In [ ]:
```python
import numpy as np
import torch
import torch.nn as nn
import torchvision
from torch.utils.data import DataLoader, TensorDataset
from sklearn.mixture import GaussianMixture
import matplotlib.pyplot as plt
import tqdm

torch.manual_seed(1)
np.random.seed(1)
```

Instruções gerais: Sua submissão deve conter:

1. Um "ipynb" com seu código e as soluções dos problemas
2. Uma versão pdf do ipynb

Caso você opte por resolver as questões de "papel e caneta" em um editor de $\LaTeX$ externo, o inclua no final da versão pdf do 'ipynb'--- submetendo um único pdf.

Trabalho de casa 08: K-means e Mixture models

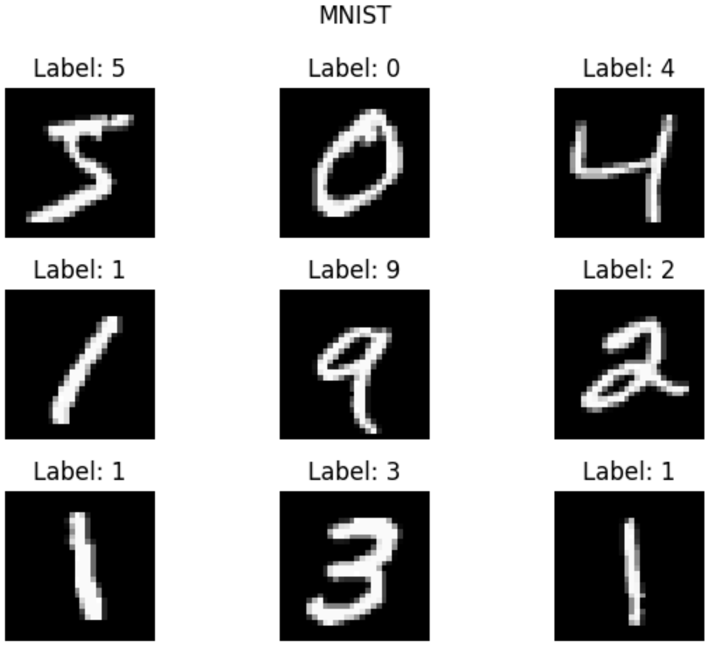
Exercícios práticos

Ler os dados

In [ ]:
```python
mnist_trainset = torchvision.datasets.MNIST(root='./data', train=True, download=True,
                                            transform=torchvision.transforms.ToTensor())
fashion_mnist_trainset = torchvision.datasets.FashionMNIST(root='./data', train=True, download=True,
                                                           transform=torchvision.transforms.ToTensor())

mnist_testset = torchvision.datasets.MNIST(root='./data', train=False, download=True,
                                           transform=torchvision.transforms.ToTensor())
```

In [ ]:
```python
def display_nine_images(dataset):
    for i, (image, label) in enumerate(dataset):
        plt.subplot(3, 3, i + 1)
        plt.imshow(image.permute(1, 2, 0), cmap='gray')
        plt.axis('off')
        plt.title(f'Label: {label}')
        if i >= 8: break
    plt.suptitle(dataset.__class__.__name__)
    plt.tight_layout()
```

In [ ]:
```python
display_nine_images(mnist_trainset)
```



In [ ]:
```python
display_nine_images(fashion_mnist_trainset)
```

1. Implemente o algoritmo de K-means e aplique-o ao MNIST usando $K = 10$ (o número de dígitos no banco de dados) --- inicializando os centroides aleatoriamente ou usando a estratégia do k-means++. Considere também inicializar os centróides como as médias das imagens de cada classe (é possível já que MNIST possui labels). Em geral, imagens similares são agrupadas junto? Plote exemplos de amostras em cada cluster.

In [ ]:

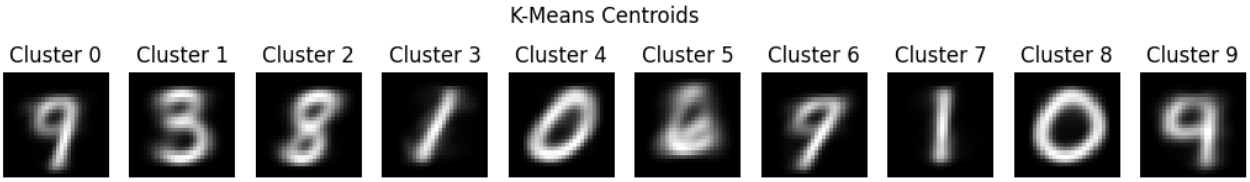
```python
class KMeans:
    def __init__(self, n_clusters, max_iter=100, device: str = None, seed: int = None):
        self.n_clusters = n_clusters
        self.max_iter = max_iter
        self.device = torch.device(device) if device else torch.device('cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu')
        self.centroids = None
        self.labels = None
        if seed is not None:
            np.random.seed(seed)
            torch.manual_seed(seed)
        if torch.cuda.is_available(): # GPU
            torch.set_default_device('cuda')

    def kmeans_pp(self, X):
    # Aplica o algoritmo Kmeans++ para inicializar os centroides
        centroids = torch.zeros(self.n_clusters, X.size(1))
        chosen = torch.tensor(np.random.choice(len(X), 1))
        centroids[0] = X[chosen]
        for i in range(1, self.n_clusters):
            distances = torch.cdist(X, centroids[:i])
            probabilities = (distances ** 2).min(dim=1)[0].cpu().numpy()
            probabilities[chosen.cpu().numpy()] = 0
            probabilities /= probabilities.sum()
            chosen = torch.tensor(np.random.choice(len(X), 1, p=probabilities))
            centroids[i] = X[chosen]
        return centroids


    def fit(self, X: torch.Tensor, targets: torch.Tensor = None, init: str = None):
        X = X.to(self.device)
        if init == "random_centroids":
            # Inicializa os centroides aleatoriamente
            self.centroids = X[torch.tensor(np.random.choice(len(X), self.n_clusters, replace=False))]
        elif init == "kmeans++":
            # Inicializa os centroides usando o algoritmo KMeans++
            self.centroids = self.kmeans_pp(X)
        elif init == "mean":
            # Inicializa os centroides como as médias das imagens de cada classe
            self.centroids = torch.zeros(self.n_clusters, X.size(1))
            for i in range(self.n_clusters):
                self.centroids[i] = X[targets == i].mean(dim=0)
        else:
            raise ValueError("init deve ser 'random_centroids' ou 'kmeans++'")

        for i in tqdm.tqdm(range(self.max_iter), desc='Iteração'):
            old_centroids = self.centroids.clone()
            distances = torch.cdist(X, self.centroids)
            new_labels = torch.argmin(distances, dim=1)
            for j in range(self.n_clusters):
                self.centroids[j] = X[new_labels == j].mean(dim=0)

            if torch.all(old_centroids == self.centroids):
                print(f'Convergiu na iteração {i}')
                break
        self.labels = new_labels
```

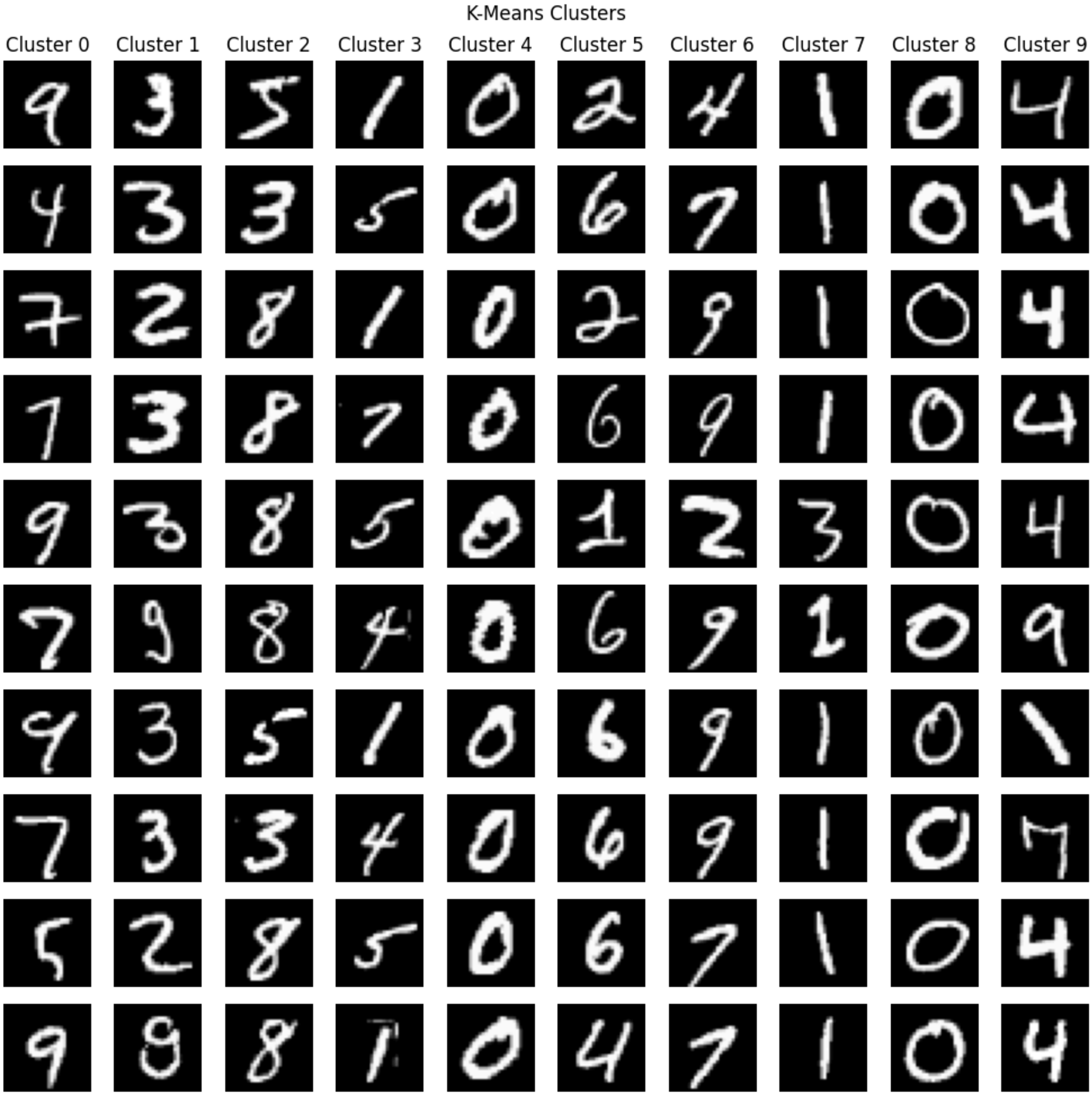
```
    def plot_centroids(self):
        plt.figure(figsize=(13, 2))
        for i in range(self.n_clusters):
            plt.subplot(1, self.n_clusters, i + 1)
            plt.imshow(self.centroids[i].cpu().numpy().reshape(28, 28), cmap='gray')
            plt.axis('off')
            plt.title(f'Cluster {i}')
        plt.suptitle('K-Means Centroids')
        plt.show()

    def plot_clusters(self, X):
        X, labels = X.cpu(), self.labels.cpu()
        plt.figure(figsize=(10, 10))
        for i in range(self.n_clusters):
            cluster_images = X[labels == i][:10]
            for j, image in enumerate(cluster_images):
                plt.subplot(10, self.n_clusters, i + j * self.n_clusters + 1)
                plt.imshow(image.numpy().reshape(28, 28), cmap='gray')
                plt.axis('off')
                if j == 0:
                    plt.title(f'Cluster {i}')
        plt.suptitle('K-Means Clusters')
        plt.tight_layout()
        plt.show()
```

Vamos plotar os centroides e as imagens mais próximas de cada cluster. Começamos inicializando os centroides aleatoriamente.

In [ ]:
```
data, targets = mnist_trainset.data.flatten(1).float(), mnist_trainset.targets
kmeans = KMeans(n_clusters=10, seed=42)
kmeans.fit(data, targets, init="random_centroids") # Inicializa os centroides aleatoriamente

kmeans.plot_centroids()
kmeans.plot_clusters(data)
```

```
Iteração:  62%|██████    | 62/100 [00:03<00:02, 18.45it/s]
Convergiu na iteração 62
```

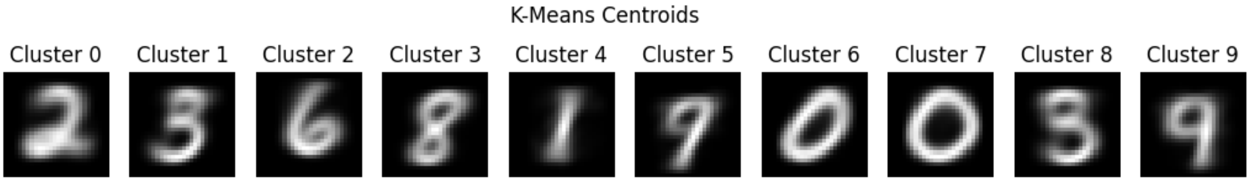


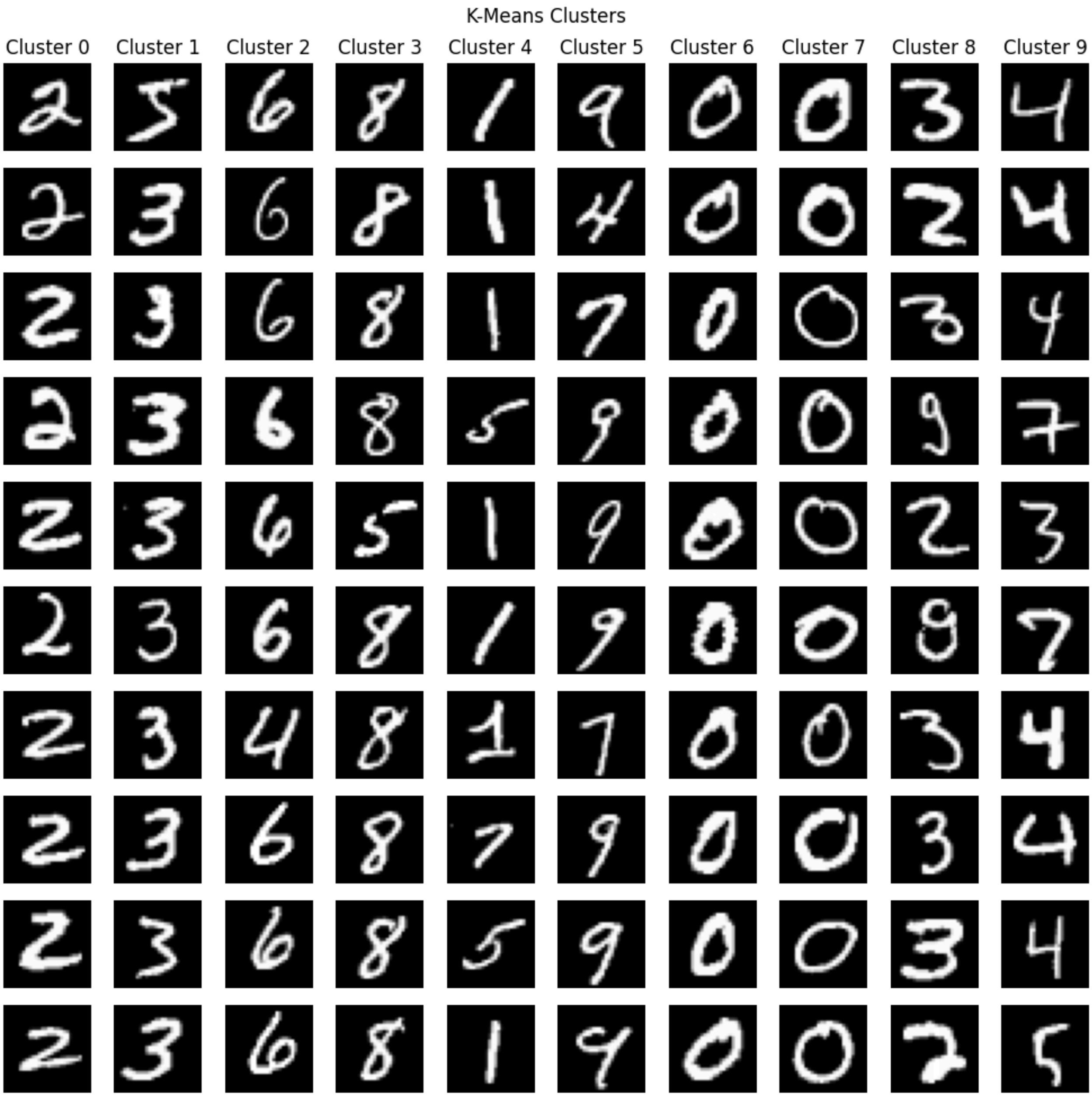


Agora inicializamos os centroides com o k-means++.

In [ ]:
```
data, targets = mnist_trainset.data.flatten(1).float(), mnist_trainset.targets
kmeans = KMeans(n_clusters=10, seed=42)
kmeans.fit(data, targets, init="kmeans++") # Inicializa os centroides usando o algoritmo KMeans++
kmeans.plot_centroids()
kmeans.plot_clusters(data)
```

```
Iteração:  94%|█████████▍| 94/100 [00:01<00:00, 80.76it/s]
Convergiu na iteração 94
```

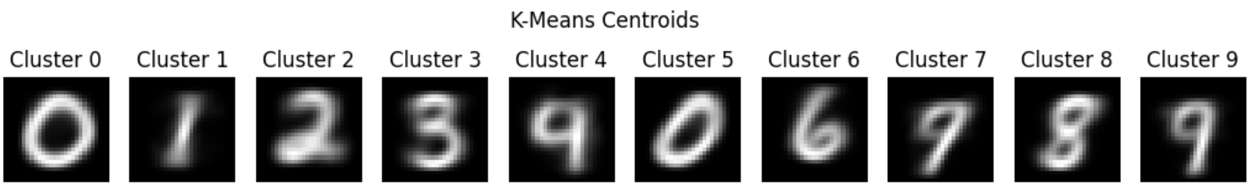


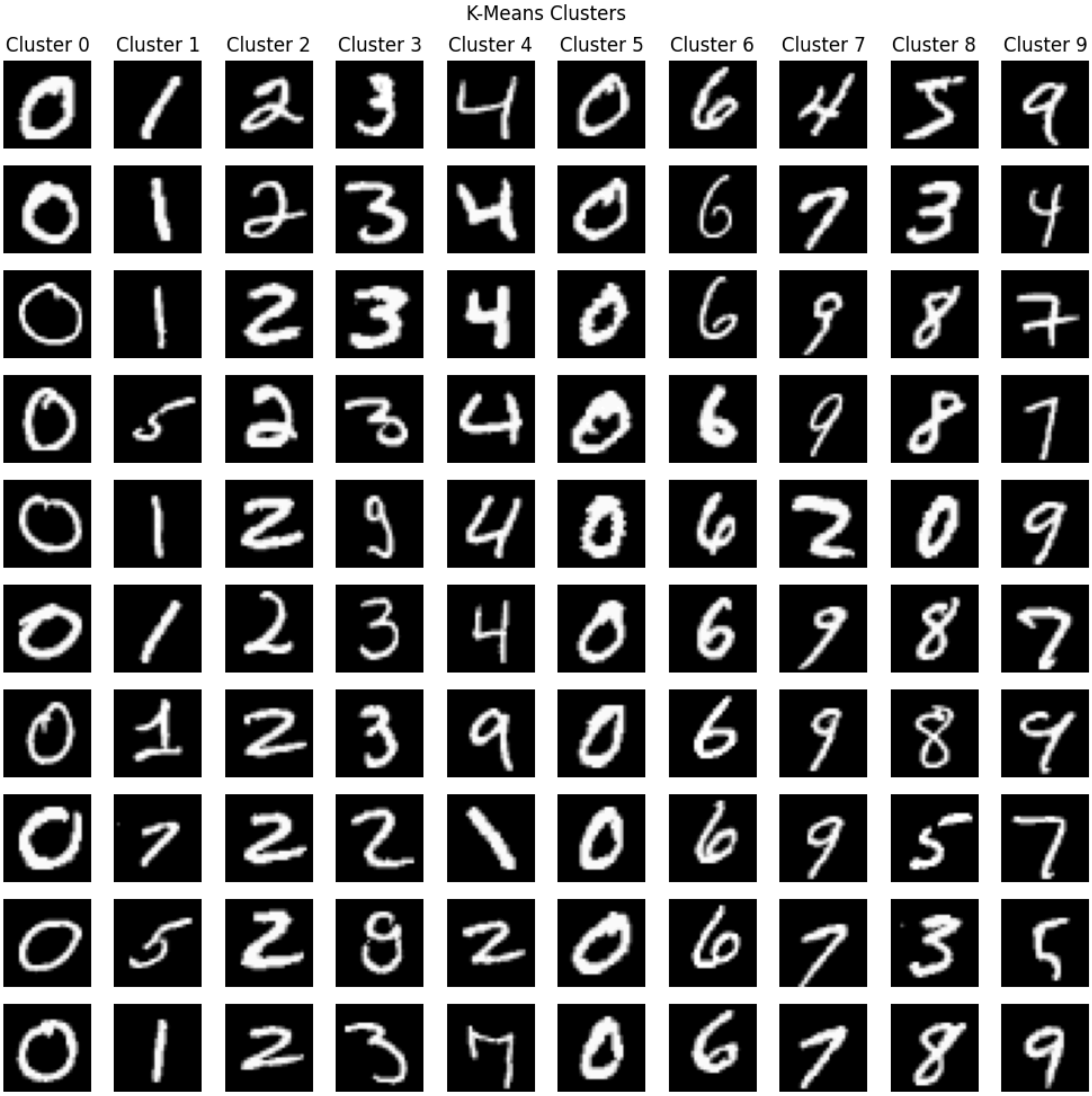


Por fim, vamos inicializar os centroides com as médias das imagens de cada classe.

In [ ]:
```
data, targets = mnist_trainset.data.flatten(1).float(), mnist_trainset.targets
kmeans = KMeans(n_clusters=10, max_iter=200, seed=42)
kmeans.fit(data, targets, init="mean") # Inicializa os centroides como as médias das imagens de cada classe
kmeans.plot_centroids()
kmeans.plot_clusters(data)
```

```
Iteração:   0%|          | 0/200 [00:00<?, ?it/s]Iteração:  92%|█████████▏| 183/200 [00:02<00:00, 81.15it/s]
Convergiu na iteração 183
```





No geral, imagens similares são agrupadas no mesmo cluster. Vimos que a inicialização aleatória tem resultados piores do que a inicialização pelo algoritmo kmeans++. A inicialização com as médias das imagens de cada classe também pode ser útil, mas é mais sensível a outliers. Note que todas as inicializações tiveram dificuldades em identificar o cluster 5 e 9.

2. Gaussian Mixture Models (GMMs) são estimadores de densidade poderosos. Podemos utilizá-los, por exemplo, para detectar amostras "fora da distribuição de treino" (out-of-distribution, OOD) em tempo de teste, evitando possíveis previsões catastróficias. Com isso em mente, treine um MLP para classificar o MNIST. Com o MLP treinado, use um GMM para modelar as ativações da penúltima camada desse MLP (usando as ativações dos dados de treino). Agora, avalie a capacidade dessa GMM diferenciar amostras de test do MNIST e do FashionMNIST (espera-se que amostras OOD --- do Fashin MNIST--- estejam nas caudas). Teste essa estratégia com números diferentes de componente das misturas e escolha a que provê a melhor separação. Para simplificar sua vida, use a implementação de GMM do scikit-learn.

In [ ]:
```
# Gaussian Mixture Models
class MLP(nn.Module):
    def __init__(self, input_size: int = 784, hidden_size: int = 100, num_classes: int = 10, device: str = None,
                 num_epochs: int = 10, lr: float = 0.001, weight_decay: float = 0.01, batch_size: int = 1024, seed: int = 42):
        super().__init__()
        self.layers = nn.ModuleList([
            nn.Linear(input_size, hidden_size),
            nn.ReLU(),
            nn.Linear(hidden_size,  hidden_size //2),
            nn.ReLU(),
            nn.Linear(hidden_size //2, hidden_size //4),
            nn.SiLU(),
            nn.Linear(hidden_size //4, num_classes),
        ])

        self.criterion = nn.CrossEntropyLoss()
        self.num_epochs = num_epochs
        self.batch_size = batch_size
        self.lr = lr
        self.weight_decay = weight_decay
```

```
        self.optimizer = torch.optim.Adam(self.parameters(), lr=lr, weight_decay=weight_decay)
        self.device = device
        self.seed = seed
        self.train_losses = []
        if torch.cuda.is_available(): # GPU
            torch.set_default_device('cuda')
        if seed is not None:
            np.random.seed(seed)
            torch.manual_seed(seed)

    def forward(self, x):
        x = x.view(x.size(0), -1)
        for layer in self.layers:
            x = layer(x)
        return x

    def fit(self, train_set):
        train_loader = DataLoader(train_set, batch_size=self.batch_size, shuffle=True, generator=torch.Generator(device=self.c
        for epoch in range(self.num_epochs):
            run_loss = 0
            iterate = tqdm.tqdm(train_loader, desc=f'Epoch [{epoch+1}/{self.num_epochs}]')
            for images, labels in iterate:
                images, labels = images.to(self.device), labels.to(self.device)
                self.optimizer.zero_grad()
                # Forward pass
                outputs = self(images)
                loss = self.criterion(outputs, labels)
                # Backward pass and optimize
                loss.backward()
                self.optimizer.step()
                self.train_losses.append(loss.item())
                run_loss += loss.item()
                iterate.set_postfix(loss=run_loss/len(train_loader))

    def predict(self, test_set):
        test_loader = DataLoader(test_set, batch_size=self.batch_size, shuffle=True, generator=torch.Generator(device=self.dev
        self.eval()
        correct, total = 0, 0
        with torch.no_grad():
            for images, labels in test_loader:
                images, labels = images.to(self.device), labels.to(self.device)
                outputs = self(images)
                _, predicted = torch.max(outputs.data, 1)
                total += labels.size(0)
                correct += (predicted == labels).sum().item()
        print(f'Accuracy: {100 * correct / total:.2f}%')

    def get_penultimate_activations(self, dataset, device):
        self.eval()
        activations = []
        loader = DataLoader(dataset, batch_size=self.batch_size, shuffle=False)
        with torch.no_grad():
            for images, _ in loader:
                images = images.to(device)
                x = images.view(images.size(0), -1)
                for layer in self.layers[:-1]:  # Exclude the last layer
                    x = layer(x)
                activations.append(x.cpu().numpy())
        return np.vstack(activations)
```

In [ ]:
```
batch_size = 1024
lr = 0.001
weight_decay = 0.001
num_epochs = 20
seed = 42
device = 'cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu'
model = MLP(num_epochs=num_epochs, lr=lr, weight_decay=weight_decay, batch_size=batch_size, device=device, seed=seed)
```

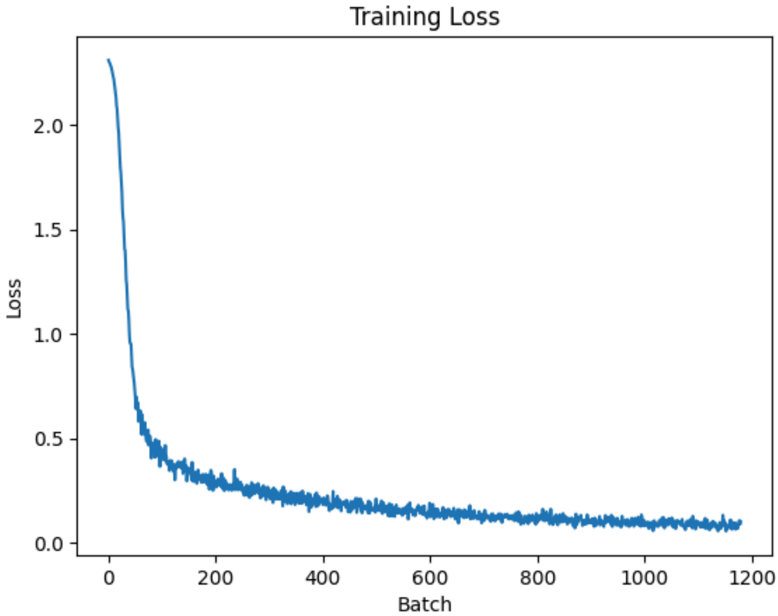
Vamos treinar a MLP e usar um GMM para modelar as ativações da penúltima camada. Em seguida, vamos avaliar a capacidade dessa GMM diferenciar amostras de teste do MNIST e do FashionMNIST.

In [ ]:
```
model.fit(mnist_trainset)
torch.save(model.state_dict(), 'mlp_mnist.pth')
model.predict(mnist_testset)
```

```
Epoch [1/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.24it/s, loss=1.48]
Epoch [2/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.52it/s, loss=0.46]
Epoch [3/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.66it/s, loss=0.341]
Epoch [4/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.58it/s, loss=0.289]
Epoch [5/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.42it/s, loss=0.253]
Epoch [6/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.55it/s, loss=0.223]
Epoch [7/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.35it/s, loss=0.201]
Epoch [8/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.52it/s, loss=0.181]
Epoch [9/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.51it/s, loss=0.165]
Epoch [10/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:06<00:00,  8.47it/s, loss=0.153]
Epoch [11/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.39it/s, loss=0.139]
Epoch [12/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  7.47it/s, loss=0.13]
Epoch [13/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  7.40it/s, loss=0.121]
Epoch [14/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  7.78it/s, loss=0.114]
Epoch [15/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:08<00:00,  7.36it/s, loss=0.107]
Epoch [16/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.26it/s, loss=0.101]
Epoch [17/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.27it/s, loss=0.0959]
Epoch [18/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.33it/s, loss=0.0911]
Epoch [19/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.14it/s, loss=0.0881]
Epoch [20/20]: 100%|██████████| 59/59 [00:07<00:00,  8.37it/s, loss=0.0843]
Accuracy: 96.72%
```

In [ ]:

```python
# Plot the training loss
plt.figsize=(6, 5)
plt.plot(model.train_losses)
plt.xlabel('Batch')
plt.ylabel('Loss')
plt.title('Training Loss')
plt.show()
```



In [ ]:

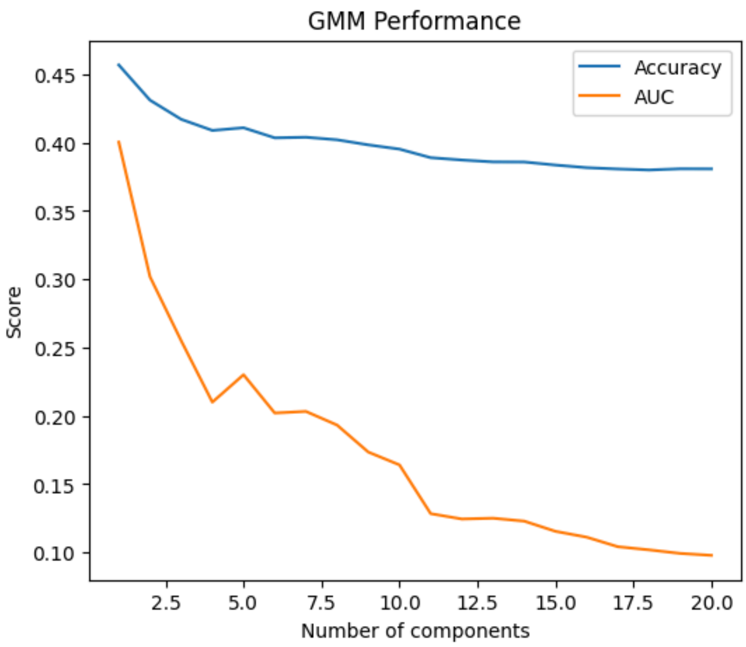
```python
from sklearn.metrics import roc_auc_score, accuracy_score
# Get penultimate layer activations
mnist_activations = model.get_penultimate_activations(mnist_testset, device)
fashion_activations = model.get_penultimate_activations(fashion_mnist_trainset, device)

# Fit GMM on MNIST activations
num_components = range(1, 21)
auc_scores, accuracies = [], []
best_gmm_score, best_gmm_auc, best_gmm_acc = None, None, None
best_score, best_auc, best_acc = -np.inf, -np.inf, -np.inf

for n in tqdm.tqdm(num_components, desc='Component'):
    gmm = GaussianMixture(n_components=n, random_state=seed)
    gmm.fit(mnist_activations)
    # GMM score
    mnist_prob = gmm.score_samples(mnist_activations)
    fashion_prob = gmm.score_samples(fashion_activations)
    # AUC score
    combined_scores = np.concatenate([mnist_prob, fashion_prob])
    labels = np.concatenate([np.zeros_like(mnist_prob), np.ones_like(fashion_prob)])
    auc = roc_auc_score(labels, combined_scores)
    auc_scores.append(auc)
    # Accuracy
    threshold = np.median(combined_scores)
    predicted_labels = (combined_scores > threshold).astype(int)
    accuracy = accuracy_score(labels, predicted_labels)
    accuracies.append(accuracy)

    if mnist_prob.mean() > best_score:
        best_score = mnist_prob.mean()
        best_gmm_score = gmm
```

```
    if auc >= best_auc:
        best_auc = auc
        best_gmm_auc = gmm

    if accuracy > best_acc:
        best_acc = accuracy
        best_gmm_acc = gmm

# Evaluate GMM on MNIST and FashionMNIST activations
mnist_scores = best_gmm_score.score_samples(mnist_activations)
fashion_scores = best_gmm_score.score_samples(fashion_activations)

# Print results
print(f'Best number of components: {best_gmm_score.n_components}')
print(f'MNIST scores: {mnist_scores.mean():.2f} ± {mnist_scores.std():.2f}')
print(f'FashionMNIST scores: {fashion_scores.mean():.2f} ± {fashion_scores.std():.2f}')

print(f'Best accuracy: {best_acc:.2f}')
print(f'Best number of components based on accuracy: {best_gmm_acc.n_components}')
print(f'Best AUC: {best_auc:.2f}')
print(f'Best number of components based on AUC: {best_gmm_auc.n_components}')
```

```
Component:  30%|███        | 6/20 [00:20<01:04,  4.60s/it]Component: 100%|██████████| 20/20 [03:44<00:00, 11.21s/it]
Best number of components: 20
MNIST scores: 5.20 ± 10.72
FashionMNIST scores: -14.39 ± 13.58
Best accuracy: 0.46
Best number of components based on accuracy: 1
Best AUC: 0.40
Best number of components based on AUC: 1
```

In [ ]:

```
# plot accuracies and auc
plt.figure(figsize=(6, 5))
plt.plot(num_components, accuracies, label='Accuracy')
plt.plot(num_components, auc_scores, label='AUC')
plt.xlabel('Number of components')
plt.ylabel('Score')
plt.title('GMM Performance')
plt.legend()
plt.show()
```



A performance do GMM foi avaliada usando a métrica AUC e acurácia. Apesar de não ser satisfatória, a melhor performance foi obtida com 20 e 1 componentes respectivamente.

1. Como vimos anteriormente, a função custo para k-means é:

$$\sum_{i=1...K} \sum_{x \in C_i} \|x - \mu_i\|_2^2, \tag{1}$$

a qual otimizamos atualizando os clusters e seus respectivos centróides de maneira alternada. Suponha, no entanto, que nosso banco de dados contém entradas faltantes, i.e., existe algum vetor $x = [x_1, \ldots, x_D]$ para o qual apenas as entradas $x_o \forall o(x) \in O(x) \subseteq \{1, \ldots, D\}$ foram observadas. Deixe, similarmente, que $M(x)$ denote o conjunto de índices faltantes em x. Existem várias maneiras de contornar esse problema. A mais animalesca (e que descarta menos informação) é jogar fora amostras com entradas faltantes. Pode-se também pré-processar o banco de dados para preencher os valores faltantes. Uma terceira opção é codificar nossa incerteza sobre $x_{M(x)}$ como uma distribuição e propagar essa incerteza pela nossa função custo. Caso não saibamos muito sobre esses valores faltantes, por exemplo, podemos atribuir uma Gaussiana com média zero e variância $c > 0$ para cada $x_m \forall m \in M(x)$. Nesse caso, nossa função custo se transforma em:

$$\sum_{i=1...K} \sum_{x \in C_i} \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[\|x - \mu_i\|_2^2\right], \tag{2}$$

Derive algoritmo para otimizar a função acima --- de maneira similar à que derivamos o k-means. Comente como seu algoritmo difere do K-means original.

Resposta:

1. Inicialize os centróides $\mu_1, \ldots, \mu_K$ aleatoriamente ou usando a estratégia do k-means++.

2. Considere uma função indicadora $y_{n,k}$ tal que $y_{n,k} = \begin{cases} 1, & \text{se } x_n \text{ pertence ao cluster } k, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$

A função custo para o K-means com valores faltantes se torna:

$$J = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} y_{n,k} \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[\|x_n - \mu_k\|_2^2\right]$$

1. Minimizamos J em relação a y_{nk} fixando μ_k. Isso significa atribuir cada ponto de dados x_n ao cluster cujo centróide minimiza a expectativa da distância quadrática entre x_n e μ_k

$$y_{n,k} = \begin{cases} 1, & \text{se } k = \arg\min_{k'} \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[\|x_n - \mu_{k'}\|_2^2\right] \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Para calcular $\mathbb{E}\left[\|x_n - \mu_k\|\|_2^2\right]$, temos que separar x_n em partes observadas $x_{O(x)}$ e faltaantes $x_{M(x)}$. E também μ_k em $\mu_{O(\mu_k)}$ e $\mu_{M(\mu_k)}$. Assim, temos que:

$$\mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[\|x_n - \mu_{k'}\|_2^2\right] = \left\|x_{O(x)} - \mu_{O(\mu_{k'})}\right\|_2^2 + \sum_{m \in M(x)} (\mu_{k,m}^2 + c)$$

Onde c é a variância da distribuição Gaussiana que modela os valores faltantes.

1. Minimizamos J em relação a μ_k, fixando r_{nk}. Basta derivarmos J em relação a μ_k e igualarmos a zero.

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} y_{n,k} \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[\frac{\partial}{\partial \mu_k} \|x_n - \mu_k\|_2^2\right] = 0 \\
&\Leftrightarrow -2 \sum_{n=1}^{N} y_{n,k} \, \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[x_n - \mu_k\right] = 0 \\
&\Leftrightarrow \sum_{n=1}^{N} y_{n,k} \, \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[x_n\right] = \sum_{n=1}^{N} y_{n,k} \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N(0, cc|M(x)|)} \left[\mu_k\right] \\
&\Leftrightarrow \mu_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} y_{n,k} \mathbb{E}_{x_{M(x)} \sim N\left(0, cI_{|M(x)|}\right)} \left[x_n\right]}{\sum_{n=1}^{N} y_{n,k}}
\end{aligned}$$

Para calcular $E[x_n]$, observamos que para os valores faltantes $x_{M(x)}$, a expectativa é zero (pois $x_{M(x)} \sim N(0, cI_{|M(x)|})$). Logo,

$$E[x_n] = \begin{cases} x_{O(x)}, & \text{se } x_d \text{ é observado} \\ 0, & \text{se } x_d \text{ é faltante} \end{cases}$$

Portanto, a atualização dos centróides μ_k se torna:

$$\mu_k = \frac{\sum_{n=1}^{N} y_{n,k} x_{n,d}}{\sum_{n=1}^{N} y_{n,k}}$$

Onde $x_{n,d} = 0$ se $d \in M(x_n)$ e $x_{n,d}$ observado se $d \in O(x_n)$.

1. Repita os Passos 3 e 4 até que os centróides μ_k convirjam (ou a mudança seja menor que um limiar definido).

Conclusões: Diferente do K-means original, que assume que todos os valores são observados, no novo algoritmo, lidamos explicitamente com valores faltantes. Para isso, modelamos a incerteza sobre os valores faltantes como uma distribuição Gaussiana com média zero e variância c.

2. Na aula, motivamos o uso de *Gaussian Mixture Models* (GMMs) e discutimos como estimar seus parâmetros via máxima verossimilhança. Mais especificamente, começamos a derivar um algoritmo de *coordinate ascent* para maximizar a verossimilhança. Siga os passos da Seção 9.2 (página 430) do *Pattern Recognition and Machine Learning* (C. Bishop) e mostre a derivação passo-a-passo (boa parte está omitida no livro) do algoritmo.

Resposta: Tome uma amostra $X = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$ de uma mistura gaussiana de K componentes, onde a densidade de probabilidade de cada componente é dada por:

$$p(x \mid \pi, \mu, \Sigma) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}\left(x \mid \mu_k, \Sigma_k\right)$$

1. Vamos derivar a log-verossimilhança com respeito a μ_k e igualar a zero:

$$\frac{\partial}{\partial \mu_k} l(X \mid \pi, \mu, \Sigma) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial \mu_k} \log\left[\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k\right)\right]$$

Expandindo essa derivada,

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\frac{\partial}{\partial \mu_k} \sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\pi_k \frac{\partial}{\partial \mu_k} \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\pi_k \frac{\partial}{\partial \mu_k} (2\pi)^{-k/2} \det\left(\Sigma_k\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^{\top} \Sigma_k^{-1}\left(x-\mu_k\right)\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} = 0$$

Levando em conta a forma da densidade gaussiana, temos:

$$\Leftrightarrow -\sum_{i=1}^{n} \frac{\pi_k \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} \Sigma_k^{-1}\left(X_i-\mu_k\right) = 0$$

Definindo $\gamma_{ik} = \frac{\pi_k \mathcal{N}(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j)}$, temos

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik}\left(X_i-\mu_k\right) = 0$$

Resolvendo para μ_k, obtemos:

$$\mu_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik} X_i}{\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik}}$$

1. Agora, vamos derivar a log-verossimilhança com respeito a Σ_k e igualar a zero:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\pi_k \frac{\partial}{\partial \Sigma_k} (2\pi)^{-k/2} \det\left(\Sigma_k\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^{\top} \Sigma_k^{-1}\left(x-\mu_k\right)\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} = 0$$

$$-\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik}\left[\Sigma_k^{-1} - \Sigma_k^{-1}\left(X_i-\mu_k\right)\left(X_i-\mu_k\right)^{T} \Sigma_k^{-1}\right] = 0$$

$$\sum_{i=1} \gamma_{ik}\left[\Sigma_k - \left(X_i-\mu_k\right)\left(X_i-\mu_k\right)^{T}\right] = 0$$

$$\Sigma_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik}\left(X_i-\mu_k\right)\left(X_i-\mu_k\right)^{T}}{\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik}}$$

1. Só falta derivar a log-verossimilhança com respeito a π_k sujeito a $\sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1$. Por lagrange, temos que:

$$\mathcal{L}(\pi, \lambda) = \sum_{i=1}^{n} \log\left[\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k\right)\right] + \lambda\left(1-\sum_{k=1}^{K} \pi_k\right)$$

Daí,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \pi_k} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} + \lambda = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik} + \pi_k \lambda = 0$$

$$\lambda = -\sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_k, \Sigma_k\right)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j \mathcal{N}\left(X_i \mid \mu_j, \Sigma_j\right)} = -n$$

Logo,

$$\pi_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \gamma_{ik}$$