CS229 Lecture notes

原作者：Andrew Ng（吴恩达）

翻译：CycleUser

Part IX

期望最大化算法(EM algorithm)

在前面的若干讲义中，我们已经讲过了期望最大化算法（EM algorithm），使用场景是对一个高斯混合模型进行拟合（fitting a mixture of Gaussians）。在本章里面，我们要给出期望最大化算法（EM algorithm）的更广泛应用，并且演示如何应用于一个大系列的具有潜在变量（latent variables）的估计问题（estimation problems）。我们的讨论从 Jensen 不等式（Jensen's inequality）开始，这是一个非常有用的结论。

1 Jensen 不等式（Jensen's inequality）

设 f 为一个函数，其定义域（domain）为整个实数域（set of real numbers）。这里要回忆一下，如果函数 f 的二阶导数 $f''(x) \geq 0$ (其中的 $x \in R$)，则函数 f 为一个凸函数（convex function）。如果输入的为向量变量，那么这个函数就泛化了，这时候该函数的海森矩阵（hessian） H 就是一个半正定矩阵（positive semi-definite $H \geq 0$）。如果对于所有的 x ，都

有二阶导数 $f''(x) > 0$，那么我们称这个函数 f 是严格凸函数（对应向量值作为变量的情况，对应的条件就是海森矩阵必须为正定，写作 $H > 0$）。这样就可以用如下方式来表述 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（random variable）。然后则有：

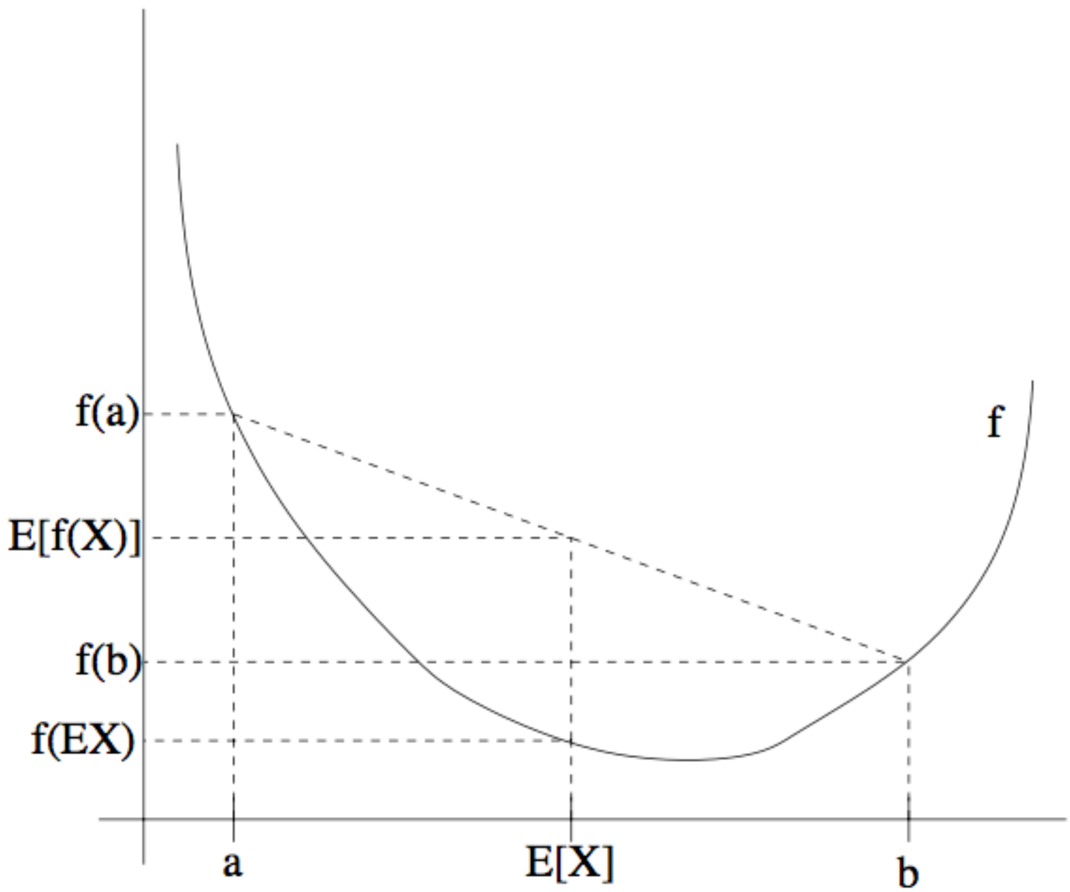
$$E[f(X)] \geq f(EX).$$

（译者注：函数的期望等于期望的函数值）

此外，如果函数 f 是严格凸函数，那么 $E[f(X)] = f(EX)$ 当且仅当 $X = E[X]$ 的概率（probability）为 1的时候成立（例如 X 是一个常数。）

还记得我们之前的约定（convention）吧，写期望（expectations）的时候可以偶尔去掉括号（parentheses），所以在上面的定理中， $f(EX) = f(E[X])$。

为了容易理解这个定理，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（chance）取值为 a，另外有 0.5 的概率取值为 b（在图中 x 轴上标出了）。这样， X 的期望值就在图中所示的 a 和 b 的中点位置。

图中在 y 轴上也标出了 f(a), f(b) 和 f(E[X])。接下来函数的期望值 E[f(X)] 在 y 轴上就处于 f(a) 和 f(b) 之间的中点的位置。如图中所示，在这个例子中由于 f 是凸函数，很明显 $E[f(X)] \geq f(EX)$。

顺便说一下，很多人都记不住不等式的方向，所以就不妨用画图来记住，这是很好的方法，还可以通过图像很快来找到答案。

备注。回想一下，当且仅当 $-f$ 是严格凸函数（[strictly] convex）的时候，f 是严格凹函数（[strictly] concave）（例如，二阶导数 $f''(x) \le 0$ 或者其海森矩阵 $H \le 0$）。Jensen 不等式也适用于凹函数（concave）f，但不等式的方向要反过来，也就是对于凹函数，$E[f(X)] \le f(EX)$。

2 期望最大化算法（EM algorithm）

假如我们有一个估计问题（estimation problem），其中由训练样本集 $\{x^{(1)}, ..., x^{(m)}\}$ 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（parameters），其中的似然函数（likelihood）如下所示：

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

然而，确切地找到对参数 θ 的最大似然估计（maximum likelihood estimates）可能会很难。此处的 $z^{(i)}$ 是一个潜在的随机变量（latent random variables）；通常情况下，如果 $z^{(i)}$ 事先得到了，然后再进行最大似然估计，就容易多了。

这种环境下，使用期望最大化算法（EM algorithm）就能很有效地实现最大似然估计（maximum likelihood estimation）。明确地对似然函数进行最大化可能是很困难的，所以我们的策略就是使用一种替代，在 E 步骤 构建一个 l 的下限（lower-bound），然后在 M 步骤 对这个下限进行优化。

对于每个 i，设 Q_i 是某个对 z 的分布，$Q_i(z) = 1, Q_i(z) \geq 0$。则有下列各式[1]：

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

上面推导（derivation）的最后一步使用了 Jensen 不等式（Jensen's inequality）。其中的 $f(x) = \log x$ 是一个凹函数（concave function），因为其二阶导数 $f''(x) = -1/x^2 < 0$ 在整个定义域（domain） $x \in R^+$ 上都成立。

此外，上式的求和中的单项：

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

是变量（quantity）$p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)/Q_i(z^{(i)})$ 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（Jensen's inequality），就得到了：

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

其中上面的角标“$z^{(i)} \sim Q_i$”就表明这个期望是对于依据分布 Q_i 来确定的 $z^{(i)}$ 的。这样就可以从等式（2）推导出等式（3）。

接下来，对于任意的一个分布 Q_i，上面的等式(3) 就给出了似然函数 $l(\theta)$ 的下限（lower-bound）。那么对于 Q_i 有很多种选择。咱们该选哪个呢？如果我们对参数 θ 有某种当前的估计，很自然就可以设置这个下限为 θ 这个值。也就是，针对当前的 θ 值，我们令上面的不等式中的符号为等号。（稍后我们能看到，这样就能证明，随着 EM迭代过程的进行，似然函数 $l(\theta)$ 就会单调递增（increases monotonically）。）

[1]如果 z 是连续的，那么 Q_i 就是一个密度函数（density），上面讨论中提到的对 z 的求和（summations）就要用对 z 的积分（integral）来替代。

为了让上面的限定值（bound）与 θ 特定值（particular value）联系紧密（tight），我们需要上面推导过程中的 Jensen 不等式这一步中等号成立。要让这个条件成立，我们只需确保是在对一个常数值随机变量（“constant”-valued random variable）求期望。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 $Q_i(z^{(i)}) = 1$（因为这是一个分布），这就进一步表明：

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

因此，在给定 $x^{(i)}$ 和参数 θ 的设置下，我们可以简单地把 Q_i 设置为 $z^{(i)}$ 的后验分布（posterior distribution），

接下来，对 Q_i 的选择，等式(3) 就给出了似然函数对数（log likelihood）的一个下限，而似然函数（likelihood）正是我们要试图求最大值（maximize）的。这就是 E 步骤。接下来在算法的 M 步骤中，就最大化等式(3) 当中的方程，然后得到新的参数 θ。重复这两个步骤，就是完整的 EM 算法，如下所示：

重复下列过程直到收敛（convergence）： {

(E 步骤) 对每个 i，设

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

(M 步骤) 设

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

怎么才能知道这个算法是否会收敛（converge）呢？设 $\theta^{(t)}$ 和 $\theta^{(t+1)}$ 是上面 EM 迭代过程中的某两个参数（parameters）。接下来我们就要证明一下 $l(\theta^{(t)}) \le l(\theta^{(t+1)})$，这就表明 EM 迭代过程总是让似然函数对数（log-likelihood）单调递增（monotonically improves）。证明这个结论的关键就在于对 Q_i 的选择中。在上面EM 迭代中，参数的起点设为 $\theta^{(t)}$，我们就可以选择 $Q_i^{(t)}(z^{(i)}) := p(z^{(i)}|x^{(i)};\theta^{(t)})$。

之前我们已经看到了，正如等式(3) 的推导过程中所示，这样选择能保证 Jensen 不等式的等号成立，因此：

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

参数 $\theta^{(t+1)}$ 可以通过对上面等式中等号右侧进行最大化而得到。因此：

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

上面的第一个不等式推自：

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

上面这个不等式对于任意值的 Q_i 和 θ 都成立，尤其当 $Q_i = Q_i^{(t)}, \theta = \theta^{(t+1)}$。要得到等式(5)，我们要利用 $\theta^{(t+1)}$ 的选择能够保证：

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

and thus, this formula evaluated at $\theta^{(t+1)}$ must be equal to or larger than the same formula evaluated at $\theta^{(t)}$. Finally, the step used to get (6) was shown earlier, and follows from $Q^{(t)}$ having been chosen to make Jensen's inequality hold with equality at $\theta^{(t)}$.

这个式子对 $\theta^{(t+1)}$ 得到的值必须大于等于 $\theta^{(t)}$ 得到的值。最后，推导等式(6) 的这一步，正如之前所示，因为在选择的时候我们选的 $Q^{(t)}$ 就是要保证 Jensen 不等式对 $\theta^{(t)}$ 等号成立。

因此，EM 算法就能够导致似然函数（likelihood）的单调收敛。在我们推导 EM 算法的过程中，我们要一直运行该算法到收敛。得到了上面的结果之后，可以使用一个合理的收敛检测（reasonable convergence test）来检查在成功的迭代（successive iterations）之间的 $l(\theta)$ 的增长是否小于某些容忍参数（tolerance parameter），如果 EM 算法对 $l(\theta)$ 的增大速度很慢，就声明收敛（declare convergence）。

备注。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，就能知道 $l(\theta) \geq J(Q, \theta)$。这样 EM 算法也可看作是在 J 上的坐标上升（coordinate ascent），其中 E 步骤在 Q 上对 J 进行了最大化（自己检查哈），然后 M 步骤则在 θ 上对 J 进行最大化。

3 高斯混合模型回顾（Mixture of Gaussians revisited ）

有了对 EM 算法的广义定义（general definition）之后，我们就可以回顾一下之前的高斯混合模型问题，其中要拟合的参数有 ϕ, μ 和 Σ。为了避免啰嗦，这里就只给出在 M 步骤中对 ϕ 和 μ_j 进行更新的推导，关于 Σ_j 的更新推导就由读者当作练习自己来吧。

E 步骤很简单。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 j 的概率。

接下来在 M 步骤，就要最大化关于参数 ϕ, μ, Σ 的值：

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

先关于 μ_l 来进行最大化。如果去关于 μ_l 的（偏）导数（derivative），得到：

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

设上式为零，然后解出 μ_l 就产生了更新规则（update rule）：

$$\mu_l := \frac{\sum_{i=1}^{m} w_l^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} w_l^{(i)}},$$

这个结果咱们在之前的讲义中已经见到过了。咱们再举一个例子，推导在 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，还有一个附加的约束，即 ϕ_j 的和为1，因为其表示的是概率 $\phi_j = p(z^{(i)} = j;\phi)$。为了保证这个约束条件成立，即 $\Sigma^k_{j=1} \phi_j = 1$，我们构建一个拉格朗日函数（Lagrangian）：

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

其中的 β 是 拉格朗日乘数（Lagrange multiplier）[2] 。求导，然后得到：

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

[2] 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。

设导数为零，然后解方程，就得到了：

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

也就是说， $\phi_j \propto \sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}$. 结合约束条件（constraint）$\Sigma_j \phi_j = 1$，可以很容易地发现 $-\beta = \Sigma_{i=1}^{m} \Sigma_{j=1}^{k} w_j^{(i)} = \Sigma_{i=1}^{m} 1 = m$.

(这里用到了条件 $w_j^{(i)} = Q_i(z^{(i)} = j)$。这样我们就得到了在 M 步骤中对参数 ϕ_j 进行更新的规则了：

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

接下来对 M 步骤中对 Σ_j 的更新规则的推导就很容易了。