抽1枚,投掷10次,统计出现正面的概率,得到结果

不完整数据的参数估计

试验代号	投掷的硬币	出现正面的次数
1	В	5
2	A	9
3	A	8
4	В	4
5	A	7

### EM算法

$$P(Y|\theta) = \prod_{i=1}^{n} [\pi p^{y_i} (1-p)^{1-y_i} + (1-\pi)q^{y_i} (1-q)^{1-y_i}]$$



• 例2:3枚硬币, A, B, C, 这些硬币出现正面的概率 $\pi$ , p, q。进行如下 掷硬币试验: 先掷A, 如果正面, 选硬币B, 反面选C; 然后投选出来的 硬币, 出现正面记为1, 出现反面记为0; 独立[ 先选择硬币 硬币出现正面的概率

・隐变量: 观测变量 是 隐变量

在硬币下表现 出的正反面

•  $P(y|\theta) = \sum_{z} P(y,z|\theta) = \sum_{z} P(z|\theta) P(y|z,\theta) =$ 

$$\pi p^{y} (1-p)^{1-y} + (1-\pi)q^{y} (1-q)^{1-y}$$

# 最大似然估计—存在隐变量



• 
$$P(Y|\theta) = \prod_{i=1}^{n} [\pi p^{y_i} (1-p)^{1-y_i} + (1-\pi)q^{y_i} (1-q)^{1-y_i}]$$

• 
$$lnP(Y|\theta) = \sum_{i=1}^{n} ln[\pi p^{y_i} (1-p)^{1-y_i} + (1-\pi)q^{y_i} (1-q)^{1-y_i}]$$

• 
$$\frac{\partial lnP(Y|\theta)}{\partial \pi} = \sum_{i=1}^{n} \frac{p^{y_i}(1-p)^{1-y_i}-q^{y_i}(1-q)^{1-y_i}}{\pi p^{y_i}(1-p)^{1-y_i}+(1-\pi)q^{y_i}(1-q)^{1-y_i}}$$



# 最大似然估计—不存在隐变量



• 
$$P(Y|\theta) = [q^{y_1}(1-q)^{1-y_1}][p^{y_2}(1-p)^{1-y_2}]\cdots$$

明确知道仍的 哪个硬币

• 
$$lnP(Y|\theta) = \sum_{i=1}^{n_1} lnp^{y_i} (1-p)^{1-y_i} + \sum_{j=1}^{n_2} lnq^{y_j} (1-q)^{1-y_j}$$

$$\bullet \frac{\partial lnP(Y|\theta)}{\partial p} = \sum_{i=1}^{n_1} \frac{(1-p)^{1-y_j} \cdot y_j \cdot p^{y_j} \cdot p^{-1} + p^{y_j} \cdot (y_j-1) \cdot (1-p)^{1-y_j} \cdot (1-p)^{-1}}{p^{y_j} (1-p)^{1-y_j}}$$

### EM算法



· EM算法包含两步:

• E: 求期望(隐变量的条件概率分布的期望)  $Q(\theta, \theta^i)$ 

• M: 求极大化  $\frac{Q}{\partial \theta} = 0$ 

· (E-step) 如果参数已知,根据训练数据推断出最优隐变量的值

• (M-step) 如果隐变量已知,对参数做极大似然估计

### EM算法过程



- · EM算法包含两步:
  - E-step:  $i e^{i}$  为第i次迭代参数 $\theta$ 的估计值,在第i+1次迭代的E步,计算  $Q(\theta,\theta^{i}) = E_{Z}[\log P(Y,Z|\theta)|Y,\theta^{i}] = \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) \log P(Y,Z|\theta)$
  - M-step: 求使 $Q(\theta, \theta^i)$ 极大化的 $\theta$ ,确定第i+1次迭代的参数的估计值 $\theta^{i+1}$ ,  $\theta^{i+1} = argmax_{\theta}Q(\theta, \theta^i)$



• 
$$L(\theta) = \log P(Y|\theta) = \log \sum_{Z} P(Y,Z|\theta)$$
  
=  $\log \sum_{Z} P(Y|Z,\theta) P(Z|\theta)$ 



• 中心目标: 极大化

$$P(Y|\theta) = \prod_{i=1}^{n} [\pi p^{y_i} (1-p)^{1-y_i} + (1-\pi)q^{y_i} (1-q)^{1-y_i}]$$

$$\theta = (\pi, p, q)$$

- $L(\theta) = log \sum_{Z} P(Y|Z,\theta) P(Z|\theta)$
- 新的 $\theta$ , 希望能使 $L(\theta)$ 增加
  - 在第i次的参数为 $\theta^i$
  - $L(\theta) L(\theta^i) = log \sum_{Z} P(Y|Z,\theta) P(Z|\theta) log P(Y|\theta^i)$
  - =  $log \sum_{Z} P(Z|Y, \theta^{i}) \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^{i})} log P(Y|\theta^{i})$



•  $log \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^{i})}$ 

Jesen不等式:  $\log \sum_{j} \lambda_{j} y_{j} \geq \sum_{j} \lambda_{j} \log y_{j}$ ,  $\sum_{j} \lambda_{j} = 1$ 

•  $\geq \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) log \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^{i})}$ 





- 中心目标: 极大化
  - $L(\theta) = log \sum_{Z} P(Y|Z,\theta) P(Z|\theta)$
- 新的 $\theta$ , 希望能使 $L(\theta)$ 增加
  - 在第i次的参数为 $\theta^i$
  - $L(\theta) L(\theta^i) = log \sum_{Z} P(Y|Z,\theta) P(Z|\theta) log P(Y|\theta^i)$
  - =  $log \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^{i})} log P(Y|\theta^{i})$
  - $\geq \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) log \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^{i})P(Y|\theta^{i})}$

 $L(\theta) \geq B(\theta, \theta^i)$ 



- $L(\theta) \geq B(\theta, \theta^i)$
- $B(\theta, \theta^i)$ 是一个下界
- 如果使 $B(\theta, \theta^i)$ 增大的 $\theta$ , 也可以使 $L(\theta)$ 增大
- 为了使 $L(\theta)$ 尽可能增大,有 $\theta^{i+1} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} B(\theta, \theta^i)$ 
  - $\underset{\theta}{\operatorname{argmax}} L(\theta^{i}) + \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) log \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^{i})P(Y|\theta^{i})}$



• 
$$\operatorname{argmax} L(\theta^i) + \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^i) log \frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y,\theta^i)P(Y|\theta^i)}$$

• = 
$$\underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{\mathbf{Z}} P(\mathbf{Z}|\mathbf{Y}, \boldsymbol{\theta}^i) \log P(\mathbf{Y}|\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta}) P(\mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta})$$

• = 
$$\underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{Z} P(Z|Y, \theta^{i}) \log_{\theta} P(Y, Z|\theta)$$

$$Q(\theta, \theta^{i}) = E_{Z}[\log P(Y, Z|\theta) | Y, \theta^{i}]$$

$$= \sum_{Z} \log P(Y, Z|\theta) P(Z|Y, \theta^{i})$$

### EM算法



#### · EM算法包含两步:

• E-step:  $i e^{i}$  为第i次迭代参数 $\theta$ 的估计值,在第i+1次迭代的E步,计算  $Q(\theta,\theta^{i}) = E_{Z}[\log P(Y,Z|\theta) | Y,\theta^{i}] = \sum_{Z} P(Z|Y,\theta^{i}) \log P(Y,Z|\theta)$ 

• M-step: 求使 $Q(\theta, \theta^i)$ 极大化的 $\theta$ 

$$\theta = \operatorname*{argmax}_{\theta} Q(\theta, \theta^{i})$$

给定当前观测变量和参数 $\theta^i$ , Z的条件概率分布

# EM算法



#### • 说明:

- 对初值敏感
- 局部极值
- 停止迭代条件
  - $\| heta^{i+1} heta^i\| < arepsilon$
  - $\|Q(\theta^{i+1}, \theta^i) Q(\theta^i, \theta^i)\| < \varepsilon$



# $P(\text{事件}A|观测y_j) = \frac{P(观测y_j|\text{事件}A)P(事件A)}{P(观测y_j)}$



• 例2:3枚硬币, A, B, C, 这些硬币出现正面的概率 π, p, q 。进行如下掷硬币试验: 先掷A, 如果正面, 选硬币B, 反面选C; 然后投选出来的硬币, 出现正面记为1, 出现反面记为0; 独立反复做n次试验, 求三枚硬币出现正面的概率

· 隐变量:投掷的是B还是C

K表示第几轮参数值

硬币来自B的概率

硬币来自B**,** 观测*y<sub>i</sub>*的概率

• 硬币来自B:  $\mu_j^k = P(Z = B|Y, \theta^{k-1})$ 

• 硬币来自C: 1 - μ<sub>i</sub><sup>k</sup>

常数

 $\frac{\pi^{k-1}(p^{k-1})^{y_j}(1-p^{k-1})^{1-y_j}}{\pi^{k-1}(p^{k-1})^{y_j}(1-p^{k-1})^{1-y_j}+(1-\pi^{k-1})(q^{k-1})^{y_j}(1-q^{k-1})^{1-y_j}}$ 



- $Q(\theta, \theta^i) = \sum_{Z} P(Z|Y, \theta^k) \log P(Y, Z|\theta)$
- =  $\sum_{\mathbf{Z}} P(\mathbf{Z}|\mathbf{Y}, \boldsymbol{\theta}^k) \log P(\mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}) P(\mathbf{Y}|\mathbf{Z}, \boldsymbol{\theta})$
- $\Sigma_z$ 包含了两种情况(来自B硬币or来自C硬币)
- 最大化: 对参数求导



$$\cdot \sum_{j=1}^{N} \left\{ \mu_{j}^{k} \log \left[ \pi p^{y_{j}} (1-p)^{1-y_{j}} \right] + \left( 1 - \mu_{j}^{k} \right) \log \left[ (1-\pi) q^{y_{j}} (1-q)^{1-y_{j}} \right] \right\}$$

$$\cdot \sum_{j=1}^{N} \{ \mu_{j}^{k} \log \left[ \pi p^{y_{j}} (1-p)^{1-y_{j}} \right] + \left( 1 - \mu_{j}^{k} \right) \log \left[ (1-\pi) q^{y_{j}} (1-q)^{1-y_{j}} \right] \}$$

• 
$$\frac{\sum_{j=1}^{N} \mu_{j}^{k}}{\pi} - \frac{\sum_{j=1}^{N} (1 - \mu_{j}^{k})}{1 - \pi} = 0$$

• 
$$\sum_{j=1}^{N} \mu_{j}^{k} - \sum_{j=1}^{N} \mu_{j}^{k} \pi - n\pi + \sum_{j=1}^{N} \mu_{j}^{k} \pi = 0$$

• 
$$\pi = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{N} \mu_j^k$$



• 
$$\sum_{j=1}^{N} \{ \mu_{j}^{k} \log \left[ \pi p^{y_{j}} (1-p)^{1-y_{j}} \right] + \left( 1-\mu_{j}^{k} \right) \log \left[ (1-\pi)q^{y_{j}} (1-q)^{1-y_{j}} \right] \}$$

• 
$$\sum_{j=1}^{N} \mu_{j}^{k} \cdot \frac{(1-p)^{1-y_{j}} \cdot y_{j} \cdot p^{y_{j}} \cdot p^{-1} + p^{y_{j}} \cdot (y_{j}-1) \cdot (1-p)^{1-y_{j}} \cdot (1-p)^{-1}}{p^{y_{j}} (1-p)^{1-y_{j}}} = 0$$

• 
$$\sum_{j=1}^{N} \mu_j^k \cdot \frac{y_j (1-p) + (y_j-1)p}{p(1-p)} = 0$$

• 
$$\sum_{j=1}^{N} \mu_j^k y_j = \sum_{j=1}^{N} \mu_j^k p$$

• 
$$p = \frac{\sum_{j=1}^N \mu_j^k y_j}{\sum_{j=1}^N \mu_j^k}$$



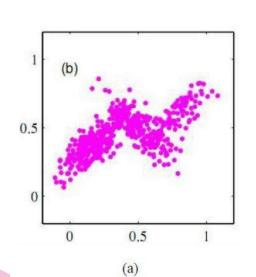
#### • 高斯混合模型(Gussian misture model)

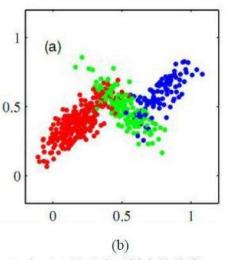
• 一个事物分解为若干的基于高斯概率密度函数(正态分布曲线)形成的模型

• 公式表达: 
$$P(y|\theta) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \emptyset(y|\theta_k)$$

• 
$$\theta = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k; \theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_k)$$

• 
$$\emptyset(y|\theta_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} exp(-\frac{(y-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2})$$







$$P(\text{事件}A|观测y_j) = \frac{P(观测y_j|\text{事件}A)P(事件A)}{P(观测y_j)}$$

• 定义隐变量

• 
$$\gamma_{jk} = \begin{cases} 1, \hat{\pi}_j \uparrow \chi_j \\ 0, \Delta_j \end{cases}$$

$$\boldsymbol{\theta^{i-1}} = \left\{\boldsymbol{\theta_1^{i-1}}, \boldsymbol{\theta_2^{i-1}}, \cdots, \boldsymbol{\theta_K^{i-1}}\right\}$$

$$oldsymbol{ heta_k^{i-1}} = ig\{lpha_k^{i-1}, \sigma_k^{i-1}, \mu_k^{i-1}ig\}$$

 $\emptyset(y|\boldsymbol{\theta_k})$ 

已知量

• 
$$\widehat{\gamma}_{ik} = P(\gamma_{ik} = 1 | y_i, \theta_k^{i-1})$$
 i-1表示第i-1轮参数

• 
$$P(\gamma_{jk} = 1 | y_j, \theta_k^{i-1}) = \frac{P(\gamma_{jk} = 1, y_j | \theta_k^{i-1})}{P(y_j | \theta_k^{i-1})} = \frac{P(y_j | \gamma_{jk} = 1, \theta_k^{i-1}) P(\gamma_{jk} = 1 | \theta_k^{i-1})}{P(y_j | \theta_k^{i-1}) P(y_j | \theta)} = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \phi(y_j | \theta_k^{i-1})$$

高斯混合模型 
$$\sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \widehat{\gamma}_{jk} \log \left( \alpha_k \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} exp(-\frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}) \right) \right\}$$



• 
$$Q(\theta, \theta^i) = \sum_{Z} P(Z|Y, \theta^{i-1}) \log P(Y, Z|\theta)$$

• 
$$P(Z|Y,\theta^{i-1}) = P(\gamma_{jk}|y_j,\theta_k^{i-1}) = \widehat{\gamma}_{jk}$$

• 
$$log P(Y, Z|\theta) = log P(Z|\theta)P(Y|Z, \theta)$$

• 
$$P(Z|\theta) = P(\gamma_{jk}|\theta_k) = \alpha_k$$

• 
$$P(Y|Z,\theta) = P(y_j|\gamma_{jk},\theta_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} exp(-\frac{(y_j-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2})$$







• 
$$\sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \widehat{\gamma}_{jk} \log \left( \alpha_k \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} exp\left(-\frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right) \right) \right\}$$

• 
$$\sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \log(\alpha_k) + \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} (\log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} - \frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}) \right\}$$



$$\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \log(\alpha_k) + \lambda(\alpha_k - 1)$$

• 
$$\sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \log(\alpha_k) + \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} (\log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} - \frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma}) \right\}$$

• 注意约束: 
$$\sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1$$

• 
$$J = \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} \log(\alpha_k) + \lambda(\sum_{k=1}^K \alpha_k - 1)$$

• 
$$\frac{\partial J}{\partial \alpha_k} = \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} + \lambda \alpha_k = 0$$
 
$$\sum_{j=1}^N \left( \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} + \lambda \alpha_k \right) = 0$$

$$\bullet \ \alpha_k = \frac{\sum_{j=1}^N \widehat{\gamma}_{jk}}{N}$$

$$\sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1$$



$$\lambda = -N$$

$$\sum_{k=1}^{K} \hat{\gamma}_{jk} = 1$$







• 
$$\sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \log(\alpha_k) + \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} (\log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} - \frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}) \right\}$$

• 
$$J = \sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \left( -\frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2} \right) \right\}$$

• 
$$\frac{\partial J}{\partial \mu_k} = 2 \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} (y_j - \mu_k) = 0$$

• 
$$\mu_k = \frac{\sum_{j=1}^N \widehat{\gamma}_{jk} y_j}{\sum_{j=1}^N \widehat{\gamma}_{jk}}$$

$$\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \left(-\left(y_{j} - \mu_{k}\right)^{2}\right)$$



• 
$$\sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \log(\alpha_k) + \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} (\log \frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \frac{1}{2} \log \sigma_k^2 - \frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}) \right\}$$

• 
$$J = \sum_{k=1}^{K} \left\{ \sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \left( -\frac{1}{2} \log \sigma_k^2 - \frac{(y_j - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2} \right) \right\}$$

• 
$$\frac{\partial J}{\partial \sigma_k^2} = \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} \left( -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sigma_k^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{(y_j - \mu_k)^2}{(\sigma_k^2)^2} \right) = 0$$

• 
$$\sigma_k^2 = \frac{\sum_{j=1}^N \widehat{\gamma}_{jk} (y_j - \mu_k)^2}{\sum_{j=1}^N \widehat{\gamma}_{jk}}$$

$$\sum_{j=1}^{N} \left( \hat{\gamma}_{jk} - \frac{\left( y_j - \mu_k \right)^2}{\sigma_k^2} \right) = 0$$



### **EM**



- EM 算法可以用到朴素贝叶斯法的无监督学习。
  - 考虑无监督文本二分类问题,即训练数据包含m个文档 $\{z^1, z^2, ..., z^m\}$ ,无监督场景下每个文档的 类别未知,已知词表总数为d,每个文档数据均由d维向量表示

$$(\mathbf{z}^{i} = \{x_{1}^{i}, x_{2}^{i}, \cdots, x_{d}^{i}\}, \quad x_{j}^{i} = \begin{cases} \mathbf{0} & \mathbf{z}^{i} \text{内不包含第} \mathbf{j} \cap \mathbf{i} \\ \mathbf{1} & \mathbf{z}^{i} \text{内包含第} \mathbf{j} \cap \mathbf{i} \end{cases}$$

考虑朴素贝叶斯判断公式:  $p(c|x) \approx \prod_{j=1}^d p(x_j|c)p(c)$  定义如下模型参数:

 $\phi_{z^i} = p(z^i = 1)$ ,文档i属于第1类

 $\varphi_{j|z^i=1}=p(x^i_j=1|z^i=1)$ ,当i文档属于第1类时,第j个特征出现

 $\varphi_{j|z^i=0} = p(x_j^i = 1|z^i = 0)$ ,当i文档属于第2类时,第j个特征出现