

EM 算法

如果概率模型的变量都是观测变量，那么给定数据，可以直接使用极大似然估计法。但当模型含有隐含变量时，不能简单的进行极大似然估计，需要EM算法。因此EM算法是对含有隐含变量的概率模型参数进行极大似然估计。

为了说明EM算法，首先介绍Jession不等式。

Jession inequality

如果 f 为凸函数 $f''(x) \geq 0$, 那么 $f(E(x)) \leq E(f(x))$

如果 f 为凹函数 $f''(x) \leq 0$, 那么 $f(E(x)) \geq E(f(x))$

$f(E(x)) = E(f(x))$ 的充要条件是随机变量 x 在概率1下取相同值。

下面来推导EM算法：

模型： $P(x, z, \theta)$

仅观测到 x

目标：最大化极大似然函数 $l(\theta) = \sum_{i=1}^m \log(P(x^i, \theta)) = \sum_{i=1}^m \log(\sum_{z^i} P(x^i, z^i, \theta))$

上述问题的难点是log中含有加法。

基本精神：初始化参数 θ ，建立一个对数似然函数的比较紧密的下界，猜测参数之后，找到这个函数取最大值的 θ ，并重复上述过程，直到收敛到函数的一个局部最优值（不保证达到全局最优解）。

$$l(\theta) = \sum_i \log(P(x^i, \theta)) = \sum_{i=1} \log(\sum_{z^i} P(x^i, z^i, \theta))$$

$$= \sum_{i=1} \log(\sum_{z^i} Q(z^i) \frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q(z^i)})$$

其中 $Q_i(z^i)$ 为 z^i 的一个概率分布

$$= \sum_i \log E_{z^i \in Q} [\frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q(z^i)}]$$

根据Jession不等式，有

$$\geq \sum_i E_{z^i \in Q} [\log(\frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q(z^i)})]$$

$$= \sum_i \sum_{z^i} Q(z^i) \log(\frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q(z^i)})$$

当 $\frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q(z^i)}$ 以概率1取恒定值时，等号成立，因此，获得原始函数的一个紧密的下界。选取合适的 $Q(z^i)$ 使得等式成立。

根据 $\frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q_i(z^i)} = \text{constant}$ ，可以得到： $Q(z^i)$ 正比于 $P(x^i, z^i, \theta)$

$$\sum_{z^i} Q(z^i) = 1$$

$$\text{根据上边两式可以得到：} Q(z^i) = \frac{P(x^i, z^i, \theta)}{\sum_{z^i} P(x^i, z^i, \theta)} = \frac{P(x^i, z^i, \theta)}{P(x^i, \theta)} = P(z^i | x^i, \theta)$$

因此EM算法总结如下：

E-step：

计算 $Q_i(z^i) = P(z^i|x^i, \theta)$

M-step:

最大化紧却下界函数：

$$\theta = \operatorname{argmax}_{\theta} \sum_i \sum_{z^i} Q(z^i) \log\left(\frac{P(x^i, z^i, \theta)}{Q(z^i)}\right)$$