CS229 Lecture notes

原作者: Andrew Ng (吴恩达),翻译: CylcerUser

1 因子分析(Factor analysis)

如果有一个高斯模型混合(a mixture of several Gaussians)而来的数据集 $x^{(i)} \in R^n$,那么就可以用期望最大化算法(EM algorithm)来对这个混合模型(mixture model)进行拟合。这种情况下,对于有充足数据(sufficient data)的问题,我们通常假设可以从数据中识别出多个高斯模型结构(multiple-Gaussian structure)。例如,如果我们的训练样本集合规模(training set size)m 远远大于(significantly larger than)数据的维度(dimension)n,就符合这种情况。然后来考虑一下反过来的情况,也就是 n 远远大于 m,即 n>m。在这样的问题中,就可能单独一个高斯模型来对数据建模很艰难,更不用说了高斯模型的混合模型了。由于 m 个数据点所张开(span)的只是一个 m 维空间 m 的低维度子空间(low-dimensional subspace),如果用高斯模型(Gaussian)对数据进行建模,然后还是用常规的最大似然估计(usual maximum likelihood estimators)来估计(estimate)平均值(mean)和方差(covariance),得到的则是:

$$\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x^{(i)}$$

$$\Sigma = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (x^{(i)} - \mu)(x^{(i)} - \mu)^{T}$$

we would find that the matrix Σ is singular. This means that Σ^{-1} does not exist, and $1||\Sigma|^{\frac{1}{2}} = 1/0$. But both of these terms are needed in computing the usual density of a multivariate Gaussian distribution. Another way of the stating this difficulty is that maximum likelihood estimate of the parmeters result in a Gaussian that places all of its probability in the affine space spanned by the data 1 °, and the corresponds to a singular convariance matrix.

我们会发现这里的 Σ 是一个奇异(singular)矩阵。这就意味着其逆矩阵 Σ 不存在,而 $1/|\Sigma|^{\frac{1}{2}}=1/0$ 。但这几个变量都是必须的,要用来计算一个多元高斯函数分布(multivariate Gaussian distribution)的常规密度函数(usual density)。还可以用另外一种方法来讲述清楚这个难题,也就是对参数(parameters)的最大似然估计(maximum likelihood:estimates)会产生一个高斯分布(Gausssian),其概率分分布在有样本数据所张成的放射空间(affine space)中,对应着一个奇异的协方差矩阵(singular convariance matrix)。

通常情况下,除非 m 比 n 大出相当多 (some reasonable amount),否则最大似然估计 (maximum likelihood estimates)得到的均值 (mean)和方差 (convariance)都会很差 (quite poor)。尽管如此,我们还是希望能用自己已有的数据,拟合出一条合理 (reasonable)的高斯模型 (Gaussian model),而且希望能够识别出数据中的某些有意义的协方差结构 (convariance structure)。那这可怎们办?

在接下来的这一部分内容里,我们首先回顾一下对 Σ 的两个可能约束(possible restrictions),这来那个约束条件能让我们使用小规模数据来拟合 Σ ,但是都不能就我们的问题给出让人满意的解 (staisfactory solution)。然后接下来我们要讨论一下高斯模型的边界和条件分布。最后,我们会讲下因子分析模型 (factor analysis model),以及对应的期望最大化算法(EM algorithm)。

This is the set of points x satisfying $x = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i x^{(i)}$, for some α_i 's so that $\sum_{i=1}^{m} \alpha_i = 1$

1.1Σ 的约束条件

如果我们没有充足的数据来拟合一个完整的协方差矩阵 (covariance matrix),就可以对矩阵空间 Σ 给出某些约束条件 (restrictions)。例如,我们可以选择拟合一个对角(diagonal)的协方差矩阵 Σ 。这样,读者很容易就能验证这样的一个协方差矩阵的最大似然估计(maximum lilklihoof estimate),可以有对角矩阵(diagonal matrix) Σ 满足:

$$\Sigma_{jj} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (x_j^i - \mu_j)^2$$

因此, Σ 就是对数据中的 j 个坐标位置的方差的经验估计(empeirical estimate)。

Recall that the contours of a Gaussian density are ellipses. A diagonal Σ corresponds to a Gaussian where the major axes of these ellipses are axis-aligned.

回忆一下,高斯模型的密度的形状是椭圆形的。对角矩阵 Σ 对应的就是椭圆的长轴(major axes)对齐 (axis-aligned)的高斯模型。

有时候,我们还要对这个协方差矩阵(convariance matrix)给出进一步的约束,不仅设为对角的(major axes),还要求所有的对角元素(diagonal entries)都相等。这时候,就有 $\Sigma = \sigma^2 I$,其中 σ^2 是我们控制的参数。对于这个 σ^2 的最大似然估计则为:

$$\sigma^{2} = \frac{1}{mn} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} (x_{j}^{i} - \mu_{j})^{2}$$

这种模型对应的是密度函数为圆形轮廓的高斯模型(在二维空间也就是平面中是圆形,在更高维度当中就是球(spheres)或者超球体(hyperspheres))。如果我么对数据要拟合一个完整的,不受约束的(unconstrained)协方差矩阵 Σ ,就必须满足 $m \ge n+1$,这样才使得对 Σ 的最大似然估计不是奇异矩阵(singular matrix)。在上面提到的两个约束条件之下,只要 $m \ge 2$,我们就能获得非奇异的(non-singular) Σ 。

然而,讲 Σ 限定为对角矩阵,也就意味着对数据中不同坐标(coordinates)的 x_i, x_j 建模都不相关 (uncorrelated),且互相独立(independent)。通常,还是从样本数据里获得某些有趣的相关信息结构比较好。 如果使用上面对 Σ 的某一种约束,就可能没有办法获取这些信息了。在本章讲义里面,我们会提到因子分析模型(factor analysis model),这个模型使用的参数比对角矩阵 Σ 更多,而且能从数据中获取某些相关性的信息(captures some correlations),但也不能对完整的协方差矩阵(full covariance matrix)进行拟合。

1.2 多重高斯模型(Gaussians)的边界(Marginal)和条件(Conditional)

在讲解因子分析之前(factor analysis)之前,我们要说一下一个联合多元高斯分析(joint multivariate Gaussian distribution)下的随机变量(random variables)的条件(conditional)和边界(marginal 分布 (distributions)。

假如我们有一个值为向量的随机变量(vector-valued random variable):

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

其中 $x_1 \in R^r, x_2 \in R^s$, 因此 $x \in R^{r+s}$ 。设 $x \sim N(\mu, \Sigma)$, 即以 μ 和 Σ 为参数的正太分布,则这两个参数为:

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix}$$

其中, $\mu \in R^r, \mu_2 \in R^s, \Sigma_{11} \in R^{r \times r}, \Sigma_{12}^{r \times s}$,依次类推。由于协方差矩阵 (convariance matrix) 是对称的 (symmetric),所以有 $\Sigma_{12} = \Sigma_{21}^T$ 。

基于我们的假设, x_1 和 x_2 是联合多元高斯分布 (jointly multivariate Gaussian)。那么 x_1 的边界分布是什么?不难看出 x_1 的期望 $E[x_1] = \mu_1$,而协方差 $Cov(x_1) = E[(x_1 - \mu_1)(x_1 - \mu_1)] = \Sigma_{11}$,接下来为了验证后面一项成立,要用 x_1 和 x_2 的联合方差的概念。

$$Cov(x) = \Sigma$$

$$= \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix}$$

$$= E[(x - \mu)(x - u)^T]$$

$$= E\left[\begin{pmatrix} x_1 - \mu_1 \\ x_2 - \mu_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 - \mu_1 \\ x_2 - \mu_2 \end{pmatrix}^T \right]$$

$$= E\left[\begin{pmatrix} (x_1 - \mu_1)(x_1 - \mu_1)^T \\ (x_2 - \mu_2)(x_1 - \mu_1)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (x_1 - \mu_1)(x_2 - \mu_2)^T \\ (x_2 - \mu_2)(x_2 - \mu_2)^T \end{pmatrix}^T \right]$$

Matching the upper-left sub blocks in the matrices in the second and the last lines above gives the result. 高斯分布的边界条件(marginal distributions)本身也是高斯分布。所以我么就可以给出一个正太分布 $x_1 N(\mu_1, \Sigma_{11})$ 来作为 x_1 的边界分布(marginal distributions)。

此外,我们还可以提出领一个问题,给定 x_2 的情况下 x_1 的条件分布是什么呢?通过参考多元高斯分布的定义,就能得到条件分布 $x_1|x_2$ $N(\mu_{1|2},\Sigma_{1|2})$ 为:

$$\mu_{1|2} = \mu_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(x_2 - \mu_2)$$
 (1) $\Sigma_{1|2} = \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}$ (2)

在下一节对因子分析模型 (factor analysis model) 的讲解中,上面这些公式就很有用了,可以帮助高斯分布的条件和边界分布(conditional and marginal distributions)

1.3 因子分析模型(Factor analysis model)

在因子分析模型(Factor analysis model)中,我们定制在 (x,z) 上的一个联合分布,如下所示,其中 $z \in \mathbb{R}^k$ 是一个潜在随机变量(latent randon variable):

$$z\ N(0,I)$$

$$x|z\ N(\mu+\Lambda z,\Psi)$$

上面的式子中,我们这个模型中的参数是向量 $\mu \in R^n$,矩阵 $\Lambda \in R^{n \times k}$,以及一个对角矩阵 $\Psi \in R^{n \times n}$ 。k的值通常都选择比 n 小一点的。

这样,我们就设想每个数据点 x^i 都是通过一个 k 维度的多元高斯分布 z^i 中取样获得的。然后,通过计算 $\mu + \Lambda z^i$,就可以映射到实数域 R^n 中的一个 k 维仿射空间 (k-dimensional affine space),在 $\mu + \Lambda z^{(i)}$ 上加上 协方差 Ψ 噪音,就得到了 $x^{(i)}$ 。

反过来,咱们也就可以定义因子分析模型(factor anaylsis model),使用下面的设定:

$$z \ N(0,I)$$

$$\xi \ N(0,\psi)$$

$$x = \mu + \Lambda z + \xi$$

其中的 ξ 和 z 是相互独立的。然后咱们来确切地看看这个模型定义的分布(distribution our)。其中,随机变量 z 和 x 有一个联合高斯分布(joint Gaussian distribution):

$$\begin{bmatrix} z \\ x \end{bmatrix} \ N(\mu_{zx}, \Sigma)$$

然后咱们要找到 μ_{zx} 和 Σ 。

我们知道 z 的期望 E(z)=0, 这是因为 z 服从的是均值为 0 的正太分布 z N(0,I)。此外我们还知道:

$$E[x] = E[\mu + \Lambda z + \xi]$$

$$= \mu + \Lambda E[z] + E[\xi]$$

$$= \mu$$

综合以上这些条件,就得到了:

$$\mu_{zx} = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \mu \end{bmatrix}$$

下一步就是要找出 Σ ,我们需要计算出 $\Sigma = E[x - E[Z](z - E(x))^T]$ (矩阵 Σ 左上部分(upper-left block)), $\Sigma_{xx} = E[(z - E(z))(x - E(x))^T]$ (右上部分(upper-right block)),以及 $E[(x - E(x))(x - E(x))^t]$ (右下部分(lowe-right block))。

由于 z 是一个正太分布 z N(0,1),很容易就能知道 $\Sigma_{zz} = Cov(z) = I$,另外:

$$\begin{split} E[(z-E(z))(x-E[x])^T] &= E[z(\mu+\Lambda z+\xi-\mu)^T] \\ &= E[zz^T] + E[z\xi^T] \\ &= \Lambda^T \end{split}$$

在上面的最后一步中,使用到了结论 $E[zz^T] = Cov(z)$ (因为 z 的均值为 0,而且 $E[z\xi] = E[z]E[\xi^T]$) (因为 z 和 ξ 相互独立,因此乘积(product)的期望(expectation)等于期望的乘积)。

同样的方法,我们可以用下面的方法论来找到 Σ_{xx} :

$$\begin{split} E[(x-E(x))(x-E[x])^T] &= E[(\mu+\Lambda z+\xi-\mu)(\mu+\Lambda z+\xi-\mu)^T] \\ &= E[\Lambda z z^T \Lambda^T] + E[\xi z^T \Lambda^T + \Lambda z \xi^T + \xi \xi^T] \\ &= \Lambda E[z z^T] \Lambda^T + E[\xi \xi^T] \\ &= \Lambda \Lambda^T + \Psi \end{split}$$

把上面综合到一起,就得到了:

$$\mu_{zx} = \begin{bmatrix} z \\ hx \end{bmatrix} \ N \left(\begin{bmatrix} \vec{0} \\ \mu \end{bmatrix} \ \begin{bmatrix} I & \Lambda^T \\ \Lambda & \Lambda\Lambda^T + \Psi \end{bmatrix} \right)$$

因此,我们还能发现 x 边界分布(marginal distribution)为: x $N(\mu \Lambda \Lambda^T + \Psi)$ 。所以,给定一个训练样本集合 $\{x^{(i);i=1\cdots,m}\}$,参数(parameters)的最大似然估计函数的对数函数(log likelihood),就可以写为:

$$l(\mu, \Lambda, \Psi) = \log \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} |\Lambda \Lambda^{T} + \Psi|^{\frac{1}{2}}} exp(-\frac{1}{2} (x^{(i)-\mu})^{T} (\Lambda \Lambda^{T} + \Psi)^{-1} (x^{i} - \mu))$$

为了进最大似然估计,我们就要最大化上面这个参数的函数。但确切地对上面这个方程进行最大化,是很艰难的,不信你自己试试哈,而且我们都知道没有算法能够以封闭形式(closed-form)来实现对大化。所以,我们就该用期望最大化算法(EM algorithm)。下一节里面,咱们就来推导一下针对因子分析模型(factor analysis)的期望最大化算法(EM)

1.4 针对因子分析模型(factor analysis)的期望最大化算法(EM))

EM 算法步骤的推导很简单。只需要计算出来 $Q_i(z^i) = p(z^{(i)}|x^{(i)};\mu,\Lambda,\Psi)$ 。把等式 (3) 当中给出的分布带入到方程 (1 – 2),来找出一个高斯分布的条件分布,我们就能发现 $z^{(i)|x^{(i)}};\mu,\Lambda,\Psi \sim N(\mu_{z^i},\Sigma_{z^{(i)}|x^i})$,其中:

$$\begin{split} & \mu_{z^{(i)}|x^{(i)}} = \boldsymbol{\Lambda}^T (\boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\Lambda}^T + \boldsymbol{\Psi})^{-1} (\boldsymbol{x}^{(i)-\boldsymbol{\mu}}) \\ & \boldsymbol{\Sigma}_{z^{(i)}|x^{(i)}} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{\Lambda}^T (\boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\Lambda}^T + \boldsymbol{\Psi})^{-1} \boldsymbol{\Lambda} \end{split}$$

所以通过对 $\mu_{z^{(i)}|x^i}$ 和 $\Sigma_{z^{(i)}|x^i}$, 进行这样的定义, 就能得到:

$$Q_i(z^i) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} |\sum_{z^{(i)}|x^{(i)}}|^{\frac{1}{2}}} exp(\frac{-1}{2} (z^{(i)} - \mu_{z^{(i)}|x^{(i)}})^T \sum_{z^{(i)}|x^{(i)}}^{-1} (z^{(i)} - \mu_{z^{(i)}|x^{(i)}})$$

接下来就是 M 步骤了。这里需要去最大化下面这个参数 μ, Λ, Ψ 的函数值:

$$\sum_{i=1}^{m} \int_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi)}{Q_i(z^{(i)})} dz^{(i)}$$
(4)

我们在本文中仅仅对 Λ 进行优化,关于 μ 和 Ψ 的更新就作为练习留给自己进行推导了。 把等式 (4) 简化成下面的形式:

$$\sum_{i=1}^{m} \int_{z^{(i)}} [logp(x^{(i)}|z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi) + logp(z^{(i)}) - logQ_i(z^{(i)})] dz^{(i)}$$
 (5)

$$= \sum_{i=1}^{m} E_{z^{(i)}} Q_{i}[logp(x^{(i)}|z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi) + logp(z^{(i)}) - logQ_{i}(z^{(i)})]$$
 (6)

上面的等式中, $z^{(i)}$ Q_i 这个下标(subscript),表示的意思是这个期望是从 Q_i 中取得 z^i 的。在后续的推导过程中,如果没有歧义的情况下,我们就会把这个省略掉。删除这些不依赖参数的项目后,我们就发现只需要最大化:

我们对上面的函数进行关于 Λ 的最大化。可见只有最后的一项依赖 Λ 。求导数,同时利用下面几个结论: $Tra = a(fora \in R), TrAB = TrBA, \nabla_A TrABA^T C = CAB + C^TAB$, 就能得到:

$$\begin{split} & \nabla_{\lambda} \sum_{i=1}^{m} - E[\frac{1}{2}(x^{i} - \mu - \Lambda z^{i})^{T} \Psi^{-1}(x^{i} - \mu - \Lambda z^{i})] \\ & = \sum_{i=1}^{m} \nabla_{\Lambda} E[-tr \frac{1}{2} z^{i^{T}} \Lambda^{T} \Psi^{-1} \Lambda z^{i} + tr z^{i^{T}} \Lambda^{T} \Psi^{-1}(x^{i} - \mu)] \\ & = \sum_{i=1}^{m} \nabla_{\Lambda} E[-tr \frac{1}{2} \Lambda^{T} \Psi^{-1} \Lambda z^{i} z^{i^{T}} + tr \Lambda^{T} \Psi^{-1}(x^{i} - \mu) z^{i^{T}}] \\ & = \sum_{i=1}^{m} E[-\Psi^{-1} \Lambda z^{i} z^{i^{T}} + \Psi^{-1}(x^{i} - \mu) z^{i^{T}}] \end{split}$$

设置导数为 0. 然后简化, 就能得到:

$$\sum_{i=1}^{m} \Lambda E_{z^{i}} Q_{i}[z^{i}z^{i^{T}}] = \sum_{i=1}^{m} (x^{i} - \mu) E_{z^{i}} Q_{i}[z^{i^{T}}]$$

接下来, 求解 Λ , 就能得到:

$$\Lambda = (\sum_{i=1}^{m} (x^{i} - \mu) E_{z^{i} Q_{i}}[z^{i^{T}}]) (\sum_{i=1}^{m} E_{z^{i} Q_{i}}[z^{i}z^{i^{T}}])^{-1}$$
 (7)

有一个很有意思的地方需要注意,上面这个等式和用最小二乘线性回归推出的正则方程有密切的关系:

$$\theta^T = (y^T X)(X^T X)^{-1}$$

与之类似,这里的 x 是一个关于 z (以及噪声 noise) 的线性方程。考虑在 E 步骤中对 z 已经给出猜测,接下来就可以来尝试与 x 和 z 相关的位置量 Λ 进行估计。接下来不出意料,我们就会得到某种类似正则方程的结果。然而,这个还是和利用对 z 的最佳猜测(best guesses)进行最下二乘算法有一个很大的区别的;这一点我们很快就会看到。

为了完成 M 步骤的更新,接下来我们要解出等式 (7) 当中的期望值 (values of the expectations)。由于我们 定义 Q_i 是均值为 $\mu_{z^i|x^i}$,协方差为

 $Sigma_{z^i|x^i}$ 的一个高斯分布,所以很容易得到:

$$\begin{split} E_{z^{i}\ Q_{i}}[z^{i^{T}}] &= \mu_{z^{i}|x^{i}}^{T} \\ E_{z^{i}\ Q_{i}}[z^{i}z^{i^{T}}] &= \mu_{z^{i}|x^{i}}\mu_{z^{i}|x^{i}}^{T} + \Sigma_{z^{i}|x^{i}} \end{split}$$

上面第二个等式的推导依赖与下面这个事实: 对于一个随机变量 Y, 协方差 $Cov(Y) = E[YY^T] - E[Y]E[Y]^T$, 所以 $E[YY^T] = E[Y]E[Y]^T + Cov(Y)$ 。把这个带入道等式 (7),就得到 M 步骤中 Λ 的更行规则:

$$\Lambda = (\sum_{i=1}^{m} (x^{i} - \mu) \mu_{z^{i}|x^{i}}^{T}) (\sum_{i=1}^{m} \mu_{z^{i}|x^{i}} \mu_{z^{i}|x^{i}}^{T} + \Sigma_{z^{i}|x^{i}})^{-1}$$
(8)

上面这个等式中,要特别注意等号右边这一侧的 $\Sigma_{z^i|x^i}$ 。这是一个根据 z^i 给出的 x^i 后验发分布 $p(z^i|x^i)$ 的 协方差,而在 M 步骤中必须考虑到在这个后验分布中 z^i 的不确定性。推导 EM 算法的一个常见错误就是在 E 步骤进行假设,只需要算出在随机变量 z 的期望 E[z],然后把这个值放到 M 步骤当中 z 出现的每个地方进行

优化。当然,这能解决简单问题,例如高斯混合模型,在因子模型的推导过程中,就同时需要 $E[zz^T]$ 和 E[z]; 而我们已经知道, $E[zz^T]$ 和 $E[z]E[z]^T$ 随着 $\Sigma_{z|x}$ 而变化。因此,在 M 步骤就必须要考虑到后验分布 $p(z^i|x^i)$ 中 z 的协方差。

最后,我们还可以发现,在 M 步骤对参数 μ 和 Ψ 的优化。不难发现其中的 μ 为:

$$\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x^i$$

由于这个值随着参数的变换而该改变(也就是说,和 Λ 的更新不同,这里等式右侧不依赖 $Q_i(z^i)=p(z^i|x^i;\mu,\Lambda,\Psi)$),这个 $Q_i(z^i)$ 是依赖参数的,这个只需要计算一次就可以,在算法运行过程中,也不需要进一步更新。类似地,对角矩阵 Ψ 也可以通过计算下面这个式子来获得:

$$\phi = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x^{i} x^{i^{T}} - x^{i} \mu_{z^{i}|x^{i}}^{T} \Lambda^{T} - \Lambda \mu_{z^{i}|x^{i}} x^{i^{T}} + \Lambda (\mu_{z^{i}|x^{i}} \mu_{z^{i}|x^{i}}^{T} + \Sigma_{z^{i}|x^{i}}) \Lambda^{T}$$

然后只需要设 $\Psi_{ii} = \Phi_{ii}$ (也就是说,设 Ψ 为一个仅仅包含矩阵 Φ 中对角线元素的对角矩阵)