EM算法 (Expectation-Maximization Algorithm)

1. EM算法收敛性 (Convergence of EM Algorithm)

EM算法是一种迭代算法，用于含有隐变量 (Latent Variables) 的概率模型参数估计。其目标是最大化观测数据 X 的对数似然函数 (Log-Likelihood)。

1.1 基础定义 (Basic Definitions)

- **符号系统 (Ntation)**:
  - X: 观测数据 (Observed Data)
  - Z: 隐变量 (Unobserved Data / Latent Variable)
  - (X, Z): 完整数据 (Complete Data)
  - θ: 参数 (Parameter)
- **MLE**: 最大似然估计 (Maximum Likelihood Estimation)

$$\theta_{MLE} = \arg\max_{\theta} \log P(X|\theta) \tag{1}$$

- **EM 算法公式 (EM Formula)**:

$$\theta^{(t+1)} = \arg\max_{\theta} \int_Z \log P(X, Z|\theta) \cdot P(Z|X, \theta^{(t)}) dZ \tag{2}$$

- **步骤分解 (Steps)**:
  1. **E-step (Expectation)**:
     计算基于当前参数 $\theta^{(t)}$ 下隐变量 Z 的后验分布，构建对数似然的期望函数 (Q函数)：

$$P(Z|X, \theta^{(t)}) \to E_{Z|X,\theta^{(t)}}[\log P(X, Z|\theta)] \tag{3}$$

  2. **M-step (Maximization)**:
     最大化上述期望函数以获得新的参数估计 $\theta^{(t+1)}$：

$$\theta^{(t+1)} = \arg\max_{\theta} Q(\theta, \theta^{(t)}) = \arg\max_{\theta} E_{Z|X,\theta^{(t)}}[\log P(X, Z|\theta)] \tag{4}$$

我们希望证明 EM 算法的迭代能够保证似然函数单调递增，即：

$$\log P(X|\theta^{(t+1)}) \geq \log P(X|\theta^{(t)}) \tag{5}$$

1.2 似然函数的分解 (Decomposition of Log-Likelihood)

根据条件概率公式 $P(Z|X, \theta) = \frac{P(X,Z|\theta)}{P(X|\theta)}$，我们可以写出：

$$\log P(X|\theta) = \log P(X, Z|\theta) - \log P(Z|X, \theta) \tag{6}$$

对等式两边关于隐变量 Z 的后验分布 $P(Z|X, \theta^{(t)})$ 求期望（积分）：

左边 (LHS):

$$\begin{aligned} \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log P(X|\theta) dZ &= \log P(X|\theta) \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) dZ \\ &= \log P(X|\theta) \cdot 1 \\ &= L(\theta) \end{aligned} \tag{7}$$

(注：左边与 Z 无关，积分值为1)

右边 (RHS):

$$\int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log P(X, Z|\theta) dZ - \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log P(Z|X, \theta) dZ \tag{8}$$

我们将这两项分别定义为 Q 和 H：

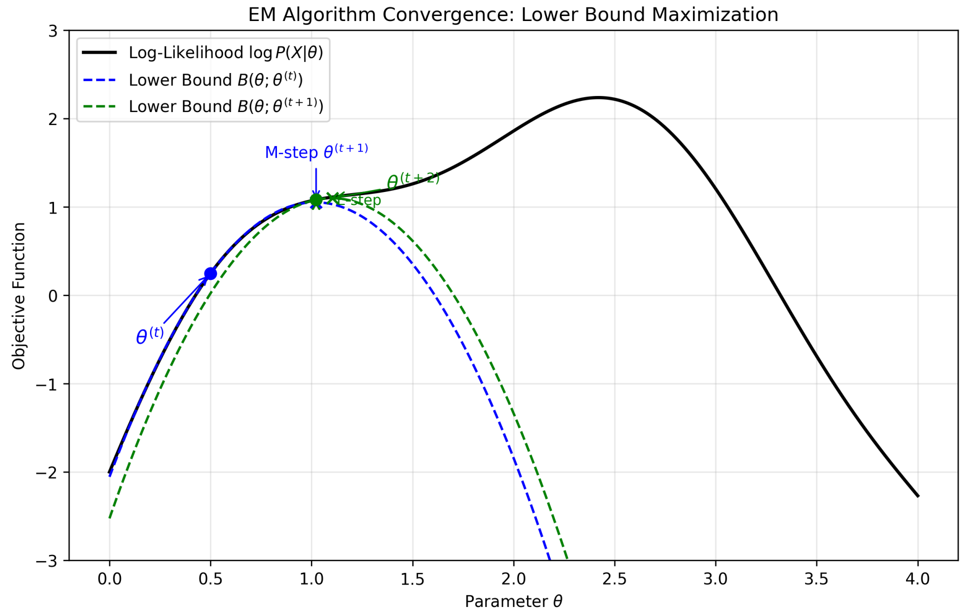
- **Q function**: $Q(\theta, \theta^{(t)}) = \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log P(X, Z|\theta) dZ$
- **H function**: $H(\theta, \theta^{(t)}) = \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log P(Z|X, \theta) dZ$

因此得到了核心分解式：

$$L(\theta) = Q(\theta, \theta^{(t)}) - H(\theta, \theta^{(t)}) \tag{9}$$

1.3 收敛性证明 (Proof)

下图展示了 EM 算法通过不断构建和最大化下界函数（Lower Bound）来逼近对数似然函数的过程：



我们要比较 $\theta^{(t+1)}$ 和 $\theta^{(t)}$ 处的似然函数值：

$$L(\theta^{(t+1)}) - L(\theta^{(t)}) = [Q(\theta^{(t+1)}, \theta^{(t)}) - Q(\theta^{(t)}, \theta^{(t)})] - [H(\theta^{(t+1)}, \theta^{(t)}) - H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)})] \tag{10}$$

第一项 (Q-term):
由于 EM 算法的 M-step 定义为 $\theta^{(t+1)} = \arg\max_\theta Q(\theta, \theta^{(t)})$，显然有：

$$Q(\theta^{(t+1)}, \theta^{(t)}) \geq Q(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) \tag{11}$$

第二项 (H-term):
我们考察 H 函数的差值：

$$\begin{aligned} H(\theta^{(t+1)}, \theta^{(t)}) - H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) &= \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \left[\log P(Z|X, \theta^{(t+1)}) - \log P(Z|X, \theta^{(t)})\right] dZ \\ &= \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log \frac{P(Z|X, \theta^{(t+1)})}{P(Z|X, \theta^{(t)})} dZ \end{aligned} \tag{12}$$

利用 **Jensen's Inequality** (对于凹函数 $\log x$，有 $E[\log x] \leq \log E[x]$):

$$\begin{aligned} \int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \log \frac{P(Z|X, \theta^{(t+1)})}{P(Z|X, \theta^{(t)})} dZ &\leq \log \left(\int_Z P(Z|X, \theta^{(t)}) \frac{P(Z|X, \theta^{(t+1)})}{P(Z|X, \theta^{(t)})} dZ \right) \\ &= \log \left(\int_Z P(Z|X, \theta^{(t+1)}) dZ \right) \\ &= \log 1 \\ &= 0 \end{aligned} \tag{13}$$

所以：

$$H(\theta^{(t+1)}, \theta^{(t)}) \leq H(\theta^{(t)}, \theta^{(t)}) \tag{14}$$

即 H 项在从 $\theta^{(t)}$ 更新到 $\theta^{(t+1)}$ 时是**减小**（或不变）的。
由于 $L(\theta)$ 中 H 项前是负号，这意味着 H 的减小会增加 L。

结论:

$$L(\theta^{(t+1)}) - L(\theta^{(t)}) \geq 0 \implies L(\theta^{(t+1)}) \geq L(\theta^{(t)}) \tag{15}$$

每次迭代，似然函数都会单调增加，直到收敛到局部最优解。

2. 公式的导出 (Formula Export)

我们有两种主要的方法来推导 EM 算法的迭代公式。

2.1 方法一：Jensen 不等式 (Jensen's Inequality)

目标是最大化对数似然函数 $\log P(X|\theta)$。我们可以引入隐变量 Z 的分布 $q(Z)$ 来对目标函数进行变换：

$$\begin{aligned}\log P(X|\theta) &= \log \int_Z P(X,Z|\theta)dZ \\ &= \log \int_Z \frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)} \cdot q(Z)dZ \\ &= \log E_{q(Z)}\left[\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}\right]\end{aligned} \tag{16}$$

由于 $\log(x)$ 是 **凹函数 (Concave Function)**，根据 Jensen 不等式 ($f(E[x]) \geq E[f(x)]$ for concave f)：

$$\log E_{q(Z)}\left[\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}\right] \geq E_{q(Z)}\left[\log \frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}\right] \tag{17}$$

这一项被称为 **ELBO (Evidence Lower Bound)**：

$$\text{ELBO} = \int_Z q(Z) \log \frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)} dZ \tag{18}$$

等号成立条件 (Condition for Equality):
Jensen 不等式取等号当且仅当随机变量是常数，即:

$$\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)} = C \text{ (Constant)} \tag{19}$$

这推导出 $q(Z) = \frac{1}{C}P(X,Z|\theta)$。
利用概率密度归一化性质 $\int_Z q(Z)dZ = 1$ 来求解 C：

$$\begin{aligned}1 &= \int_Z \frac{1}{C}P(X,Z|\theta)dZ \\ C &= \int_Z P(X,Z|\theta)dZ = P(X|\theta)\end{aligned} \tag{20}$$

(即常数 C 就是边缘概率/似然函数)

代回原式得到：

$$q(Z) = \frac{P(X,Z|\theta)}{P(X|\theta)} = P(Z|X,\theta) \tag{21}$$

2.2 方法二：对数似然分解 (Decomposition)

我们也可以直接利用恒等变换分解对数似然函数。
首先写出恒等变换：

$$\log P(X|\theta) = \log \frac{P(X,Z|\theta)}{P(Z|X,\theta)} = \log \frac{P(X,Z|\theta)/q(Z)}{P(Z|X,\theta)/q(Z)} \tag{22}$$

对等式两边关于分布 $q(Z)$ 求期望（积分）：

左边 (LHS):

$$\int_Z q(Z) \log P(X|\theta)dZ = \log P(X|\theta) \cdot \int_Z q(Z)dZ = \log P(X|\theta) \tag{23}$$

右边 (RHS):

$$\int_Z q(Z)\log\left(\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}\frac{q(Z)}{P(Z|X,\theta)}\right)dZ = \underbrace{\int_Z q(Z)\log\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}dZ}_{\text{ELBO}} - \underbrace{\int_Z q(Z)\log\frac{q(Z)}{P(Z|X,\theta)}dZ}_{\text{KL}(q||P)} \\ = \text{ELBO} + KL(q(Z)||P(Z|X,\theta)) \tag{24}$$

其中：

1. **ELBO (Evidence Lower Bound)**:

$$\text{ELBO} = \int_Z q(Z)\log\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}dZ \tag{25}$$

2. **KL Divergence (KL 散度)**:

$$KL(q||p) = \int_Z q(Z)\log\frac{q(Z)}{P(Z|X,\theta)}dZ \geq 0 \tag{26}$$

结论:

$$\log P(X|\theta) = \text{ELBO} + KL(q||p) \tag{27}$$

由于 $KL \geq 0$，再次得到了 $\log P(X|\theta) \geq \text{ELBO}$。

在 EM 算法中，我们交替优化 ELBO：

- **E-step**: 当 $q(Z) = P(Z|X,\theta^{(t)})$ 时，$KL = 0$，ELBO 触碰到对数似然函数。
- **M-step**: 固定 $q(Z)$，最大化 ELBO 以提升下界。

$$\begin{aligned}
\theta^{(t+1)} &= \arg\max_\theta \text{ELBO} \\
&= \arg\max_\theta \int_Z P(Z|X,\theta^{(t)})\log\frac{P(X,Z|\theta)}{P(Z|X,\theta^{(t)})}dZ \\
&= \arg\max_\theta \int_Z P(Z|X,\theta^{(t)})\log P(X,Z|\theta)dZ - \underbrace{\int_Z P(Z|X,\theta^{(t)})\log P(Z|X,\theta^{(t)})dZ}_{\text{const w.r.t }\theta} \\
&= \arg\max_\theta E_{Z|X,\theta^{(t)}}[\log P(X,Z|\theta)]
\end{aligned} \tag{28}$$

这导出了标准的 EM 更新公式。

3. 广义 EM (Generalized EM)

我们通常将 EM 算法理解为对目标函数的坐标上升优化。为了更清晰地表述这一点，我们将 ELBO 定义为一个关于 q 和 θ 的二元函数：

$$L(q,\theta) = \text{ELBO} = \int_Z q(Z)\log\frac{P(X,Z|\theta)}{q(Z)}dZ \tag{29}$$

根据之前的推导：

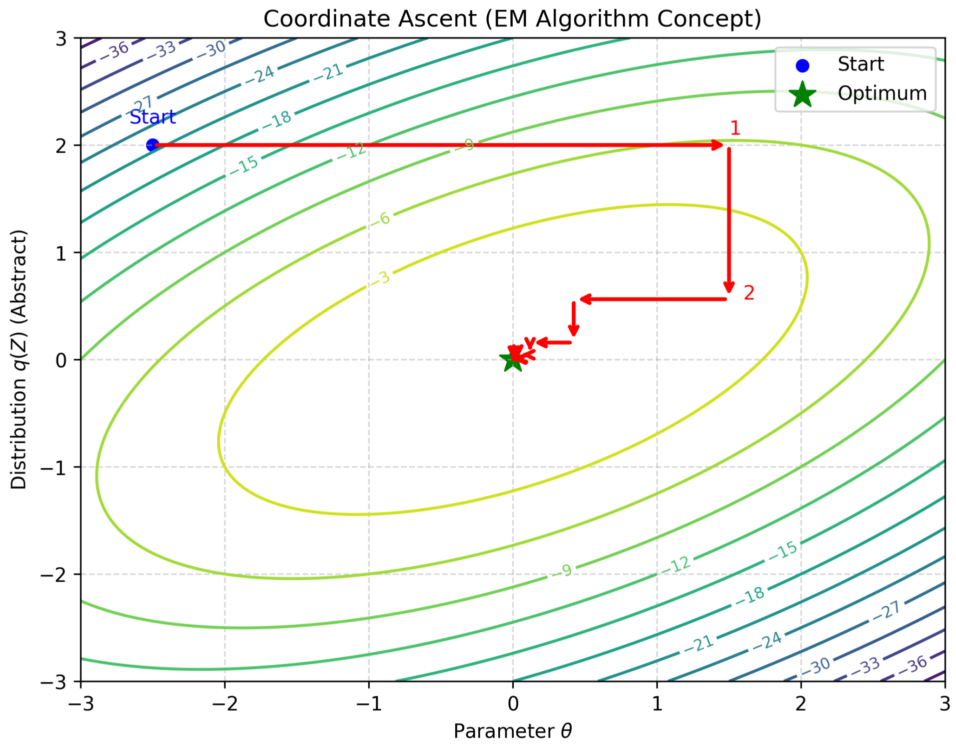
$$\log P(X|\theta) = L(q,\theta) + KL(q||P(Z|X,\theta)) \tag{30}$$

由于 $KL \geq 0$，这是一个明显的下界：

$$\log P(X|\theta) \geq L(q,\theta) \tag{31}$$

3.1 坐标上升法 (Coordinate Ascent)

EM 算法的迭代过程实际上是 **坐标上升法 (Coordinate Ascent)**，即在 $L(q,\theta)$ 曲面上交替固定一个变量最大化另一个变量：



$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} L(q, \theta) \tag{32}$$

1. **E-step**: 固定 $\theta^{(t)}$，关于 q 最大化 L：

$$q^{(t+1)} = \arg\max_{q} L(q, \theta^{(t)}) \tag{33}$$

   - 在标准 EM 中，这个最大化有解析解：$q^{(t+1)} = P(Z|X, \theta^{(t)})$。
   - 此时 $KL(q||p) = 0$，下界 L 触碰到目标函数 $\log P(X|\theta)$。

2. **M-step**: 固定 $q^{(t+1)}$，关于 θ 最大化 L：

$$\theta^{(t+1)} = \arg\max_{\theta} L(q^{(t+1)}, \theta) \tag{34}$$

   这等价于最大化期望完整对数似然。

这与 **梯度上升法 (Gradient Ascent)** 不同，后者是同时对所有参数及其梯度方向进行更新。

3.2 函数 $L(q, \theta)$ 的展开与熵

我们可以将 $L(q, \theta)$ 展开为：

$$\begin{aligned} L(q, \theta) &= \int_Z q(Z) \log P(X, Z|\theta) - \log q(Z) dZ \\ &= E_q[\log P(X, Z|\theta)] + H[q] \end{aligned} \tag{35}$$

其中 $H[q]$ 是分布 q 的**熵 (Entropy)**。M-step 中只需要最大化第一项，因为熵与 θ 无关。

3.3 广义 EM 的变体 (Variations)

当 E-step 无法求出精确的后验分布 $P(Z|X, \theta)$ 时，我们可以采用近似方法，只要能提升 $L(q, \theta)$ 即可：

- **VBEM / VEM (Variational Bayesian EM)**: 使用变分推断来近似后验分布 $q(Z)$。
- **MCEM (Monte Carlo EM)**: 在 E-step 中使用蒙特卡洛采样来近似期望。