JerryLead

All things are difficult before they are easy.

（EM算法）The EM Algorithm

EM是我一直想深入学习的算法之一，第一次听说是在NLP课中的HMM那一节，为了解决HMM的参数估计问题，使用了EM算法。在之后的MT中的词对齐中也用到了。在Mitchell的书中也提到EM可以用于**贝叶斯**网络中。

下面主要介绍EM的整个推导过程。

1. Jensen不等式

回顾优化理论中的一些概念。设f是定义域为实数的函数，如果对于所有的实数x，$f''(x) \geq 0$，那么f是凸函数。当x是向量时，如果其hessian矩阵H是半正定的（$H \geq 0$），那么f是凸函数。如果$f''(x) > 0$或者$H > 0$，那么称f是严格凸函数。

Jensen不等式表述如下：

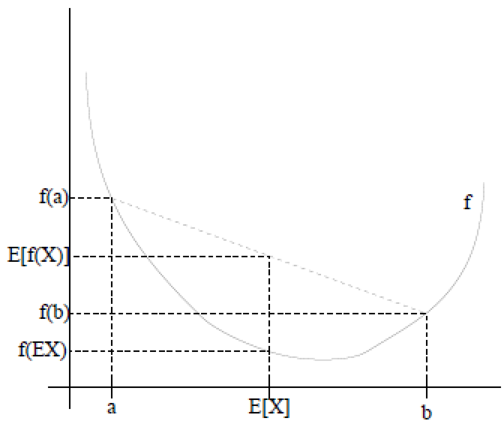
如果f是凸函数，X是随机变量，那么

$E[f(X)] \geq f(EX)$

特别地，如果f是严格凸函数，那么$E[f(X)] = f(EX)$当且仅当$p(x = E[X]) = 1$，也就是说X是常量。

这里我们将$f(E[X])$简写为$f(EX)$。

如果用图表示会很清晰：



图中，实线f是凸函数，X是随机变量，有0.5的概率是a，有0.5的概率是b。（就像掷硬币一样）。X的期望值就是a和b的中值了，图中可以看到$E[f(X)] \geq f(EX)$成立。

当f是（严格）凹函数当且仅当-f是（严格）凸函数。

Jensen不等式应用于凹函数时，不等号方向反向，也就是$E[f(X)] \leq f(EX)$。

2. EM算法

给定的训练样本是$\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\}$，样例间独立，我们想找到每个样例隐含的类别z，能使得p(x,z)最大。p(x,z)的最大似然估计如下：

$$= \sum_{i=1} \log \sum_{z} p(x, z; \theta).$$

第一步是对极大似然取对数，第二步是对每个样例的每个可能类别z求联合分布概率和。但是直接求θ一般比较困难，因为有隐藏变量z存在，但是一般确定了z后，求解就容易了。

EM是一种解决存在隐含变量优化问题的有效方法。竟然不能直接最大化$\ell(\theta)$，我们可以不断地建立ℓ的下界（E步），然后优化下界（M步）。这句话比较抽象，看下面的。

对于每一个样例i，让Q_i表示该样例隐含变量z的某种分布，Q_i满足的条件是$\sum_z Q_i(z) = 1, Q_i(z) \geq 0$。（如果z是连续性的，那么$Q_i$是概率密度函数，需要将求和符号换做积分符号）。比如要将班上学生聚类，假设隐藏变量z是身高，那么就是连续的高斯分布。如果按照隐藏变量是男女，那么就是伯努利分布了。

可以由前面阐述的内容得到下面的公式：

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

（1）到（2）比较直接，就是分子分母同乘以一个相等的函数。（2）到（3）利用了Jensen不等式，考虑到$\log(x)$是凹函数（二阶导数小于0），而且

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

就是 $[p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)/Q_i(z^{(i)})]$ 的期望（回想期望公式中的Lazy Statistician规则）

> 设Y是随机变量X的函数，$Y = g(X)$（g是连续函数），那么
>
> （1） X是离散型随机变量，它的分布律为$P(X = x_k) = p_k$，k=1,2,…。若$\sum_{k=1}^{\infty} g(x_k) p_k$绝对收敛，则有
>
> $$E(Y) = E[g(X)] = \sum_{k=1}^{\infty} g(x_k) p_k$$
>
> （2） X是连续型随机变量，它的概率密度为$f(x)$，若 $\int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx$ 绝对收敛，则有
>
> $$E(Y) = E[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx$$

对应于上述问题，Y是 $[p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)/Q_i(z^{(i)})]$，X是$z^{(i)}$，$Q_i(z^{(i)})$是$p_k$，g是$z^{(i)}$到 $[p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)/Q_i(z^{(i)})]$ 的映射。这样解释了式子（2）中的期望，再根据凹函数时的Jensen不等式：

$$f\left(\mathrm{E}_{z^{(i)} \sim Q_i} \left[\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} \right] \right) \geq \mathrm{E}_{z^{(i)} \sim Q_i} \left[f\left(\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} \right) \right],$$

可以得到（3）。

这个过程可以看作是对$\ell(\theta)$求了下界。对于Q_i的选择，有多种可能，那种更好的？假设θ已经给定，那么$\ell(\theta)$的值就决定于$Q_i(z^{(i)})$和$p(x^{(i)}, z^{(i)})$了。我们可以通过调整这两个概率使下界不断上升，以逼近$\ell(\theta)$的真实

阅读排行榜

评论排行榜

推荐排行榜

最新评论

1. Re:支持向量机（五）SMO算法

讨论a1与a2的直线的地方，因为a1与a2是对称的，所以最好带上y1和y2

--林北林奈

2. Re:独立成分分析（Independent Component Analysis）

同求代码

--222222233344

3. Re:典型关联分析（Canonical Correlation Analysis）

博主您好，有个问题想问一下，在求出特征向量并排序之后，在限定条件下求解m，并将对应特征向量*m，这个存在符号+-的问题吗？我写了一个CCA程序，和matlab程序传入相同的数据，输出的特征向量存在符号...

--阿土dfgdsfga

4. Re:（EM算法）The EM Algorithm

L(θ)是通过求导数为0得到下一次更新的，那么L(θ)收敛到局部最大值，而不是全局最大值这种情况是否也会发生，若是该怎么处理呢？

--努力吧少年666

5. Re:线性判别分析（Linear

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

c为常数，不依赖于$z^{(i)}$。对此式子做进一步推导，我们知道$\sum_z Q_i(z^{(i)}) = 1$，那么也就有$\sum_z p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta) = c$，（多个等式分子分母相加不变，这个认为每个样例的两个概率比值都是c），那么有下式：

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

至此，我们推出了在固定其他参数θ后，$Q_i(z^{(i)})$的计算公式就是后验概率，解决了$Q_i(z^{(i)})$如何选择的问题。这一步就是E步，建立$\ell(\theta)$的下界。接下来的M步，就是在给定$Q_i(z^{(i)})$后，调整θ，去极大化$\ell(\theta)$的下界（在固定$Q_i(z^{(i)})$后，下界还可以调整的更大）。那么一般的EM算法的步骤如下：

> 循环重复直到收敛 {
>
> （E步）对于每一个i，计算
>
> $$Q_i(z^{(i)}) := p(z^{(i)}|x^{(i)}; \theta)$$
>
> （M步）计算
>
> $$\theta := \arg\max_\theta \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}.$$

那么究竟怎么确保EM收敛？假定$\theta^{(t)}$和$\theta^{(t+1)}$是EM第t次和t+1次迭代后的结果。如果我们证明了$\ell(\theta^{(t)}) \le \ell(\theta^{(t+1)})$，也就是说极大似然估计单调增加，那么最终我们会到达最大似然估计的最大值。下面来证明，选定$\theta^{(t)}$后，我们得到E步

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

这一步保证了在给定$\theta^{(t)}$时，Jensen不等式中的等式成立，也就是

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

然后进行M步，固定$Q_i^{(t)}(z^{(i)})$，并将$\theta^{(t)}$视作变量，对上面的$\ell(\theta^{(t)})$求导后，得到$\theta^{(t+1)}$，这样经过一些推导会有以下式子成立：

$$\begin{aligned} \ell(\theta^{(t+1)}) &\ge \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i^{(t)}(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta^{(t+1)})}{Q_i^{(t)}(z^{(i)})} && (4) \\ &\ge \sum_i \sum_{z^{(i)}} Q_i^{(t)}(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta^{(t)})}{Q_i^{(t)}(z^{(i)})} && (5) \\ &= \ell(\theta^{(t)}) && (6) \end{aligned}$$

解释第（4）步，得到$\theta^{(t+1)}$时，只是最大化$\ell(\theta^{(t)})$，也就是$\ell(\theta^{(t+1)})$的下界，而没有使等式成立，等式成立只有是在固定θ，并按E步得到Q_i时才能成立。

况且根据我们前面得到的下式，对于所有的Q_i和θ都成立

第（5）步利用了M步的定义，M步就是将$\theta^{(t)}$调整到$\theta^{(t+1)}$，使得下界最大化。因此（5）成立，（6）是之前的等式结果。

这样就证明了$\ell(\theta)$会单调增加。一种收敛方法是$\ell(\theta)$不再变化，还有一种就是变化幅度很小。

再次解释一下（4）、（5）、（6）。首先（4）对所有的参数都满足，而其等式成立条件只是在固定θ，并调整好Q时成立，而第（4）步只是固定Q，调整θ，不能保证等式一定成立。（4）到（5）就是M步的定义，（5）到（6）是前面E步所保证等式成立条件。也就是说E步会将下界拉到与$\ell(\theta)$一个特定值（这里$\theta^{(t)}$）一样的高度，而此时发现下界仍然可以上升，因此经过M步后，下界又被拉升，但达不到与$\ell(\theta)$另外一个特定值一样的高度，之后E步又将下界拉到与这个特定值一样的高度，重复下去，直到最大值。

如果我们定义

$$J(Q,\theta)=\sum_i\sum_{z^{(i)}}Q_i(z^{(i)})\log\frac{p(x^{(i)},z^{(i)};\theta)}{Q_i(z^{(i)})},$$

从前面的推导中我们知道$\ell(\theta)\geq J(Q,\theta)$，EM可以看作是J的坐标上升法，E步固定$\theta$，优化$Q$，M步固定$Q$优化$\theta$。

3. 重新审视混合高斯模型

我们已经知道了EM的精髓和推导过程，再次审视一下混合高斯模型。之前提到的混合高斯模型的参数ϕ，μ和Σ计算公式都是根据很多假定得出的，有些没有说明来由。为了简单，这里在M步只给出ϕ和μ的推导方法。

E步很简单，按照一般EM公式得到：

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

简单解释就是每个样例i的隐含类别$z^{(i)}$为j的概率可以通过后验概率计算得到。

在M步中，我们需要在固定$Q_i(z^{(i)})$后最大化最大似然估计，也就是

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

这是将$z^{(i)}$的k种情况展开后的样子，未知参数ϕ_j，μ_j和Σ_j。

固定ϕ_j和Σ_j，对μ_j求导得

$$\begin{aligned}\nabla_{\mu_l}&\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^kw_j^{(i)}\log\frac{\frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma_j|^{1/2}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x^{(i)}-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x^{(i)}-\mu_j)\right)\cdot\phi_j}{w_j^{(i)}}\\&=-\nabla_{\mu_l}\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^kw_j^{(i)}\frac{1}{2}(x^{(i)}-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x^{(i)}-\mu_j)\\&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^mw_l^{(i)}\nabla_{\mu_l}2\mu_l^T\Sigma_l^{-1}x^{(i)}-\mu_l^T\Sigma_l^{-1}\mu_l\\&=\sum_{i=1}^mw_l^{(i)}\left(\Sigma_l^{-1}x^{(i)}-\Sigma_l^{-1}\mu_l\right)\end{aligned}$$

等于0时，得到

这就是我们之前模型中的μ的更新公式。

然后推导ϕ_j的更新公式。看之前得到的

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} \log \frac{\frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma_j|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x^{(i)}-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x^{(i)}-\mu_j)\right)\cdot\phi_j}{w_j^{(i)}}$$

在ϕ和μ确定后，分子上面的一串都是常数了，实际上需要优化的公式是：

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

需要知道的是，ϕ_j还需要满足一定的约束条件就是$\sum_{j=1}^{k}\phi_j = 1$。

这个优化问题我们很熟悉了，直接构造拉格朗日乘子。

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

还有一点就是$\phi_j \geq 0$，但这一点会在得到的公式里自动满足。

求导得，

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

等于0，得到

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

也就是说$\phi_j \propto \sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}$.再次使用$\sum_{j=1}^{k}\phi_j = 1$，得到

$$-\beta = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} = \sum_{i=1}^{m} 1 = m.$$

这样就神奇地得到了β。

那么就顺势得到M步中ϕ_j的更新公式：

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

Σ的推导也类似，不过稍微复杂一些，毕竟是矩阵。结果在之前的混合高斯模型中已经给出。

4. 总结

如果将样本看作观察值，潜在类别看作是隐藏变量，那么聚类问题也就是参数估计问题，只不过聚类问题中参数分为隐含类别变量和其他参数，这犹如在x-y坐标系中找一个曲线的极值，然而曲线函数不能直接求导，因此什么梯度下降方法就不适用了。但固定一个变量后，另外一个可以通过求导得到，因此可以使用坐标上升法，一次固定一个变量，对另外的求极值，最后逐步逼近极值。对应到EM上，E步估计隐含变量，M步估计其他参数，交替将极值推向最大。EM中还有“硬”指定和“软”指定的概念，“软”指定看似更为合理，但计算量要大，“硬”指定在某些场合如K-means中更为实用（要是保持一个样本点到其他所有中心的概率，就会很麻烦）。

另外，EM的收敛性证明方法确实很牛，能够利用log的凹函数性质，还能够想到利用创造下界，拉平函数下界，优化下界的方法来逐步逼近极大值。而且每一步迭代都能保证是单调的。最重要的是证明的数学公式非常精妙，硬是分子分母都乘以z的概率变成期望来套上Jensen不等式，前人都是怎么想到的。

博客园 cnblogs.com 会员 周边 新闻 博问 AI培训 云市场 注册 登录

参考。

标签: Machine Learning

好文要顶 关注我 收藏该文 微信分享


JerryLead
粉丝 - 2912 关注 - 5
+加关注

109 1

« 上一篇： 混合高斯模型（Mixtures of Gaussians）和EM算法
» 下一篇： 在线学习（Online Learning）

posted on 2011-04-06 16:18 JerryLead 阅读(292475) 评论(59) 编辑 收藏 举报

会员力量，点亮园子希望 刷新页面 返回顶部

登录后才能查看或发表评论，立即 登录 或者 逛逛 博客园首页

编辑推荐：
- 都说了能不动就别动，非要去调整，出生产事故了吧
- Redis 分布式锁的正确使用姿势
- 聊一聊程序员沟通相关的问题
- 优化接口设计的思路系列：分页接口的设计和优化
- 记一次 .NET某列控连锁系统 崩溃分析

阅读排行：
- 在做程序员的道路上，你掌握了什么概念或技术使你感觉自我提升突飞猛进?
- 都说了能不动就别动，非要去调整，出生产事故了吧 → 补充
- 前端树形Tree数据结构使用-🤸各种姿势总结
- ASP.NET Core MVC应用模型的构建[1]: 应用的蓝图
- 美团面试：说说OOM三大场景和解决方案？ （绝对史上最全）