EM 算法

1. 如果概率模型的变量都是观测变量，则给定数据之后，可以直接用极大似然估计法或者贝叶斯估计法来估计模型参数。

   但是当模型含有隐变量时，就不能简单的使用这些估计方法。此时需要使用 `EM` 算法。

   - `EM` 算法是一种迭代算法。
   - `EM` 算法专门用于含有隐变量的概率模型参数的极大似然估计，或者极大后验概率估计。
2. `EM` 算法的每次迭代由两步组成：
   - `E` 步求期望。
   - `M` 步求极大。

   所以 `EM` 算法也称为期望极大算法。

一、示例

1.1 身高抽样问题

1. 假设学校所有学生中，男生身高服从正态分布 $\mathcal{N}(\mu_1,\sigma_1^2)$， 女生身高服从正态分布 $\mathcal{N}(\mu_2,\sigma_2^2)$ 。

   现在随机抽取200名学生，得到这些学生的身高 $\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$，求参数 $\{\mu_1,\sigma_1^2,\mu_2,\sigma_2^2\}$ 的估计。
2. 定义隐变量为 z ，其取值为 $\{0,1\}$ ，分别表示 `男生、女生` 。
   - 如果隐变量是已知的，即已知每个学生是男生还是女生 $\{z_1,z_2,\cdots,z_n\}$，则问题很好解决：
     - 统计所有男生的身高的均值和方差，得到 $\{\mu_1,\sigma_1^2\}$ ：

       $$\mu_1=\text{avg}\{x_i\mid z_i=0\}\quad \sigma_1^2=\text{var}\{x_i\mid z_i=0\}$$

       其中 $\{x_i\mid z_i=0\}$ 表示满足 $z_i=0$ 的 x_i 构成的集合。avg,var 分别表示平均值和方差。
     - 统计所有女生的身高的均值和方差，得到 $\{\mu_2,\sigma_2^2\}$ ：

       $$\mu_2=\text{avg}\{x_i\mid z_i=1\}\quad \sigma_2^2=\text{var}\{x_i\mid z_i=1\}$$

       其中 $\{x_i\mid z_i=1\}$ 表示满足 $z_i=1$ 的 x_i 构成的集合。avg,var 分别表示平均值和方差。
   - 如果已知参数 $\{\mu_1,\sigma_1^2,\mu_2,\sigma_2^2\}$，则任意给出一个学生的身高 x ，可以知道该学生分别为男生/女生的概率。

     $$p_1=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\times\sigma_1}\exp\left(-\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}\right)$$
     $$p_2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\times\sigma_2}\exp\left(-\frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2}\right)$$

     则有：$p(z=0\mid x)=\frac{p_1}{p_1+p_2},p(z=1\mid x)=\frac{p_2}{p_1+p_2}$ 。因此也就知道该学生更可能为男生，还是更可能为女生。

   因此：参数 $\{\mu_1,\sigma_1^2,\mu_2,\sigma_2^2\}\Leftrightarrow$ `学生是男生/女生` ，这两个问题是相互依赖，相互纠缠的。
3. 为解决该问题，通常采取下面步骤：

- 先假定参数的初始值：$\{\mu_1^{<0>}, \sigma_1^{2<0>}, \mu_2^{<0>}, \sigma_2^{2<0>}\}$。
- 迭代：$i = 0, 1, \cdots$
  - 根据 $\{\mu_1^{<i>}, \sigma_1^{2<i>}, \mu_2^{<i>}, \sigma_2^{2<i>}\}$ 来计算每个学生更可能是属于男生，还是属于女生。

    这一步为 `E` 步（`Expectation`），用于计算隐变量的后验分布 $p(z \mid x)$。
  - 根据上一步的划分，统计所有男生的身高的均值和方差，得到 $\{\mu_1^{<i+1>}, \sigma_1^{2<i+1>}\}$；统计所有女生的身高的均值和方差，得到 $\{\mu_2^{<i+1>}, \sigma_2^{2<i+1>}\}$。

    这一步为 `M` 步（`Maximization`），用于通过最大似然函数求解正态分布的参数。
  - 当前后两次迭代的参数变化不大时，迭代终止。

1.2 三硬币模型

1. 已知三枚硬币 `A`，`B`，`C`，这些硬币正面出现的概率分别为 π, p, q。进行如下试验：
   - 先投掷硬币 `A`，若是正面则选硬币 `B`；若是反面则选硬币 `C`。
   - 然后投掷被选出来的硬币，投掷的结果如果是正面则记作 `1`；投掷的结果如果是反面则记作 `0`。
   - 独立重复地 N 次试验，观测结果为：`1,1,0,1,0,...0,1`。

   现在只能观测到投掷硬币的结果，无法观测投掷硬币的过程，求估计三硬币正面出现的概率。
2. 设：
   - 随机变量 Y 是观测变量，表示一次试验观察到的结果，取值为 `1` 或者 `0`
   - 随机变量 Z 是隐变量，表示未观测到的投掷 `A` 硬币的结果，取值为 `1` 或者 `0`
   - $\theta = (\pi, p, q)$ 是模型参数

   则：
   $$\begin{aligned} P(Y;\theta) &= \sum_Z P(Y, Z;\theta) = \sum_Z P(Z;\theta) P(Y \mid Z;\theta) \\ &= \pi p^Y (1-p)^{1-Y} + (1-\pi) q^Y (1-q)^{1-Y} \end{aligned}$$

   注意：随机变量 Y 的数据可以观测，随机变量 Z 的数据不可观测
3. 将观测数据表示为 $\mathbb{Y} = \{y_1, y_2, \cdots, y_N\}$，未观测数据表示为 $\mathbb{Z} = \{z_1, z_2, \cdots, z_N\}$。

   由于每次试验之间都是独立的，则有：
   $$P(\mathbb{Y};\theta) = \prod_{j=1}^N P(Y = y_i;\theta) = \prod_{j=1}^N [\pi p^{y_j} (1-p)^{1-y_j} + (1-\pi) q^{y_j} (1-q)^{1-y_j}]$$
4. 考虑求模型参数 $\theta = (\pi, p, q)$ 的极大似然估计，即：
   $$\hat{\theta} = \arg\max_\theta \log P(\mathbb{Y};\theta)$$

   这个问题没有解析解，只有通过迭代的方法求解，`EM` 算法就是可以用于求解该问题的一种迭代算法。
5. `EM` 算法求解：

   首先选取参数的初值，记作 $\theta^{<0>} = (\pi^{<0>}, p^{<0>}, q^{<0>})$，然后通过下面的步骤迭代计算参数的估计值，直到收敛为止：

   设第 i 次迭代参数的估计值为：$\theta^{<i>} = (\pi^{<i>}, p^{<i>}, q^{<i>})$，则 `EM` 算法的第 $i+1$ 次迭代如下：
   - `E` 步：计算模型在参数 $\theta^{<i>} = (\pi^{<i>}, p^{<i>}, q^{<i>})$ 下，观测数据 y_j 来自于投掷硬币 `B` 的概率：

$$\mu_j^{<i+1>}=\frac{\pi^{<i>}(p^{<i>})^{y_j}(1-p^{<i>})^{1-y_j}}{\pi^{<i>}(p^{<i>})^{y_j}(1-p^{<i>})^{1-y_j}+(1-\pi^{<i>})(q^{<i>})^{y_j}(1-q^{<i>})^{1-y_j}}$$

它其实就是 $P(Z=1\mid Y=y_j)$，即：已知观测变量 $Y=y_j$ 的条件下，观测数据 y_j 来自于投掷硬币 `B` 的概率。

- `M` 步：计算模型参数的新估计值：

$$\pi^{<i+1>}=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\mu_j^{<i+1>}$$

$$p^{<i+1>}=\frac{\sum_{j=1}^{N}\mu_j^{<i+1>}y_j}{\sum_{j=1}^{N}\mu_j^{<i+1>}}$$

$$q^{<i+1>}=\frac{\sum_{j=1}^{N}(1-\mu_j^{<i+1>})y_j}{\sum_{j=1}^{N}(1-\mu_j^{<i+1>})}$$

  - 第一个式子：通过后验概率 $P(Z\mid Y)$ 估计值的均值作为先验概率 π 的估计。
  - 第二个式子：通过条件概率 $P(Y\mid Z=1)$ 的估计来求解先验概率 p 的估计。
  - 第三个式子：通过条件概率 $P(Y\mid Z=0)$ 的估计来求解先验概率 q 的估计。

6. `EM` 算法的解释：
   - 初始化：随机选择三枚硬币 `A`，`B`，`C` 正面出现的概率 π,p,q 的初始值 $\pi^{<0>},p^{<0>},q^{<0>}$ 。
   - `E` 步：在已知概率 π,p,q 的情况下，求出每个观测数据 y_j 是来自于投掷硬币 `B` 的概率。即：$p(z_j\mid y_j=1)$ 。

     于是对于 N 次实验，就知道哪些观测数据是由硬币 `B` 产生，哪些是由硬币 `C` 产生。
   - `M` 步：在已知哪些观测数据是由硬币 `B` 产生，哪些是由硬币 `C` 产生的情况下：
     - π 就等于硬币 `B` 产生的次数的频率。
     - p 就等于硬币 `B` 产生的数据中，正面向上的频率。
     - q 就等于硬币 `C` 产生的数据中，正面向上的频率。

二、EM算法原理

2.1 观测变量和隐变量

1. 令 Y 表示观测随机变量，$\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots,y_N\}$ 表示对应的数据序列；令 Z 表示隐随机变量，$\mathbb{Z}=\{z_1,z_2,\cdots,z_N\}$ 表示对应的数据序列。

   $\mathbb{Y}$ 和 $\mathbb{Z}$ 连在一起称作完全数据，观测数据 $\mathbb{Y}$ 又称作不完全数据。

2. 假设给定观测随机变量 Y ，其概率分布为 $P(Y;\theta)$，其中 θ 是需要估计的模型参数，则不完全数据 $\mathbb{Y}$ 的似然函数是 $P(\mathbb{Y};\theta)$， 对数似然函数为 $L(\theta)=\log P(\mathbb{Y};\theta)$ 。

   假定 Y 和 Z 的联合概率分布是 $P(Y,Z;\theta)$，完全数据的对数似然函数是 $\log P(\mathbb{Y},\mathbb{Z};\theta)$，则根据每次观测之间相互独立，有：

$$\log P(\mathbb{Y};\theta)=\sum_i\log P(Y=y_i;\theta)$$

$$\log P(\mathbb{Y},\mathbb{Z};\theta)=\sum_i\log P(Y=y_i,Z=z_i;\theta)$$

3. 由于 $\mathbb{Y}$ 发生，根据最大似然估计，则需要求解对数似然函数：

$$L(\theta)=\log P(\mathbb{Y};\theta)=\sum_{i=1}\log P(Y=y_i;\theta)=\sum_{i=1}\log\sum_{Z}P(Y=y_i,Z;\theta)$$
$$=\sum_{i=1}\log\left[\sum_{Z}P(Y=y_i\mid Z;\theta)P(Z;\theta)\right]$$

的极大值。其中 $\sum_Z P(Y=y_i,Z;\theta)$ 表示对所有可能的Z 求和，因为边缘分布 $P(Y)=\sum_Z P(Y,Z)$ 。

该问题的困难在于：该目标函数包含了未观测数据的的分布的积分和对数。

2.2 EM算法

2.2.1 原理

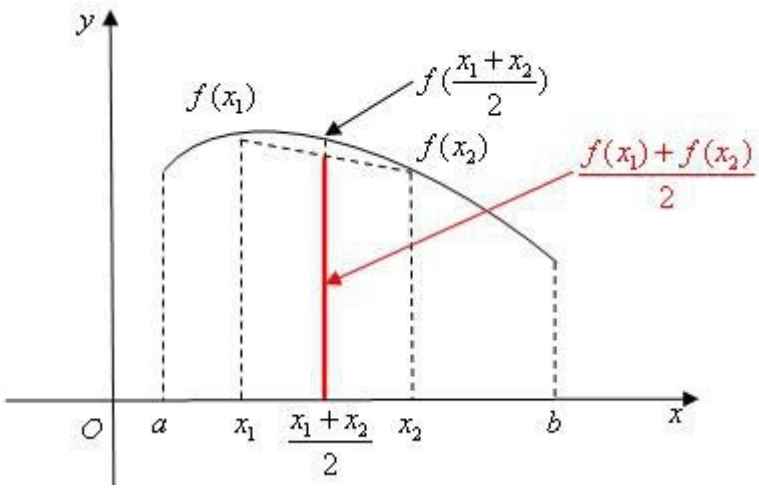
1. `EM` 算法通过迭代逐步近似极大化 $L(\theta)$ 。

   假设在第 i 次迭代后，θ 的估计值为： $\theta^{<i>}$。则希望 θ 新的估计值能够使得 $L(\theta)$ 增加，即：$L(\theta)>L(\theta^{<i>})$ 。

   为此考虑两者的差：$L(\theta)-L(\theta^{<i>})=\log P(\mathbb{Y};\theta)-\log P(\mathbb{Y};\theta^{<i>})$ 。

   > 这里 $\theta^{<i>}$ 已知，所以 $\log P(\mathbb{Y};\theta^{<i>})$ 可以直接计算得出。

2. `Jensen` 不等式：如果 f 是凸函数，x 为随机变量，则有：$\mathbb{E}[f(x)]\leq f(\mathbb{E}[x])$ 。
   - 如果 f 是严格凸函数，当且仅当 x 是常量时，等号成立。



   - 当 λ_i 满足 $\lambda_j\geq 0,\sum_j\lambda_j=1$ 时，将 λ_j 视作概率分布。

     设随机变量 y 满足概率分布 $p(y=y_j)=\lambda_j$ ，则有：$\log\sum_j\lambda_j y_j\geq\sum_j\lambda_j\log y_j$ 。

3. 考虑到条件概率的性质，则有 $\sum_Z P(Z\mid Y;\theta)=1$ 。因此有：

$$L(\theta)-L(\theta^{<i>})=\sum_j\log\sum_Z P(Y=y_j,Z;\theta)-\sum_j\log P(Y=y_j;\theta^{<i>})$$

$$=\sum_j\left[\log\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\frac{P(Y=y_j,Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})}-\log P(Y=y_j;\theta^{<i>})\right]$$

$$\geq\sum_j\left[\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j,Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})}-\log P(Y=y_j;\theta^{<i>})\right]$$

$$=\sum_j\left[\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})}-\log P(Y=y_i;\theta^{<i>})\times 1\right]$$

$$=\sum_j\left[\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})}-\log P(Y=y_j;\theta^{<i>})\times\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\right]$$

$$=\sum_j\left[\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})P(Y=y_j;\theta^{<i>})}\right]$$

等号成立时，需要满足条件：

$$P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})=\frac{1}{n_Z}$$

$$\frac{P(Y=y_j,Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})}=\text{const}$$

其中 n_Z 为随机变量 Z 的取值个数。

4. 令：

$$B(\theta,\theta^{<i>})=L(\theta^{<i>})+\sum_j\left[\sum_Z P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})P(Y=y_j;\theta^{<i>})}\right]$$

则有：$L(\theta)\geq B(\theta,\theta^{<i>})$，因此 $B(\theta,\theta^{<i>})$ 是 $L(\theta^{<i>})$ 的一个下界。

- 根据定义有：$L(\theta^{<i>})=B(\theta^{<i>},\theta^{<i>})$。因为此时有：

$$\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta^{<i>})P(Z;\theta^{<i>})}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})P(Y=y_j;\theta^{<i>})}=\frac{P(Y=y_j,Z;\theta^{<i>})}{P(Y=y_j,Z;\theta^{<i>})}=1$$

- 任何可以使得 $B(\theta,\theta^{<i>})$ 增大的 θ，也可以使 $L(\theta)$ 增大。

  为了使得 $L(\theta)$ 尽可能增大，则选择使得 $B(\theta,\theta^{<i>})$ 取极大值的 θ：$\theta^{<i+1>}=\arg\max_\theta B(\theta,\theta^{<i>})$。

5. 求极大值：

$$\theta^{<i+1>}=\arg\max_{\theta}B(\theta,\theta^{<i>})$$

$$=\arg\max_{\theta}\left[L(\theta^{<i>})+\sum_{j}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})P(Y=y_j;\theta^{<i>})}\right)\right]$$

$$=\arg\max_{\theta}\sum_{j}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log\frac{P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)}{P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})P(Y=y_j;\theta^{<i>})}\right)$$

$$=\arg\max_{\theta}\sum_{j}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log P(Y=y_j\mid Z;\theta)P(Z;\theta)\right)$$

$$=\arg\max_{\theta}\sum_{j}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log P(Y=y_j,Z;\theta)\right)$$

其中：$L(\theta^{<i>}),P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})P(Y=y_j;\theta^{<i>})$ 与 θ 无关，因此省略。

2.2.2 算法

1. `EM` 算法：
   - 输入：
     - 观测变量数据 $\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots,y_N\}$
     - 联合分布 $P(Y,Z;\theta)$，以及条件分布 $P(Z\mid Y;\theta)$

     > 联合分布和条件分布的形式已知（比如说高斯分布等），但是参数未知（比如均值、方差）

   - 输出：模型参数 θ
   - 算法步骤：
     - 选择参数的初值 $\theta^{<0>}$ ，开始迭代。
     - `E` 步：记 $\theta^{<i>}$ 为第 i 次迭代参数 θ 的估计值，在第 $i+1$ 步迭代的 `E` 步，计算：

       $$Q(\theta,\theta^{<i>})=\sum_{j=1}^{N}\mathbb{E}_{P(Z|Y=y_j;\theta^{<i>})}\log P(Y=y_j,Z;\theta)$$

       $$=\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log P(Y=y_j,Z;\theta)\right)$$

       其中$\mathbb{E}_{P(Z|Y=y_j;\theta^{<i>})}\log P(Y=y_j,Z;\theta)$ 表示：对于观测点 $Y=y_j$ ， $\log P(Y=y_j,Z;\theta)$ 关于后验概率 $P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})$ 的期望。
     - `M` 步：求使得 $Q(\theta,\theta^{<i>})$ 最大化的 θ，确定 $i+1$ 次迭代的参数的估计值 $\theta^{<i+1>}$

       $$\theta^{<i+1>}=\arg\max_{\theta}Q(\theta,\theta^{<i>})$$

     - 重复上面两步，直到收敛。
2. 通常收敛的条件是：给定较小的正数 $\varepsilon_1,\varepsilon_2$，满足：$||\theta^{<i+1>}-\theta^{<i>}||<\varepsilon_1$ 或者 $||Q(\theta^{<i+1>},\theta^{<i>})-Q(\theta^{<i>},\theta^{<i>})||<\varepsilon_2$ 。
3. $Q(\theta,\theta^{<i>})$是算法的核心，称作 Q 函数。其中：
   - 第一个符号表示要极大化的参数（未知量）。
   - 第二个符号表示参数的当前估计值（已知量）。
4. `EM` 算法的直观理解：`EM` 算法的目标是最大化对数似然函数 $L(\theta)=\log P(\mathbb{Y})$ 。

- 直接求解这个目标是有问题的。因为要求解该目标，首先要得到未观测数据的分布 $P(Z\mid Y;\theta)$ 。如：身高抽样问题中，已知身高，需要知道该身高对应的是男生还是女生。

  但是未观测数据的分布就是待求目标参数 θ 的解的函数。这是一个“鸡生蛋-蛋生鸡” 的问题。

- `EM` 算法试图多次猜测这个未观测数据的分布 $P(Z\mid Y;\theta)$ 。

  每一轮迭代都猜测一个参数值 $\theta^{<i>}$，该参数值都对应着一个未观测数据的分布 $P(Z\mid Y;\theta^{<i>})$ 。如：已知身高分布的条件下，男生/女生的分布。

- 然后通过最大化某个变量来求解参数值。这个变量就是 $B(\theta,\theta^{<i>})$ 变量，它是真实的似然函数的下界。
  - 如果猜测正确，则 B 就是真实的似然函数。
  - 如果猜测不正确，则 B 就是真实似然函数的一个下界。

5. 隐变量估计问题也可以通过梯度下降法等算法求解，但由于求和的项数随着隐变量的数目以指数级上升，因此代价太大。
   - `EM` 算法可以视作一个非梯度优化算法。
   - 无论是梯度下降法，还是 `EM` 算法，都容易陷入局部极小值。

2.2.3 收敛性定理

1. 定理一：设 $P(\mathbb{Y};\theta)$ 为观测数据的似然函数，$\theta^{<i>}$ 为 `EM` 算法得到的参数估计序列， $P(\mathbb{Y};\theta^{<i>})$ 为对应的似然函数序列，其中 $i=1,2,\cdots$。

   则： $P(\mathbb{Y};\theta^{<i>})$ 是单调递增的，即：$P(\mathbb{Y};\theta^{<i+1>})\geq P(\mathbb{Y};\theta^{<i>})$ 。

2. 定理二：设 $L(\theta)=\log P(\mathbb{Y};\theta)$ 为观测数据的对数似然函数， $\theta^{<i>}$ 为 `EM` 算法得到的参数估计序列，$L(\theta^{<i>})$ 为对应的对数似然函数序列，其中 $i=1,2,\cdots$。
   - 如果 $P(\mathbb{Y};\theta)$ 有上界，则 $L(\theta^{<i>})$ 会收敛到某一个值 L^* 。
   - 在函数 $Q(\theta,\theta^{<i>})$ 与 $L(\theta)$ 满足一定条件下，由 `EM` 算法得到的参数估计序列 $\theta^{<i>}$ 的收敛值 θ^* 是 $L(\theta)$ 的稳定点。

     > 关于“满足一定条件”：大多数条件下其实都是满足的。

3. 定理二只能保证参数估计序列收敛到对数似然函数序列的稳定点 L^* ，不能保证收敛到极大值点。
4. `EM` 算法的收敛性包含两重意义：
   - 关于对数似然函数序列 $L(\theta^{<i>})$ 的收敛。
   - 关于参数估计序列 $\theta^{<i>}$ 的收敛。

   前者并不蕴含后者。
5. 实际应用中， `EM` 算法的参数的初值选择非常重要。
   - 参数的初始值可以任意选择，但是 `EM` 算法对初值是敏感的，选择不同的初始值可能得到不同的参数估计值。
   - 常用的办法是从几个不同的初值中进行迭代，然后对得到的各个估计值加以比较，从中选择最好的（对数似然函数最大的那个）。
6. `EM` 算法可以保证收敛到一个稳定点，不能保证得到全局最优点。其优点在于：简单性、普适性。

三、EM算法与高斯混合模型

3.1 高斯混合模型

1. 高斯混合模型(`Gaussian mixture model,GMM`)：指的是具有下列形式的概率分布模型：

$$P(y;\theta)=\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\phi(y;\theta_k)$$

其中 α_k 是系数，满足：

- $\alpha_k\geq 0,\sum_{k=1}^{K}\alpha_k=1$ 。
- $\phi(y;\theta_k)$ 是高斯分布密度函数，称作第 k 个分模型， $\theta_k=(\mu_k,\sigma_k^2)$：

$$\phi(y;\theta_k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(y-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)$$

2. 如果用其他的概率分布密度函数代替上式中的高斯分布密度函数，则称为一般混合模型。

3.2 参数估计

1. 假设观察数据 $\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots,y_N\}$ 由高斯混合模型 $P(y;\theta)=\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\phi(y;\theta_k)$ 生成，其中 $\theta=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_K;\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_K)$。

   可以通过`EM`算法估计高斯混合模型的参数 θ 。

2. 可以设想观察数据 y_j 是这样产生的：

   - 首先以概率 α_k 选择第 k 个分模型 $\phi(y;\theta_k)$ 。
   - 然后以第 k 个分模型的概率分布 $\phi(y;\theta_k)$ 生成观察数据 y_j 。

   这样，观察数据 y_j 是已知的，观测数据 y_j 来自哪个分模型是未知的。

   对观察变量 y ，定义隐变量 z ，其中 $p(z=k)=\alpha_k$ 。

3. 完全数据的对数似然函数为：

$$P(y=y_j,z=k;\theta)=\alpha_k\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(y_j-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)$$

   其对数为：

$$\log P(y=y_j,z=k;\theta)=\log\alpha_k-\log\sqrt{2\pi}\sigma_k-\frac{(y_j-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}$$

   后验概率为：

$$P(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})=\frac{\alpha_k\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k^{<i>}}\exp\left(-\frac{(y_j-\mu_k^{<i>})^2}{2\sigma_k^{<i>2}}\right)}{\sum_{t=1}^{K}\alpha_t\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_t^{<i>}}\exp\left(-\frac{(y_j-\mu_t^{<i>})^2}{2\sigma_t^{<i>2}}\right)}$$

   即：$P(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})=\frac{P(y=y_j,z=k;\theta^{<t>})}{\sum_{t=1}^{K}P(y=y_j,z=t;\theta)}$。

   则 Q 函数为：

$$Q(\theta,\theta^{<i>})=\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{z}P(z\mid y=y_j;\theta^{<i>})\log P(y=y_j,z;\theta)\right)$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}P(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})\left(\log\alpha_k-\log\sqrt{2\pi}\sigma_k-\frac{(y_j-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)$$

求极大值：$\theta^{<i+1>}=\arg\max_\theta Q(\theta,\theta^{<i>})$ 。

根据偏导数为 0，以及 $\sum_{k=1}^{K}\alpha_k=1$ 得到：

- α_k：

  $$\alpha_k^{<i+1>}=\frac{n_k}{N}$$

  其中：$n_k=\sum_{j=1}^{N}P(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})$ ，其物理意义为：所有的观测数据 $\mathbb{Y}$ 中，产生自第 k 个分模型的观测数据的数量。

- μ_k：

  $$\mu_k^{<i+1>}=\frac{\overline{Sum}_k}{n_k}$$

  其中：$\overline{Sum}_k=\sum_{j=1}^{N}y_jP(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})$ ，其物理意义为：所有的观测数据 $\mathbb{Y}$ 中，产生自第 k 个分模型的观测数据的总和。

- σ^2：

  $$\sigma_k^{<i+1>2}=\frac{\overline{Var}_k}{n_k}$$

  其中：$\overline{Var}_k=\sum_{j=1}^{N}(y_j-\mu_k^{<i>})^2P(z=k\mid y=y_i;\theta^{<i>})$ ，其物理意义为：所有的观测数据 $\mathbb{Y}$ 中，产生自第 k 个分模型的观测数据，偏离第 k 个模型的均值（$\mu_k^{<i>}$ ）的平方和。

4. 高斯混合模型参数估计的`EM`算法：

   - 输入：
     - 观察数据 $\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots,y_N\}$
     - 高斯混合模型的分量数 K
   - 输出：高斯混合模型参数 $\theta=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_K;\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_K;\sigma_1^2,\sigma_2^2,\cdots,\sigma_K^2)$
   - 算法步骤：
     - 随机初始化参数 $\theta^{<0>}$ 。
     - 根据 $\theta^{<i>}$ 迭代求解 $\theta^{<i+1>}$ ，停止条件为：对数似然函数值或者参数估计值收敛。

       $$\alpha_k^{<i+1>}=\frac{n_k}{N},\ \mu_k^{<i+1>}=\frac{\overline{Sum}_k}{n_k},\ \sigma_k^{<i+1>2}=\frac{\overline{Var}_k}{n_k}$$

       其中：
       - $n_k=\sum_{j=1}^{N}P(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})$ 。

         其物理意义为：所有的观测数据 $\mathbb{Y}$ 中，产生自第 k 个分模型的观测数据的数量。
       - $\overline{Sum}_k=\sum_{j=1}^{N}y_jP(z=k\mid y=y_j;\theta^{<i>})$。

         其物理意义为：所有的观测数据 $\mathbb{Y}$ 中，产生自第 k 个分模型的观测数据的总和。

- $\overline{Var}_k=\sum_{j=1}^N(y_j-\mu_k^{<i>})^2P(z=k\mid y=y_i;\theta^{<i>})$。

  其物理意义为：所有的观测数据 $\mathbb{Y}$ 中，产生自第 k 个分模型的观测数据，偏离第 k 个模型的均值（$\mu_k^{<i>}$）的平方和。

四、EM 算法与 kmeans 模型

1. `kmeans` 算法：给定样本集 $\mathbb{D}=\{\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N\}$，针对聚类所得簇划分 $\mathcal{C}=\{\mathbb{C}_1,\mathbb{C}_2,\cdots,\mathbb{C}_K\}$，最小化平方误差：

$$\min_{\mathcal{C}}\sum_{k=1}^K\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_k||_2^2$$

   其中 $\vec{\mu}_k=\frac{1}{|\mathbb{C}_k|}\sum_{\vec{\mathbf{x}}_i\in\mathbb{C}_k}\vec{\mathbf{x}}_i$ 是簇 $\mathbb{C}_k$ 的均值向量。

2. 定义观测随机变量为 $\vec{\mathbf{x}}$，观测数据为 $\mathbb{D}$。定义隐变量为 z，它表示 $\vec{\mathbf{x}}$ 所属的簇的编号。设参数 $\theta=(\vec{\mu}_1,\vec{\mu}_2,\cdots,\vec{\mu}_K)$，则考虑如下的生成模型：

$$P(\vec{\mathbf{x}},z\mid\theta)\propto\begin{cases}\exp(-||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_z||_2^2) & ||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_z||_2^2=\min_{1\le k\le K}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_k||_2^2\\ 0 & ||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_z||_2^2>\min_{1\le k\le K}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_k||_2^2\end{cases}$$

   其中 $\min_{1\le k\le K}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_k||_2^2$ 表示距离 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近的中心点所在的簇编号。即：

   - 若 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近的簇就是 $\vec{\mu}_z$ 代表的簇，则生成概率为 $\exp(-||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_z||_2^2)$。
   - 若 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近的簇不是 $\vec{\mu}_z$ 代表的簇，则生成概率等于 0。

3. 计算后验概率：

$$P(z\mid\vec{\mathbf{x}},\theta^{<i>})\propto\begin{cases}1 & ||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_z||_2^2=\min_{1\le k\le K}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_k^{<i>}||_2^2\\ 0 & ||\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mu}_z||_2^2>\min_{1\le k\le K}||\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mu}_k^{<i>}||_2^2\end{cases}$$

   即：

   - 若 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近的簇就是 $\vec{\mu}_z$ 代表的簇，则后验概率为 1。
   - 若 $\vec{\mathbf{x}}$ 最近的簇不是 $\vec{\mu}_z$ 代表的簇，则后验概率为 0。

4. 计算 Q 函数：

$$Q(\theta,\theta^{<i>})=\sum_{j=1}^N\left(\sum_z P(z\mid\vec{\mathbf{x}}=\vec{\mathbf{x}}_j;\theta^{<i>})\log P(\vec{\mathbf{x}}=\vec{\mathbf{x}}_j,z;\theta)\right)$$

   设距离 $\vec{\mathbf{x}}_j$ 最近的聚类中心为 $\vec{\mu}_{t_j}^{<i>}$，即它属于簇 t_j，则有：

$$Q(\theta,\theta^{<i>})=\text{const}-\sum_{j=1}^N||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_{t_j}||_2^2$$

   则有：

$$\theta^{<i+1>}=\arg\max_\theta Q(\theta,\theta^{<i>})=\arg\min_\theta\sum_{j=1}^N||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_{t_j}||_2^2$$

   定义集合 $\mathbb{I}_k=\{j\mid t_j=k\},\quad k=1,2\cdots,K$，它表示属于簇 k 的样本的下标集合。则有：

$$\sum_{j=1}^N||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_{t_j}||_2^2=\sum_{k=1}^K\sum_{j\in\mathbb{I}_k}||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_k||_2^2$$

则有：

$$\theta^{<i+1>}=\arg\min_{\theta}\sum_{k=1}^{K}\sum_{j\in\mathbb{I}_k}||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_k||_2^2$$

这刚好就是 `k-means` 算法的目标：最小化平方误差。

5. 由于求和的每一项都是非负的，则当每一个内层求和 $\sum_{j\in\mathbb{I}_k}||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_k||_2^2$ 都最小时，总和最小。即：

$$\vec{\mu}_k^{<i+1>}=\arg\min_{\vec{\mu}_k}\sum_{j\in\mathbb{I}_k}||\vec{\mathbf{x}}_j-\vec{\mu}_k||_2^2$$

得到：$\vec{\mu}_k^{<i+1>}=\frac{1}{|\mathbb{I}_k|}\sum_{j\in\mathbb{I}_k}\vec{\mathbf{x}}_j$，其中 $|\mathbb{I}_k|$ 表示集合 $|\mathbb{I}_k|$ 的大小。

这就是求平均值来更新簇中心。

五、EM 算法的推广

5.1 F 函数

1. `F` 函数：假设隐变量 Z 的概率分布为 $\tilde{P}(Z)$，定义分布 $\tilde{P}(Z)$ 与参数 θ 的函数 $F(\tilde{P},\theta)$ 为：

$$F(\tilde{P},\theta)=\mathbb{E}_{\tilde{P}}[\log P(Y,Z;\theta)]+H(\tilde{P})$$

其中 $H(\tilde{P})=-\mathbb{E}_{\tilde{P}}\log\tilde{P}$ 是分布 $\tilde{P}(Z)$ 的熵。

通常假定 $P(Y,Z;\theta)$ 是 θ 的连续函数，因此 $F(\tilde{P},\theta)$ 为 $\tilde{P}(Z)$ 和 θ 的连续函数。

2. 函数 $F(\tilde{P},\theta)$ 有下列重要性质：
   - 对固定的 θ，存在唯一的分布 $\tilde{P}_\theta(Z)$ 使得极大化 $F(\tilde{P},\theta)$。此时 $\tilde{P}_\theta(Z)=P(Z\mid Y;\theta)$，并且 $\tilde{P}_\theta$ 随着 θ 连续变化。
   - 若 $\tilde{P}_\theta(Z)=P(Z\mid Y;\theta)$，则 $F(\tilde{P},\theta)=\log P(Y;\theta)$ 。
3. 定理一：设 $L(\theta)=\log P(\mathbb{Y};\theta)$ 为观测数据的对数似然函数，$\theta^{<i>}$ 为 `EM` 算法得到的参数估计序列，函数 $F(\tilde{P},\theta)=\sum_Y\mathbb{E}_{\tilde{P}}[\log P(Y,Z;\theta)]+H(\tilde{P})$，则：
   - 如果 $F(\tilde{P},\theta)$ 在 $\tilde{P}^*(Z)$ 和 θ^* 有局部极大值，那么 $L(\theta)$ 也在 θ^* 有局部极大值。
   - 如果 $F(\tilde{P},\theta)$ 在 $\tilde{P}^*(Z)$ 和 θ^* 有全局极大值，那么 $L(\theta)$ 也在 θ^* 有全局极大值。
4. 定理二：`EM` 算法的一次迭代可由 `F` 函数的极大-极大算法实现：设 $\theta^{<i>}$ 为第 i 次迭代参数 θ 的估计，$\tilde{P}^{<i>}$ 为第 i 次迭代函数 $\tilde{P}(Z)$ 的估计。在第 $i+1$ 次迭代的两步为：
   - 对固定的 $\theta^{<i>}$，求 $\tilde{P}^{<i+1>}$ 使得 $F(\tilde{P},\theta^{<i>})$ 极大化。
   - 对固定的 $\tilde{P}^{<i+1>}$，求 $\theta^{<i+1>}$ 使得 $F(\tilde{P}^{<i+1>},\theta)$ 极大化。

5.2 GEM算法1

1. `GEM` 算法1（`EM` 算法的推广形式）：
   - 输入：
     - 观测数据 $\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots\}$
     - F 函数
   - 输出：模型参数
   - 算法步骤：
     - 初始化参数 $\theta^{<0>}$，开始迭代。

- 第 $i+1$ 次迭代：
  - 记 $\theta^{<i>}$ 为参数 θ 的估计值， $\tilde{P}^{<i>}$ 为函数 $\tilde{P}$ 的估计值。求 $\tilde{P}^{<i+1>}$ 使得 $F(\tilde{P},\theta^{<i>})$ 极大化。
  - 求 $\theta^{<i+1>}$ 使得 $F(\tilde{P}^{<i+1>},\theta)$ 极大化。
  - 重复上面两步直到收敛。

2. 该算法的问题是，有时候求 $F(\tilde{P}^{<i+1>},\theta)$ 极大化很困难。

5.3 GEM算法2

1. `GEM` 算法2（ `EM` 算法的推广形式）：
   - 输入：
     - 观测数据 $\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots\}$
     - Q 函数
   - 输出：模型参数
   - 算法步骤：
     - 初始化参数 $\theta^{<0>}$ ，开始迭代。
     - 第 $i+1$ 次迭代：
       - 记 $\theta^{<i>}$ 为参数 θ 的估计值， 计算

$$Q(\theta,\theta^{<i>})=\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log P(Y=y_j,Z;\theta)\right)$$

       - 求 $\theta^{<i+1>}$ 使得 $Q(\theta^{<i+1>},\theta^{<i>})>Q(\theta^{<i>},\theta^{<i>})$
       - 重复上面两步，直到收敛。

2. 此算法不需要求 $Q(\theta,\theta^{<i>})$ 的极大值，只需要求解使它增加的 $\theta^{<i+1>}$ 即可。

5.4 GEM算法3

1. `GEM` 算法3（ `EM` 算法的推广形式）：
   - 输入：
     - 观测数据 $\mathbb{Y}=\{y_1,y_2,\cdots\}$
     - Q 函数
   - 输出：模型参数
   - 算法步骤：
     - 初始化参数 $\theta^{<0>}=(\theta_1^{<0>},\theta_2^{<0>},\cdots,\theta_d^{<0>})$ ，开始迭代
     - 第 $i+1$ 次迭代：
       - 记 $\theta^{<i>}=(\theta_1^{<i>},\theta_2^{<i>},\cdots,\theta_d^{<i>})$ 为参数 $\theta=(\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_d)$ 的估计值， 计算

$$Q(\theta,\theta^{<i>})=\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{Z}P(Z\mid Y=y_j;\theta^{<i>})\log P(Y=y_j,Z;\theta)\right)$$

       - 进行 d 次条件极大化：
         - 首先在 $\theta_2^{<i>},\cdots,\theta_d^{<i>}$ 保持不变的条件下求使得 $Q(\theta,\theta^{<i>})$ 达到极大的 $\theta_1^{<i+1>}$

        - 然后在 $\theta_1 = \theta_1^{<i+1>}, \theta_j = \theta_j^{<i>}, j = 3, \cdots, d$ 的条件下求使得 $Q(\theta, \theta^{<i>})$ 达到极大的 $\theta_2^{<i+1>}$
        - 如此继续，经过 d 次条件极大化，得到 $\theta^{<i+1>} = (\theta_1^{<i+1>}, \theta_2^{<i+1>}, \cdots, \theta_d^{<i+1>})$，使得 $Q(\theta^{<i+1>}, \theta^{<i>}) > Q(\theta^{<i>}, \theta^{<i>})$
    - 重复上面两步，直到收敛。
2. 该算法将 `EM` 算法的 `M` 步分解为 d 次条件极大化，每次只需要改变参数向量的一个分量，其余分量不改变。