GMM 张量形式算法

一、 确定先验参数：

均值向量矩阵记作$\varPhi=[\mu_i]_{d\times k}$，其中$d$是样本数据维数，$k$为聚类数，$\mu_i$表示第$i$个分布的均值；混合系数向量记作$\alpha=[a_i]_{1\times k}$，其中$a_i$表示第$i$个分布的混合系数，满足$a_i>0$且$\sum_{i=1}^{k}a_i=1$；逆协方差张量记作$\mathscr{C}^{-1}=[\varSigma_i{}^{-1}{}_{d\times d}]_{d\times d\times k}$（协方差张量记作$\mathscr{C}=[(\varSigma_i)_{d\times d}]_{d\times d\times k}$），其中$\varSigma_i$表示第$i$个分布的协方差矩阵；原始数据张量$\mathscr{D}=[D_{m\times d}]_{m\times d\times k}$，其中$m$为样本数量，$D$表示原始数据矩阵 PCADataT；均值张量记作$\mathscr{M}=[\varPhi_{d\times k}]_{d\times k\times m}$。

二、 计算 E 步：

设向量

$$\beta=\left[\left|\varSigma_i\right|^{-\frac{1}{2}}\right]_{1\times k}$$

中心化张量

$$\mathscr{O}=(\mathscr{D}^{[2,3,1]}-\mathscr{M})^{[2,1,3]}$$

其中的加法为按照对应元素相加，张量上标表示张量的旋转（矩阵转置的扩展），$\mathscr{A}^{[a,b,c]}$则表示张量与相互正交的三个方向 a,b,c（1,2,3 的一个排列）共同旋转，使这三个方向分别旋转到了原来的 1,2,3 方向上。

下面定义 4 个张量积和 2 个点运算：

考虑两个张量在$\otimes_1$运算下的情形：

$$\mathscr{A}_{d\times k\times m}\otimes_1\mathscr{B}_{d\times d\times k}=\mathscr{C}_{d\times k\times m}$$

满足

$$\mathscr{C}_{ijk}=\sum_{l=1}^{d}\mathscr{A}_{ljk}\cdot\mathscr{B}_{lij}$$

其中$\mathscr{C}_{ijk}$指张量$\mathscr{C}$在 1,2,3 方向上分别是第 i,j,k 个的元素；

考虑两个张量在$\otimes_2$运算下的情形：

$$\mathscr{A}_{d\times k\times m}\otimes_2\mathscr{B}_{d\times k\times m}=C_{m\times k}$$

满足

$$C_{ij}=\sum_{l=1}^{d}\mathscr{A}_{lji}\cdot\mathscr{B}_{lji}$$

其中C是矩阵；

考虑两个张量在$\otimes_3$运算下的情形：

$$\mathscr{A}_{m\times d\times k}\otimes_3\mathscr{B}_{m\times d\times k}=\mathscr{C}_{d\times d\times m\times k}$$

满足

$$\mathscr{C}_{ijku}=\mathscr{A}_{kiu}\cdot\mathscr{B}_{kju}\,;$$

考虑两个张量在$\otimes_4$运算下的情形：

$$\mathscr{A}_{d\times d\times m\times k}\otimes_4 A_{m\times k}=\mathscr{C}_{d\times d\times k}$$

满足

$$\mathscr{C}_{ijk}=\sum_{l=1}^{m}A_{lk}\cdot\mathscr{A}_{ijlk}\,;$$

定义点乘运算“$\otimes.$”：

$$\alpha_{1\times l}\otimes.A_{n\times l}=B_{n\times l}$$

满足

$$B_{ij}=\alpha_j\cdot A_{ij}\,;$$

定义点除运算“$\odot.$”：

$$A_{n\times l}\odot.\alpha_{1\times l}=B_{n\times l}$$

满足

$$B_{ij}=A_{ij}/\alpha_j\text{。}$$

于是我们可以得到高斯概率密度矩阵：

$$P=(2\pi)^{-4}\cdot\beta\otimes.e^{-\frac{1}{2}\cdot\mathscr{O}\otimes_1\mathscr{C}^{-1}\otimes_2\mathscr{O}}$$

进而得到伽马矩阵：

$$\mathit{\Gamma}=(\alpha\otimes.P)\odot.(P\cdot\alpha^{T})$$

三、　计算 M 步：

这一步主要是更新参数。

更新均值张量：

$$\mathit{\Phi}=(D^{T}\cdot\mathit{\Gamma})\odot.\gamma_0\,;$$

$$\mathscr{M} = [\Phi_{d \times k}]_{d \times k \times m},$$

其中$\gamma_0 = \left[\sum_{c=1}^{m} \Gamma_{ci}\right]_{1 \times k}$；

更新中心化张量：

$$\mathscr{O} = \left(\mathscr{D}^{[2,3,1]} - \mathscr{M}\right)^{[2,1,3]};$$

更新协方差张量：

$$\mathscr{G} = \mathscr{O} \otimes {}_3\mathscr{O}$$

$$\mathscr{C} = \mathscr{G} \otimes {}_4\Gamma$$

更新混合系数向量：

$$\gamma_0 = \left[\sum_{c=1}^{m} \Gamma_{ci}\right]_{1 \times k}$$

$$\alpha = \gamma_0 / m$$

到此就完成一次迭代。需要再迭代一次则由此跳转到 E 步开始执行即可