在前面高斯混合模型中，我们已经讲过了期望最大化算法对其进行拟合。在本章中，我们要给出**期望最大化算法**（EM algorithm）的更广泛应用，并且演示如何将其应用到一个大系列的具有**潜在变量**（latent variables）的**估计问题**（estimation problems）。下面主要介绍 EM 的整个推导过程。

1. Jensen 不等式（Jensen's inequality）

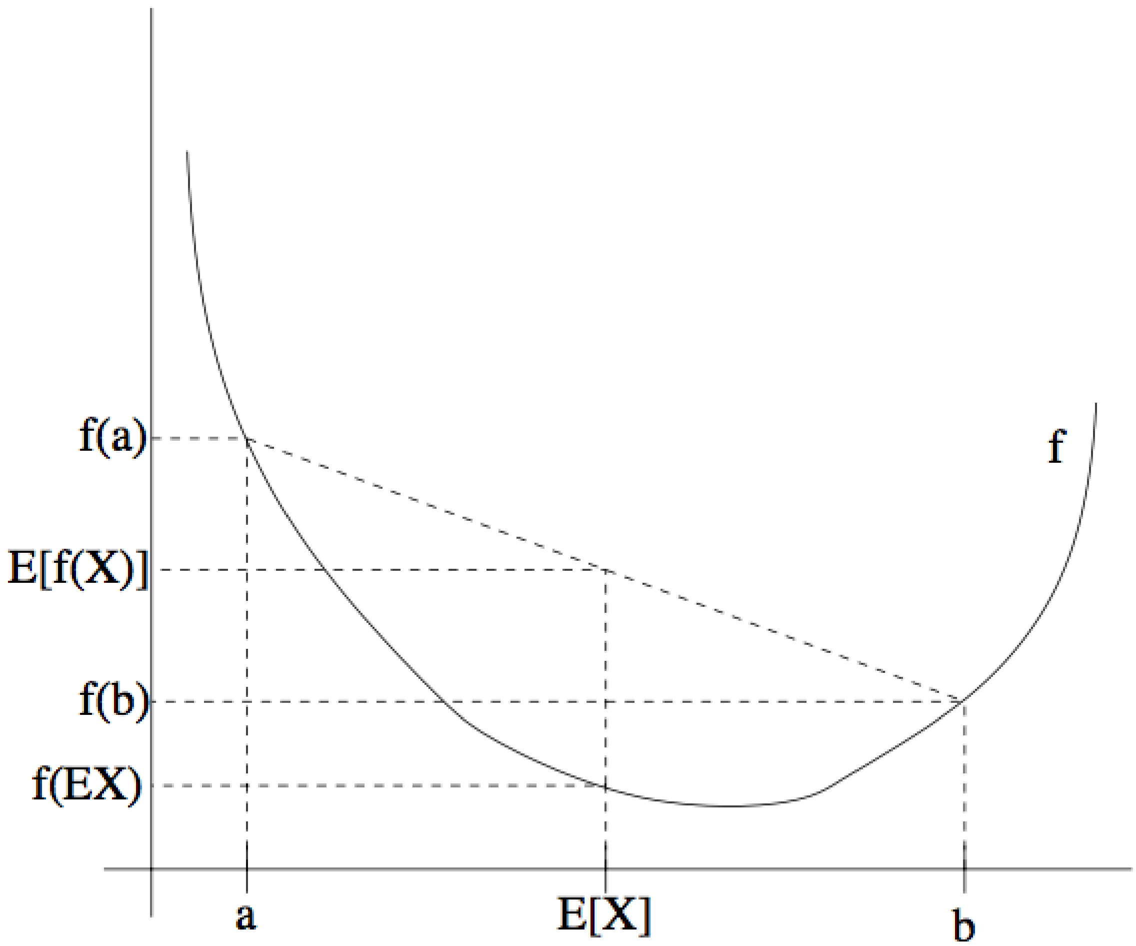
设 f 为一个函数，其定义域为整个实数域。如果函数 f 的二阶导数 $f''(x) \geq 0 (x \in R)$，则函数 f 为一个**凸函数**（**convex function**）。如果输入为向量，那么这个函数就泛化了，这个时候该函数的**海森矩阵**（hessian）H 就是一个半正定矩阵。如果对于所有的 x，都有二阶导数 $f''(x) > 0$，我们称这个函数 f 是**严格凸函数**（对于输入 x 是向量的情况，对应的条件就是海森矩阵正定）。这样就可以用如下形式来表述 **Jensen 不等式**：

定理（Theorem）：设 f 是一个凸函数，且设 X 是一个随机变量。然后则有：

$$E[f(X)] \geq f(E[X])$$
$$(\text{函数值的期望大于等于期望的函数值})$$

此外，如果函数 f 是严格凸函数，那么 $E[f(X)] = f(E[X])$ 当且仅当 $X = EX$ 的概率为 1，即 X 是常量。

为了方便理解这个定理，可以参考下面的图：



上图中，f 是一个凸函数，在图中用实线表示。另外 X 是一个随机变量，有 0.5 的概率取值为 a，另外有 0.5 的概率取值为 b。这样，X 的期望 EX 就在图中所示的 a 和 b 的中点位置。图中在 y 轴上也标出了 $f(a), f(b)$ 和 $f(EX)$。函数值的期望 $E[f(X)]$ 在 y 轴上就处于 $f(a)$ 和 $f(b)$ 之间的中点位置。由于 f 是凸函数，很明显 $E[f(X)] \geq f(EX)$。

> 当且仅当 $-f$ 是严格凸函数的时候，f 是**严格凹函数**（strictly concave function）。Jensen 不等式也适用于凹函数（concave function），不等式的方向要反过来，即 $E[f(X)] \leq f(EX)$。

2. EM 算法（The EM algorithm）

假设我们有一个估计问题，其中训练集 $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\}$ 包含了 m 个独立样本。我们用模型 $p(x, z)$ 对数据进行建模，拟合其参数，其**似然函数**（likelihood）如下所示:

$$
\begin{aligned}
l(\theta) &= \sum_{i=1}^{m} \log p(x;\theta) \\
&= \sum_{i=1}^{m} \log \sum_{z} p(x.\, z;\theta)
\end{aligned}
$$

然而，确切地找到对参数 θ 的最大似然估计可能会很难，此处的 $z^{(i)}$ 是一个**潜在的随机变量**。通常情况下，如果 $z^{(i)}$ 事先得到了，然后在进行最大似然估计，就容易多了。**期望最大化算法**（EM algorithm）是一种解决存在隐含变量优化问题的有效方法。既然不能直接最大化 $l(\theta)$，我们可以不断地构建 l 的下界（步骤 E）；然后对这个下界进行优化（步骤 M）。

对于每个 i，设 Q_i 表示该样本隐藏变量 $z^{(i)}$ 的某种分布，即 $z^{(i)} \sim Q_i, \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) = 1, Q_i(z^{(i)}) \geq 0$。（根据上面的高斯混合模型，可以将 $z^{(i)}$ 可能的取值假设为 $1, 2, .., k$ 等 k 个值）则有下列各式:

$$\begin{aligned}
\sum_i \log p(x^{(i)}; \theta) &= \sum_i \log \sum_{z^{(i)}} p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta) && (1) \\
&= \sum_i \log \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} && (2) \\
&\geq \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} && (3)
\end{aligned}$$

上面的等式（3）使用了 Jensen 不等式。其中的 $f(x) = \log(x)$ 是一个凹函数，而且式子

$$\sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}$$

表示的是变量 $\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}$ 基于 $z^{(i)}$ 的期望，其中 $z^{(i)}$ 是根据 Q_i 给定的分布确定。然后利用 Jensen 不等式可以得到:

$$f(E_{z^{(i)} \sim Q_i}[\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}]) \geq E_{z^{(i)} \sim Q_i}[f(\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})})]$$

接下来，对于任意的一个分布 Q_i，等式（3）就给出了似然函数 $l(\theta)$ 的下界。Q_i 有很多种可能选择，我们应该选择哪一个（我们选择合适的 Q_i 的目的是让下界尽可能大，等号尽可能成立，这样保证似然函数最大，然后得到参数 θ ）？假设我们对参数 θ 有某种估计（即 θ 假设已知），很自然的做法就是让下界紧逼当前 θ 值下的似然函数。也就是说，针对当前的 θ 值，我们让等号成立（即先构建下界，然后对下界优化）。

根据 Jensen 不等式，要让等式成立，需要让随机变量变成常数值，也就是需要:

$$\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} = c$$

其中常数 c 不依赖 $z^{(i)}$。要实现这一条件，只需满足:

$$Q_i(z^{(i)}) \propto p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$$

实际上，由于我们已知 $\sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) = 1$，即 $\sum_{z^{(i)}} p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta) = c$，这就进一步表明:

$$\begin{aligned}
Q_i(z^{(i)}) &= \frac{Q_i(z^{(i)})}{\sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)})} \\
&= \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{\sum_{z^{(i)}} p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)} \\
&= \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{p(x^{(i)}; \theta)} \\
&= p(z^{(i)} | x^{(i)}; \theta)
\end{aligned}$$

因此，在给定 $x^{(i)}$ 和参数 θ 的条件下，我们可以简单的选择 Q_i 为 $z^{(i)}$ 的**后验分布**（posterior distribution）。

至此，等式（3）给出了似然函数的一个下界，我们的目的就是最大化似然函数，目的转化为对 Q_i 的选择；然后在参数 θ 假定的情况下，Q_i 的计算公式就是 $z^{(i)}$ 的后验分布；这就是 EM 算法的步骤 E。接下来的步骤 M 中，就是在给定 Q_i 的条件下，最大化等式（3）中的方程，得到新的参数 θ。重复这两个步骤，就是完整的 EM 算法，总结如下：

重复一下过程直到收敛：$\{$

- 步骤 E：对每个 i，设：

$$Q_i(z^{(i)}) := p(z^{(i)}|x^{(i)};\theta) \qquad (4)$$

- 步骤 M：设

$$\theta := \arg\max_\theta \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)};\theta)}{Q_i(z^{(i)})} \qquad (5)$$

$\}$

我们怎么知道这个算法是否收敛？事实上，假设 $\theta^{(t)}$ 和 $\theta^{(t+1)}$ 是上面 EM 算法迭代过程中的某两个相邻参数，如果存在 $l(\theta^{(t)}) \le l(\theta^{(t+1)})$，这就表明 EM 算法迭代过程总是让似然函数**单调递增**的。根据上述介绍的 EM 算法，我们的参数起点不妨设为 $\theta^{(t)}$，这样我们选择的 Q_i 为：

$$Q_i^{(t)}(z^{(i)}) := p(z^{(i)}|x^{(i)};\theta^{(t)})$$

在等式（3）的推导过程中，我们选择的 Q_i 可以让不等式的等号成立，因此：

$$l(\theta^{(t)}) = \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i^{(t)}(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)};\theta^{(t)})}{Q_i^{(t)}(z^{(i)})} \qquad (6)$$

参数 $\theta^{(t+1)}$ 是通过让上式中等号右侧的部分最大化而得到的，即有：

$$\begin{aligned} l(\theta^{(t+1)}) &\ge \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i^{(t)}(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)};\theta^{(t+1)})}{Q_i^{(t)}(z^{(i)})} && (7) \\ &\ge \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i^{(t)}(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)};\theta^{(t)})}{Q_i^{(t)}(z^{(i)})} && (8) \\ &\ge l(\theta^{(t)}) && (9) \end{aligned}$$

不等式（7）成立的条件可以参见不等式（3），不等式（3）对于任意值的 Q_i, θ 都成立。不等式（8）的条件来自于 $\theta^{(t+1)}$ 的选择性，根据不等式（5），$\theta^{(t+1)}$ 取的是使得似然函数下界最大的参数值，故也成立。不等式（9）的条件来自于等式（6）。因此，EM 算法得到的参数能够保证似然函数的单调收敛。

> 如果我们定义
>
> $$J(Q,\theta) = \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)};\theta)}{Q_i(z^{(i)})}$$
>
> 通过我们之前的推导，可以知道 $l(\theta) \ge J(Q,\theta)$。这样 EM 算法也可看作是在 J 上的坐标上升法，其中步骤 E 在 Q 上对 J 进行了最大化，然后步骤 M 则在 θ 上对 J 进行最大化。

3. 高斯混合模型（Mixture of Gaussians Model）

有了对 EM 算法的广义定义之后，我们再来回顾一下之前的高斯混合（MoG）模型问题。其中要拟合的参数有 ϕ, μ, Σ。在高斯混合模型中，我们知道一下概率分布：

$$
\begin{aligned}
p(z^{(i)} = j) &= \phi_j \\
p(x^{(i)}|z^{(i)} = j) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma_j|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu_j)^T \Sigma_j^{-1}(x^{(i)} - \mu_j))
\end{aligned}
$$

步骤 E 很简单，还是按照上面的算法推导过程，只需要计算：

$$
w_j^{(i)} = Q_i(z^{(i)} = j) = P(z^{(i)} = j|x^{(i)}; \phi, \mu, \Sigma)
$$

这里面的 $Q_i(z^{(i)} = j)$ 表示的是在分布 Q_i 上 $z^{(i)}$ 取值为 j 的概率。

接下来在步骤 M 中，就是要最大化关于参数 ϕ, μ, Σ 的值：

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{m} \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \phi, \mu, \Sigma)}{Q_i(z^{(i)})} \\
&= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} Q_i(z^{(i)} = j) \log \frac{p(x^{(i)}|z^{(i)} = j; \mu, \Sigma) p(z^{(i)} = j; \phi)}{Q_i(z^{(i)} = j)} \\
&= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} \log \frac{\frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma_j|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu_j)^T \Sigma_j^{-1}(x^{(i)} - \mu_j))\phi_j}{w_j^{(i)}}
\end{aligned}
$$

1）先关于 μ_j 来进行最大化，即先求关于 μ_j 的偏导数，得到：

$$
\nabla_{\mu_j} = \sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)} (\Sigma_j^{-1} x^{(i)} - \Sigma_j^{-1} \mu_j)
$$

令上式为零，然后解出 μ_j 就得到了更新规则：

$$
\mu_j := \frac{\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}}
$$

2）然后推导 M 步骤中参数 ϕ_j 的更新规则。把仅关于参数 ϕ_j 的表达式结合起来，就能发现只需要最大化下面的表达式：

$$
\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} \log \phi_j
$$

然而，此处还有一个附加的约束条件，即 ϕ_j 的和为 1，因为其表示的是概率。为了保证约束条件成立，我们构建一个拉格朗日函数如下：

$$L(\phi) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} \log \phi_j + \beta(\sum_{j=1}^{k}\phi_j - 1)$$

> 这里我们不用在意约束条件 $\phi_j \geq 0$，因为很快就能发现，这里推导得到的解会自然满足这个条件的。

其中的 β 是拉格朗日乘数。求导，然后得到：

$$\nabla_{\phi_j} L(\phi) = \sum_{i=1}^{m} \frac{w_j^{(i)}}{\phi_j} + \beta$$

设导数为零，然后解方程，就得到了：

$$\begin{aligned}
\phi_j &= \frac{\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}}{-\beta} \\
\sum_{j=1}^{k}\phi_j &= \frac{\sum_{j=1}^{k}\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}}{-\beta} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)}}{-\beta} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{m} 1}{-\beta} \\
&= \frac{m}{-\beta} = 1
\end{aligned}$$

由于 $\sum_{j=1}^{k}\phi_j = 1$，可得 $-\beta = m$，由此可以得到参数 ϕ_j 的更新规则：

$$\phi_j = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}$$

接下来对 M 步骤中对 Σ_j 的更新规则的推导就很容易了。

4. 朴素贝叶斯混合模型（Mixture of Naive Bayes Model）

根据之前讲的生成式算法朴素贝叶斯法，在文本分类问题中，使用朴素贝叶斯混合模型的概率分布如下：

$$\begin{aligned}
p(z^{(i)} = 1) &= \phi \\
p(x^{(i)}|z^{(i)}) &= \prod_{j=1}^{n} p(x_j^{(i)}|z^{(i)}) \\
p(x_j^{(i)} = 1|z^{(i)} = 1) &= \phi_{j|z=1} \\
p(x_j^{(i)} = 1|z^{(i)} = 0) &= \phi_{j|z=0}
\end{aligned}$$

然后，我们可以写出 EM 算法的各步骤计算过程：

步骤 E:

$$w^{(i)} = p(z^{(i)} = 1 | x^{(i)}; \phi, \phi_{j|z})$$

步骤 M:

$$\phi = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} w^{(i)}$$

$$\phi_{j|z=1} = \frac{\sum_{i=1}^{m} w^{(i)} 1\{x_j^{(i)} = 1\}}{\sum_{i=1}^{m} w^{(i)}}$$

$$\phi_{j|z=0} = \frac{\sum_{i=1}^{m} (1 - w^{(i)}) 1\{x_j^{(i)} = 1\}}{\sum_{i=1}^{m} (1 - w^{(i)})}$$

其实与生成式算法相似，只不过把 y 换成了 z，并重复多次直至收敛。