$EM(Expectation - maximization)$算法及其推广

EM算法的引入

两硬币模型

假设有两枚硬币，它们随机抛掷的结果如下表：

$1.\quad B$	$H\ T\ T\ T\ H\ H\ T\ H\ T\ H$
$2.\quad A$	$H\ H\ H\ H\ T\ H\ H\ H\ H\ H$
$3.\quad A$	$H\ T\ H\ H\ H\ H\ H\ T\ H\ H$
$4.\quad B$	$H\ T\ H\ T\ T\ T\ H\ H\ T\ T$
$5.\quad A$	$T\ H\ H\ H\ T\ H\ H\ H\ T\ H$

我们很容易估计（**这里也是用的极大似然估计，推导过程略，可以得出就是频率比值**）出两枚硬币出现正面的概率：

$$\theta_A = \frac{24}{30} = 0.8$$
$$\theta_B = \frac{9}{20} = 0.45$$

现在我们不记录硬币标记，则上述表格改变如下：

$1.\quad *$	$H\ T\ T\ T\ H\ H\ T\ H\ T\ H$
$2.\quad *$	$H\ H\ H\ H\ T\ H\ H\ H\ H\ H$
$3.\quad *$	$H\ T\ H\ H\ H\ H\ H\ T\ H\ H$
$4.\quad *$	$H\ T\ H\ T\ T\ T\ H\ H\ T\ T$
$5.\quad *$	$T\ H\ H\ H\ T\ H\ H\ H\ T\ H$

这种情况下，我们该如何估计θ_A和θ_B呢？

为了描述清楚问题，我们引入一个隐变量$Z=(z_1,z_2,z_3,z_4,z_5)$，代表每一轮所使用的硬币种类。为什么叫做隐变量？因为我们虽然知道有这个变量，但我们无法对其进行观测从而得到其确定的值。这时对于原来的问题会出现矛盾：

- 如果我们不知道Z，显然我们是无法使用上面的极大似然估计法去估计θ_A和θ_B的。要想用老方法去估计，我们必须先求出Z。
- 可要用极大似然估计法去估计出Z，我们又得先知道θ_A和θ_B。

解决方法就是先随机初始化θ_A和θ_B，然后用**最大似然**去估计Z，然后基于Z按照**最大似然**去估计出新的θ_A和θ_B，**循环直至收敛！**

求解如下：

我们随机初始化$\theta_A = 0.6$和$\theta_B = 0.5$。

- 第一轮抛掷：

  如果是硬币A则出现实验结果的概率为$0.6^5 \times 0.4^5$；如果是硬币B则出现实验结果的概率为$0.5^5 \times 0.5^5$；根据贝叶斯公式，可得：

$$P_A = \frac{0.6^5 \times 0.4^5}{(0.6^5 \times 0.4^5) + (0.5^5 \times 0.5^5)} = 0.45$$
$$P_B = \frac{0.5^5 \times 0.5^5}{(0.6^5 \times 0.4^5) + (0.5^5 \times 0.5^5)} = 0.55$$

  同理可得五轮的概率如下：

$NO.$	$Coin.A$	$Coin.B$
1.	0.45	0.55
2.	0.80	0.20
3.	0.73	0.27
4.	0.35	0.65
5.	0.65	0.35

  - **由概率可以看出估计的硬币应该如下所示：**

1. B	$H\ T\ T\ T\ H\ H\ T\ H\ T\ H$
2. A	$H\ H\ H\ H\ T\ H\ H\ H\ H\ H$
3. A	$H\ T\ H\ H\ H\ H\ H\ T\ H\ H$
4. B	$H\ T\ H\ T\ T\ T\ H\ H\ T\ T$
5. A	$T\ H\ H\ H\ T\ H\ H\ H\ T\ H$

  这时再利用**最大似然估计**去重新估计θ_A、θ_B。

$$\theta_A = \frac{24}{30} = 0.8$$
$$\theta_B = \frac{9}{20} = 0.45$$

  用新的θ_A、θ_B去重新用**最大似然估计**法去估计Z，然后再估计θ_A、θ_B，会发现收敛，所以我们认为地选定它作为真实值。

  - **还有一种方法：我们可以求出每轮抛掷硬币A和硬币B对10次的贡献：**

$NO.$	$Coin.A$	$Coin.B$
1.	$2.2H \quad 2.2T$	$2.8H \quad 2.8T$
2.	$7.2H \quad 0.8T$	$1.8H \quad 0.2T$
3.	$5.9H \quad 1.5T$	$2.1H \quad 0.5T$
4.	$1.4H \quad 2.1T$	$2.6H \quad 3.9T$
5.	$4.5H \quad 1.9T$	$2.5H \quad 1.1T$
$Total.$	$21.3H \quad 8.6T$	$11.7H \quad 8.4T$

然后用极大似然估计来估计出新的θ_A和θ_B：

$$\theta_A = \frac{21.3}{21.3+8.6} = 0.71$$
$$\theta_B = \frac{11.7}{11.7+8.4} = 0.58$$

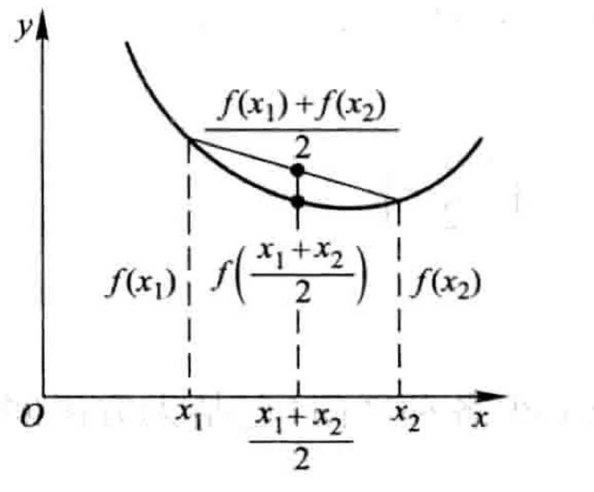
如此反复迭代，我们可以求出最终的参数值，10轮之后分别是$0.80, 0.52$。

EM算法的导出

$Jensen$ **（琴生）不等式**：

若f是凸函数，则：

$$f(tx_1+(1-t)x_2) \leqslant tf(x_1)+(1-t)f(x_2) \quad t \in [0,1]$$



将上式中的t推广到n个同样成立，也即：

$$f(t_1x_1+t_2x_2+\cdots+t_nx_n) \leqslant t_1f(x_1)+t_2f(x_2)+\cdots+t_nf(x_n) \quad t_1\cdots \in [0,1], t_1+\cdots+t_n=1$$

再将$t_1\cdots t_n$视为概率，不难得到:

$$f(E[X]) \leqslant E[f(X)]$$

其中X是随机变量，f是凸函数，$E[X]$表示X的期望。（**期望的函数小于函数的期望**），我们要用这个不等式去放缩下面的似然函数。

我们面对一个有隐变量Z的概率模型，目标是**极大化观测数据Y关于参数θ的对数似然函数**，即极大化：

$$L(\theta) = ln\ P(Y|\theta) = ln\ \sum_Z P(Y,Z|\theta) = ln\left(\sum_Z P(Z|\theta)\cdot P(Y|Z;\theta)\right)$$

注意：上式中的θ并不是随机变量，我们目前不知道它的具体值，但是我们知道在确定它的情况下，$P(Y)$等概率也是可以确定的。

困难在于：上式中包含**未观测数据Z**以及**和（连续型就是积分）的对数。**

EM算法采用的是**通过逐步迭代近似极大化$L(\theta)$**：

直观来说就是我们会求出一个序列$\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_n$，更靠后的$\theta$都会比前一个$\theta$使得似然函数$L(\theta)$更大。

- 假设在第i此迭代后θ的估计值是$\theta^{(i)}$，我们希望新的估计值θ能使$L(\theta)$增加，即$L(\theta) > L(\theta^{(i)})$，然后以此达到极大值。为此我们考虑**两者的差**：

$$\begin{aligned}
L(\theta) - L(\theta^{(i)}) &= ln\left(\sum_Z P(Z|\theta)\cdot P(Y|Z;\theta)\right) - ln\ P(Y|\theta^{(i)}) \\
&= ln\left(\sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)})\cdot \frac{P(Z|\theta)\cdot P(Y|Z;\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})}\right) - ln\ P(Y|\theta^{(i)}) \\
&\geqslant \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})} - ln\ P(Y|\theta^{(i)}) \\
&= \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})} - 1\cdot ln\ P(Y|\theta^{(i)}) \\
&= \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})} - \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ P(Y|\theta^{(i)}) \\
&= \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})P(Y|\theta^{(i)})} \\
&= \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y,Z|\theta)}{P(Y,Z|\theta^{(i)})}
\end{aligned}$$

  简单移项可得：

$$L(\theta) \geqslant L(\theta^{(i)}) + \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})P(Y|\theta^{(i)})}$$

  注意：其中的ln函数是凹函数，故利用$Jensen$不等式结论（与凸函数相反）。且上式中并没有用到$f(E[X]) \geqslant E[f(X)]$，而是用到了原来的结论：$\sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)})$是1，也就是说仅仅将$P(Z|Y;\theta^{(i)})$看做是和为1的系数而已，并未强调其是概率。

令　$B(\theta,\theta^{(i)}) = L(\theta^{(i)}) + \sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)}) ln\ \frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})P(Y|\theta^{(i)})}$，其中具体到每一步而言$\theta^{(i)}$是已知的，但是每一次迭代的$\theta_i$都可能是不同的，所以我们有必要显示地表示出来以示这是一个迭代过程。

则　$L(\theta) \geqslant B(\theta,\theta^{(i)})$

即函数$B(\theta,\theta^{(i)})$是$L(\theta)$的**一个下界**，若我们有能力求得$\theta^{(i+1)}$使得$B(\theta,\theta^{(i)})$达到极大（只是在θ_i的小范围内最大，而不是全局最大），则可以得到

$$B(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}) \geqslant B(\theta^{(i)},\theta^{(i)})$$

然后我们将新的$\theta^{(i+1)}$代入到原来的$L(\theta)$观察是否会变大，如果会变大，那么我们就可以极大化$B(\theta,\theta^{(i)})$来达到更新$L(\theta)$的目的。

我们注意到：$B(\theta^{(i)},\theta^{(i)})=L(\theta^{(i)})$，所以可以进一步推得：

$$L(\theta^{(i+1)})\geqslant B(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)})\geqslant B(\theta^{(i)},\theta^{(i)})=L(\theta^{(i)}))$$

因此，任何可以使$B(\theta,\theta^{(i)})$增大的θ，也可以使$L(\theta)$增大，我们将原问题转化为了求使得$B(\theta,\theta^{(i)})$达到极大值的$\theta^{(i+1)}$，即

$$\begin{aligned}
\theta^{(i+1)} &= arg\,\underset{\theta}{max} B(\theta,\theta^{(i)})\\
&= arg\,\underset{\theta}{max}\left(L(\theta^{(i)})+\sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)})ln\,\frac{P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y;\theta^{(i)})P(Y|\theta^{(i)})}\right)\\
&= arg\,\underset{\theta}{max}\left(\sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)})ln\,P(Y|Z;\theta)P(Z|\theta)\right)\\
&= arg\,\underset{\theta}{max}\left(\sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)})ln\,P(Y,Z|\theta)\right)\\
&= arg\,\underset{\theta}{max}\,Q(\theta,\theta^{(i)})
\end{aligned}$$

这就是从$\theta^{(i)}$到$\theta^{(i+1)}$的一次迭代，求出的$\theta^{(i+1)}$作为下一次的$\theta^{(i)}$。

值得说明的是，对于具体的求解$\theta^{(i+1)}$的每一步算法过程中，$L(\theta^{(i)}),P(Y|\theta^{(i)}),P(Z|Y;\theta^{(i)})$是一个常数。

到此我们来阐明EM算法：

- E步：计算**完全数据的对数似然函数**$ln\,P(Y,Z|\theta)$关于给定观测数据Y和当前参数$\theta^{(i)}$（第一次是假设的）条件下对隐变量Z的条件概率分布$P(Z|Y,\theta^{(i)})$（实际上是一个后验分布）的**期望**，也即是Q**函数**：（极大似然估计）

$$Q(\theta,\theta^{(i)})=E_Z\left[lnP(Y,Z|\theta)|Y;\theta^{(i)}\right]=\sum_Z P(Z|Y;\theta^{(i)})ln\,P(Y,Z|\theta)$$

- M步：求使得Q函数达到**极大的**θ作为$\theta^{(i+1)}$。
- 重复上述过程，直至收敛。

三硬币模型

假设有三枚硬币，分别记作A,B,C。这些硬币出现正面的概率分别是π,p,q。进行如下抛硬币试验：先抛掷硬币A，如果是正面选硬币B进行第二次抛掷；如果是反面选硬币C进行第二次抛掷；第二次抛掷出现正面记作1，出现反面记作0；独立重复进行n次试验，假设$n=10$，观测结果如下：

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

问如何**估计三枚硬币正面出现的概率**，即三硬币模型的参数。

解答：

首先，对**单次实验**可以建模如下：

$$
\begin{aligned}
P(y|\theta) &= \sum_z P(y,z|\theta) \\
&= \sum_z P(z|\theta)P(y|z;\theta) \\
&= \begin{cases} \pi p + (1-\pi)q & if\ y=1; \\ \pi(1-p)+(1-\pi)(1-q) & if\ y=0; \end{cases} \\
&= \pi p^y (1-p)^{1-y} + (1-\pi)q^y(1-q)^{1-y}
\end{aligned}
$$

上述式子中，y就是最后的观测变量，取值为$0,1$。随机变量z是隐变量，三硬币例子中表示的就是未观测到的抛掷硬币A的结果。$\theta=(\pi,p,q)$是模型的参数。

以上为了考虑进去隐变量用到了公式$P(A)=P(AB_1)+P(AB_2)+\cdots+P(AB_n)$，$P(AB)=P(A)P(B|A)$。

接下来对**整个实验**进行建模：

将观测数据表示为$Y=(Y_1,Y_2,\cdots,Y_n)^T$，则观测数据的**似然函数**为：

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

求模型参数θ的极大似然估计为：

$$
\hat{\theta} = arg\ \underset{\theta}{max}\ logP(Y|\theta)
$$

问题**没有解析解**，只有通过迭代的算法，EM算法不过是求解这个问题的一种迭代算法。

先选取初值$\theta^{(0)}=\pi^{(0)},p^{(0)},q^{(0)}=0.5,0.5,0.5$。

- E步：计算在模型参数$\theta^{(i)}$的**条件下观测数据y_j来自硬币B的概率**，也即推测出硬币A为正面的概率。
  - **第一步求出在观测数据下隐变量的条件概率分布：**（给定观测数据Y和当前的参数估计值$\theta^{(i)}$的条件，此处求出观测数据来自硬币B的概率值，记为$\mu_j^{(i+1)}$），如果未给定观测数据Y，则可以简单地得到$P(z_j=1|\theta^{(i)})=\pi^{(i)}$，实际上此处是**计算$\pi^{(i)}$在观察到$y_j$的后验**，视每次$y_i$取值的不同而改变。

$$
P(z_j=1|y_j,\theta^{(i)})=\mu_j^{(i+1)}=\frac{\pi^{(i)}(p^{(i)})^{y_j}(1-p^{(i)})^{1-y_j}}{\pi^{(i)}(p^{(i)})^{y_j}(1-p^{(i)})^{1-y_j}+(1-\pi^{(i)})(q^{(i)})^{y_j}(1-q^{(i)})^{1-y_j}}
$$

  - **进一步求出期望：**

$$
Q(\theta|\theta^{(i)})=\sum_{j=1}^{N}\left\{\mu_j^{(i+1)}ln[\pi p^{y_j}(1-p)^{1-y_j}]+(1-\mu_j^{(i+1)})ln[(1-\pi)q^{y_j}(1-q)^{1-y_j}]\right\}
$$

  这里我们可以明确地看到，Q**函数是对原来的“对数似然函数”关于隐变量的后验分布求期望。可以看作是对原来无法直接求解的对数似然函数做了一个改造，变得可以求解了。**

- M步：计算模型参数的新估计值（这实际上是极大化Q，即令偏导数为0推导出来的，此处省略推导过程）

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

  直观理解就是

$$A\text{出现正面的概率} = \frac{B\text{出现的概率和}}{B\text{出现的概率和} + C\text{出现的概率和}} = \frac{B\text{出现的概率和}}{n}$$

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

值得注意的是，上式中在$u_j^{(i+1)}$对于y的各种取值不相等的情况下，不能化简成$\frac{\sum_{j=1}^{n} y_j}{n}$。

直观理解就是

$$B\text{出现正面的概率} = \frac{B\text{出现正面的概率和}}{B\text{出现的概率和}}$$

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

直观的理解就是

$$C\text{出现正面的概率} = \frac{C\text{出现正面的概率和}}{C\text{出现的概率和}}$$

将$\theta^{(0)}$代入可得对于$y_j = 1$或$y_j = 0$来说，$\mu_j^{(1)} = 0.5$

代入公式可以得到：

$$\pi^{(1)} = 0.5, p^{(1)} = 0.6, q^{(1)} = 0.6$$

继续迭代得到：

$$\mu_j^{(2)} = 0.5, \pi^{(2)} = 0.5, p^{(2)} = 0.6, q^{(2)} = 0.6$$

可以看出，已经收敛，于是得到参数θ的极大似然估计。