机器学习第三次作业——EM算法与确定参数、分类

统计81 于越 *

April 12, 2021

1 EM算法简介

本次作业主要探讨机器学习中统计学习理论相关的部分。机器学习中的算法，深究其原理，都可以找到和概率统计相通的部分。我们希望通过学习机对于数据集的学习，可以尽可能地获取数据集背后的信息。在现实生活中，虽然很多值是可以被观测和被学习到的，但是还是有很多不完整的样本数据集存在于现实生活中，这些量就是我们常说的未知量。尽管我们确实不知道这些信息，但是我们渴望知道这些信息，因此我们就尝试着去对于这些“隐藏的”不知道的变量进行估计。这就是EM算法，通过已知信息，训练数据集的学习，去尽可能挖掘关于隐变量的信息，通过对于已知数据集的不停迭代，进而对于隐变量参数进行合适的估计与逼近。在本次作业中，我主要选取了两个主要的例子，去体现EM算法中的混合二项分布与混合高斯分布，并且对于这样的EM算法给出了自身的理解。

2 混合二项分布

2.1 过程推导

混合二项分布的一个典型例子是抛硬币，对于所抛的硬币进行合适的参数估计。在这里，我们假定有两枚硬币A与B，其中A正面朝上的概率用θ_A表示，B正面朝上的概率用θ_B表示。抛硬币之前我们需要对硬币进行适当地选择，用π_A表示选到硬币A的概率，用π_B表示选到硬币B的概率。但是事实上，我们很可能不知道我们所选择的是哪一枚硬币，因此我们想要尝试对着所选硬币的概率进行合适的估计。这样，在这个例子中的参数空间有4个参数:

$$\theta = \{\theta_A, \theta_B, \pi_A, \pi_B\} \tag{1}$$

*学号：2183210516

我们所要做的，就是在仅仅做实验的情况下，对于实际的这个参数空间进行估计。这样我们需要通过多次反复地利用实验数据，进行迭代逼近最后的结果。

假设两枚硬币为A与B，随机变量X表示实验中硬币正面朝上次数，即(x_i).再设隐随机变量为Z，表示所选择的硬币的概率(我们事先不知道选择的是哪一枚硬币)。用n表示选择一枚硬币之后的抛掷硬币次数，用k表示选择硬币的次数(做多少组实验),这样，我们就可以得到一个$k*n$维的矩阵数据集。

令

$$P(Z=A)=\pi_A, P(Z=B)=\pi_B \tag{2}$$

用以表示先验。

与此同时，可以获得当前的似然，也就是假定选择某枚硬币之后的正面朝上次数的概率，满足一个二项分布

$$P(X=x_i|Z=A;\theta_A)=C_n^{x_i}\theta_A^{x_i}(1-\theta_A)^{n-x_i} \tag{3}$$

$$P(X=x_i|Z=B;\theta_B)=C_n^{x_i}\theta_B^{x_i}(1-\theta_B)^{n-x_i} \tag{4}$$

而对于Z，该隐变量显然服从一个伯努利分布，即

$$P(Z=j)=\pi_j^{z_j}(1-\pi_j)^{1-z_j}, \qquad j=A,B \qquad z_j=0,1 \tag{5}$$

这样，可以获得一个对数的极大似然:

$$\begin{aligned} l(\theta)=lnP(X|\theta)=ln\Pi_{i=1}^{k}P(X=x_i|\theta)=\sum_{i=1}^{k}lnP(X=x_i|\theta) \\ =\sum_{i=1}^{k}ln\sum_{j\in\{A,B\}}P(X=x_i,Z=j|\theta)=ln\sum_{z}P(X,Z=j|\theta) \end{aligned} \tag{6}$$

E步：

$$\begin{aligned} \Omega(\theta,\theta^{old})=E_{Z|X,\theta^{old}}lnP(X,Z|\theta)=\sum_{j}P(Z|X,\theta^{old})lnP(X,Z|\theta) \\ =\sum_{j\in\{A,B\}}\sum_{i}P(Z=j|X=x_i,\theta^{old})lnP(X=x_i,Z=j|\theta)= \\ \sum_{i=1}^{k}P(Z=A|X=x_i,\theta^{old})lnP(X=x_i,Z=A|\theta) \\ +\sum_{i=1}^{k}P(Z=B|X=x_i,\theta^{old})lnP(X=x_i,Z=B|\theta) \end{aligned} \tag{7}$$

要求得上式的E步似然函数，我们需要求一个后验分布$P(Z=j|X=x_i;\theta_j)$，这需要用到贝叶斯公式。

我们先求联合分布：

$$P(X=x_i,Z=A;\theta_A)=C_n^{x_i}\theta_A^{x_i}(1-\theta_A)^{n-x_i} \tag{8}$$

$$P(X = x_i, Z = B; \theta_B) = C_n^{x_i} \theta_B^{x_i} (1 - \theta_B)^{n - x_i} \tag{9}$$

故下面使用贝叶斯公式求后验分布：

$$\begin{aligned} P(Z = A|X = x_i; \theta_A) &= \frac{P(X = x_i, Z = A; \theta_A)}{P(X = x_i|\theta)} \\ &= \frac{\pi_A C_n^{x_i} \theta_A^{x_i} (1 - \theta_A)^{n - x_i}}{\pi_A C_n^{x_i} \theta_A^{x_i} (1 - \theta_A)^{n - x_i} + \pi_B C_n^{x_i} \theta_B^{x_i} (1 - \theta_B)^{n - x_i}} \end{aligned} \tag{10}$$

同理，

$$\begin{aligned} P(Z = B|X = x_i; \theta_B) &= \frac{P(X = x_i, Z = B; \theta_B)}{P(X = x_i|\theta)} \\ &= \frac{\pi_B C_n^{x_i} \theta_B^{x_i} (1 - \theta_B)^{n - x_i}}{\pi_A C_n^{x_i} \theta_A^{x_i} (1 - \theta_A)^{n - x_i} + \pi_B C_n^{x_i} \theta_B^{x_i} (1 - \theta_B)^{n - x_i}} \end{aligned} \tag{11}$$

为便于推导，我们记

$$\gamma_i(A, \theta_A^{old}) = P(Z = A|X = x_i, \theta_A^{old}) \tag{12}$$

$$\gamma_i(B, \theta_B^{old}) = P(Z = B|X = x_i, \theta_B^{old}) \tag{13}$$

因为$\pi_A + \pi_B = 1$，我们记$\pi_A = \pi$.

故，我们有

$$\begin{aligned} l(\theta) = \sum_{i=1}^{k} lnP(X = x_i|\theta) &= \sum_{i=1}^{k} P(Z = j) lnP(X = x_{i|Z=j;\theta_j}) \\ &= \sum_{i=1}^{k} ln[C_n^{x_i} \theta_j^{x_i} (1 - \theta_j)^{n - x_i} \pi^{z_j} (1 - \pi)^{1 - z_j}] \\ = \sum_{i=1}^{k} [x_i ln\theta_j + (n - x_i) ln(1 - \theta_j) &+ z_j ln\pi + (1 - z_j) ln(1 - \pi) + C] \end{aligned} \tag{14}$$

注意到

$$\gamma_i(A, \theta^{old}) + \gamma_i(B, \theta^{old}) = 1 \tag{15}$$

最后可得

$$\begin{aligned} \Omega(\theta, \theta^{old}) = E_{Z|X,\theta^{old}} lnP(X, Z|\theta) &= \sum_j P(Z|X, \theta^{old}) lnP(X, Z|\theta) \\ &= \sum_{i=1}^{k} \gamma_i(A, \theta^{old})[x_i ln\theta_A + (n - x_i) ln(1 - \theta_A) + ln\pi] \\ + \sum_{i=1}^{k} \gamma_i(B, \theta^{old}) &[x_i ln\theta_B + (n - x_i) ln(1 - \theta_B) + ln(1 - \pi)] + C_0 \\ &= \sum_{i=1}^{k} x_i [\gamma_i(A, \theta^{old}) ln\theta_A + \gamma_i(B, \theta^{old}) ln\theta_B] \\ + \sum_{i=1}^{k} (n - x_i) &[\gamma_i(A, \theta^{old}) ln(1 - \theta_A) + \gamma_i(B, \theta^{old}) ln(1 - \theta_B)] \\ &+ \sum_{i=1}^{k} \gamma_i(A, \theta^{old}) ln\pi + \sum_{i=1}^{k} \gamma_i(B, \theta^{old}) ln(1 - \pi) + C_0 \end{aligned} \tag{16}$$

M步：最后，我们对

$$\theta = \{\theta_A, \theta_B, \pi_A, \pi_B\} \tag{17}$$

求导，并且令求导结果均为0，解方程，可以得出最后结果为

$$\theta_A^{new} = \frac{\sum_{i=1}^{k} x_i \gamma_i(A, \theta^{old})}{n \sum_{i=1}^{k} \gamma_i(A, \theta^{old})} \tag{18}$$

$$\theta_B^{new} = \frac{\sum_{i=1}^{k} x_i \gamma_i(B, \theta^{old})}{n \sum_{i=1}^{k} \gamma_i(B, \theta^{old})} = \frac{\sum_{i=1}^{k} x_i [1 - \gamma_i(A, \theta^{old})]}{n \sum_{i=1}^{k} [1 - \gamma_i(A, \theta^{old})]} \tag{19}$$

$$\pi^{new} = \frac{\sum_{i=1}^{k} \gamma_i(A, \theta^{old})}{k} \tag{20}$$

每一步求出新的参数后，判断算法是否收敛。若收敛，则终止，不然继续迭代知道算法终止即可获得参数空间的估计。

2.2 代码实例

我们依旧利用之前的抛硬币的例子进行实验。

2.2.1 实验一:1000组实验，每组实验投币1000次

我们假定实际的参数空间取值如下：

$$\theta_A = 0.7, \theta_B = 0.45, \pi_A = 0.6, \pi_B = 0.4 \tag{21}$$

实验结果如下：

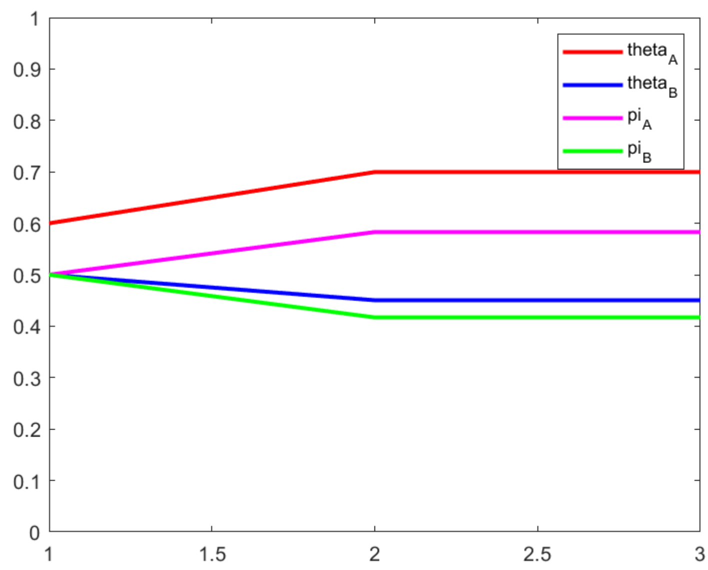


Figure 1: 实验一结果

迭代得出的参数空间结果为：

$$\theta_A = 0.6996, \theta_B = 0.4504, \pi_A = 0.5830, \pi_B = 0.4170 \tag{22}$$

可以看到迭代效果还是不错的。

接下来我们可以试着考虑一下参数选择大小接近的情况。

2.2.2 实验二：1000组实验，每组投币1000次，考虑隐变量参数大小接近情况

我们在实验二中设定的实际参数空间取值如下：

$$\theta_A = 0.8, \theta_B = 0.6, \pi_A = 0.50001, \pi_B = 0.49999 \tag{23}$$

实验结果如下：

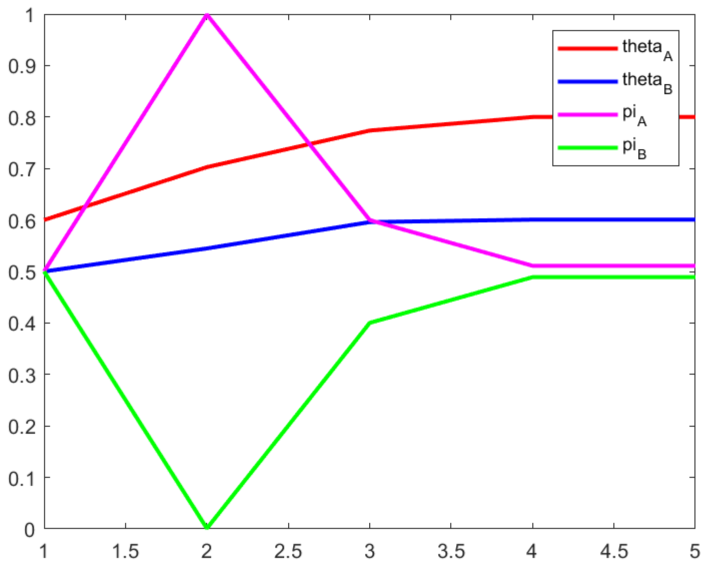


Figure 2: 实验二结果

迭代得出的参数空间结果为：

$$\theta_A = 0.8, \theta_B = 0.6, \pi_A = 0.5110, \pi_B = 0.4890 \tag{24}$$

迭代效果也是不错的。

接下来我们可以试着考虑一下比较极端的情况。

2.2.3 实验三：1000组实验，每组投币1000次，考虑极端情况

我们在实验三中设定的实际参数空间取值如下：

$$\theta_A = 0.8, \theta_B = 0.6, \pi_A = 1, \pi_B = 0 \tag{25}$$

实验结果如下：

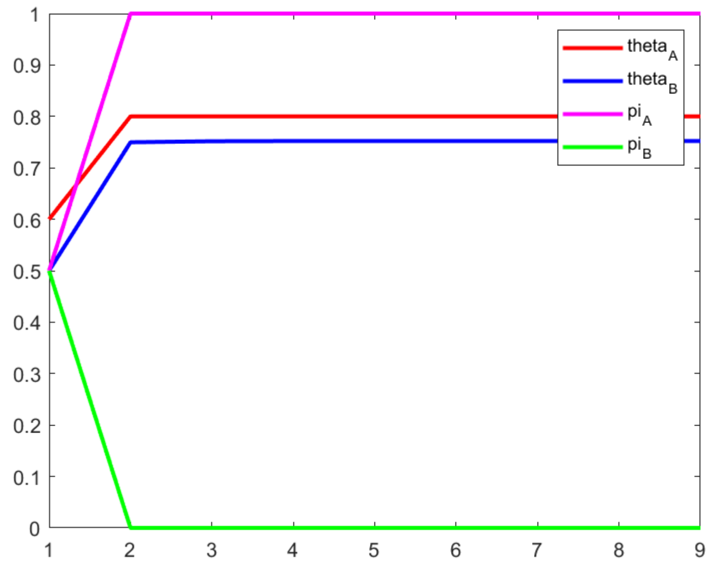


Figure 3: 实验三结果

迭代得出的参数空间结果为：

$$\theta_A = 0.8, \theta_B = 0.7523, \pi_A = 1, \pi_B = 0 \tag{26}$$

发现此时除了参数θ_B，其他的参数迭代效果都很好。这和我们设定本身就不会选择硬币B这个事实有关。因为我们为选择硬币B，学习机得不到关于硬币B的有效信息，因此关于参数θ_B，得到的结果也相当随机。

最后我们将数据矩阵缩小，观察结果。

2.2.4 实验四:10组实验，每组实验投币10次

我们假定实际的参数空间取值如下：

$$\theta_A = 0.7, \theta_B = 0.45, \pi_A = 0.6, \pi_B = 0.4 \tag{27}$$

实验结果如下：

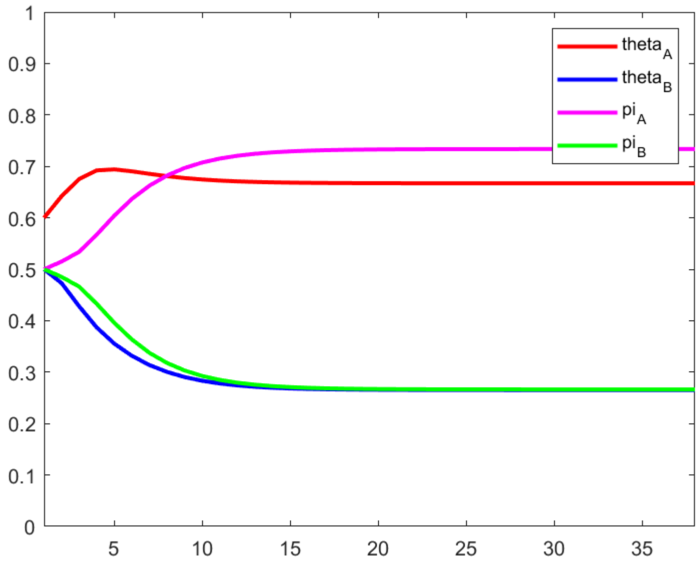


Figure 4: 实验四结果

迭代得出的参数空间结果为：

$$\theta_A = 0.6771, \theta_B = 0.2652, \pi_A = 0.7336, \pi_B = 0.2664 \tag{28}$$

显然，我们迭代参数估计的结果远没有实验一好了。这是容易理解的，因为学习机能学到的数据少了，因此掌握的信息也少，数据准确度也不如之前。

3 EM算法——混合高斯分布用以分类

3.1 过程推导

类比于混合二项分布，事实上混合高斯分布的隐变量也是做某种选择，只是这里的选择是选择一个聚类。在给定一个数据集服从于某一个混合高斯分布时，我们不知道这个数据集中的点具体属于哪一个高斯分布。因此，我们采用EM算法，同样通过不断地迭代，可以具体地得出隐变量Z，也就是数据点具体属于哪一个高斯分布的结果。

首先我们有观察数据集

$$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\} \tag{29}$$

观察量是独立于混合分布

$$p(x) = \sum_{i=1}^{k} \pi_k N(x|\mu_k, \Sigma_k) \tag{30}$$

其中参数空间

$$\theta = \{\pi_k, \mu_k, \Sigma_k\} \tag{31}$$

为模型参数。

考虑对数据集X的极大似然问题。

对数似然函数

$$lnP(X|\theta) = \sum_{i=1}^{N} ln(\sum_{i=1}^{k} \pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k)) \tag{32}$$

而$z_n = [z_{n1}, z_{n2}, \cdots, z_{nk}]$用来表示隐变量隐含$x_n$的信息。

若x_n来自第k个成分分布，则有$z_{nk} = 1$，否则$z_{nk} = 0$.因此有$\sum_k z_{nk} = 1$.

我们用$\pi_k = P(z_{nk} = 1)$表示数据点属于第k个聚类的概率。自然有$0 \leq \pi_k \leq 1$，且$\sum_k z_{nk} = 1$.π_k即为每个分量$N(X|\mu_k, \Sigma_k)$的权重。

那么，显然π_k服从一个多项分布，即

$$p(z_n) = \Pi_{k=1}^{k} \pi_k^{z_{nk}} \tag{33}$$

x在给定z取特定值情况下的条件分布为

$$p(x_n|z_{nk} = 1) = N(x_n|\mu_k, \Sigma_k) \tag{34}$$

则可得

$$p(x_n|z_n) = \Pi_{k=1}^{K} N(x_n|\mu_k, \Sigma_k)^{z_{nk}} = \pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k) \tag{35}$$

则x_n, z_n的联合分布为

$$\begin{aligned} p(x_n, z_n) &= p(x_n|z_n)p(z_n) = p(x_n|z_n)p(z_n|\pi) \\ &= \Pi_{k=1}^{K} (\pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k))^{z_{nk}} \end{aligned} \tag{36}$$

故x_n边缘分布为

$$p(x_n) = \sum_{z_n} p(x_n, z_n) = \sum_{z_n} (\Pi_{k=1}^{K} (\pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k))^{z_{nk}}) = \sum_k \pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k) \tag{37}$$

对n个独立分布数据点，完全数据似然函数为

$$p(X, Z| \therefore) = \Pi_{n=1}^{N} \Pi_{k=1}^{K} (\pi_k N(x_n|\mu_k, \Sigma_k))^{z_{nk}} \tag{38}$$

则完全数据的对数似然函数为

$$lnP(X, Z|\theta) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} [ln\pi_k + lnN(x_n|\mu_k, \Sigma_k)] \tag{39}$$

则E步：要通过计算似然关于Z在原参数下后验分布的期望使得完整数据都得以应用。

则

$$\begin{aligned} E_{Z|X,\theta^{old}}[lnP(X, Z|\theta)] &= \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{nk} P(z_{nk}|X, \theta^{old})[ln\pi_k + lnN(x_n|\mu_k, \Sigma_k)] \\ &= \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} E[z_{nk}|X, \theta^{old}][ln\pi_k + lnN(x_n|\mu_k, \Sigma_k)] \end{aligned} \tag{40}$$

而

$$E[z_{nk}|X,\theta^{old}] = P(z_{nk}=1|x_{nk},\theta^{old}) = \frac{P(z_{nk}=1,x_{nk}|\theta^{old})}{P(x_{nk}|\theta^{old})}$$
$$= \frac{P(x_{nk}|z_{nk}=1,\mu_k,\Sigma_k)P(z_{nk}=1|\pi_k)}{\sum_{j=1}^{K}P(z_{nj}=1,x_{nk}|\pi_k,\mu_k,\Sigma_k)} = \frac{\pi_k N(x_n|\mu_k,\Sigma_k)}{\sum_{j=1}^{K}\pi_k N(x_n|\mu_j,\Sigma_j)} \tag{41}$$

为了便于推导，我们令$E[z_{nk}|X,\theta] = \gamma(z_{nk})$.
M步：
高维正态分布的表达式为

$$f_x(x_1,x_2,\cdots,x_k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k|\Sigma|}}exp(-\frac{1}{2}(x-\mu)^{\mathrm{T}}\Sigma^{-1}(x-\mu)) \tag{42}$$

M步的目的是要使$E_{Z|X,\theta^{old}}[lnP(X,Z|\theta)]$最大化。
求新一步迭代的π_k可以采用lagrange乘子法。
这里过程略去，可求得新一步迭代的π_k值为

$$\pi_k = \frac{\sum_{n=1}^{N}\gamma(z_{nk})}{N} \tag{43}$$

也可求得新一步迭代的期望和方差为

$$\mu_k = \frac{\sum_{n=1}^{N}\gamma(z_{nk})x_n}{\sum_{n=1}^{N}\gamma(z_{nk})} \tag{44}$$

$$\Sigma_k = \frac{\sum_{n=1}^{N}\gamma(z_{nk})(x_n-\mu)(x_n-\mu)^{\mathrm{T}}}{\sum_{n=1}^{N}\gamma(z_{nk})} \tag{45}$$

每一步求出新的参数后，判断算法是否收敛。若收敛，则终止，不然继续迭代知道算法终止即可获得参数空间的估计。也可以规定一定的迭代次数，确保分类完成后再结束迭代。

3.2 代码实例

我们考虑属于一个混合高斯分布的点，然后用EM算法不断迭代，直到可以确定数据点属于哪一个具体的高斯分布，即完成分类。

3.2.1 实验一：5000个点进行分类，且数据点方差(分散度)不大

我们设置初始的参数π的向量为

$$\pi = [0.3, 0.5, 0.2] \tag{46}$$

随机生成5000个属于权重如上的某个混合高斯分布，分布点如下：

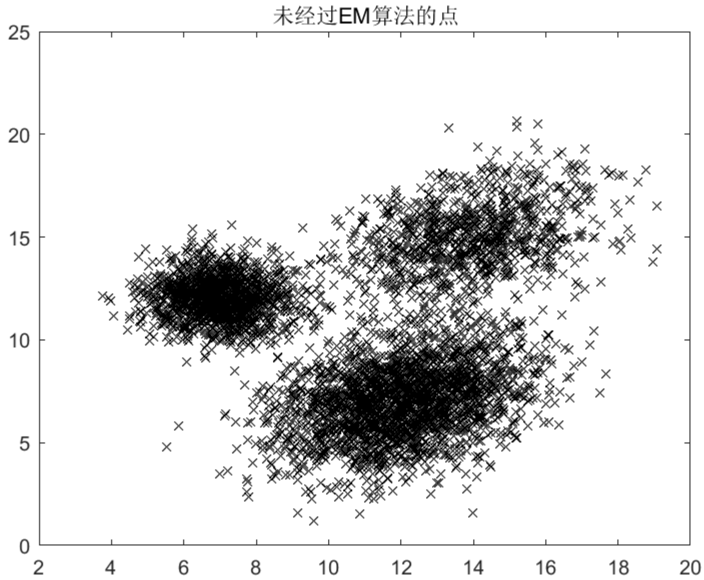


Figure 5: 实验一生成随机点

我们需要画出这些点具体所属的高斯分布与后续产生的结果进行比较。具体的高斯分布数据点如下：

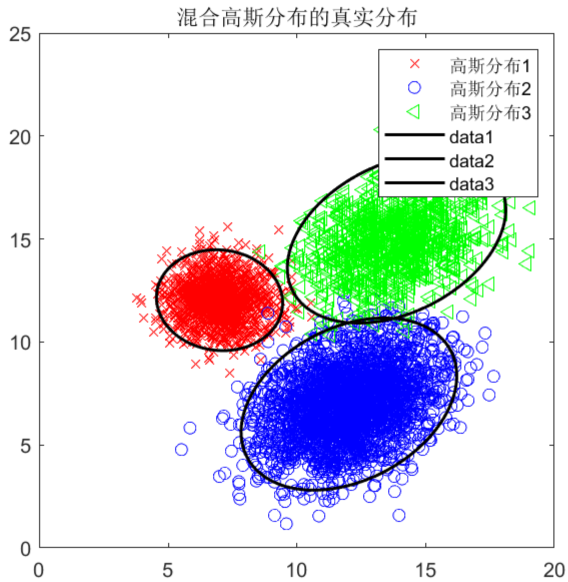


Figure 6: 实验一生成随机点真实值

经过100次的更新迭代后，我们计算出了新的参数向量π.我们对于每一个数据点的π，最大的那个分量取1，其余均为0，表示数据点具体属于哪一个高斯分布。

100次迭代后得到的数据点分类如下：

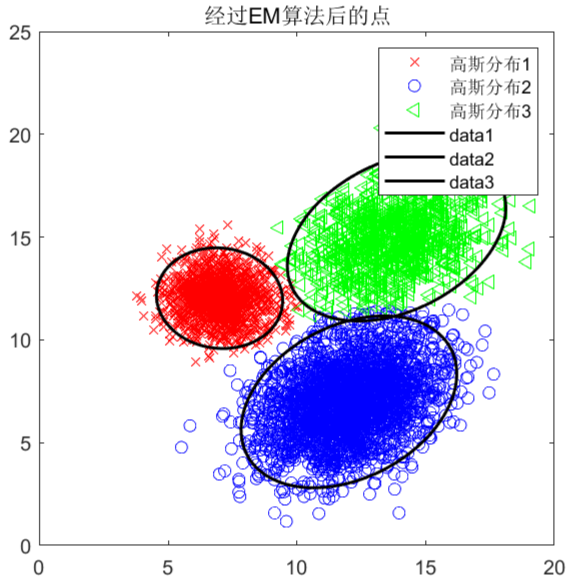
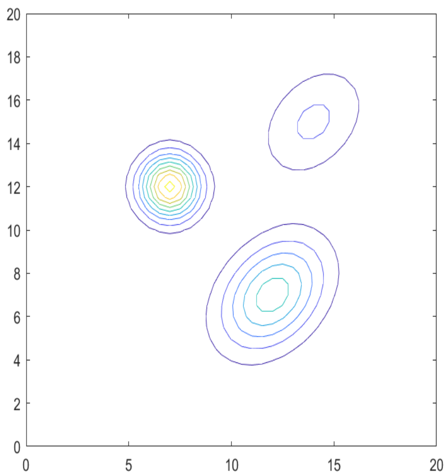
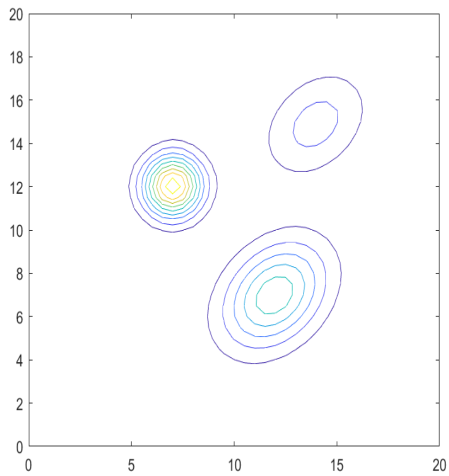


Figure 7: 实验一结果

二者对比一下感觉几乎一样。我们可以做出前后的高斯分布的等值线进行对比：



(a) 迭代前



(b) 迭代后

Figure 8: 迭代EM算法前后分布等高线对比

发现前后等高线位置和密集度近乎一样，说明分类效果很好。

3.2.2 实验二：500个点进行分类，且数据点方差(分散度)适中

我们设置初始的参数π的向量不变，仍为

$$\pi = [0.3, 0.5, 0.2] \tag{47}$$

随机生成500个属于权重如上的某个混合高斯分布，分布点如下：

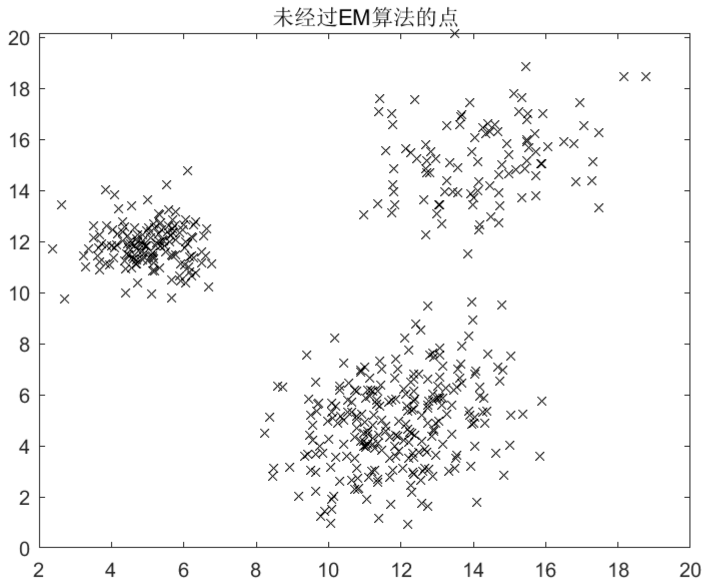


Figure 9: 实验二生成随机点

我们需要画出这些点具体所属的高斯分布与后续产生的结果进行比较。具体的高斯分布数据点如下：

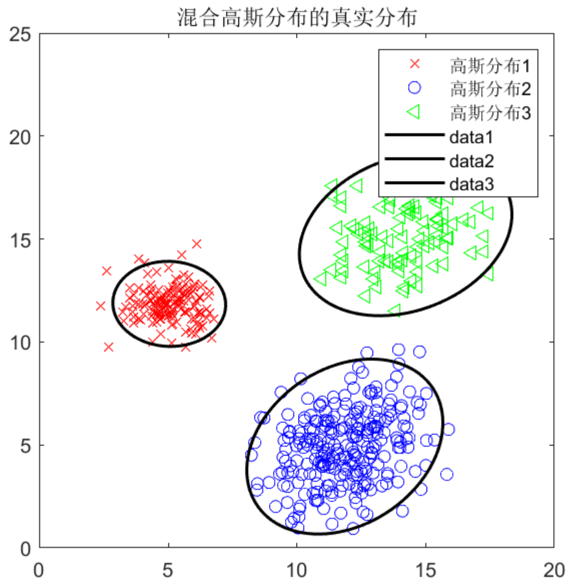


Figure 10: 实验二生成随机点真实值

经过100次的更新迭代后，我们计算出了新的参数向量π.仍旧用之前的方法确定属于哪一个聚类。

100次迭代后得到的数据点分类如下：

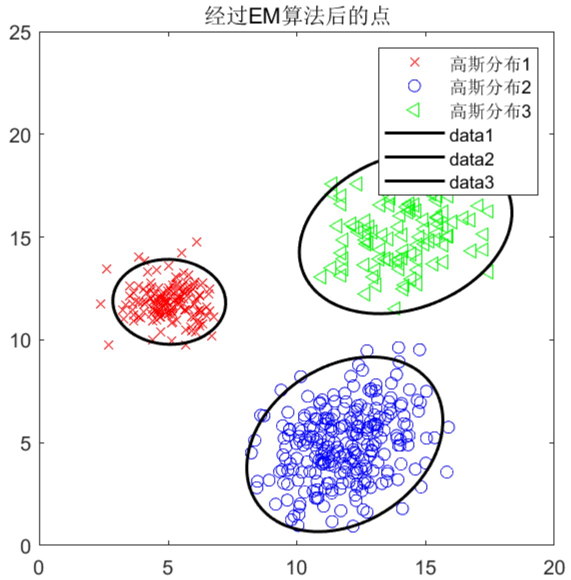
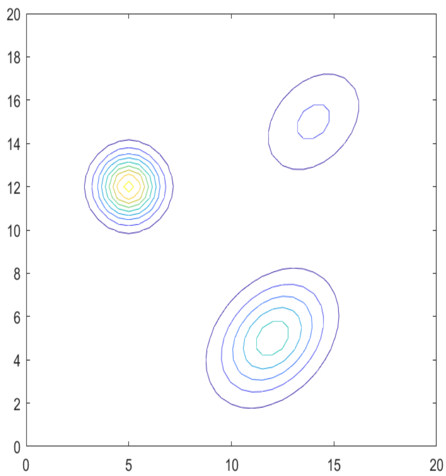
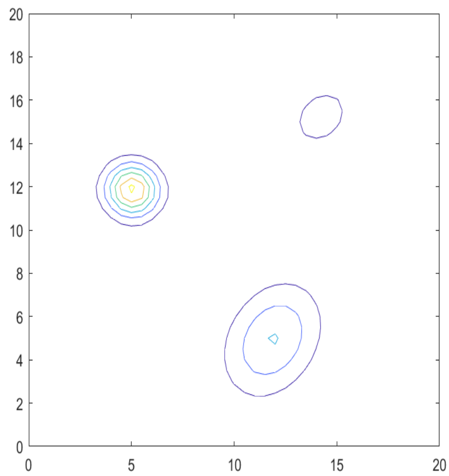


Figure 11: 实验二结果

二者对比一下感觉几乎一样。我们可以做出前后的高斯分布的等值线进行对比：



(a) 迭代前



(b) 迭代后

Figure 12: 迭代EM算法前后分布等高线对比

发现前后的位置是几乎一样的，但是分布等高线密集程度发生了一些改变，但变化不大。这个结果是完全可以的，这和数据点的减少有一定的关系。

我们再一次减少数据点，观察是否仍旧有着这样的变化。

3.2.3 实验三：50个点进行分类，且数据点方差(分散度)较大

我们设置初始的参数π的向量不变，仍为

$$\pi = [0.3, 0.5, 0.2] \tag{48}$$

随机生成50个属于权重如上的某个混合高斯分布，分布点如下：

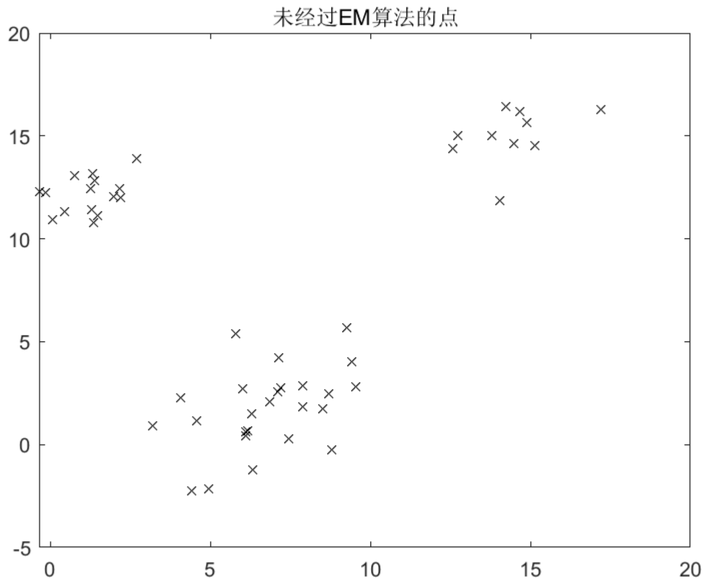


Figure 13: 实验三生成随机点

我们需要画出这些点具体所属的高斯分布与后续产生的结果进行比较。具体的高斯分布数据点如下：

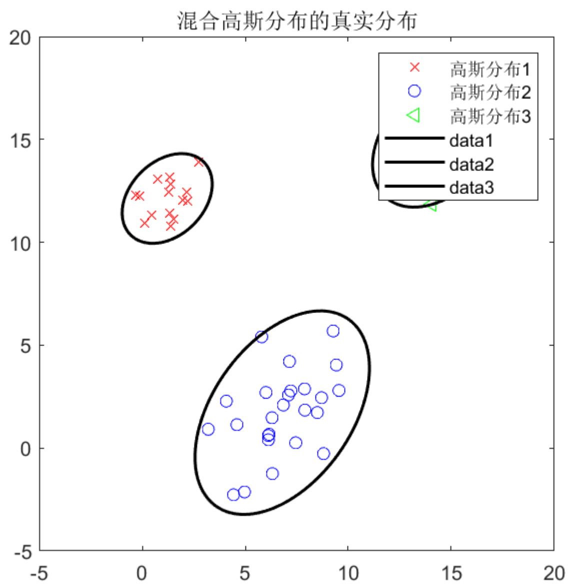


Figure 14: 实验三生成随机点真实值

经过100次的更新迭代后，我们计算出了新的参数向量π.仍旧用之前的方法确定属于哪一个聚类。

100次迭代后得到的数据点分类如下：

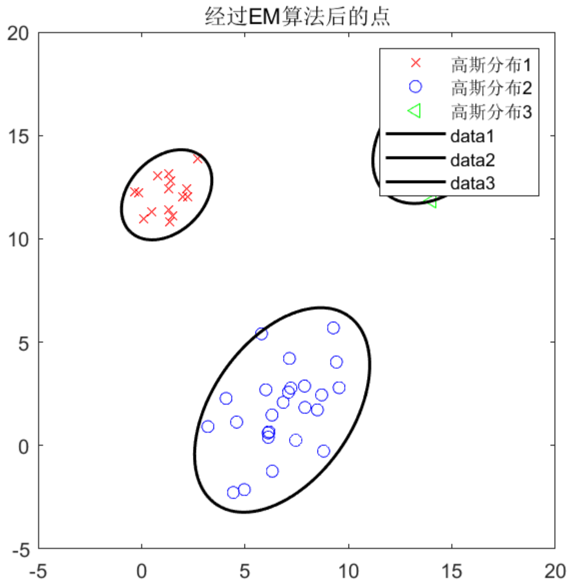
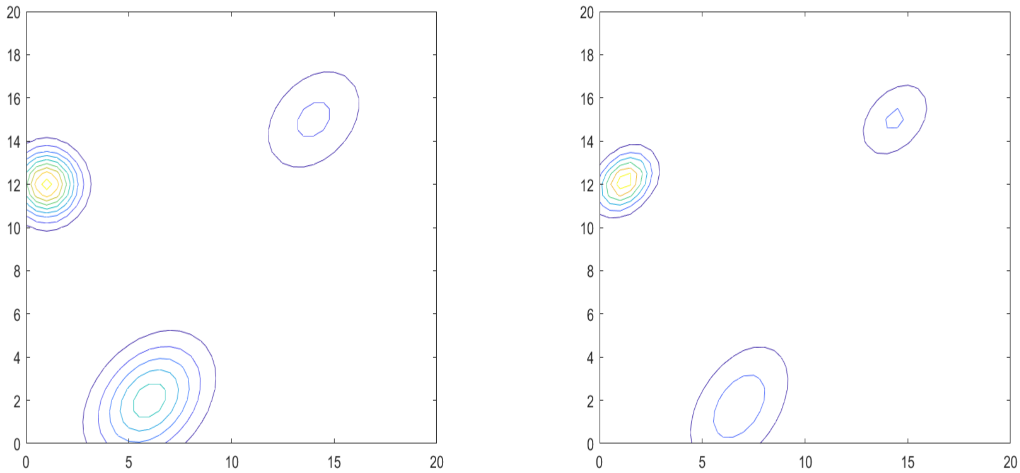


Figure 15: 实验三结果

二者对比一下还是感觉几乎一样。我们可以做出前后的高斯分布的等值线进行对比：



(a) 迭代前

(b) 迭代后

Figure 16: 迭代EM算法前后分布等高线对比

发现前后的位置是几乎一样的，但是分布等高线密集程度变化更大了。这时点的个数更少，这样的变化更明显。这间接说明了，在数据分散度较大的情况下，当数据点减

少，分类的位置判别效果仍旧很好，但是密集程度不如之前。

3.2.4 实验四：5000个点进行分类，且数据点方差(分散度)非常小(近乎重合)

我们设置初始的参数π的向量不变，仍为

$$\pi = [0.3, 0.5, 0.2] \tag{49}$$

随机生成5000个属于权重如上的某个混合高斯分布，分布点如下：

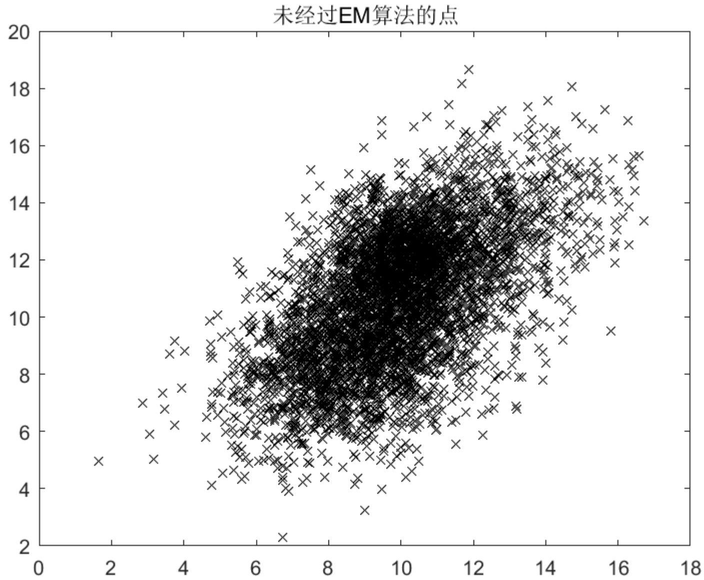


Figure 17: 实验四生成随机点

可以发现这时的数据点十分密集，挨得特别近，近乎可以看成是一个分布了。探讨这时的分类结果如何。

我们需要画出这些点具体所属的高斯分布与后续产生的结果进行比较。具体的高斯分布数据点如下：

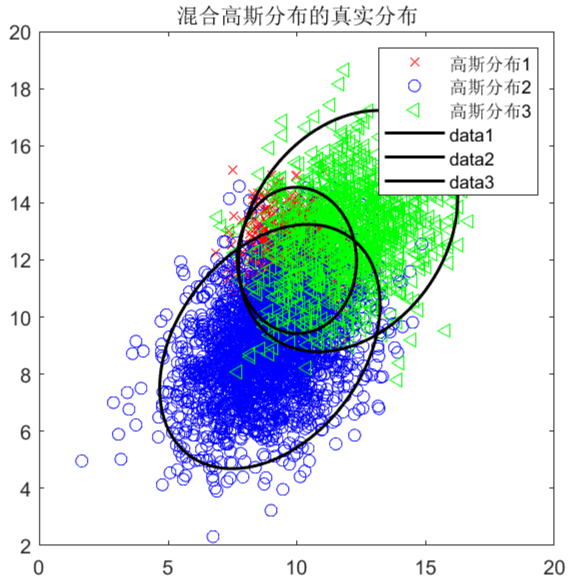


Figure 18: 实验四生成随机点真实值

发现这时要区分其实是一件非常困难的事情。那么EM算法的真实效果如何呢？

经过100次的更新迭代后，我们计算出了新的参数向量π.仍旧用之前的方法确定属于哪一个聚类。

100次迭代后得到的数据点分类如下：

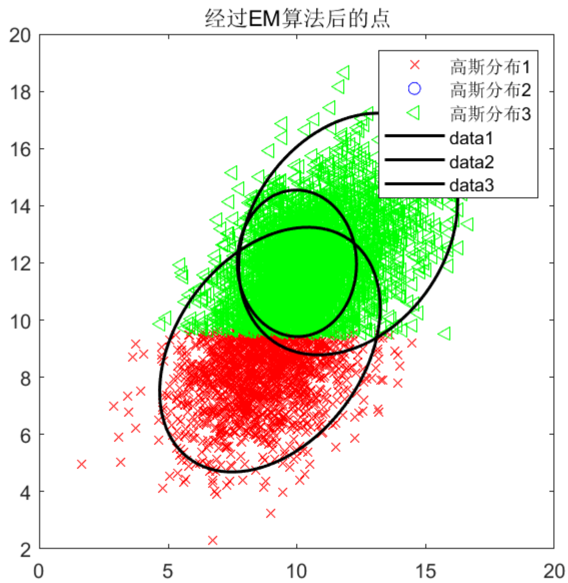
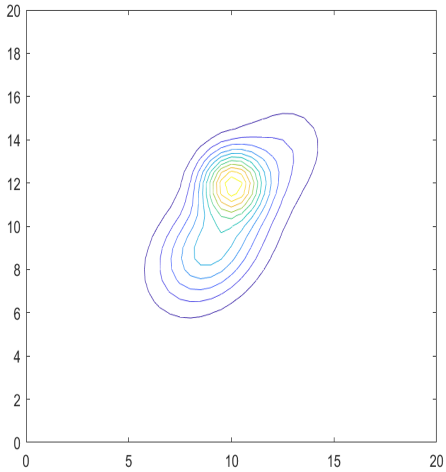
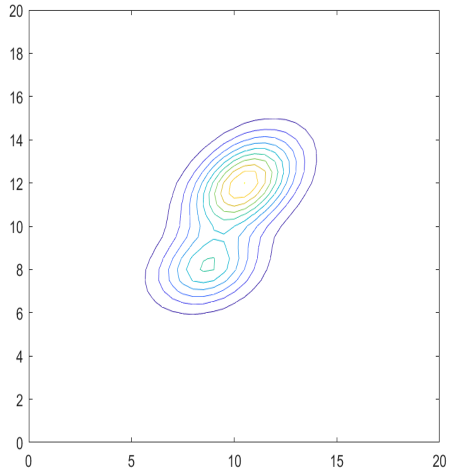


Figure 19: 实验四结果

我们可以很显然地发现，这次的分类结果相当糟糕，原来占比最大的蓝色点近乎消失，被红色点取代。绿色点很多的位置分布也出现了问题，红色点的分布范围比原先大了不少。我们画出前后的分布等值线图进一步比较：



(a) 迭代前



(b) 迭代后

Figure 20: 迭代EM算法前后分布等高线对比

对比这时的前后的等高线图，很明显地发现分布发生了很大的变化。这说明如果数据集很大，并且分布极其密集的情况下，迭代EM算法分类的效果并不是特别好。这时可以尝试别的聚类分类方法。

3.2.5 实验五：关于迭代次数的观察

我们设置初始的参数π的向量不变，仍为

$$\pi = [0.3, 0.5, 0.2] \tag{50}$$

为了观察迭代次数所产生的影响，我们选择500个点进行实验，将500个点分成3类。随机生成500个属于权重如上的某个混合高斯分布，分布点如下：

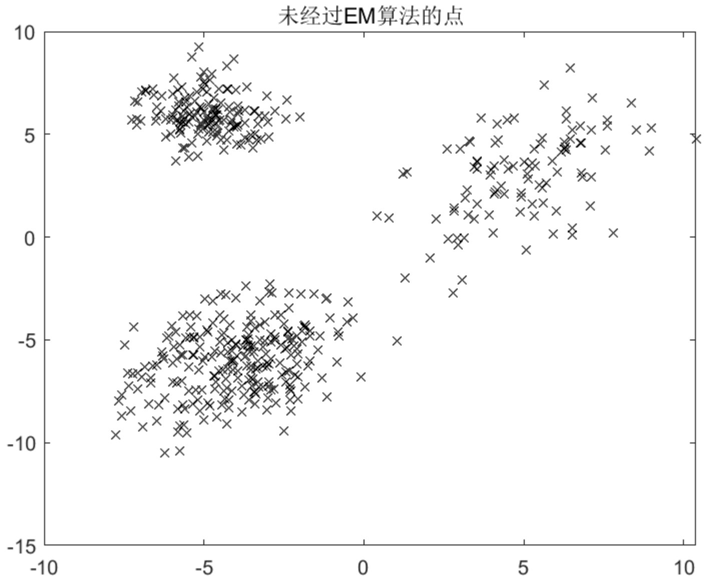


Figure 21: 实验五生成随机点

我们需要画出这些点具体所属的高斯分布与后续产生的结果进行比较。具体的高斯分布数据点如下：

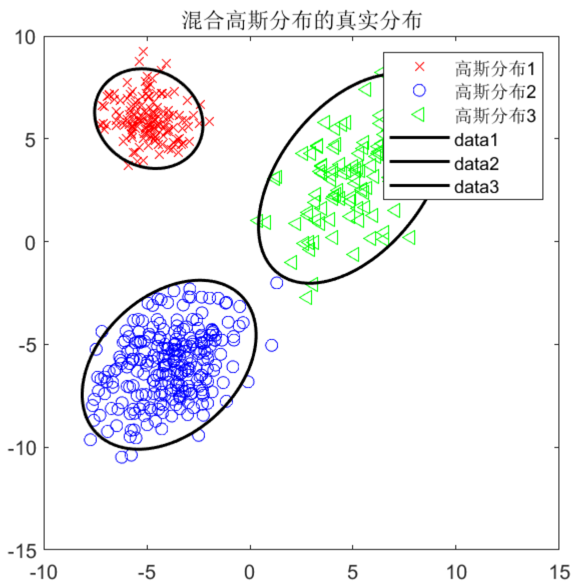
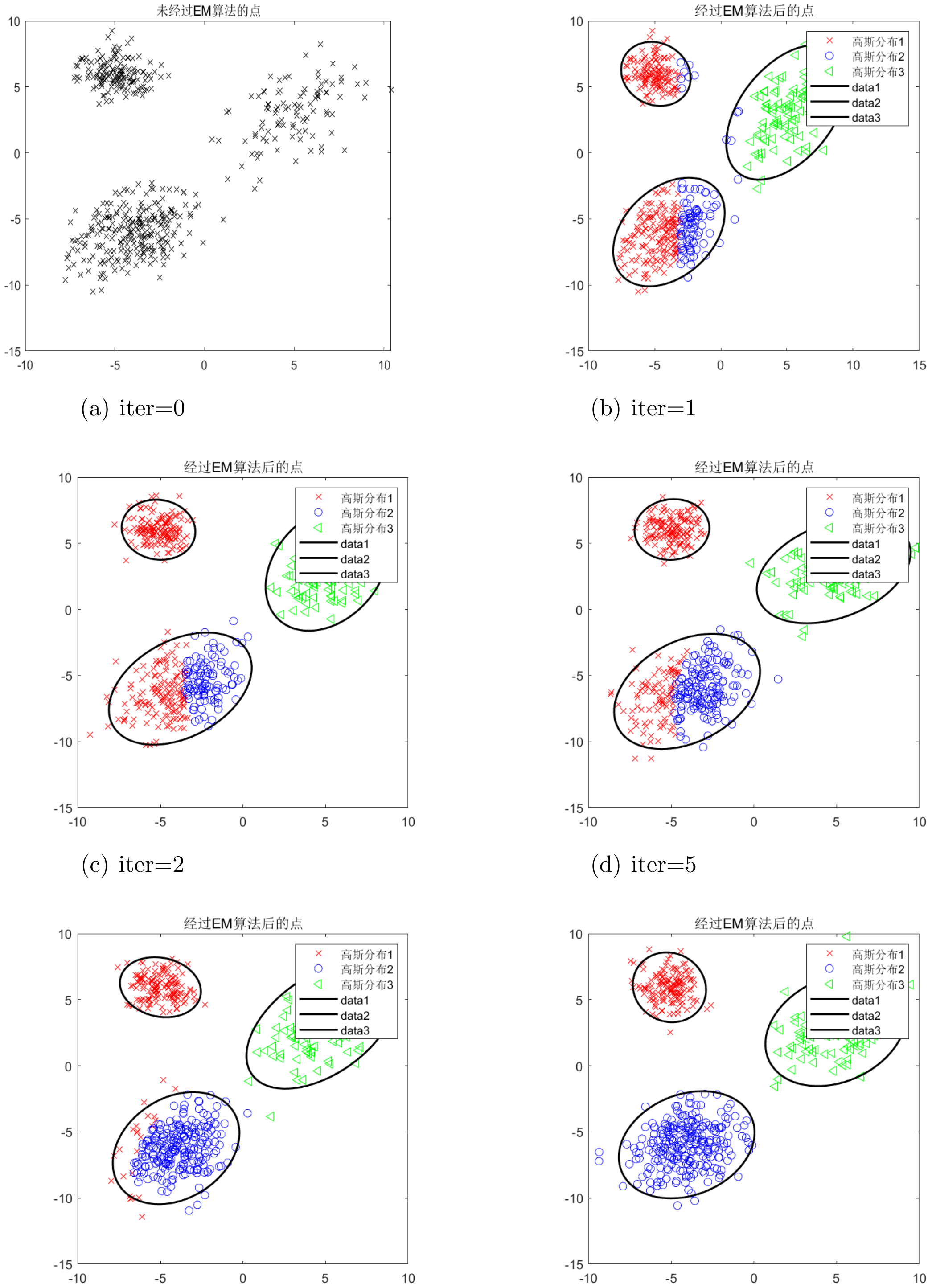


Figure 22: 实验五生成随机点真实值

我们在EM算法过程中变换迭代次数(迭代次数记为iter)，得到的分类结果如下：



(a) iter=0 (b) iter=1

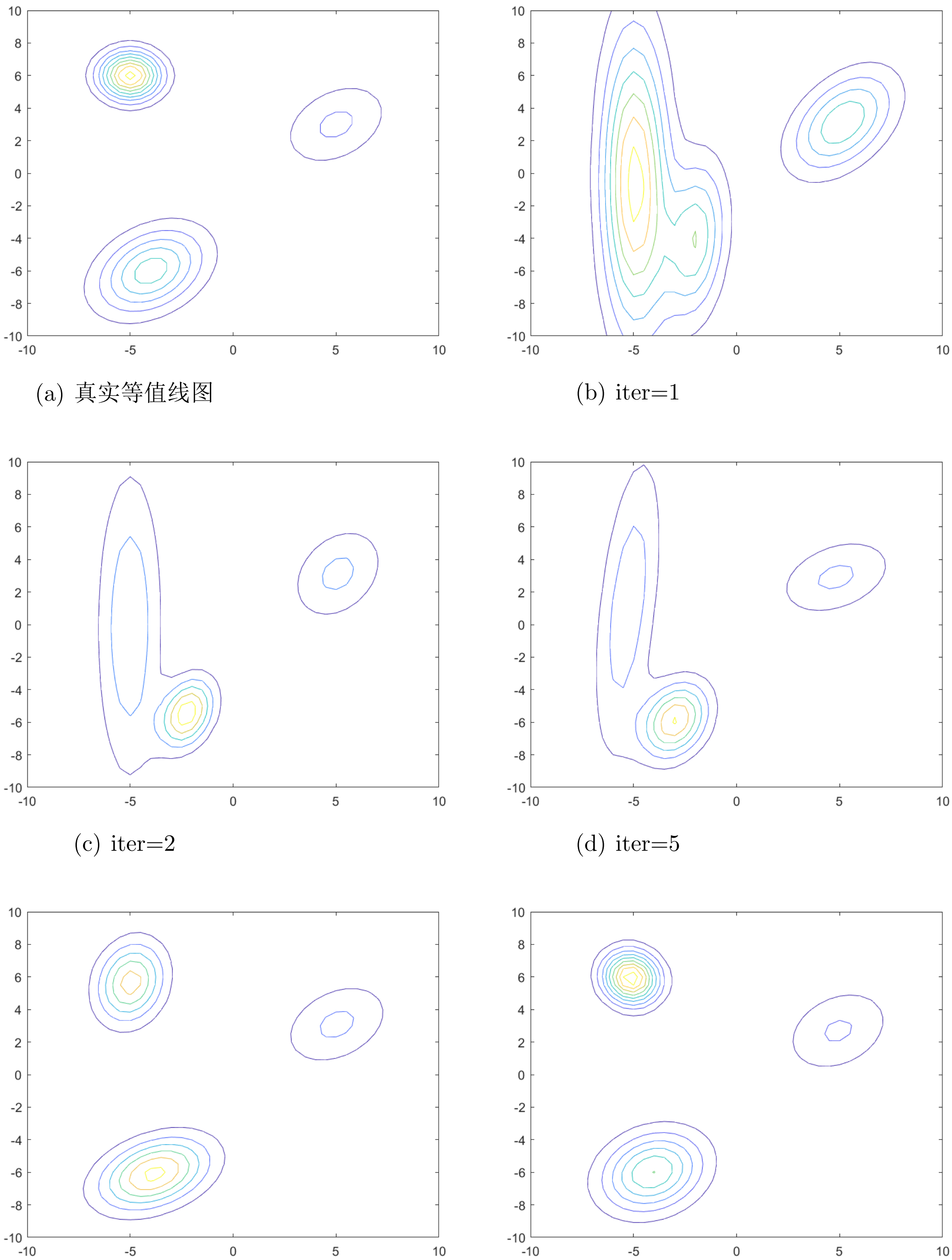
(c) iter=2 (d) iter=5

(e) iter=10 (f) iter=20

Figure 23: 迭代EM算法前后分布等高线对比

可以很显然地发现，随着迭代次数的增多，分类效果越来越好。要想完成混合高斯分布的分类，实质上只需要20步迭代足矣。

我们也可以画出随迭代次数增加的分布的等值线图：



(a) 真实等值线图 (b) iter=1

(c) iter=2 (d) iter=5

(e) iter=10 (f) iter=20

Figure 24: 迭代EM算法前后分布等高线对比

可以看到，随着迭代次数的增加，等值线图不断地向第一张图逼近。迭代次数到达20次时，等值线已经非常接近。

4 一些思考

在我看来，EM算法和机器学习的概率解释之间的关系是十分密切的。EM算法可以理解为监督学习中的分类的一种，也可以理解为一种软聚类的方式。我们在EM算法中不断进行更新的权重本质上是对于数据点集所属哪一个分类的概率。事实上，这一点我们通过对于之前分布等值线的描绘就可以清晰地看出。而也像之前实验中所表现出来的，当点集过大并且属于不同分类的点之间的距离过近时，进行分类是十分困难的，至少分类的效果不好。个人认为这是点集本身的分布对于权重的更新产生了干扰。可以看出在实验四中生成点集时，所有的点集其实可以近似地看成是分布在一个很大的椭圆中的，也就是说，我们把这5000个数据点集给理解成一个全新的非混合的高斯分布也是没有问题的，所以当我们要不断更新权重进行分类时，这个操作就很像是被“强行加上去进行”的一种操作，这也就导致最后数据点的分类结果十分糟糕，出现了本来应该是蓝色点却变成了绿色点的情况，因为本身生成点时，这些点的聚类结果就已经被混淆了，也就最后导致了这样的结果。

要将这样的分类思想给推广到实际生活中，我的理解是一种基于特征选择所进行的分类。我们要进行分类，或者说是软分类，首要的可以考虑的方式应该是特征选择。我们选择了什么样的特征，在这里可以说是给出了什么样的初始权重。我们基于初始权重进行EM算法的迭代，进而深入挖掘新的特征，不断利用特征的结合得到我们想要的结果。而且在EM算法中，我们有一个很重要的东西，就是关于隐变量的计算与估计。EM算法是似然方法的优良改进，表面上，EM算法将原先难以计算的极大似然问题进行了很好的转化，减少了计算的复杂度，更深层次地，是EM算法基于已有的数据点和分布做出了更为恰当的参数选择。分类应该是基于参数的，或者说基于特征。EM算法推动了特征选择的前进，甚至因为隐变量的存在，我们可以说这样的特征选择可以是在缺少观测信息的基础上实现的。我想，通过EM算法，我们也可以更深刻地理解概率和极大似然估计之间的区别，就是前者是已知分布和参数，求解事件结果出现的次数和频度；而后者是已知分布和事件结果，基于这种已有的特征，估计事件结果以最大概率出现情况下的参数。

5 总结

EM迭代算法主要采用隐变量的思想，可以应用于分类和确定隐变量参数的工作。事实上，对于EM算法如何收敛，判断收敛的标准，可以采用传统聚类的方法，即通过计算NMI值或者其他类似的互信息值来确定收敛与否。总之，EM算法是机器学习中的一个重要算法，通过与极大似然估计MLE理论以及贝叶斯理论的结合，实现了机器学习方面与概率统计理论的结合，为估计、学习参数提供了便利，值得进一步推广。

A 相关代码

```
%混合二项分布实验:
theta_A_ori=0.6;
theta_B_ori=0.5;
pi_A_ori=0.5;
pi_B_ori=0.5;%设定初始的参数空间中的个参数
4
E_last=1;%设定初始的期望值
error=0.000001;%设定迭代终止的误差值
n=10;%设定选择一次硬币后抛掷硬币的次数
k=5;%设定选择硬币的次数，即实验组数获得的结果矩阵应该为
(k*阶矩阵n)
iter=1;%设定初始迭代次数为1
result=zeros(k,n);%设定初始的结果矩阵全为0.记硬币正面
    朝上为，反面朝上为
10.
choice=zeros(k,1);%设定选择硬币的向量，记为选择硬币
1，为选择硬币A0B.
num=zeros(1,k);%设定表示每组实验正面朝上次数矩阵，即抛
    次实验多少次正面朝上。
n
max=100;
gamma_A=zeros(1,k);
gamma_B=zeros(1,k);
theta_A=zeros(1,max);
theta_B=zeros(1,max);
pi_A=zeros(1,max);
pi_B=zeros(1,max);
theta_A(1,1)=theta_A_ori;
theta_B(1,1)=theta_B_ori;
pi_A(1,1)=pi_A_ori;
pi_B(1,1)=pi_B_ori;
for i=1:k
choice(i,1)=binornd(1,0.6,1,1);
end%设定实际上会选到硬币的概率为A0，.6即
pi_A对应的，=0.6;pi_B=0.4.
```

```
for i=1:k
if(choice(i,1)==1)
result(i,1:n)=binornd(1,0.7,1,n);
else
result(i,1:n)=binornd(1,0.4,1,n);%在这里设定硬币实
    际正面朝上概率为
A0，即.7theta_A=0.7.相应地，
theta_B=0.4.
end
end
for i=1:k
for j=1:n
if(result(i,j)==1)
num(1,i)=num(1,i)+1;
end
end
end
for t=2:max
for i=1:k
gamma_A(1,i)=pi_A(1,t-1)*(theta_A(1,t-1)^(num(1,
    i)))
*((1-theta_A(1,t-1))^(n-num(1,i)))/(pi_A(1,t-1)*
(theta_A(1,t-1)^(num(1,i)))*
((1-theta_A(1,t-1))^(n-num(1,i)))+pi_B(1,t-1)*
(theta_B(1,t-1)^(num(1,i)))*((1-theta_B(1,t-1))
    ^(n-num(1,i))));
gamma_B(1,i)=pi_B(1,t-1)*(theta_B(1,t-1)^(num(1,
    i)))*
((1-theta_B(1,t-1))^(n-num(1,i)))/(pi_A(1,t-1)*
(theta_A(1,t-1)^(num(1,i)))*
((1-theta_A(1,t-1))^(n-num(1,i)))+pi_B(1,t-1)*
(theta_B(1,t-1)^(num(1,i)))*((1-theta_B(1,t-1))
    ^(n-num(1,i))));
end
theta_A(1,t)=sum(num.*gamma_A)/(n*sum(gamma_A));
theta_B(1,t)=sum(num.*gamma_B)/(n*sum(gamma_B));
pi_A(1,t)=sum(gamma_A)/k;
```

```
pi_B(1,t)=sum(gamma_B)/k;
diff=abs(theta_A(1,t)-theta_A(1,t-1))+
abs(theta_B(1,t)-theta_B(1,t-1))+abs(pi_A(1,t)-
    pi_A(1,t-1));
if(diff<=error)
break;
else
iter=iter+1;
end
end%迭代算法EM
iter
theta_A
theta_B
pi_A
pi_B
```

```
%混合高斯分布做分类():
N=5000;
pi_real=[3/10,5/10,2/10];
mu_real=[7,12;12,7;14,15];
cov_real(:,:,1)=[1,0;0,1];
cov_real(:,:,2)=[3,1;1,3];
cov_real(:,:,3)=[3,1;1,3];
X_1=mvnrnd(mu_real(1,:),cov_real(:,:,1),N*
    pi_real(1));
X_2=mvnrnd(mu_real(2,:),cov_real(:,:,2),N*
    pi_real(2));
X_3=mvnrnd(mu_real(3,:),cov_real(:,:,3),N*
    pi_real(3));
X=[X_1;X_2;X_3];
X=X(randperm(size(X,1)),:);
x=0:0.5:20;
y=0:0.5:20;
[x y]=meshgrid(x,y);
mesh=[x(:),y(:)];
```

```
nor_real=pi_real(1)*mvnpdf(mesh,mu_real(1,:),
    cov_real(:,:,1))
+pi_real(2)*mvnpdf(mesh,mu_real(2,:),cov_real
    (:,:,2))
+pi_real(3)*mvnpdf(mesh,mu_real(3,:),cov_real
    (:,:,3));
figure(1);
plot(X_1(:,1),X_1(:,2),'rx',X_2(:,1),X_2(:,2),
'bo',X_3(:,1),X_3(:,2),'g<');
title('混合高斯分布的真实分布');
legend('高斯分布1','高斯分布2','高斯分布3');
hold on;
confiEllipse(X_1,0.95);
hold on;
confiEllipse(X_2,0.95);
hold on;
confiEllipse(X_3,0.95);
hold on;
figure(2);
contour(x,y,reshape(nor_real,size(x,2),size(y,2)
    ));
figure(3);
surf(x,y,reshape(nor_real,size(x,2),size(y,2)));
figure(4);
plot(X(:,1),X(:,2),'kx');
title('未经过算法的点EM');

pi=[1/3,1/3,1/3];%初始化的取值pi
cov(:,:,1)=[1,0;0,1];
cov(:,:,2)=[1,0;0,1];
cov(:,:,3)=[1,0;0,1];
mu_y_init=(max(X(:,1))+min(X(:,1)))/2;
mu_x1_init=max(X(:,2))/4+3*min(X(:,2))/4;
mu_x2_init=2*max(X(:,2))/4+2*min(X(:,2))/4;
mu_x3_init=3*max(X(:,2))/4+min(X(:,2))/4;
gamma=zeros(size(X,1),length(pi));%gamma(i,j),是
    样本数量
```

```
i,是聚类数量j,gamma(i,j)表示样本属于聚类的概率，最大值
    表示为的聚类
iji
mu=[mu_x1_init,mu_y_init;mu_x2_init,mu_y_init;
mu_x3_init,mu_y_init];

%算法：EM
iter=40;
for i=1:iter
for j=1:length(pi)
gamma(:,j)=pi(j)*mvnpdf(X,mu(j,:),cov(:,:,j));
end
gamma=gamma./repmat(sum(gamma,2),1,size(gamma,2)
    );
%建立和一样规模的矩阵，矩阵每一行
    为gammagamma(:,1)+gamma(:,2)值
pi=sum(gamma,1)./size(gamma,1);
mu=gamma'*X;
mu=mu./repmat((sum(gamma,1))',1,size(mu,2));
for j=1:length(pi)
vari=repmat(gamma(:,j),1,size(X,2)).
*(X-repmat(mu(j,:),size(X,1),1));
cov(:,:,j)=(vari'*vari)/sum(gamma(:,j),1);
end
end

%估计
[c estimate]=max(gamma,[],2);

nor=pi(1)*mvnpdf(mesh,mu(1,:),cov(:,:,1))+pi(2)
*mvnpdf(mesh,mu(2,:),cov(:,:,2))+pi(3)
*mvnpdf(mesh,mu(3,:),cov(:,:,3));
figure(5);
contour(x,y,reshape(nor,size(x,2),size(y,2)));

one=find(estimate==1);
two=find(estimate==2);
```

```
three=find(estimate==3);

figure(6);
plot(X(one,1),X(one,2),'rx',X(two,1),X(two,2),'
    bo',
X(three,1),X(three,2),'g<');
title('经过算法后的点EM');
legend('高斯分布1','高斯分布2','高斯分布3');
hold on;
confiEllipse(X_1,0.95);
hold on;
confiEllipse(X_2,0.95);
hold on;
confiEllipse(X_3,0.95);
hold on;
```

```
%画置信椭圆:

function confiEllipse(datamatrix,p)
%print 2-demension confidence ellipse
%In:×n2 matrix, confidence probability p

data = datamatrix;
covariance = cov(data);
[eigenvec,eigenval] = eig(covariance);

[sortEigenval,index] = sort(diag(eigenval),'
    descend');
sortEigenvec = eigenvec(:,index);

largestEigenval = sortEigenval(1);
smallestEigenval = sortEigenval(end);
```

```
%求最小特征值
largestEigenvec = sortEigenvec(:,1);
%求最大特征向量（椭圆的长轴）

angle = atan2(largestEigenvec(2),
   largestEigenvec(1));
 %计算轴和最大特征向量之间的角度x, [-pi,pi]

if(angle < 0)
angle = angle + 2*pi;
end

avg = mean(data); %计算两列数据的均值

%计算置信椭圆的参数
chisquareVal = sqrt(chi2inv(p,2)); %卡方值
thetaGrid = linspace(0,2*pi);
phi = angle; %旋转角度
X0=avg(1);
Y0=avg(2);
a=chisquareVal*sqrt(largestEigenval); %轮距 长度
b=chisquareVal*sqrt(smallestEigenval);

ellipseXR = a*cos( thetaGrid ); %作用于直角坐标系
ellipseYR = b*sin( thetaGrid );

R = [ cos(phi) sin(phi); -sin(phi) cos(phi) ];
%旋转矩阵

rEllipse = [ellipseXR;ellipseYR]' * R; %旋转
plot(rEllipse(:,1) + X0,rEllipse(:,2) +
 Y0,'k-','linewidth',1.5);
axis square
end
```