DLNLP 第二次作业

ZY2103202 黄君辉

一. 任务描述

一个袋子中三种硬币的混合比例为：s_1, s_2与 $1-s_1-s_2(0\leq s_i\leq 1)$，三种硬币掷出正面的概率分别为：$p, q, r$。（1）自己指定系数$s_1, s_2, p, q, r$，生成$N$个投掷硬币的结果（由$01$构成的序列，其中$1$为正面，$0$为反面），利用 EM 算法来对参数进行估计并与预先假定的参数进行比较。

二. 方法介绍

2.1 模型介绍——三硬币模型

假设有 3 枚硬币，分别记作A， B和 C。 这些硬币正面向上的概率分别是
π， p和 q。进行如下抛硬币试验：

1、先抛硬币 A，根据其结果选出硬币 B 或者硬币 C，正面选硬币 B，反面选硬币 C；

2、然后掷选出的硬币，抛硬币的结果，出现正面记作 1，出现反面记作 0；

3、独立重复n次试验(这里$n=10$)，观测结果如下：

$$1,1,0,1,0,0,1,0,1,1$$

假设只能观测到掷硬币的结果，不能观测掷硬币的过程。问如何估计三硬币正面出现的概率，即三硬币模型参数。对于单次观测结果，三硬币模型可以写作：

$$\begin{aligned}p(y_j|\theta) &= \sum_z (p(y_i, z|\theta) \\ &= \sum_z p(z|\theta)p(y_i|z,\theta) \\ &= \pi p^{y_j}(1-p)^{1-y_j} + (1-\pi)q^{y_j}(1-q)^{1-y_j}\end{aligned}$$

其中y_j是第j个观测结果1或0；随机变量z是隐变量，表示未观测到的掷硬币 A 的结果；$\theta=(\pi,p,q)$是模型参数。方便起见，观测数据可以表示为$y=(y_1,y_2,...,y_n)^T$,隐变量数据可以表示为$z=(z_1,z_2,...,z_n)^T$。观测数据的似然函数可以表示为：

$$\begin{aligned}p(y|\theta) &= \sum_z (p(y|z,\theta) \\ &= \prod_{j=1}^{n}[\pi p^{y_j}(1-p)^{1-y_j} + (1-\pi)q^{y_j}(1-q)^{1-y_j}]\end{aligned}$$

2.2 算法推导——EM 算法

最大期望算法（Expectation-maximization algorithm，又译为期望最大化算法），是在概率模型中寻找参数最大似然估计或者最大后验估计的算法，其中概率模型依赖于无法观测的隐性变量。为方便上述问题求解，对上式取对数似然函数，即

$$L(\theta) = log\, p(y|\theta) = log(\sum_z (p(y|z,\theta)p(z|\theta))$$

其中$L(\theta) < 0$。运用迭代的思想解决这个问题，假设在第i次迭代后θ的估计值是θ^i。想要求取最大对数似然，就需要$L(\theta) > L(\theta^i)$,并逐步达到极大值，也就是它们的差值达到最大值：

$$J(\theta) = L(\theta) - L(\theta^i) = log(\sum_z (p(y|z,\theta)p(z|\theta) - log\, p(y|\theta^i))$$

利用 Jensen 不等式，可以得到其下界。设

$$Q(\theta, \theta^i) = \sum_z (p(z|y,\theta^i) log\, p(y,z|\theta)$$

则求取的是

$$\theta^{i+1} = arg \max_\theta Q(\theta, \theta^i)$$,

可以得到 EM 算法的步骤如下：

1. E 步：求隐变量$p(z|y,\theta^i)$：给定观测数据y和当前的参数估计θ^i，求取隐变量 z 的条件概率分布；
2. M 步：将隐变量当做已知量，求$Q(\theta,\theta^i)$的极大化θ；
3. 重复执行 E 步和 M 步直到收敛

   进一步，设y_j来自掷硬币 B 的概率为μ_j,则来自 C 的概率为$1-\mu_j$，且$\mu_j \in \{0,1\}$，$j = 1,2,\dots,n$,参数μ也为模型的隐变量。代入 EM 算法求解得到：

$$\pi^{i+1} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mu_j^i$$

$$p^{i+1} = \frac{\sum_{j=1}^{n} \mu_j^i y_j}{\sum_{j=1}^{n} \mu_j^i}$$

$$q^{i+1} = \frac{\sum_{j=1}^{n} (1-\mu_j^i) y_j}{\sum_{j=1}^{n} (1-\mu_j^i)}$$

2.3 公式推导

对于本次作业中三种不同硬币，设定模型参数为$\theta = (s_1, s_2, p, q, r)$,硬币定义为$z_1, z_2, z_3$，每次观测结果表示为$x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$,则对于任一次观测$x_i$,其概率模型为

$$\begin{aligned} p(x_i|\theta) &= \sum_z (p(x_i, z|\theta) \\ &= \sum_z p(z|\theta)p(x_i|z,\theta) \\ &= s_1 p(x_i|z_1,\theta) + s_2 p(x_i|z_2,\theta) + (1 - s_1 - s_2)p(x_i|z_3,\theta) \end{aligned}$$

其中已知硬币产生观测结果的概率为：

$$\begin{aligned} p(x_i|z_1,\theta) = x_i p + (1 - x_i)(1 - p) \\ p(x_i|z_2,\theta) = x_i q + (1 - x_i)(1 - q) \\ p(x_i|z_3,\theta) = x_i r + (1 - x_i)(1 - r) \end{aligned}$$

设x_i来自掷硬币 A 的概率为μ_1,来自掷硬币 B 的概率为μ_2,则来自 C 的概率为$\mu_3 = 1 - \mu_1 - \mu_2$，则有：

$$\begin{aligned} \mu_1(x_i) = \frac{s_1 p(x_i|z_1,\theta)}{p(x_i|\theta)} \\ \mu_2(x_i) = \frac{s_2 p(x_i|z_2,\theta)}{p(x_i|\theta)} \\ \mu_3(x_i) = \frac{s_3 p(x_i|z_3,\theta)}{p(x_i|\theta)} \end{aligned}$$

将观测结果加权求和即可得到该序列来自于哪个硬币的估计值，即硬币分布的估计值：

$$s_1 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mu_1(x_i)$$

$$s_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mu_2(x_i)$$

利用上面提到的 EM 算法进行迭代求解：

$$p^{t+1}=\frac{\sum_{i=1}^{n}\mu_1(x_i,\theta^t)x_i}{\sum_{i=1}^{n}\mu_1(x_i,\theta^t)}$$

$$q^{t+1}=\frac{\sum_{i=1}^{n}\mu_2(x_i,\theta^t)x_i}{\sum_{i=1}^{n}\mu_2(x_i,\theta^t)}$$

$$r^{t+1}=\frac{\sum_{i=1}^{n}\mu_3(x_i,\theta^t)x_i}{\sum_{i=1}^{n}\mu_3(x_i,\theta^t)}$$

重复上述步骤直到收敛，即可得到模型参数$\theta=(s_1,s_2,p,q,r)$的估计值

三. 实验

3.1 实验设计

本次实验中需要自行指定相关参数，因此 EM 算法求解的结果存在多种可能，实验设计考虑如下几种典型情况：

1. 模型参数固定，取出次数固定，但每次投掷次数改变
2. 模型参数固定，投掷次数固定，但取出次数变化
3. 取出次数固定，投掷次数固定，但模型真实参数变化
4. 取出次数固定，投掷次数固定，但算法迭代初始参数变化

每次实验均设定误差为$e=|\parallel\theta^{t+1}\parallel-\parallel\theta^{t}\parallel|\leq 10^{-5}$,即相邻两次迭代估计的参数向量模长之差小于$10^{-5}$时停止迭代，得到最终的参数估计结果。

具体实验代码见附录及 https://github.com/Jinhan-Lin/DL-NPL2

3.2 实验结果

1. 模型参数固定，取出次数固定，但每次投掷次数改变

此次实验中指定指定模型真实参数为$\theta_t=$（$0.4,0.3,0.5,0.6,0.8$）,指定初始迭代参数为$\theta^0=$（$0.5,0.3,0.3,0.4,0.5$），取出次数$N=1000$，投掷次数分别为$M=100,10,1$,实验结果如下：

指定模型参数		$\theta_t=（0.4,0.3,0.5,0.6,0.8）$
初始迭代参数		$\theta^0=（0.5,0.3,0.3,0.4,0.5）$
取出次数		$N=1000$
投掷次数	迭代轮数	最终求解结果
$M=100$	73	$\theta=（0.3941,0.3050,0.5033,0.5982,0.8011）$
$M=10$	376	$\theta=（0.2239,0.5939,0.4600,0.6210,0.8590）$
$M=1$	6	$\theta=（0.4898,0.3096,0.5499,0.6484,0.7424）$

可以看出，投掷次数对于迭代轮数和求解结果存在较大影响，当投掷次数过小时，EM 算法容易求得局部最优解，无法收敛到真实结果。当$M=100$时，求解速度较快，并且准确率可以达到较高水平。

2. 模型参数固定，投掷次数固定，但取出次数变化

此次实验中指定指定模型真实参数为$\theta_t=（0.4,0.3,0.5,0.6,0.8）$,指定初始迭代参数为$\theta^0=（0.5,0.3,0.3,0.4,0.5）$，投掷次数为$M=100$，但取出次数分别为$N=1000,500,100$，实验结果如下:

指定模型参数		$\theta_t=（0.4,0.3,0.5,0.6,0.8）$
初始迭代参数		$\theta^0=（0.5,0.3,0.3,0.4,0.5）$
投掷次数		$M=100$
取出次数	迭代轮数	最终求解结果
$N=1000$	73	$\theta=（0.3941,0.3050,0.5033,0.5982,0.8011）$
$N=500$	43	$\theta=（0.3953,0.3038,0.4953,0.6020,0.8025）$
$N=100$	46	$\theta=（0.2122,0.4747,0.4631,0.5642,0.7975）$

可以看出，取出次数对于迭代轮数影响较小，但对求解结果存在较大影响。投掷次数过少是，EM 算法很难求得精确的结果；但投掷次数也并非越多越好，当$N=500$时，求解精度与$N=1000$时相差无几，但计算量少了很多。

3. 取出次数固定，投掷次数固定，但模型真实参数变化

此次实验中指定指定初始迭代参数为$\theta^0=（0.5,0.3,0.3,0.4,0.5）$，投掷次数为$M=100$，取出次数为$N=500$，指定真实参数为：$\theta_t=（0.4,0.3,0.5,0.6,0.8）$、

$\theta_t=$（$0.2,0.3,0.5,0.6,0.8$）、$\theta_t=$（$0.4,0.3,0.5,0.5,0.5$）实验结果如下:

初始迭代参数	$\theta^0=$（$0.5,0.3,0.3,0.4,0.5$）
取出次数	$N=500$
投掷次数	$M=100$
模型真实参数	最终求解结果
$\theta_t=$（$0.4,0.3,0.5,0.6,0.8$）	$\theta=$（$0.3953,0.3038,0.4953,0.6020,0.8025$）
$\theta_t=$（$0.2,0.3,0.5,0.6,0.8$）	$\theta=$（$0.2377,0.2722,0.5034,0.6072,0.7993$）
$\theta_t=$（$0.4,0.3,0.5,0.5,0.5$）	$\theta=$（$0.5274,0.2720,0.5112,0.4780,0.4998$）

在三种硬币投掷实验中，如果 A,B,C 中任意两者的分布概率和正面概率不同，EM 算法就能很好地求出模型的相关参数。但是如第三个实验所示，B 种和 C 种硬币分布概率均为 0.3，正面概率也均为 0.5，此时可以认为 B,C 为同一类，因此 EM 算法无法求解得到两种硬币准确的参数。

4. 取出次数固定，投掷次数固定，但迭代参数变化

此次实验中指定指定初始迭代参数为$\theta_t=$（$0.4,0.3,0.5,0.6,0.8$），投掷次数为$M=100$，取出次数为$N=500$，指定真实参数为：$\theta^0=$（$0.5,0.3,0.3,0.4,0.5$）、$\theta^0=$（$0.3,0.3,0.5,0.6,0.8$）、$\theta^0=$（$0.3,0.3,0.5,0.5,0.5$）实验结果如下:

真实模型参数	$\theta_t=$（$0.4,0.3,0.5,0.6,0.8$）
取出次数	$N=500$
投掷次数	$M=100$
初始迭代参数	最终求解结果
$\theta^0=$（$0.5,0.3,0.3,0.4,0.5$）	$\theta=$（$0.3953,0.3038,0.4953,0.6020,0.8025$）
$\theta^0=$（$0.2,0.5,0.3,0.4,0.5$）	$\theta=$（$0.4470,0.2555,0.5054,0.6062,0.8032$）
$\theta^0=$（$0.3,0.3,0.5,0.6,0.8$）	$\theta=$（$0.3737,0.3263,0.4972,0.5964,0.7988$）
$\theta^0=$（$0.3,0.3,0.5,0.5,0.5$）	$\theta=$（$0.3,0.3,0.6207,0.6207,0.6208$）

可以看出，初始迭代参数对 EM 算法求解结果的影响更大，如果初始迭代参数离真实参数距离过远，求解结果需要经过多轮迭代才能接近真实模型参数，甚至无法准确得到最终结果；此外，和第 3 类情况类似，如果初始迭代参数中三种硬币存在相同的分布和正面概率，最终求

解结果也无法正确收敛，每次都在第二次迭代时就会判定为收敛。

四. 总结

总的来说，传统 EM 算法对初始值敏感，收敛的优劣很大程度上取决于其初始参数，最终结果随不同的初始值而波动较大。EM 算法可以保证收敛到一个稳定点，但是却不能保证收敛到全局的极大值点，因此它是局部最优的算法。