

EM算法

1. EM算法基本思想

最大期望算法 (Expectation-Maximization algorithm, EM) , 是一类通过迭代进行极大似然估计的优化算法, 通常作为牛顿迭代法的替代, 用于对包含隐变量或缺失数据的概率模型进行参数估计。

最大期望算法基本思想是经过两个步骤交替进行计算:

第一步是计算期望 (E) , 利用对隐藏变量的现有估计值, 计算其最大似然估计值;

第二步是最大化 (M) , 最大化在E步上求得的最大似然值来计算参数的值。

M步上找到的参数估计值被用于下一个E步计算中, 这个过程不断交替进行。

2. EM算法推导

对于 m 个样本观察数据 $x = (x^1, x^2, \dots, x^m)$, 现在想找出样本的模型参数 θ , 其极大化模型分布的对数似然函数为:

$$\theta = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m \log P(x^{(i)}; \theta)$$

如果得到的观察数据有未观察到的隐含数据 $z = (z^{(1)}, z^{(2)}, \dots, z^{(m)})$, 极大化模型分布的对数似然函数则为:

$$\theta = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m \log P(x^{(i)}; \theta) = \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m \log \sum_{z^{(i)}} P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta) \quad (a)$$

由于上式不能直接求出 θ , 采用缩放技巧:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \log \sum_{z^{(i)}} P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta) &= \sum_{i=1}^m \log \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} \\ &\geq \sum_{i=1}^m \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} \end{aligned} \quad (1)$$

上式用到了Jensen不等式:

$$\log \sum_j \lambda_j y_j \geq \sum_j \lambda_j \log y_j; \lambda_j \geq 0, \sum_j \lambda_j = 1$$

并且引入了一个未知的新分布 $Q_i(z^{(i)})$ 。

此时, 如果需要满足Jensen不等式中的等号, 所以有:

$$\frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} = c, c \text{ 为常数}$$

由于 $Q_i(z^{(i)})$ 是一个分布，所以满足

$$\sum_z Q_i(z^{(i)}) = 1$$

综上，可得：

$$Q_i(z^{(i)}) = \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{\sum_z P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)} = \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{P(x^{(i)}; \theta)} = P(z^{(i)} | x^{(i)}; \theta)$$

如果 $Q_i(z^{(i)}) = P(z^{(i)} | x^{(i)}; \theta)$ ，则第(1)式是我们的包含隐藏数据的对数似然的一个下界。如果我们能极大化这个下界，则也在尝试极大化我们的对数似然。即我们需要最大化下式：

$$\arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m Q_i(z^{(i)}) \log \frac{P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}$$

简化得：

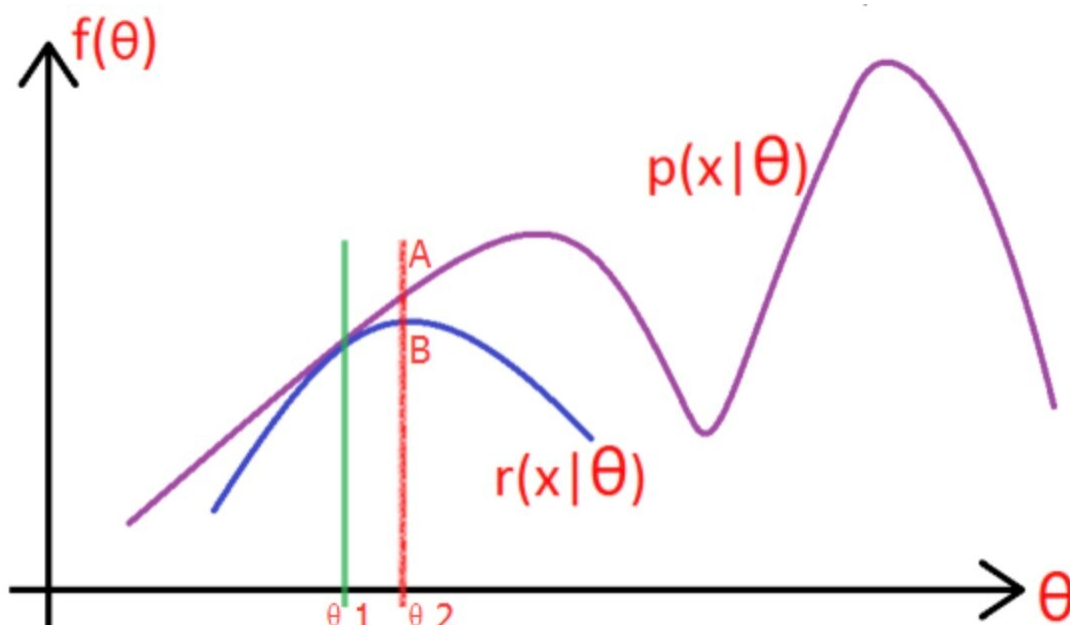
$$\arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m Q_i(z^{(i)}) \log P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$$

以上即为EM算法的M步， $\sum_{i=1}^m Q_i(z^{(i)}) \log P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$ 可理解为 $\log P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$

基于条件概率分布 $Q_i(z^{(i)})$ 的期望。以上即为EM算法中E步和M步的具体数学含义。

3. EM算法原理

考虑式 (a)，表达式中存在隐变量，通过EM算法迭代求解下界的最大值到收敛为止。



图片中的紫色部分是我们的目标模型 $p(x|\theta)$ ，该模型复杂，难以求解析解，为了消除隐变量 $z^{(i)}$ 的影响，我们可以选择一个不包含 $z^{(i)}$ 的模型 $r(x|\theta)$ ，使其满足条件 $r(x|\theta) \leq p(x|\theta)$ 。

求解步骤如下：

- (1) 选取 θ_1 ，使得 $r(x|\theta_1) = p(x|\theta_1)$ ，然后对此时的 r 求取最大值，得到极值点 θ_2 ，实现参数的更新。
- (2) 重复以上过程到收敛为止，在更新过程中始终满足 $r \leq p$ 。

4. EM算法流程

输入：观察数据 $x = (x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(m)})$ ，联合分布 $p(x, z; \theta)$ ，条件分布 $p(z|x; \theta)$ ，最大迭代次数 J

1) 随机初始化模型参数 θ 的初值 θ^0 。

2) for j from 1 to J :

a) E步。计算联合分布的条件概率期望： $Q_i(z^{(i)}) = P(z^{(i)}|x^{(i)}, \theta^j)$

$$L(\theta, \theta^j) = \sum_{i=1}^m \sum_{z^{(i)}} P(z^{(i)}|x^{(i)}, \theta^j) \log P(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$$

b) M步。极大化 $L(\theta, \theta^j)$ ，得到 θ^{j+1} : $\theta^{j+1} = \arg \max_{\theta} L(\theta, \theta^j)$ c) 如果 θ^{j+1} 收敛，则算法结束。否则继续回到步骤a) 进行E步迭代。

输出：模型参数 θ 。