EM算法的九层境界：Hinton和Jordan理解的EM算法

新智元 2017-12-15

以下文章来源于AI2ML人工智能to机器学习

AI2ML人工智能to机器学习
人工智能(artificial intelligence)机器学习(machine learning)原创文章，深度(dee...

新智元推荐

来源：AI2ML人工智能to机器学习

作者：史春奇

【新智元导读】知乎上有一个讨论：EM算法存在的意义是什么？是什么原因使得EM算法这么流行呢？EM算法是Hinton和Jordan强强发力的领域，本文作者纵向解析EM算法的9层境界，深入浅出，值得一读。

Hinton, 这个深度学习的缔造者(参考 攒说 Geoff Hinton)， Jordan 当世概率图模型的集大成者（参考“乔丹上海行”）， 他们碰撞的领域，EM算法！这个是PCA外的，另外一个无监督学习的经典，是我们的主题。

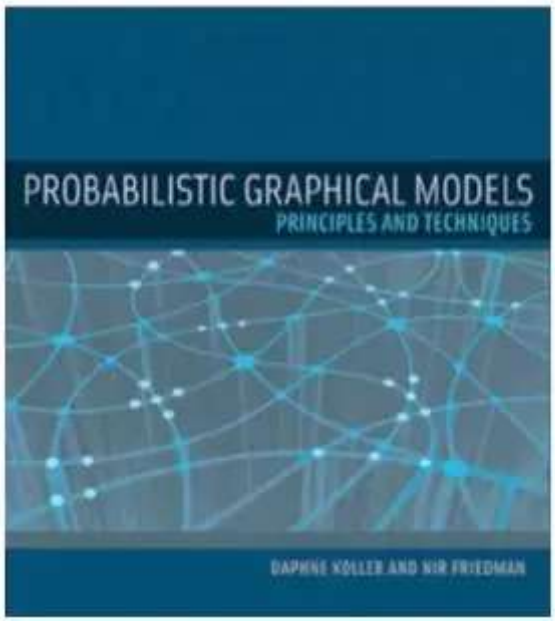
他们怎么认识的呢？Jordan的导师，就是著名的链接主义核心人物Rumelhart（参考“易图秒懂の连接主义诞生”）。在“人工智能深度学习人物关系[全]”里面我们介绍到，Hinton和Rumelhart是同事，都在Francis Crick的小组。

前言

为什么说EM算法是他们强强发力的领域呢？

这里我们讨论Hinton和统计大神Jordan的强强发力的领域。当Bayes网络发展到高级阶段， 概率图模型使得计算成为问题，由此开启了Variational Bayes领域。在“变の贝叶斯”里面， 我们解释了研究Variational Bayes，有3拨人。 第一拨人， 把物理的能量搬到了机器学习（参考“给能力以自由吧！”）。 第二拨人， 就是Hinton，他将VB和EM算法联系了起来，奠定了现在我们看到的VB的基础。 第三拨人，就是Jordan， 他重建了VB的框架ELBO的基础。所以说EM算法扩展的VBEM算法，就是Hinton和Jordan共同发力的部分。

Hinton曾在采访中，不无感慨的说到， 他当时研究VB和EM算法的关系的时候， 主动去请教当时的EM算法的大佬们， 结果那些人说Hinton是异想天开，神经有问题。 但是最终， 他还是突破重围， 搞定了VBEM算法，打下了VB世界最闪光的那盏灯。老爷子真心不容易！ 如果想切实深入到VB的世界， 我推荐Daphne Koller的神书“Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques”， 尤其其中的第8章：The Exponential Family 和第19章 Partially Observed Data。 这两章几乎是Hinton对VBEM算法研究的高度浓缩。 国内机器学习牛人王飞跃老师， 率领各路弟子花了5年时间翻译了这本神书！所以有中文版， 买了，反复阅读8、19章，要的！



Daphne Koller
Computer Science Dept.
Stanford University

Nir Friedman
School of Computer Science & Engineering
Hebrew University

为什么无监督深度学习突出成果都是Hinton和Jordan家的？

无监督深度学习，除了强化学习，主要包括BM、自动编码器AE和GAN领域。 1）这些领域中的DBN和DBM是Hinton搞的。2）AE中的经典，VAE是DP Kingma和M Welling搞得。 DP Kingma硕士导师是LeCun，LeCun的博士后导师是Hinton，并且Welling的博士后导师是Hinton。 3）而GAN是Ian Goodfellow和Yoshua Bengio的杰作， Goodfellow是Bengio的学生， 而Bengio的博士后导师是Jordan。 一句话， 无监督深度学习的经典模型几乎全是Hinton和Jordan家的。 为什么？ 因为能彻底理解EM算法到深不见底的人非Hinton和Jordan莫属。

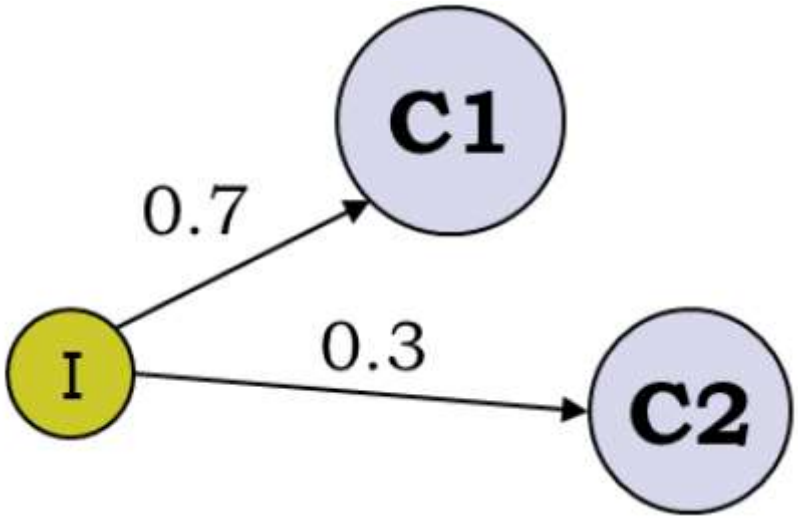
你现在明白彻底理解EM算法的重要性了吧？ 下面我浅薄的纵向理解（忽略EM的各种变种的横向）EM算法的9层境界，再回头反思一下Hinton和Jordan等会对EM算法的理解到何种程度， 简直叹而观止！

EM算法理解的九层境界

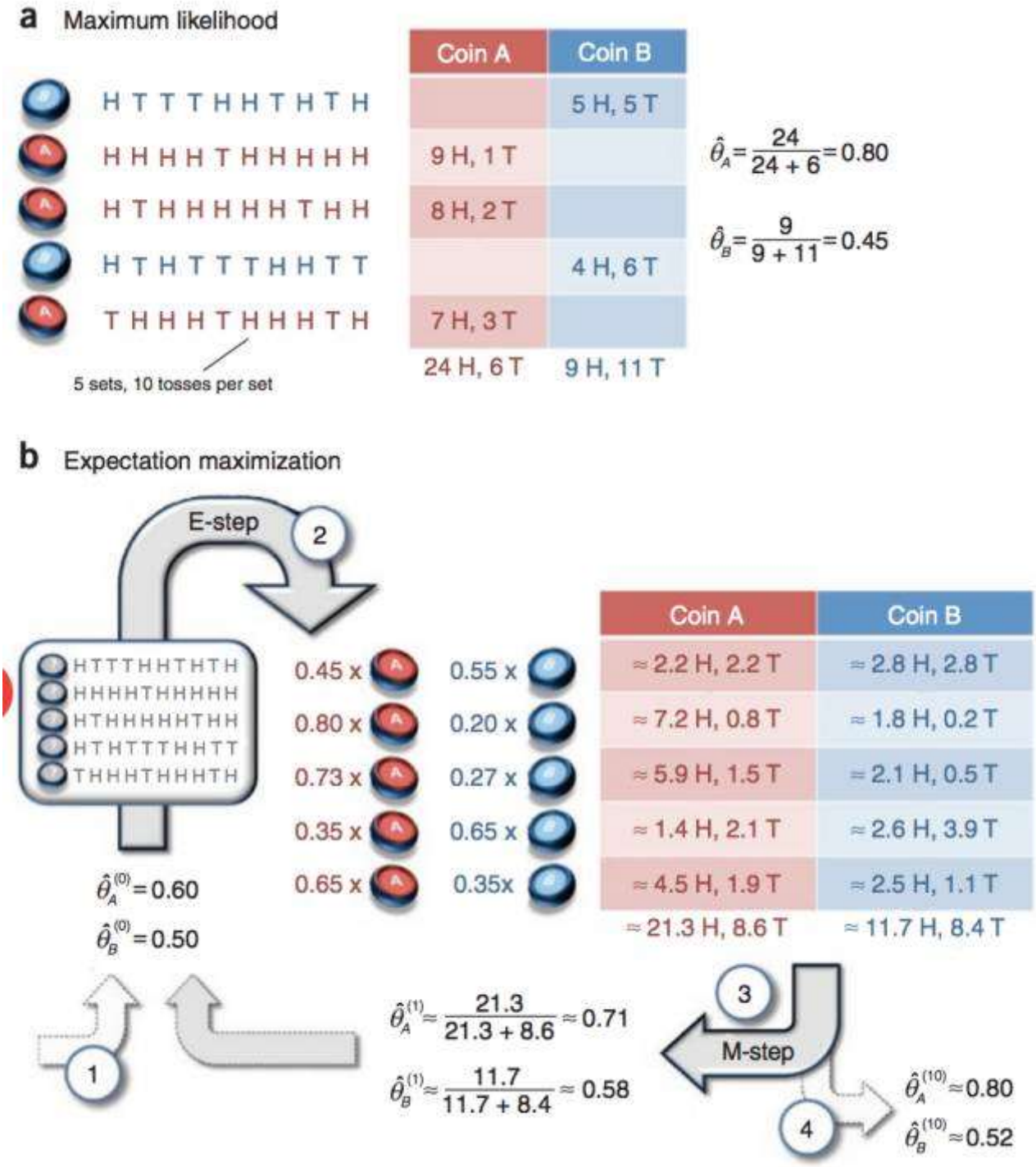
1. EM 就是 E + M
2. EM 是一种局部下限构造
3. K-Means是一种Hard EM算法
4. 从EM 到 广义EM
5. 广义EM的一个特例是VBEM
6. 广义EM的另一个特例是WS算法
7. 广义EM的再一个特例是Gibbs抽样算法
8. WS算法是VAE和GAN组合的简化版
9. KL距离的统一

第一层境界， EM算法就是E 期望 + M 最大化

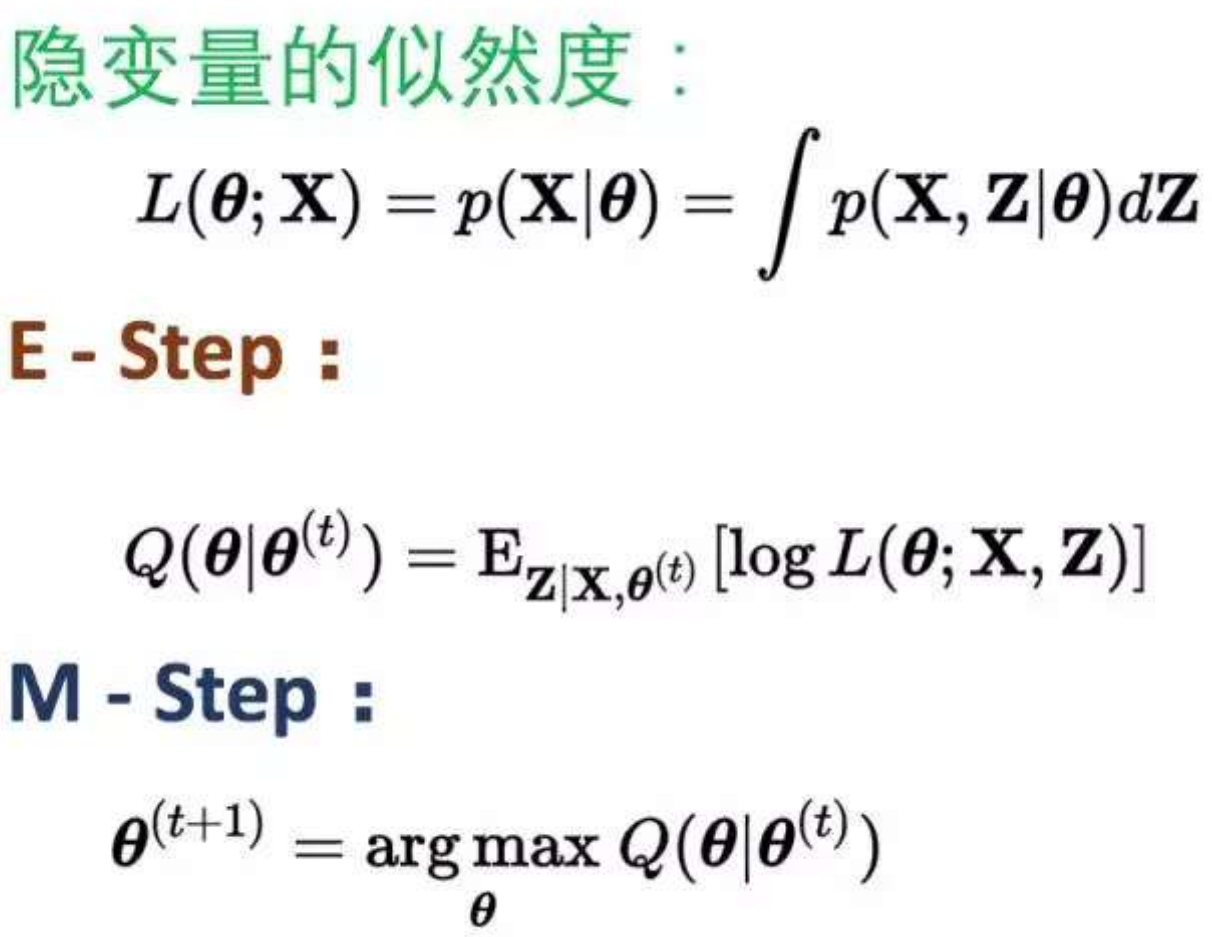
最经典的例子就是抛3个硬币，跑I硬币决定C1和C2，然后抛C1或者C2决定正反面， 然后估算3个硬币的正反面概率值。



这个例子为什么经典， 因为它告诉我们，当存在隐变量I的时候， 直接的最大似然估计无法直接搞定。 什么是隐变量？为什么要引入隐变量？ 对隐变量的理解是理解EM算法的第一要义！Chuong B Do & Serafim Batzoglou 的 Tutorial 论文“What is the expectation maximization algorithm?”对此有详细的例子进行分析。



通过隐变量，我们第一次解读了EM算法的伟大！突破了直接MLE的限制（不详细解释了）。



至此， 你理解了EM算法的第一层境界，看山是山。

第二层境界， EM算法就一种局部下限构造

如果你再深入到基于隐变量的EM算法的收敛性证明， 基于log(x)函数的Jensen不等式构造， 我们很容易证明，EM算法是在反复的构造新的下限，然后进一步求解。

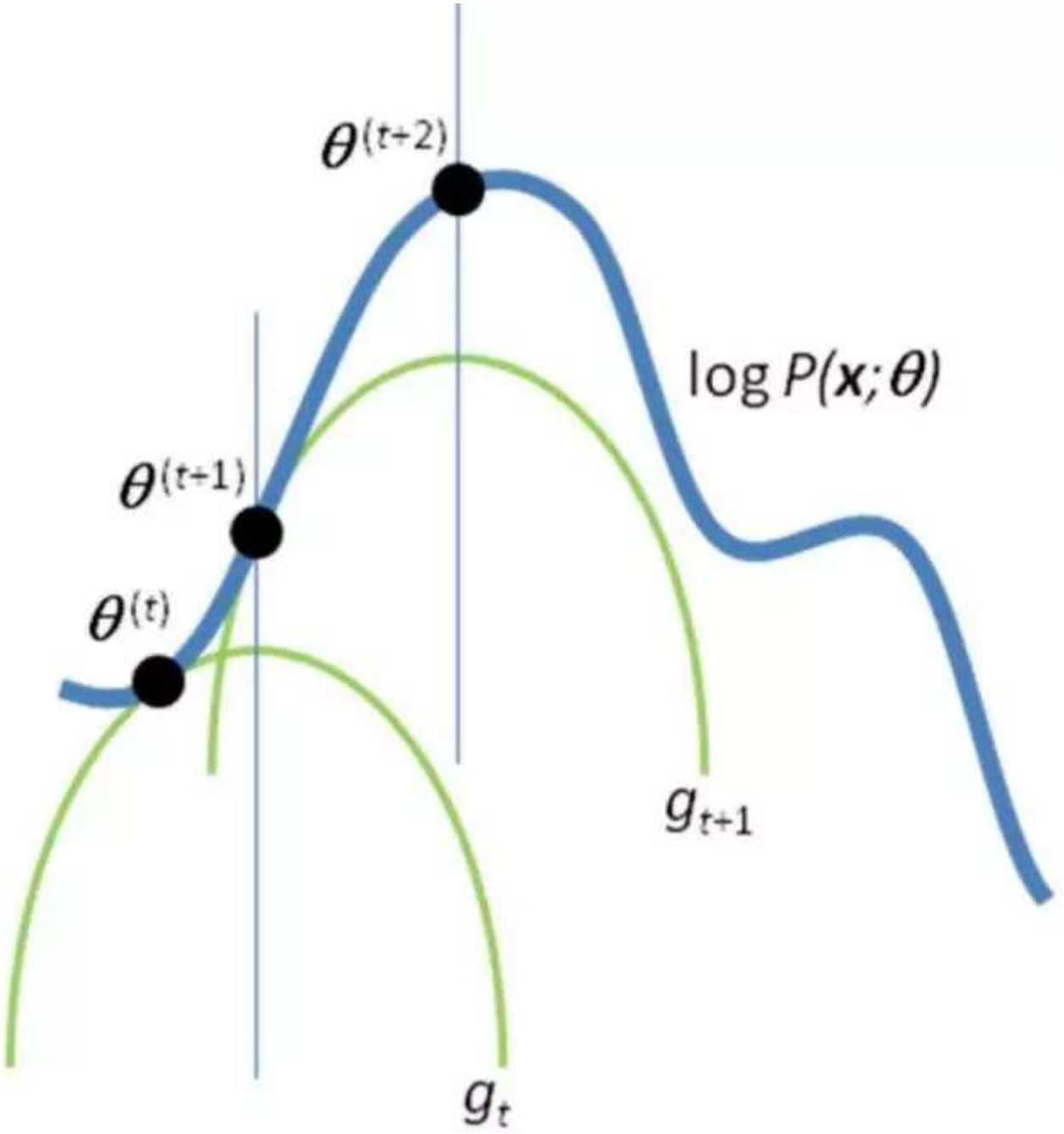
$$E[f(x)] \geq f(E[x])$$

$$\log(P(\mathbf{x}|\theta)) = \log(\sum_{\mathbf{y}} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta))$$

$$\begin{aligned}
\log(P(\mathbf{x}|\theta)) &= \log(\sum_{\mathbf{y}} q(\mathbf{y}) \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)}{q(\mathbf{y})}) \\
&\geq E_q[\log(\frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)}{q(\mathbf{y})}] \\
&\geq E_q[\log(\frac{P(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \theta)P(\mathbf{x}|\theta)}{q(\mathbf{y})}] \\
&\geq E_q[\log(P(\mathbf{x}|\theta)] - E_q[\log(\frac{q(\mathbf{y})}{P(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \theta)}] \\
&\geq E_q[\log(P(\mathbf{x}|\theta))] - KL(q(\mathbf{y})\|P(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \theta)) \\
&\geq \log(P(\mathbf{x}|\theta)) - KL(q(\mathbf{y})\|P(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \theta))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\log(P(\mathbf{x}|\theta)) &\geq E_q[\log(\frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)}{q(\mathbf{y})}] \\
&\geq E_q[\log(P(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)] - E_q[\log(q(\mathbf{y}))] \\
&\geq E_q[\log(P(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\theta)] + H(q(\mathbf{y}))
\end{aligned}$$

所以，先固定当前参数， 计算得到当前隐变量分布的一个下届函数， 然后优化这个函数， 得到新的参数， 然后循环继续。



也正是这个不停的构造下限的思想未来和VB方法联系起来了。 如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第二层境界， 看山看石。

第三层境界， K-均值方法是一种Hard EM算法

在第二层境界的基础上， 你就能随意傲游EM算法用到GMM和HMM模型中去了。 尤其是对GMM的深入理解之后， 对于有隐变量的联合概率，如果利用高斯分布代入之后：

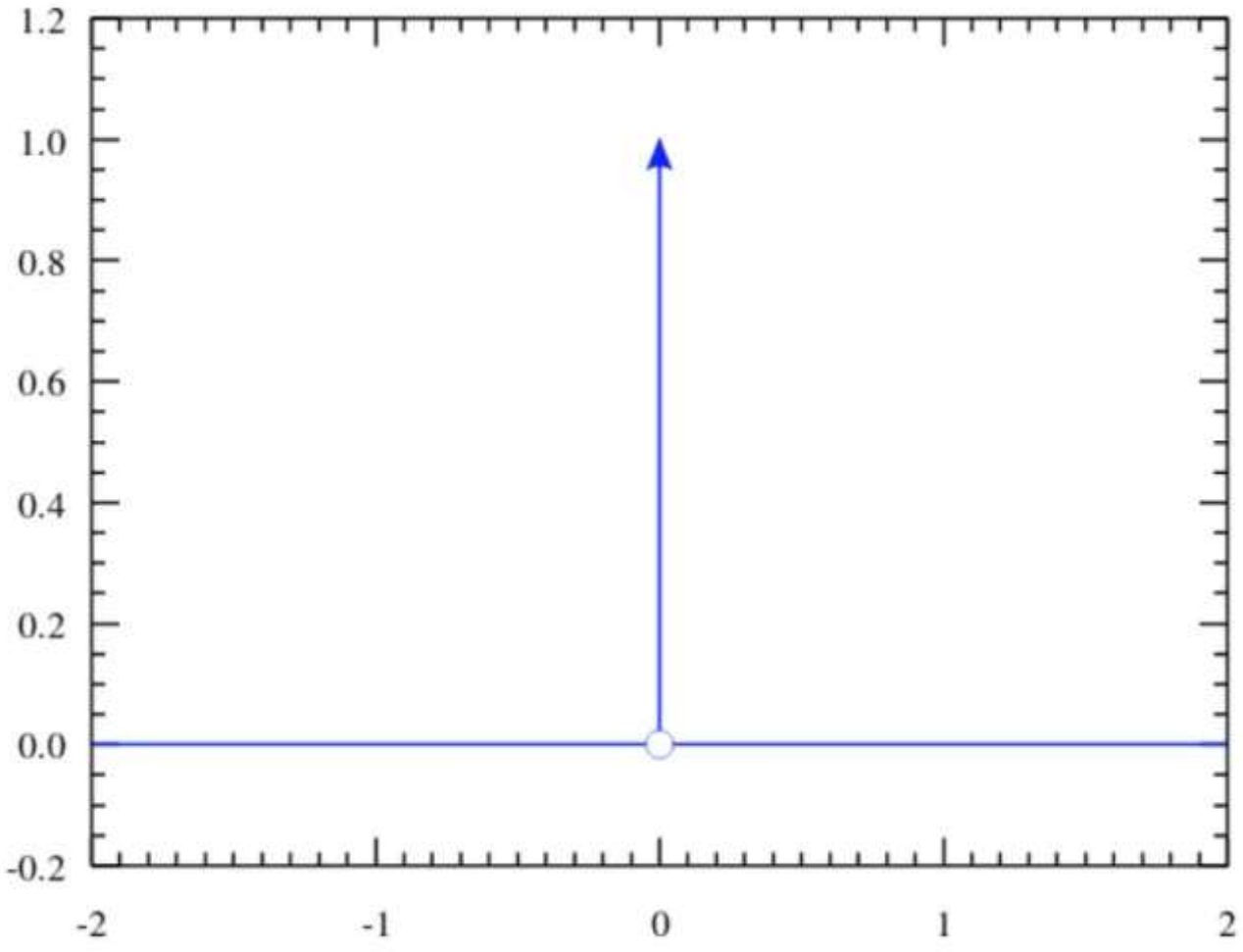
$$P_\Theta(x_1,\ldots,x_n,z_1,\ldots z_n) = \prod_{t=1}^{N} P_\Theta(z_t)P_\Theta(x_t|z_t)$$

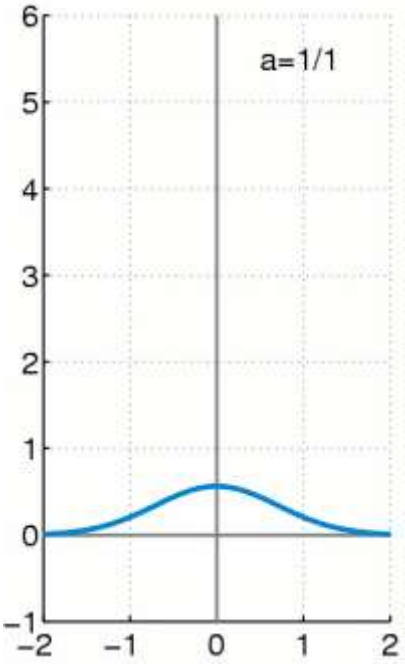
$$= \prod_{t=1}^{N} \frac{1}{K}\mathcal{N}(\mu^{z_t},I)(x_t)$$

很容易就和均方距离建立联系：

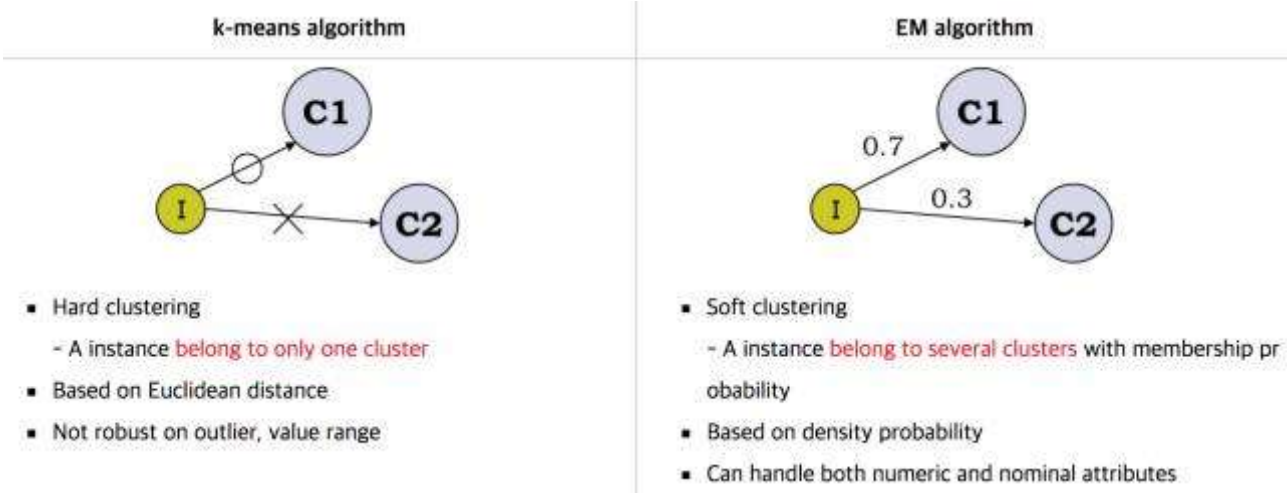
$$\left(\mu^1,\ldots,\mu^K\right)^* = \underset{\mu^1,\ldots,\mu^k}{\operatorname{argmin}} \min_{z_1,\ldots,z_n} \sum_{t=1}^{N} ||\mu^{z_t} - x_t||^2$$

但是，能不能说K-均值就是高斯分布的EM算法呢？不是， 这里虽然拓展到了相同的距离公式， 但是背后逻辑还是不一样， 不一样在哪里呢？K-均值在讨论隐变量的决定时候，用的是dirac delta分布， 这个分布是高斯分布的一种极限。





如果你觉得这个扩展不太好理解， 那么更为简单直观的就是， k-均值用的hard EM算法， 而我们说的EM算法是soft EM算法。 所谓hard 就是要么是，要么不是0-1抉择。 而Soft是0.7比例是c1，0.3比例是c2的情况。



那么充分理解了k-均值和EM算法本身的演化和差异有什么帮助呢？让你进一步理解到隐变量是存在一种分布的。

$$\log(P(\mathbf{x}|\theta)) = \log(\sum_{\mathbf{y}} P(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta))$$

$$= \log(\sum_{\mathbf{y}} q(\mathbf{y}) \frac{P(\mathbf{x},\mathbf{y}|\theta)}{q(\mathbf{y})})$$

如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第三层境界， 看山看峰。

第四层境界，EM 是 广义EM的特例

通过前3层境界， 你对EM算法的理解要跨过隐变量， 进入隐分布的境界。 如果我们把前面的EM收敛证明稍微重复一下，但是引入隐分布。

$$\mathcal{L}(\theta) = \log P(\mathcal{Y}|\theta) = \log \int P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta) d\mathcal{X}$$

$$\mathcal{L}(\theta) = \log \int q(\mathcal{X}) \frac{P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta)}{q(\mathcal{X})} d\mathcal{X} \geq \int q(\mathcal{X}) \log \frac{P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta)}{q(\mathcal{X})} d\mathcal{X} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{F}(q,\theta)$$

$$\mathcal{F}(q,\theta) = \int q(\mathcal{X}) \log P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta)\, d\mathcal{X} - \int q(\mathcal{X}) \log q(\mathcal{X})\, d\mathcal{X}$$

$$= \int q(\mathcal{X}) \log P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta)\, d\mathcal{X} + \mathbf{H}[q],$$

$$\mathcal{F}(q,\theta) = \langle \log P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta) \rangle_{q(\mathcal{X})} + \mathbf{H}[q]$$

这样我们把Jensen不等收右边的部分定义为自由能（如果你对自由能有兴趣，请参考“给能量以自由吧！”，如果没有兴趣， 你就视为一种命名）。 那么E步骤是固定参数优化隐分布， M步骤是固定隐分布优化参数，这就是广义EM算法了。

自由能：

$$\mathcal{F}(q,\theta) = \langle \log P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta) \rangle_{q(\mathcal{X})} + \mathbf{H}[q]$$

E - Step：

$$q^{(k)}(\mathcal{X}) := \underset{q(\mathcal{X})}{\text{argmax}} \ \mathcal{F}\left(q(\mathcal{X}), \theta^{(k-1)}\right)$$

M - Step：

$$\theta^{(k)} := \underset{\theta}{\text{argmax}} \ \mathcal{F}\left(q^{(k)}(\mathcal{X}), \theta\right)$$

有了广义EM算法之后， 我们对自由能深入挖掘， 发现自由能和似然度和KL距离之间的关系：

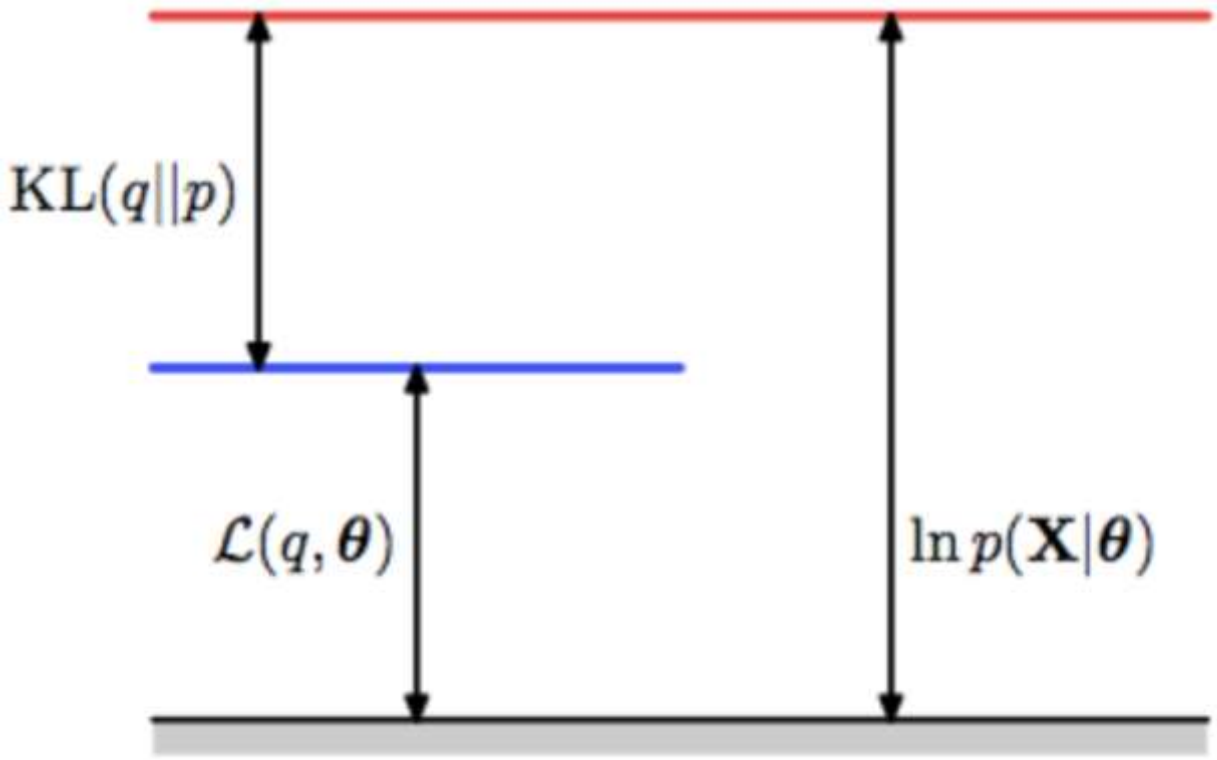
$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(q,\theta) &= \int q(\mathcal{X}) \log \frac{P(\mathcal{X},\mathcal{Y}|\theta)}{q(\mathcal{X})} \, d\mathcal{X} \\
&= \int q(\mathcal{X}) \log \frac{P(\mathcal{X}|\mathcal{Y},\theta)P(\mathcal{Y}|\theta)}{q(\mathcal{X})} \, d\mathcal{X} \\
&= \int q(\mathcal{X}) \log P(\mathcal{Y}|\theta) \, d\mathcal{X} + \int q(\mathcal{X}) \log \frac{P(\mathcal{X}|\mathcal{Y},\theta)}{q(\mathcal{X})} \, d\mathcal{X} \\
&= \mathcal{L}(\theta) - \mathbf{KL}[q(\mathcal{X}) \| P(\mathcal{X}|\mathcal{Y},\theta)]
\end{aligned}$$

所以固定参数的情况下， 那么只能最优化KL距离了， 那么隐分布只能取如下分布：

$$q^{(k)}(\mathcal{X}) = P(\mathcal{X}|\mathcal{Y},\theta^{(k-1)})$$

而这个在EM算法里面是直接给出的。 所以EM算法是广义EM算法的天然最优的隐分布情况。 但是很多时候隐分布不是那么容易计算的！

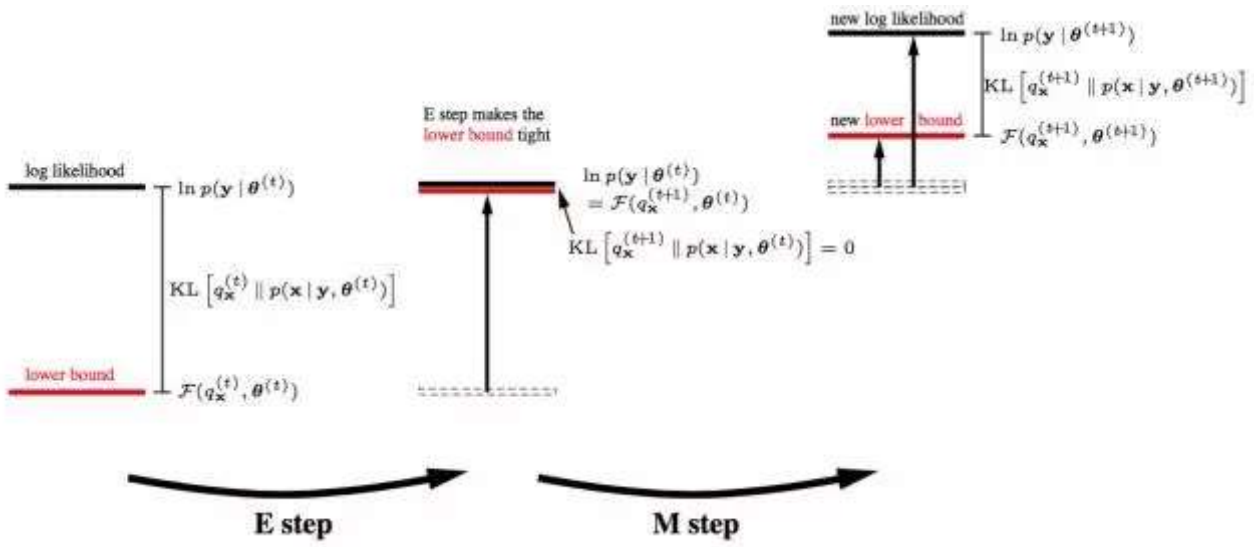
前面的推理虽然很简单， 但是要理解到位真心不容易， 首先要深入理解KL距离是如何被引入的？



其次要理解， 为什么传统的EM算法， 不存在第一个最优化？因为在没有限制的隐分布（天然情况下）情况下， 第一个最优就是要求：

$$\mathrm{KL}\left[q_{\mathbf{x}}^{(t+1)} \,\|\, p(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{y},\boldsymbol{\theta}^{(t)})\right] = 0$$

而这个隐分布， EM算法里面是直接给出的，而不是让你证明得到的。



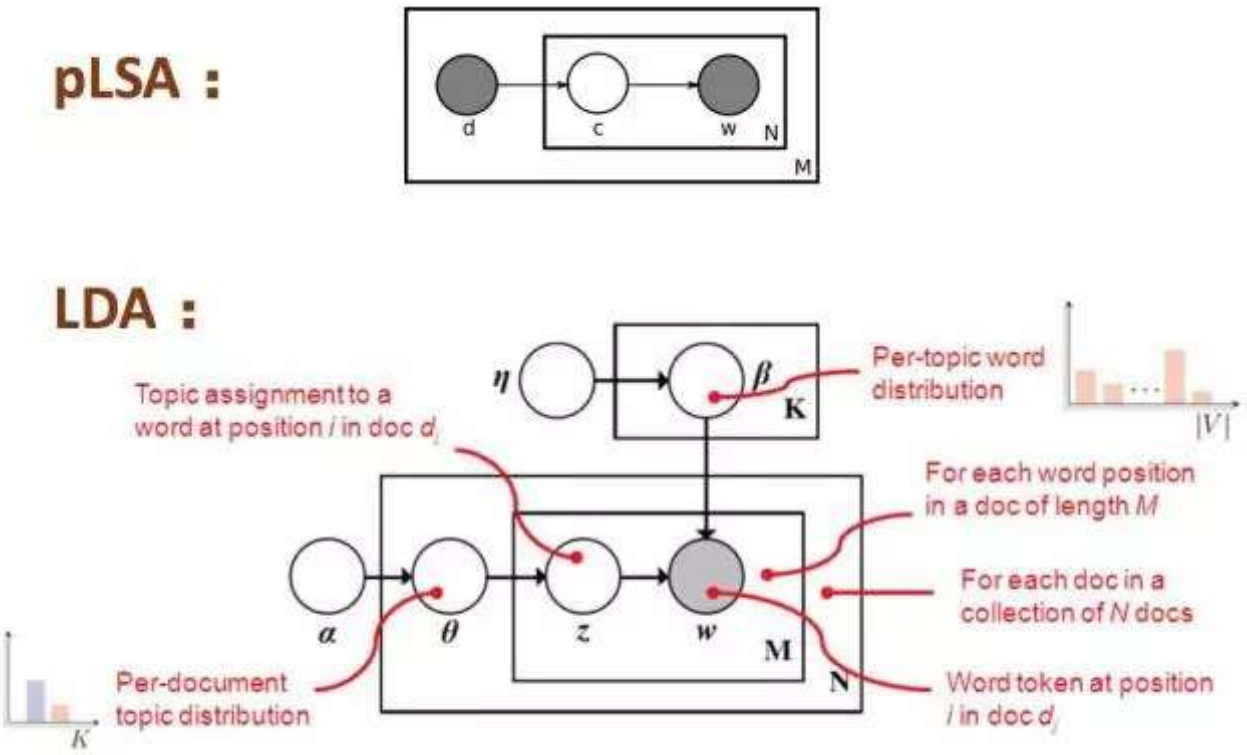
这样， 在广义EM算法中，你看到两个优化步骤，我们进入了两个优化步骤理解EM算法的境界了。

如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第四层境界， 有水有山。

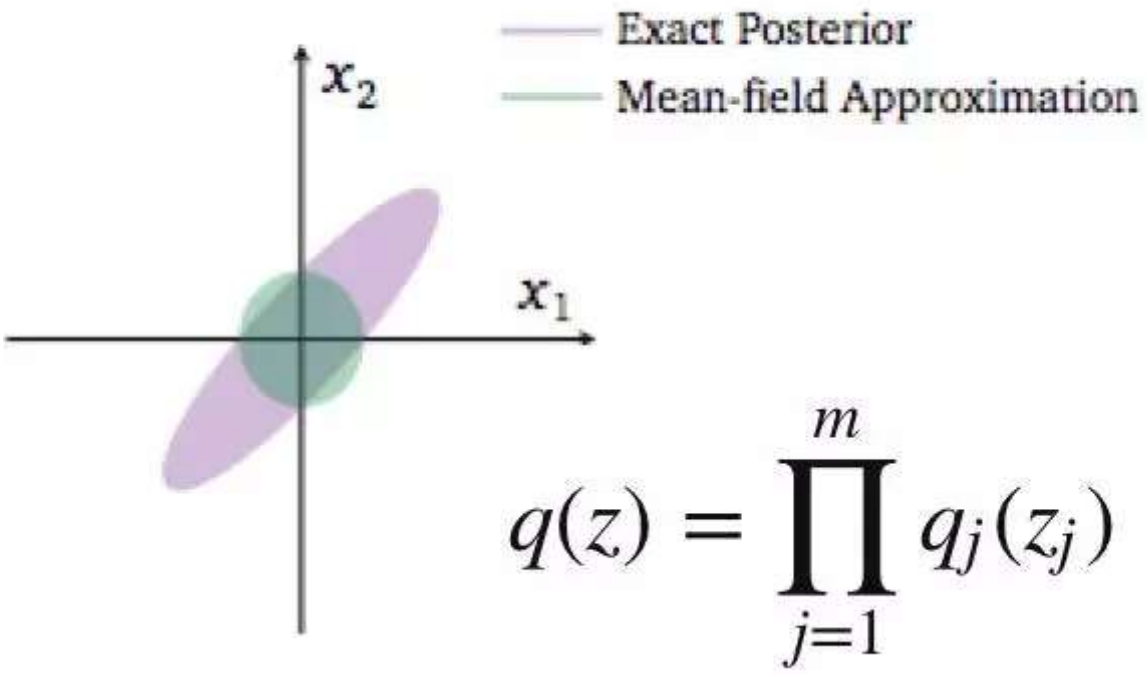
第五层境界，广义EM的一个特例是VBEM

在隐分布没有限制的时候， 广义EM算法就是EM算法， 但是如果隐分布本身是有限制的呢？譬如有个先验分布的限制， 譬如有计算的限制呢？

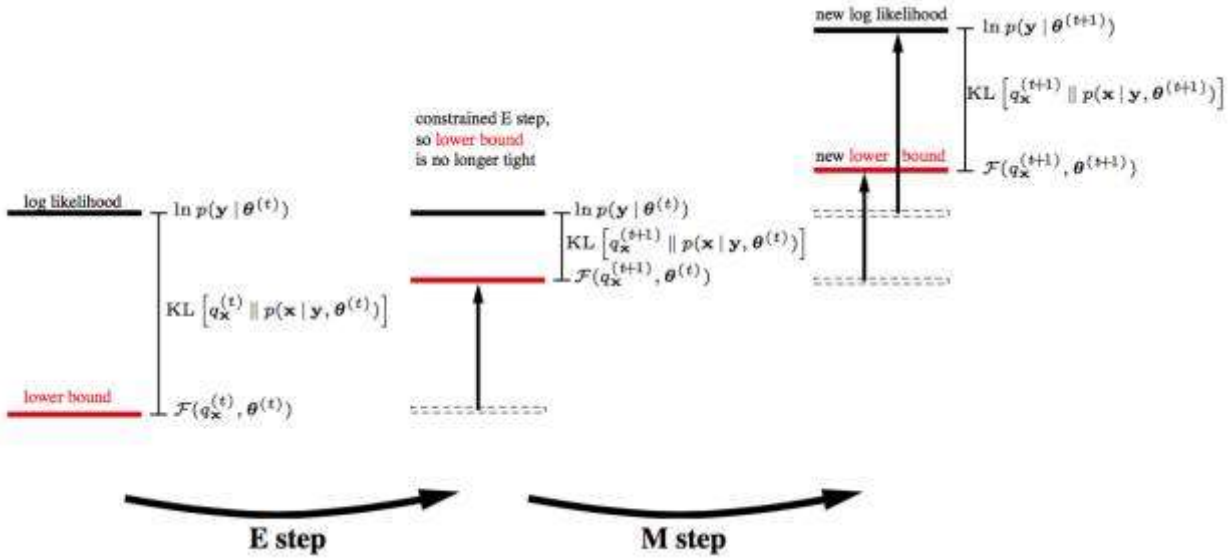
例如先验分布的限制：从pLSA到LDA就是增加了参数的先验分布！



例如计算上的限制：mean-field计算简化的要求，分量独立。



诸如此类限制， 都使得广义EM里面的第一步E优化不可能达到无限制最优， 所以KL距离无法为0。



基于有限制的理解， 再引入模型变分的思想， 根据模型m的变化， 对应参数和隐变量都有相应的分布：

$$\ln p(\mathbf{y}\,|\,m) = \ln \int d\boldsymbol{\theta}\, d\mathbf{x}\; p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}\,|\,m)$$

$$= \ln \int d\boldsymbol{\theta}\, d\mathbf{x}\; q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}\,|\,m)}{q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}$$

$$\geq \int d\boldsymbol{\theta}\, d\mathbf{x}\; q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}\,|\,m)}{q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})}$$

并且满足分布独立性简化计算的假设：

$$q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \approx q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})$$

在变分思想下， 自由能被改写了：

$$\mathcal{F}_m(q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}), q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})) = \int d\boldsymbol{\theta}\, d\mathbf{x}\; q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}) \ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}\,|\,m)}{q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})}$$

这样我们就得到了VBEM算法了：

自由能：

$$\mathcal{F}_m(q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}), q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})) = \int d\boldsymbol{\theta}\, d\mathbf{x}\; q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}) \ln \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}\,|\,m)}{q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})}$$

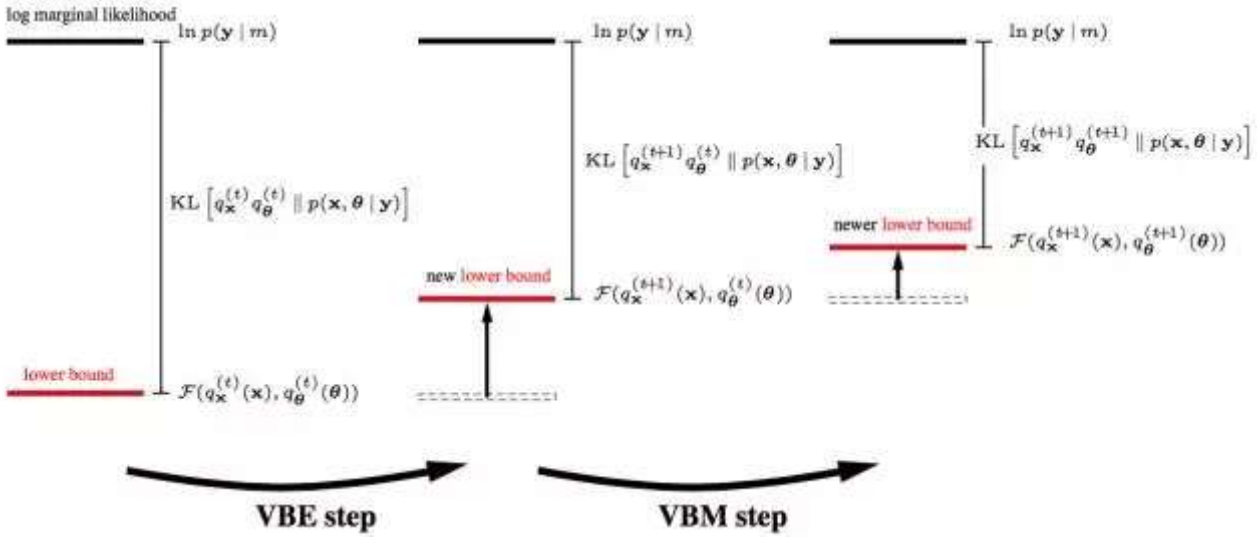
$$q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \approx q_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) q_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta})$$

E - Step：

VBE step: $q_{\mathbf{x}_i}^{(t+1)}(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\mathbf{x}_i}} \exp\left[\int d\boldsymbol{\theta}\; q_{\boldsymbol{\theta}}^{(t)}(\boldsymbol{\theta})\; \ln p(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\,|\,\boldsymbol{\theta}, m)\right]$

M - Step： $q_{\mathbf{x}}^{(t+1)}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n} q_{\mathbf{x}_i}^{(t+1)}(\mathbf{x}_i)$

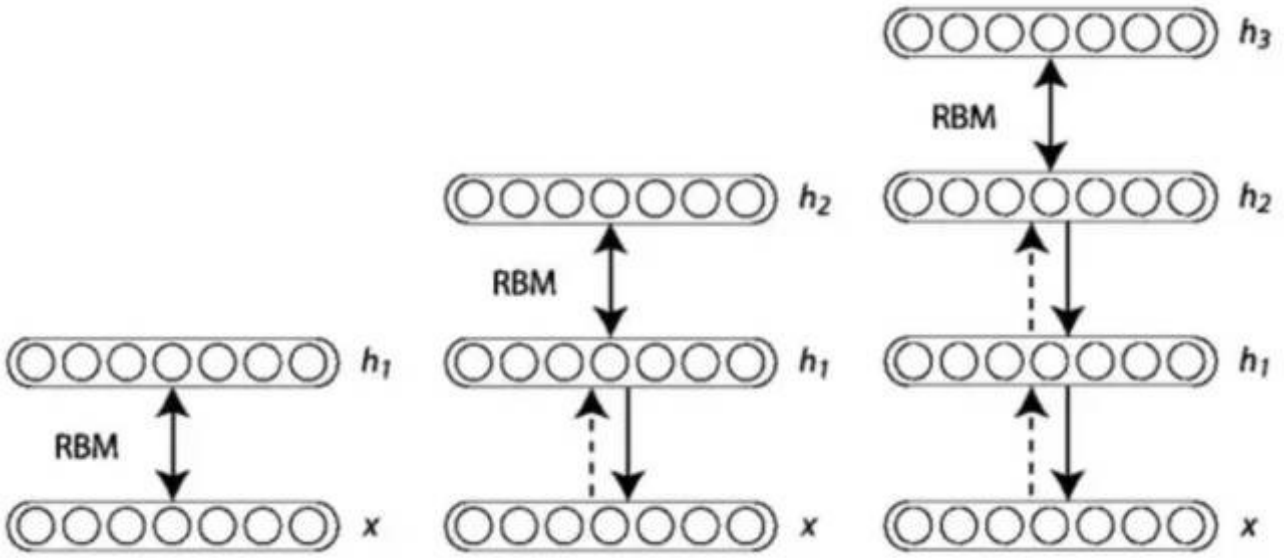
VBM step: $q_{\boldsymbol{\theta}}^{(t+1)}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\boldsymbol{\theta}}} p(\boldsymbol{\theta}\,|\,m) \exp\left[\int d\mathbf{x}\; q_{\mathbf{x}}^{(t+1)}(\mathbf{x})\; \ln p(\mathbf{x}, \mathbf{y}\,|\,\boldsymbol{\theta}, m)\right]$



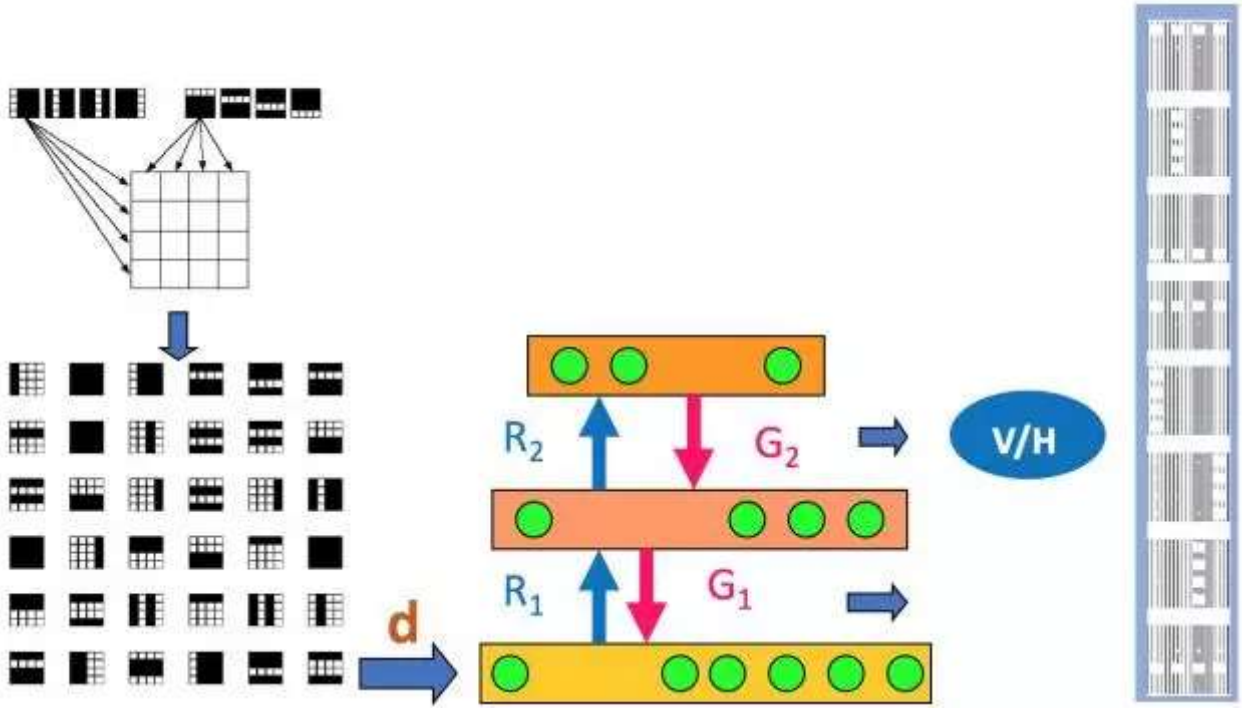
如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第五层境界， 水转山回。

第六层境界，广义EM的另一个特例是WS算法

Hinton老爷子搞定VBEM算法后， 并没有停滞， 他在研究DBN和DBM的Fine-Tuning的时候，提出了Wake-Sleep算法。 我们知道在有监督的Fine-Tuning可以使用BP算法， 但是无监督的Fine-Tuning，使用的是Wake-Sleep算法。



就是这个WS算法，也是广义EM算法的一种特例。 WS算法分为认知阶段和生成阶段。



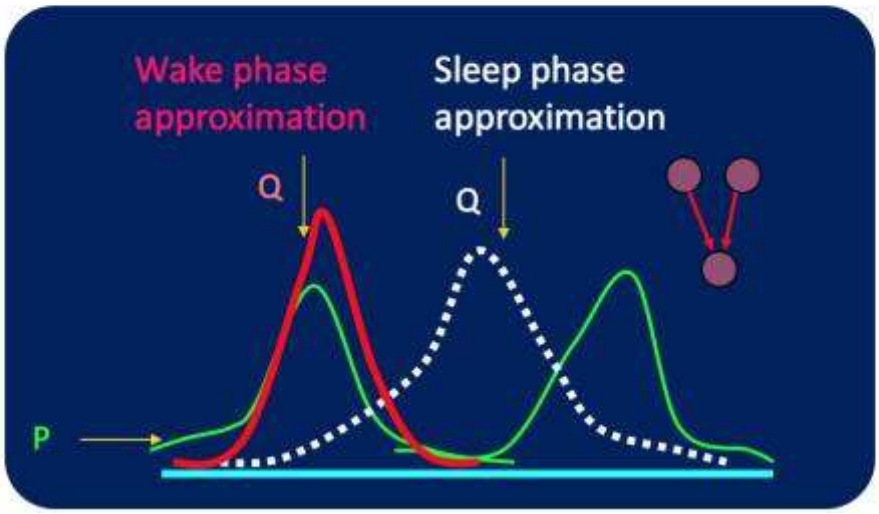
在前面自由能里面，我们将KL距离引入了， 这里刚好这两个阶段分别优化了KL距离的两种形态。固定P优化Q，和固定Q优化P。

$$\log P[d;\mathcal{G}] \geq \log P[d;\mathcal{G}] - \mathrm{KL}(\mathrm{Q}[\mathrm{h}|\mathrm{d};\mathcal{R}], \mathrm{P}[\mathrm{h}|\mathrm{d};\mathcal{G}])$$

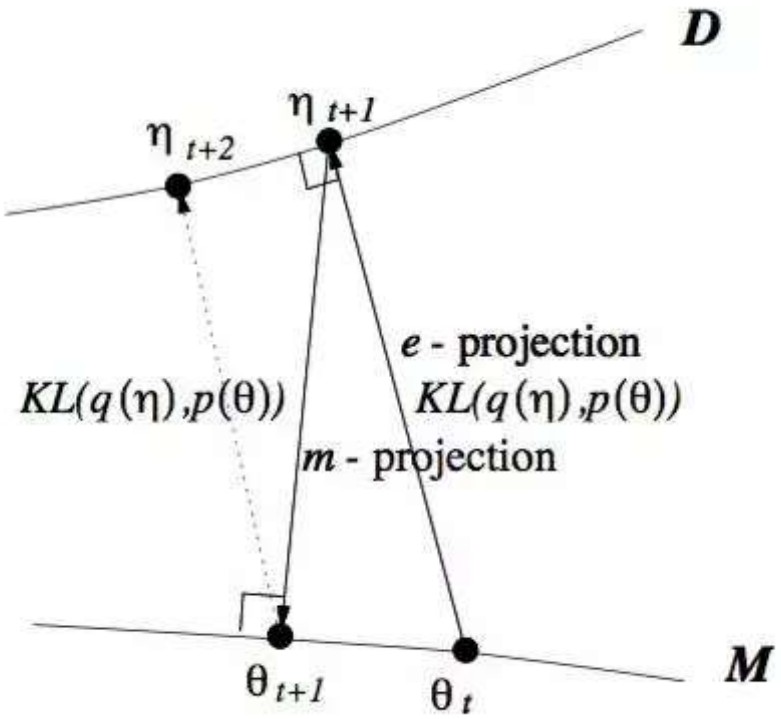
$$\equiv -\mathcal{F}(d;\mathcal{R},\mathcal{G})$$

Free energy

$$\mathcal{F}(d;\mathcal{R},\mathcal{G}) = -\log P[d;\mathcal{G}] + \mathrm{KL}(\mathrm{Q}[\mathrm{h}|\mathrm{d};\mathcal{R}], \mathrm{P}[\mathrm{h}|\mathrm{d};\mathcal{G}])$$



所以当我们取代自由能理解， 全部切换到KL距离的理解， 广义EM算法的E步骤和M步骤就分别是E投影和M投影。 因为要求KL距离最优， 可以等价于垂直。 而这个投影， 可以衍生到数据D的流形空间， 和模型M的流形空间。



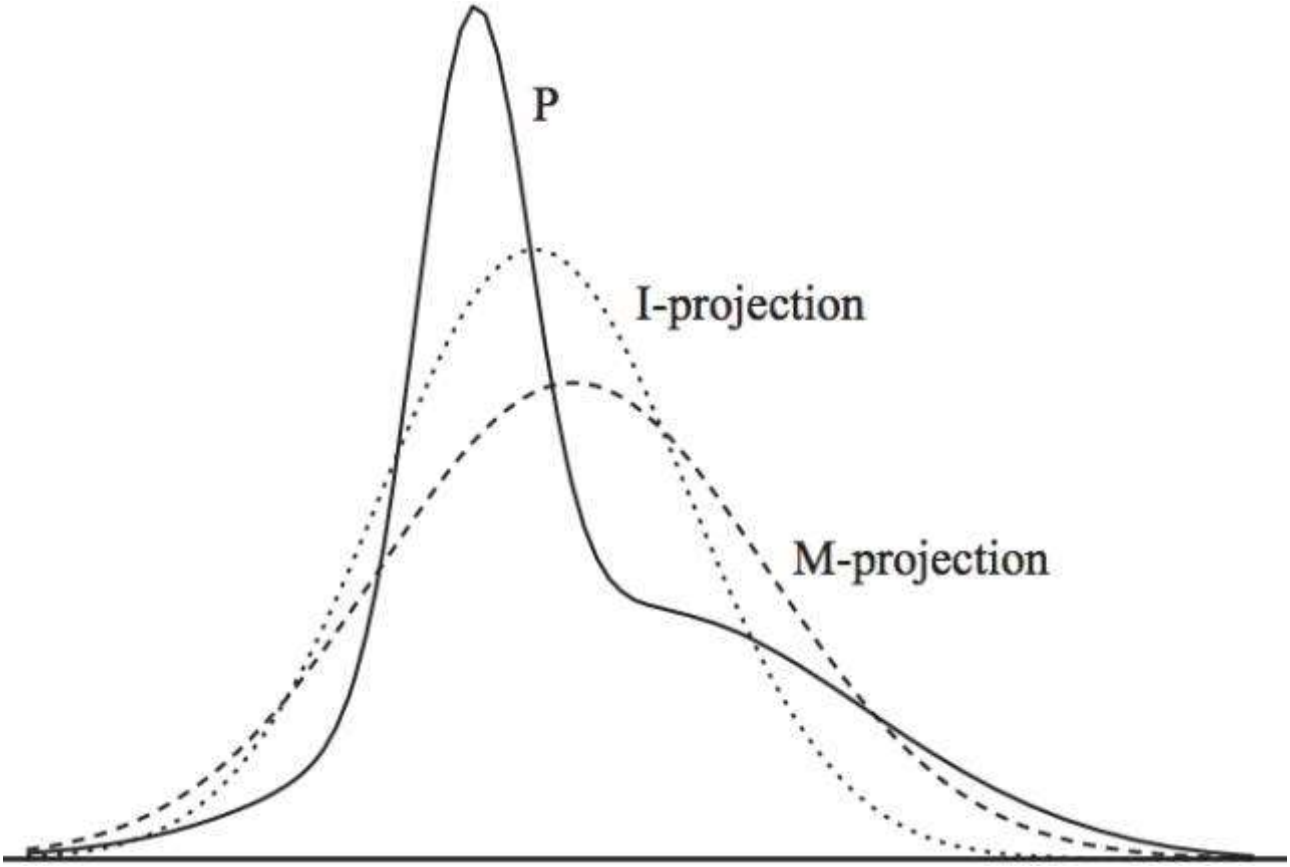
所以你认同WS算法是一种广义EM算法（GEM）之后， 基于KL距离再认识GEM算法。 引入了数据流形和模型流形。 引入了E投影和M投影。

不过要注意的wake识别阶段对应的是M步骤， 而sleep生成阶段对应的E步骤。 所以WS算法对应的是广义ME算法。

如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第六层境界， 山高水深。

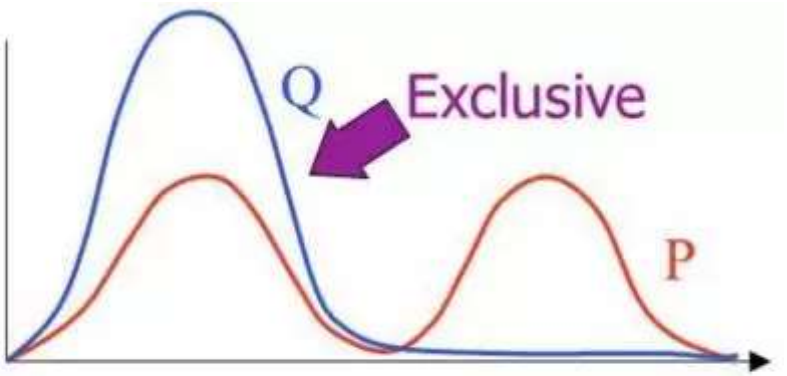
第七层境界，广义EM的再一个特例是Gibbs Sampling

其实，前面基于KL距离的认知， 严格放到信息理论的领域， 对于前面E投影和M投影都有严格的定义。 M投影的名称是类似的，但是具体是moment projection，但是E投影应该叫I投影，具体是information projection。

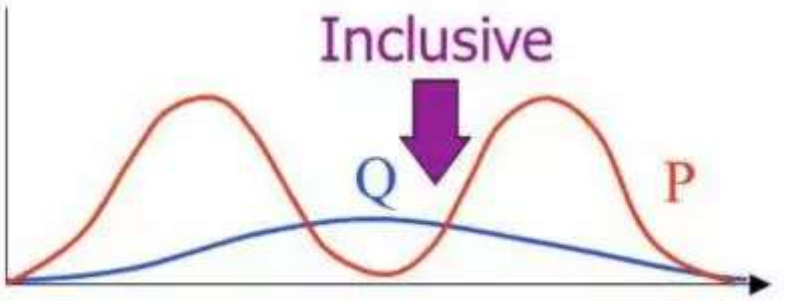


上面这种可能不太容易体会到M投影和I投影的差异， 如果再回到最小KL距离，有一个经典的比较。可以体会M投影和I投影的差异。 上面是I投影，只覆盖一个峰。 下面是M投影， 覆盖了两个峰。

Minimising
$KL(Q||P)$
$= \sum_H Q(H) \ln \frac{Q(H)}{P(H|V)}$



Minimising
$KL(P||Q)$
$= \sum_H P(H|V) \ln \frac{P(H|V)}{Q(H)}$



当我们不是直接计算KL距离， 而是基于蒙特卡洛抽样方法来估算KL距离。

KL 散度：

$$D_{KL}(f||g) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \log \left(\underbrace{\frac{f(x)}{g(x)}}_{=:r} \right) dx,$$

抽样估算：

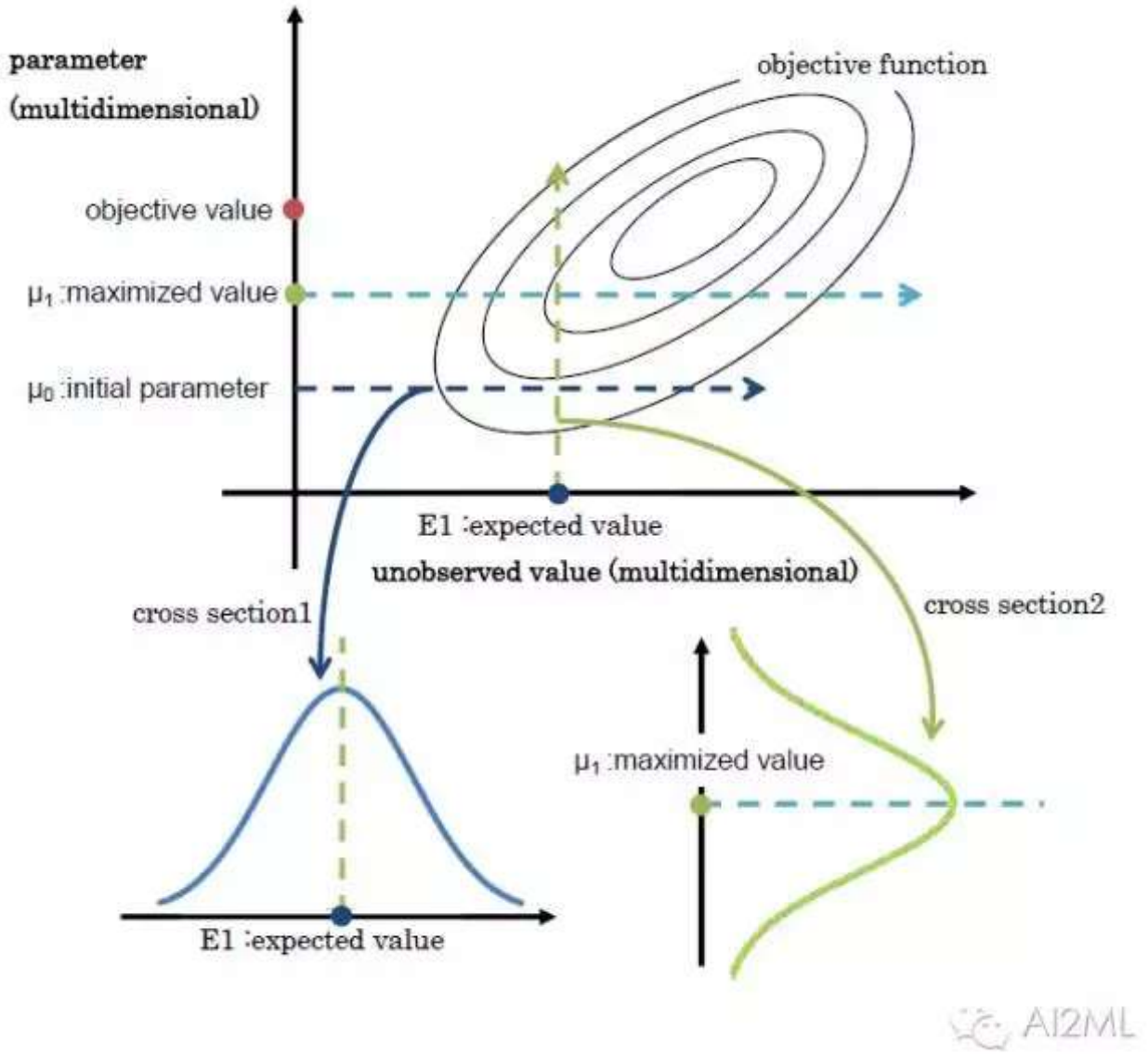
$$\widehat{D_{KL}}(f||g) = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} \log \left(\frac{f_u(x_i)}{g_u(x_i)} \right) + \log(\hat{r})$$

Importance Sampling：

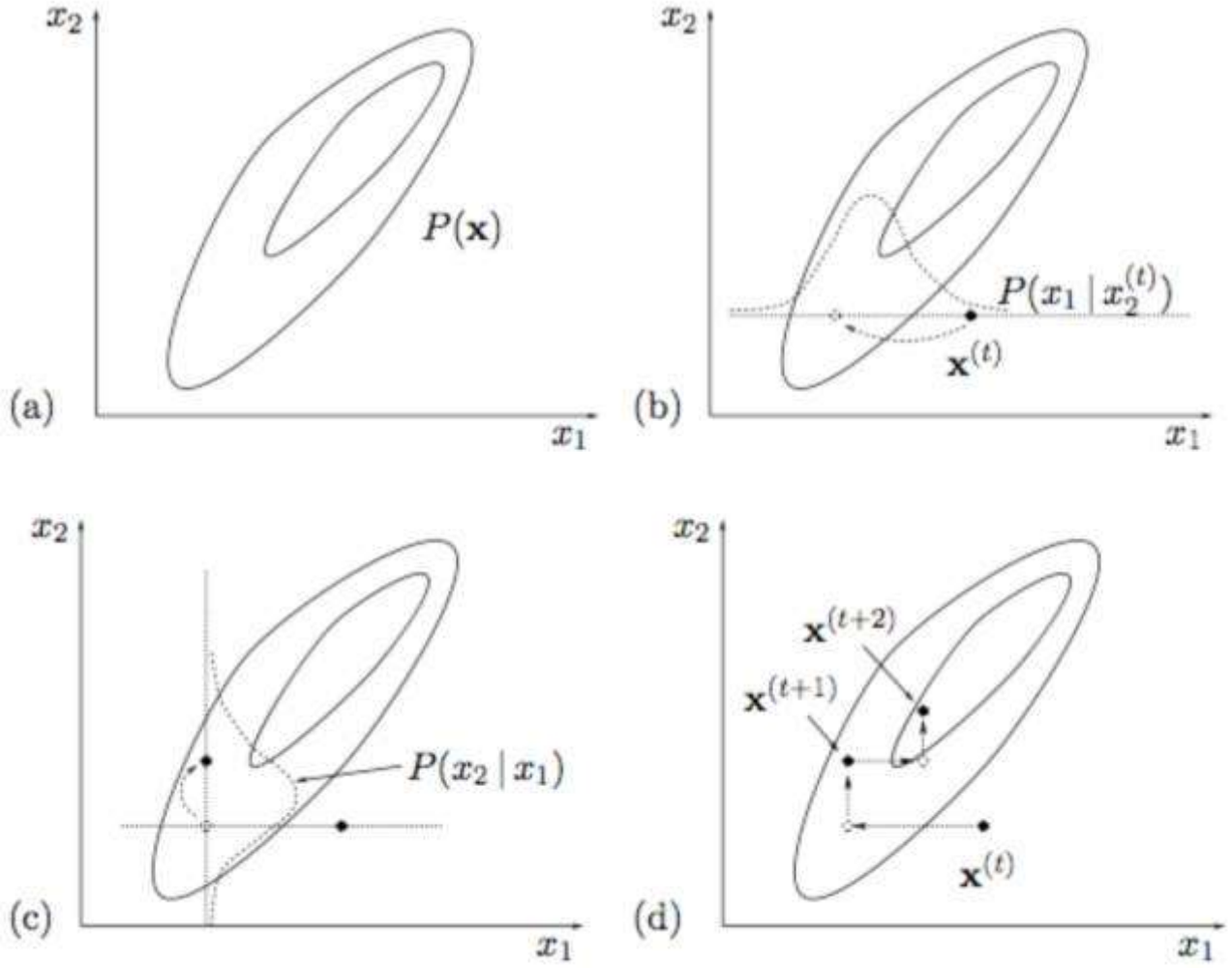
$$\hat{r} = \frac{1/n}{1/n} \frac{\sum_j f_u(x_j)/\pi_f(x_j)}{\sum_j g_u(x_j)/\pi_g(x_j)}.$$

有兴趣对此深入的，可以阅读论文“On Monte Carlo methods for estimating ratios of normalizing constants”

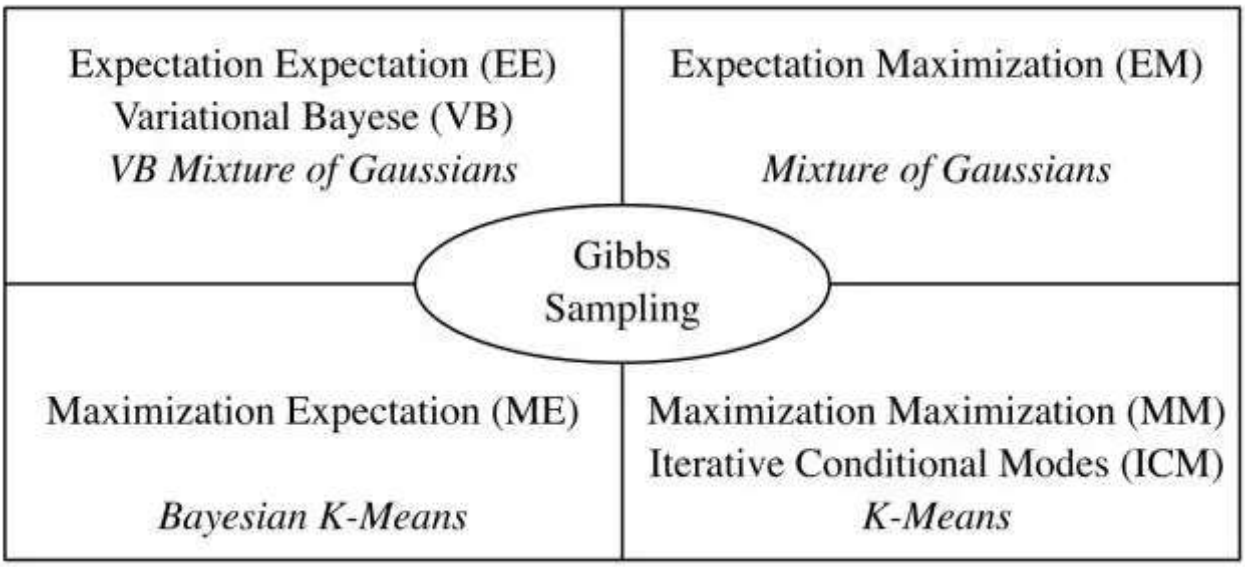
这时候， 广义EM算法，就是Gibbs Sampling了。 所以Gibbs Sampling，本质上就是采用了蒙特卡洛方法计算的广义EM算法。



所以， 如果把M投影和I投影看成是一个变量上的最小距离点，那么Gibbs Sampling和广义EM算法的收敛过程是一致的。



VAE的发明者，Hinton的博士后， Max Welling在论文“Bayesian K-Means as a “Maximization-Expectation” Algorithm”中，对这种关系有如下很好的总结！

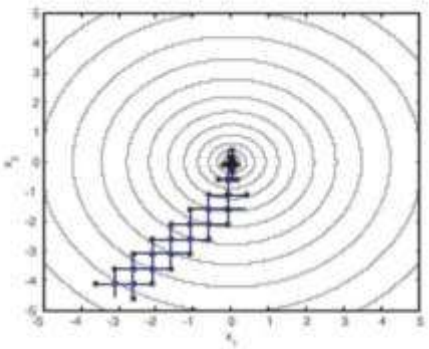


另外， Zoubin Ghahramani， Jordan的博士， 在“Factorial Learning and the EM Algorithm”等相关论文也反复提到他们之间的关系。

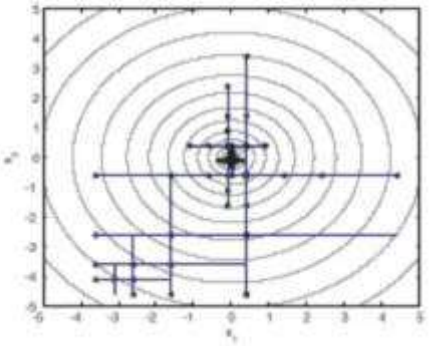
这样， 通过广义EM算法把Gibbs Sampling和EM， VB， K-Means和WS算法全部联系起来了。 有了Gibbs Sampling的背书， 你是不是能更好的理解， 为什么WS算法可以是ME步骤，而不是EM的步骤呢？另外，我们知道坐标下降Coordinate Descent也可以看成一种Gibbs Sampling过程， 如果有人把Coordinate Descent和EM算法联系起来， 你还会觉得奇怪么？

Algorithm 1 Coordinate Descent

$m \leftarrow x^{min}_{i:d} + \mathbb{U}_{i:d}(x^{max}_{i:d} - x^{min}_{i:d})$
$f_{best} \leftarrow evaluate(m)$
$\sigma_{i:d} \leftarrow (x^{max}_{i:d} - x^{min}_{i:d})/4$
$i_x \leftarrow 0$
while NOT Stopping Criterion **do**
  $i_x \leftarrow i_x + 1 \bmod d$ // Cycling over $[1, d]$
  $x'_{1:d} \leftarrow 0$
  $x'_{i_x} \leftarrow -\sigma_{i_x}$; $x_1 \leftarrow m + x'$; $f_1 \leftarrow evaluate(x_1)$
  $x'_{i_x} \leftarrow +\sigma_{i_x}$; $x_2 \leftarrow m + x'$; $f_2 \leftarrow evaluate(x_2)$
  $succ \leftarrow 0$
  if $f_1 < f_{best}$ **then**
    $f_{best} \leftarrow f_1$; $m \leftarrow x_1$; $succ \leftarrow 1$
  if $f_2 < f_{best}$ **then**
    $f_{best} \leftarrow f_2$; $m \leftarrow x_2$; $succ \leftarrow 1$
  if $succ = 1$ **then**
    $\sigma_{i_x} \leftarrow k_{succ} \cdot \sigma_{i_x}$
  else
    $\sigma_{i_x} \leftarrow k_{unsucc} \cdot \sigma_{i_x}$

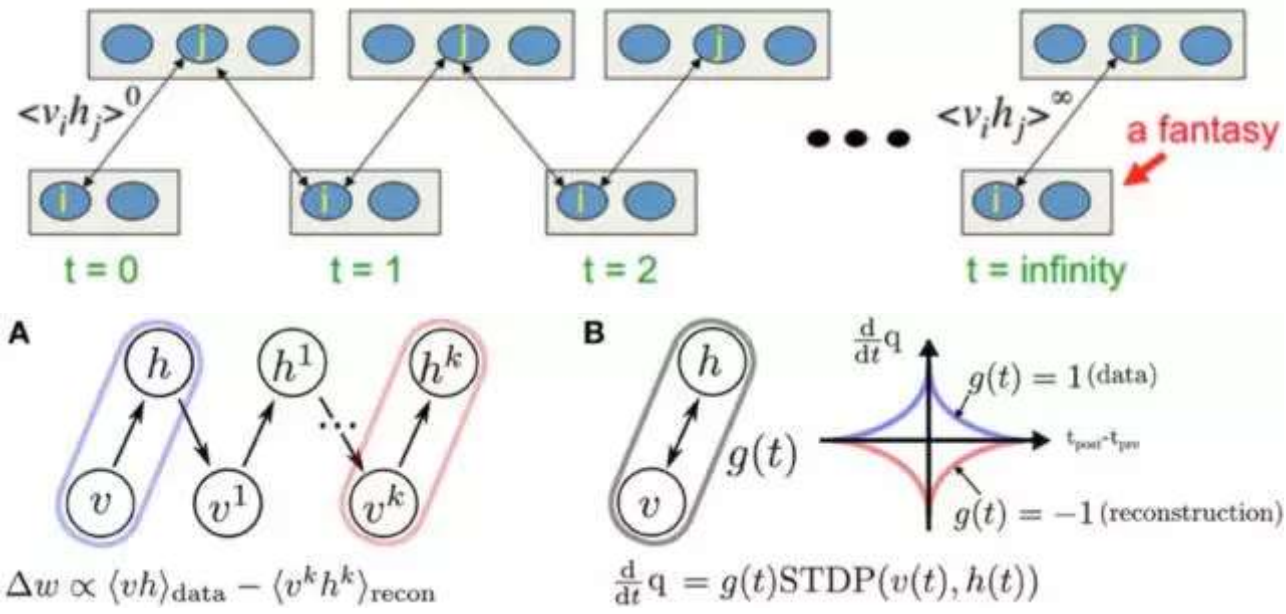


(b) $k_{succ} = 1.0$, 117 evals.



(b) $k_{succ} = 2.0$, 149 evals.

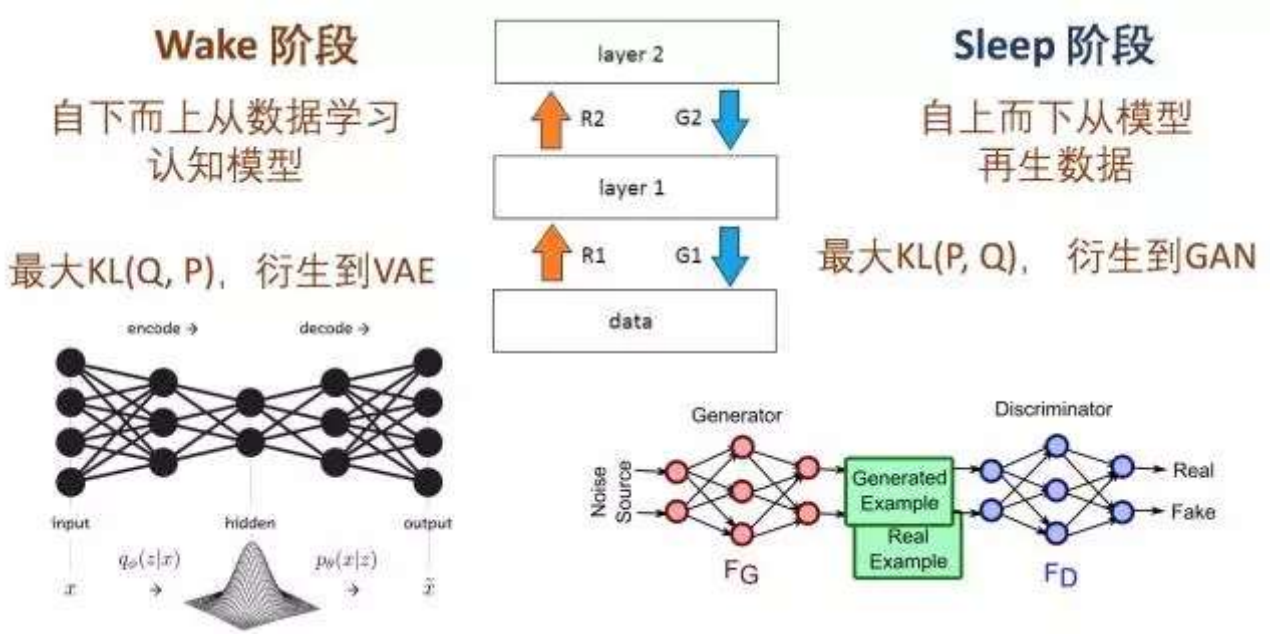
现在我们发现VB和Gibbs Sampling都可以放到广义EM的大框架下， 只是求解过程一个采用近似逼近， 一个采用蒙特卡洛采样。 有了EM算法和Gibbs Sampling的关系， 现在你理解， 为什么Hinton能够发明CD算法了么？ 细节就不展开了。



如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第七层境界， 山水轮回。

第八层境界，WS算法是VAE和GAN组合的简化版

Jordan的弟子邢波老师，他的学生胡志挺，发表了一篇文章， On Unifying Deep Generative Models，试图通过WS算法，统一对VAE和GAN的理解。



对VAE的理解， 变了加了正则化的KL距离， 而对于GAN的理解变成了加Jensen−Shannon 散度。 所以， 当我们把广义EM算法的自由能， 在WS算法中看成KL散度， 现在看成扩展的KL散度。 对于正则化扩展， 有很多类似论文， “Mode Regularized Generative Adversarial Networks”， “Stabilizing Training of Generative Adversarial Networks through Regularization”有兴趣可以读读。

所以对于VAE，类比WS算法的Wake认知阶段， 不同的是在ELBO这个VBEM目标的基础上加了KL散度作为正则化限制。 再应用再参数化技巧实现了VAE。

ELBO：

$$\mathcal{L}(\phi,\theta;x)=\mathbb{E}_{z\sim q_\phi(z|x)}[log(p_\theta(x|z))]-\mathcal{D}_{KL}(q_\phi(z|x)||p_\theta(z))$$

正则化的ELBO：

$$log(p(x))=\mathcal{L}(\phi,\theta;x)+\mathcal{D}_{KL}(q_\phi(z|x)||p_\theta(z|x))$$

Reparameterization 技巧：

$$q_\phi(z|x)\sim\mathcal{N}(\mu,\sigma^2 I)$$

$$\epsilon\sim\mathcal{N}(0,I)\qquad z=\mu+\sigma\odot\epsilon$$

而对应到GAN，类比Sleep阶段，正则化限制换了JSD距离， 然后目标KL距离也随着不同GAN的变体也可以变化。

GAN objective = $KL(p_\theta(x|y)||q^r(x|y))-JSD(p_g||p_{data})$

GAN：

$$\mathbb{E}_{p(y)}\left[\nabla_\theta\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}|y)}\left[\log q^r_{\phi_0}(y|\boldsymbol{x})\right]|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0}\right]=$$
$$-\mathbb{E}_{p(y)}\left[\nabla_\theta KL\left(p_\theta(\boldsymbol{x}|y)\|q^r(\boldsymbol{x}|y)\right)-JSD\left(p_\theta(\boldsymbol{x}|y=0)\|p_\theta(\boldsymbol{x}|y=1)\right)|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0}\right]$$

$$q^r(x|y)\propto p_{\theta_0}(x)=\frac{1}{2}(p_g(x)+p_{data}(x))$$

Info-GAN：

$$\mathbb{E}_{p(y)}\left[\nabla_\theta\mathbb{E}_{p_\theta(\boldsymbol{x}|y)}\left[\log q_{\eta_0}(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{x},y)q^r_{\phi_0}(y|\boldsymbol{x})\right]|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0}\right]=$$
$$-\mathbb{E}_{p(y)}\left[\nabla_\theta\mathrm{KL}\left(p_\theta(\boldsymbol{x}|y)\|q^r(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z},y)\right)-\mathrm{JSD}\left(p_\theta(\boldsymbol{x}|y=0)\|p_\theta(\boldsymbol{x}|y=1)\right)|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0}\right]$$

$$q^r(x|z,y)\propto q_{\eta_0}(z|x,y)\,q^r_{\phi_0}(y|x)\,p_{\theta_0}(x)$$

所以， VAE和GAN都可以理解为有特殊正则化限制的Wake-Sleep步骤， 那么组合起来也并不奇怪。

VAE minimizes KL -> smoothed output

GAN minimizes reverse KL -> mode collapse

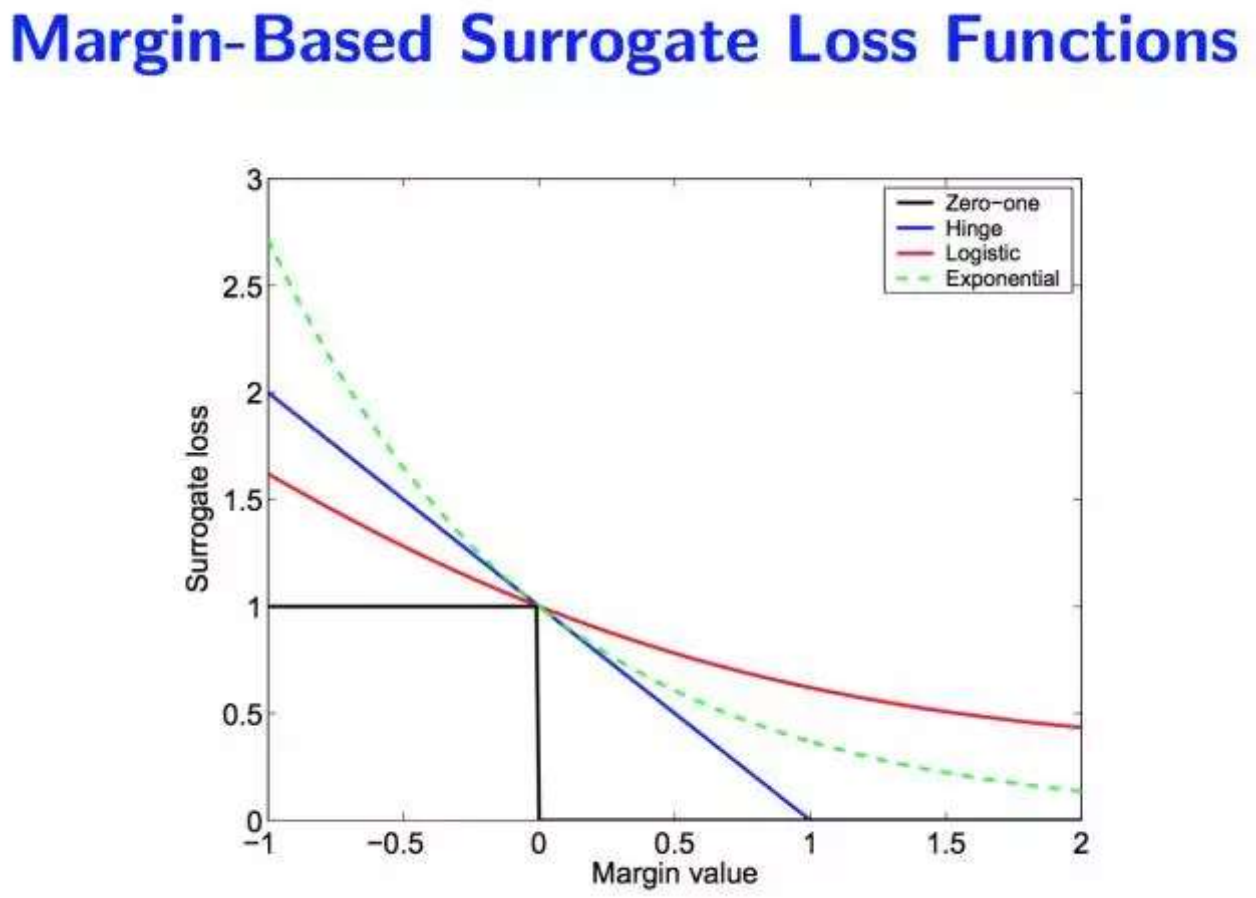
=> VAE/GAN joint model

这就是为什么那么多论文研究如何组合VAE/GAN到同一个框架下面去。目前对这方面的理解还在广泛探讨中。

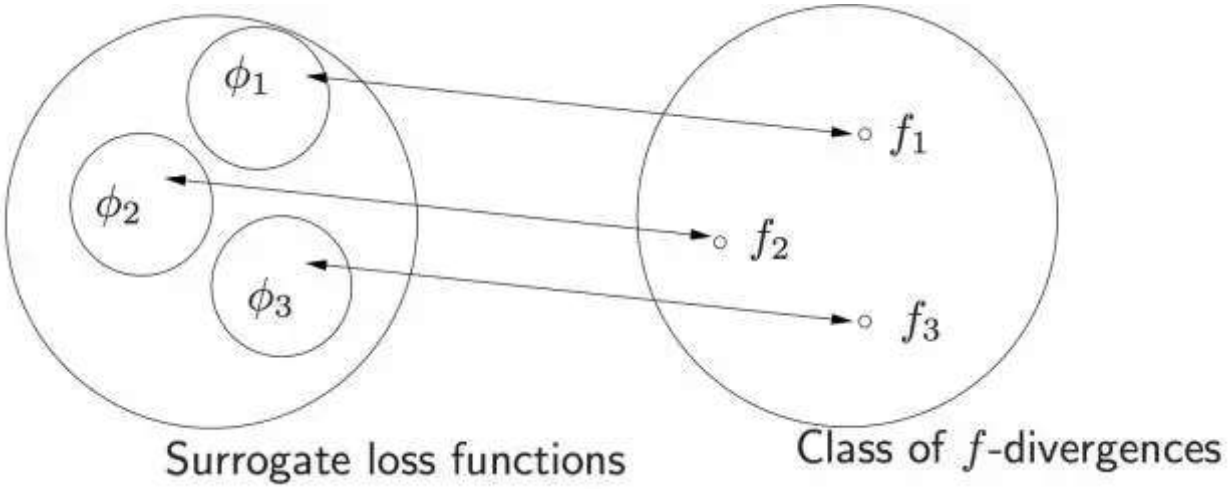
如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第八层境界， 水中有水、山外有山。

第九层境界，KL距离的统一

Jordan 大佬的一片论文， 开启了KL距离的统一， “On surrogate loss functions and f-divergences”。 里面对于所谓的正反KL距离全部统一到 f 散度的框架下面。 Jordan 首先论述了对于损失函数统一的Margin理论的意义。



然后把这些损失函数也映射到 f 散度：



然后微软的 Sebastian Nowozin， 把 f-散度扩展到GAN “f-GAN: Training Generative Neural Samplers using Variational Divergence Minimization”。

Name	$D_f(P\|Q)$	Generator $f(u)$	$T^*(x)$
Kullback-Leibler	$\int p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \mathrm{d}x$	$u \log u$	$1 + \log \frac{p(x)}{q(x)}$
Reverse KL	$\int q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} \mathrm{d}x$	$-\log u$	$-\frac{q(x)}{p(x)}$
Pearson χ^2	$\int \frac{(q(x)-p(x))^2}{p(x)} \mathrm{d}x$	$(u-1)^2$	$2(\frac{p(x)}{q(x)} - 1)$
Squared Hellinger	$\int \left(\sqrt{p(x)} - \sqrt{q(x)}\right)^2 \mathrm{d}x$	$\left(\sqrt{u}-1\right)^2$	$(\sqrt{\frac{p(x)}{q(x)}} - 1) \cdot \sqrt{\frac{q(x)}{p(x)}}$
Jensen-Shannon	$\frac{1}{2}\int p(x) \log \frac{2p(x)}{p(x)+q(x)} + q(x) \log \frac{2q(x)}{p(x)+q(x)} \mathrm{d}x$	$-(u+1)\log \frac{1+u}{2} + u \log u$	$\log \frac{2p(x)}{p(x)+q(x)}$
GAN	$\int p(x) \log \frac{2p(x)}{p(x)+q(x)} + q(x) \log \frac{2q(x)}{p(x)+q(x)} \mathrm{d}x - \log(4)$	$u \log u - (u+1)\log(u+1)$	$\log \frac{p(x)}{p(x)+q(x)}$

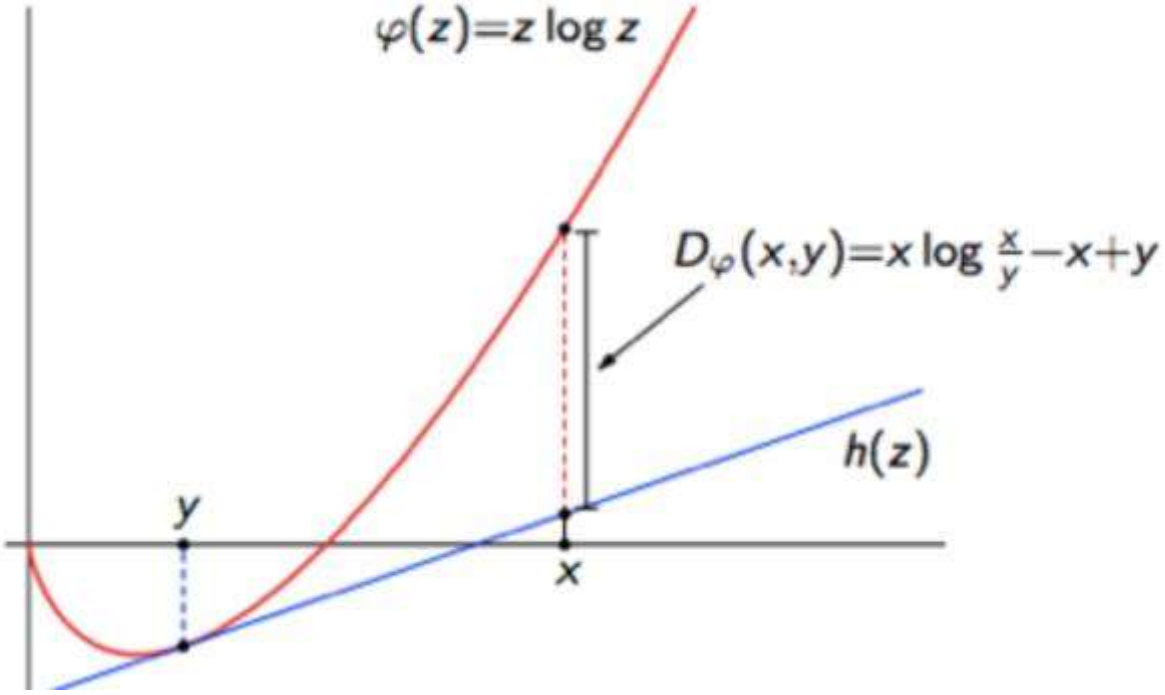
然后对正反KL散度也做了一次统一。

对于 f-散度的理解离不开对Fenchel对偶的理解（参考“走近中神通Fenchel”）。

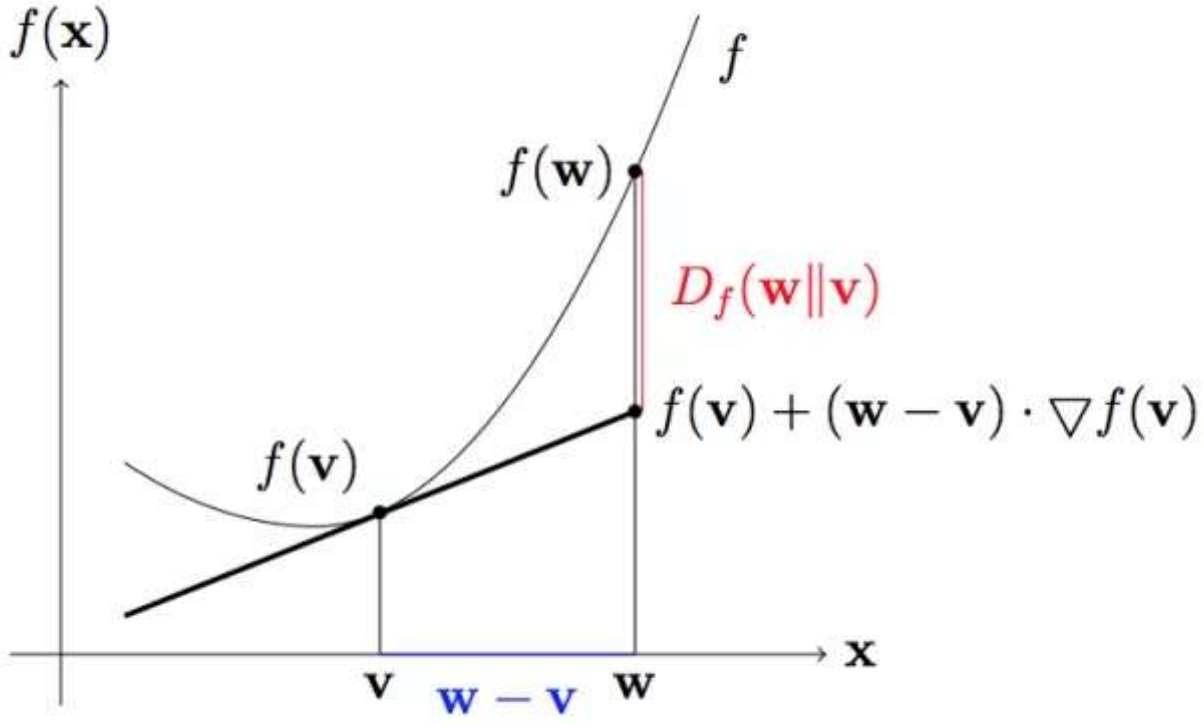
$$D_f(P\|Q) = \mathbb{E}_Q\left[f\left(\frac{P}{Q}\right)\right] = \sup_{g:\mathcal{X}\to\mathbb{R}} \mathbb{E}_P[g(X)] - \mathbb{E}_Q[f^*(g(X))]$$

除了f-散度， 还有人基于bregman散度去统一正反KL散度的认知。 KL散度就是香农熵的bregman散度。

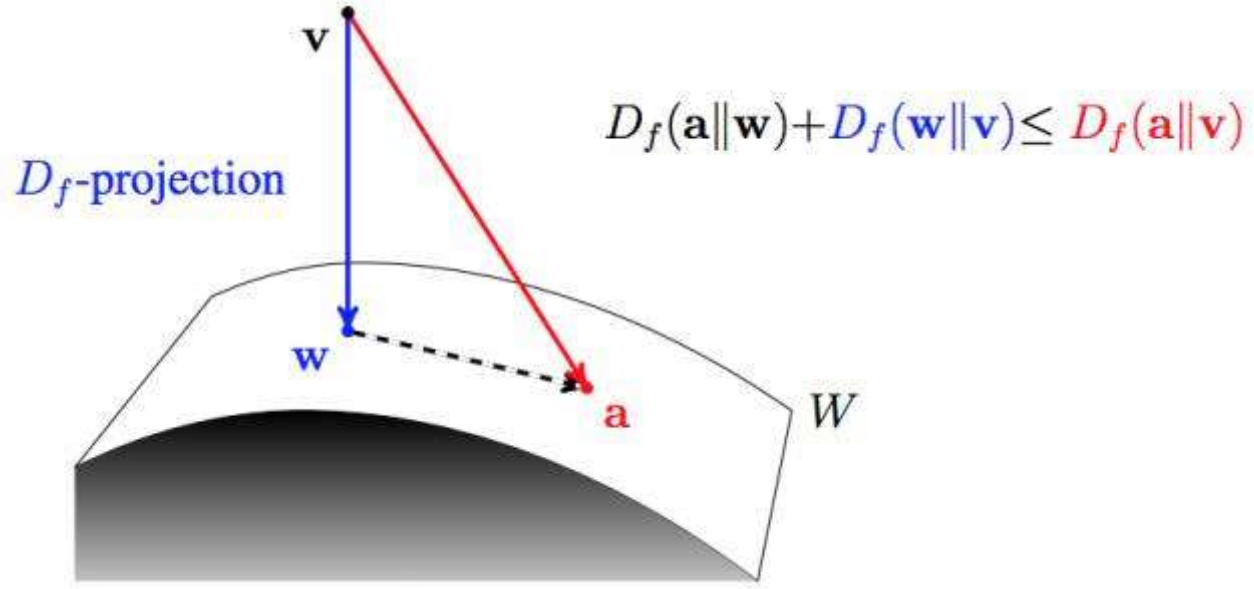
$$D_\varphi(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \varphi(\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{y}) - (\mathbf{x}-\mathbf{y})^T \nabla\varphi(\mathbf{y})$$



而Bregman散度本身是基于一阶泰勒展开的一种偏离度的度量。



然后再基于Bregman距离去研究最小KL投影， 函数空间采用香农熵（参考“信息熵的由来”）。



无论f-散度还是bregman散度对正反KL距离的统一， 之后的广义EM算法， 都会变得空间的最优投影的交替出现。 或许广义EM算法也成了不同流形空间上的坐标梯度下降算法而已coodinate descent。

如果你理解了这个， 恭喜你， 进入理解EM算法的第九层境界，山水合一。

小结

这里浅薄的介绍了理解EM算法的9层境界，托名Hinton和Jordan，着实是因为佩服他们俩和各自的弟子们对EM算法，甚至到无监督深度学习的理解和巨大贡献。想来Hinton和Jordan对此必定会有更为深刻的理解， 很好奇会到何种程度 。。。 最后依然好奇， 为啥只有他们两家的子弟能够不停的突破无监督深度学习？Hinton 老仙说， 机器学习的未来在于无监督学习！

本文经授权转载自AI2ML人工智能to机器学习，点击阅读原文查看原文。