

## 13.1

$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$  [解析]：该式即为 9.4.3 节的式(9.29)，式(9.29)中的 $k$ 个混合成分对应于此处的 $N$ 个可能的类别

## 13.2

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \arg \max_{j \in \mathcal{Y}} p(y = j|\mathbf{x}) \\ &= \arg \max_{j \in \mathcal{Y}} \sum_{i=1}^N p(y = j, \Theta = i|\mathbf{x}) \\ &= \arg \max_{j \in \mathcal{Y}} \sum_{i=1}^N p(y = j|\Theta = i, \mathbf{x}) \cdot p(\Theta = i|\mathbf{x}) \end{aligned}$$

[解析]：首先，该式的变量 $\theta \in \{1, 2, \dots, N\}$ 即为 9.4.3 节的式(9.30)中的  $z_j \in \{1, 2, \dots, k\}$  从公式第 1 行到第 2 行是做了边际化 (marginalization)；具体来说第 2 行比第 1 行多了 $\theta$ 为了消掉 $\theta$ 对其进行求和 (若是连续变量则为积分)

$$p(y = j, \theta = i|\mathbf{x}) = \frac{p(y = j, \theta = i, \mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}$$

分)  $\sum_{i=1}^N$  [推导]：从公式第 2 行到第 3 行推导如下

$$\begin{aligned} &= \frac{p(y = j, \theta = i, \mathbf{x})}{p(\theta = i, \mathbf{x})} \cdot \frac{p(\theta = i, \mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} \quad [\text{解析}]： \\ &= p(y = j|\theta = i, \mathbf{x}) \cdot p(\theta = i|\mathbf{x}) \end{aligned}$$

其中 $p(y = j|\mathbf{x})$ 表示 $\mathbf{x}$ 的类别 $y$ 为第 $j$ 个类别标记的后验概率 (注意条件是已知 $\mathbf{x}$ )； $p(y = j, \theta = i|\mathbf{x})$ 表示 $\mathbf{x}$ 的类别 $y$ 为第 $j$ 个类别标记且由第 $i$ 个高斯混合成分生成的后验概率 (注意条件是已知 $\mathbf{x}$ )； $p(y = j, \theta = i, \mathbf{x})$ 表示第 $i$ 个高斯混合成分生成的 $\mathbf{x}$ 其类别 $y$ 为第 $j$ 个类别标记的概率 (注意条件是已知 $\theta$ 和 $\mathbf{x}$ ，这里修改了西瓜书式(13.3)下方对

$p(y = j|\theta = i, \mathbf{x})$ 的表述； $p(\theta = i|\mathbf{x})$ 表示 $\mathbf{x}$ 由第 $i$ 个高斯混合成分生成的后验概率 (注意条件是已知 $\mathbf{x}$ )；西瓜书第 296 页第 2 行提到“假设样本由高斯混合模型生成，且每个类别对应一个高斯混合成分”，也就是说，如果已知 $\mathbf{x}$ 是由哪个高斯混合成分生成的，也就知道了其类别。而 $p(y = j, \theta = i|\mathbf{x})$ 表示已知 $\theta$ 和 $\mathbf{x}$ 的条件概率 (其实已知 $\theta$ 就足够，不需 $\mathbf{x}$ 的信息)，因此

$$p(y = j|\theta = i, \mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

## 13.3

$$p(\Theta = i|\mathbf{x}) = \frac{\alpha_i \cdot p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)}{\sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)}$$

[解析]：该式即为 9.4.3 节的式(9.30)，具体推导参见有关式(9.30)的解释。

## 13.4

$$\begin{aligned} LL(D_l \cup D_u) &= \sum_{(x_j, y_j) \in D_l} \ln \left( \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot p(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) \cdot p(y_j|\Theta = i, \mathbf{x}_j) \right) \\ &+ \sum_{x_j \in D_u} \ln \left( \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot p(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) \right) \end{aligned}$$

[解析]：由式(13.2)对概率 $p(y = j|\theta = i, x)$ 的分析，式中第1项中的 $p(y_j|\theta = i, x_j)$ 为

$p(y_j|\theta = i, x_j) = \begin{cases} 1, & y_i = i \\ 0, & y_i \neq i \end{cases}$  该式第1项针对有标记样本 $(x_i, y_i) \in D_i$ 来说，因为有标记样本的类别是确定的，因此此在计算它的对数似然时，它只可能来自 $N$ 个高斯混合成分中的一个（西瓜书第296页第2行提到“假设样本由高斯混合模型生成，且每个类别对应一个高斯混合成分”），所以计算第1项计算有标记样本似然时乘以了 $p(y_j|\theta = i, x_j)$ ；该式第2项针对未标记样本 $x_j \in D_u$ ；来说的，因为未标记样本的类别不确定，即它可能来自 $N$ 个高斯混合成分中的任何一个，所以第1项使用了式(13.1)。

## 13.5

$$\gamma_{ji} = \frac{\alpha_i \cdot p(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)}{\sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot p(\mathbf{x}_j|\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)}$$

[解析]：该式与式(13.3)相同，即后验概率。可通过有标记数据对模型参数 $(\alpha_i, \mu_i, \Sigma_i)$ 进行初始化，具体来说：

$$\alpha_i = \frac{l_i}{|D_l|}, \text{ where } |D_l| = \sum_{i=1}^N l_i \quad \mu_i = \frac{1}{l_i} \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} (x_j - \mu_j)(x_j - \mu_j)^T$$

$$\Sigma_i = \frac{1}{l_i} \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} (x_j - \mu_i)(x_j - \mu_i)^T$$

其中 $l_i$ 表示第 $i$ 类样本的有标记样本数目， $|D_l|$ 为有标记样本集样本总数， $\wedge$ 为“逻辑与”。

## 13.6

$$\boldsymbol{\mu}_i = \frac{1}{\sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} + l_i} \left( \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} \mathbf{x}_j + \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \mathbf{x}_j \right)$$

[推导]：类似于式(9.34)该式由 $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i} = 0$ 而得，将式(13.4)的两项分别记为：

$$LL(D_l) = \sum_{(x_j, y_j) \in D_l} \ln(\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j|\mu_s, \Sigma_s) \cdot p(y_i|\theta = s, x_j)) \quad LL(D_u) = \sum_{x_j \in D_u} \ln(\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j|\mu_s, \Sigma_s))$$

对于式(13.4)中的第1项 $LL(D_l)$ ，由于 $p(y_j|\theta = i, x_j)$ 取值非1即0（详见13.2, 13.4分析），因此

$LL(D_l) = \sum_{(x_j, y_j) \in D_l} \ln(\alpha_{y_j} \cdot p(x_j|\mu_{y_j}, \Sigma_{y_j}))$  若求 $LL(D_l)$ 对 $\mu_i$ 的偏导，则 $LL(D_l)$ 求和号中只有 $y_j = i$ 的项能留下来，即

$$\begin{aligned} \frac{\partial LL(D_l)}{\partial \mu_i} &= \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{\partial \ln(\alpha_i \cdot p(x_j|\mu_i, \Sigma_i))}{\partial \mu_i} \\ &= \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{1}{p(x_j|\mu_i, \Sigma_i)} \cdot \frac{\partial p(x_j|\mu_i, \Sigma_i)}{\partial \mu_i} \\ &= \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{1}{p(x_j|\mu_i, \Sigma_i)} \cdot p(x_j|\mu_i, \Sigma_i) \cdot \Sigma_i^{-1}(x_j - \mu_i) \\ &= \sum_{x_j \in D_u} \Sigma_i^{-1}(x_j - \mu_i) \end{aligned}$$

对于式(13.4)中的第2项 $LL(D_u)$ ，求导结果与式(9.33)的推导过程一样

$$\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i} = \sum_{x_j \in D_u} \frac{\alpha_i}{\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j|\mu_s, \Sigma_s)} \cdot p(x_j|\mu_i, \Sigma_i) \cdot \Sigma_i^{-1}(x_j - \mu_i) = \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \Sigma_i^{-1}(x_j - \mu_i) \quad \text{综合}$$

两项结果，则 $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i}$ 为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i} &= \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \Sigma_i^{-1} (x_j - \mu_i) + \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \Sigma_i^{-1} (x_j - \mu_i) \\
&= \Sigma_i^{-1} \left( \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} (x_j - \mu_i) + \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot (x_j - \mu_i) \right) \\
&= \Sigma_i^{-1} \left( \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} x_j + \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot x_j - \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \mu_i - \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \mu_i \right)
\end{aligned}$$

令  $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i} = 0$ ，两边同时左乘  $\Sigma_i$  可将  $\Sigma_i^{-1}$  消掉，移项即得

$$\sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \mu_i + \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \mu_i = \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot x_j + \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} x_j$$

上式中，可以作为常量提到求和号外面，而  $\sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} 1 = l_i$ ，即第  $i$  类样本的有标记 样本数目，因此

$$\left( \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} + \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} 1 \right) \mu_i = \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot x_j + \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} x_j$$

即得式(13.6)；

## 13.7

$$\begin{aligned}
\Sigma_i &= \frac{1}{\sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} + l_i} \left( \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i)^T \right. \\
&\quad \left. + \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i)^T \right)
\end{aligned}$$

[推导]：类似于13.6 由  $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \Sigma_i} = 0$  得，化简过程同13.6过程类似 对于式(13.4)中的第 1 项  $LL(D_l)$ ，类似于刚才式(13.6)的推导过程；

$$\begin{aligned}
\frac{\partial LL(D_l)}{\partial \Sigma_i} &= \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{\partial \ln(\alpha_i \cdot p(\mathbf{x}_j | \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i))}{\partial \Sigma_i} \\
&= \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{1}{p(\mathbf{x}_j | \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)} \cdot \frac{\partial p(\mathbf{x}_j | \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)}{\partial \Sigma_i} \\
&= \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{1}{p(\mathbf{x}_j | \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)} \cdot p(\mathbf{x}_j | \boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i) \cdot \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i)^T - \mathbf{I} \right) \cdot \frac{1}{2} \Sigma_i^{-1} \\
&= \sum_{(x_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i)^T - \mathbf{I} \right) \cdot \frac{1}{2} \Sigma_i^{-1}
\end{aligned}$$

对于式(13.4)中的第 2 项  $LL(D_u)$ ，求导结果与式(9.35)的推导过程一样；

$$\frac{\partial LL(D_u)}{\partial \Sigma_i} = \sum_{x_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x}_j - \boldsymbol{\mu}_i)^T - \mathbf{I} \right) \cdot \frac{1}{2} \Sigma_i^{-1}$$

综合两项结果，则  $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \Sigma_i}$  为

$$\begin{aligned} \frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i} &= \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top - \mathbf{I} \right) \cdot \frac{1}{2} \Sigma_i^{-1} \\ &\quad + \sum_{(\mathbf{x}_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top - \mathbf{I} \right) \cdot \frac{1}{2} \Sigma_i^{-1} \\ &= \left( \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top - \mathbf{I} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{(\mathbf{x}_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \left( \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top - \mathbf{I} \right) \right) \cdot \frac{1}{2} \Sigma_i^{-1} \end{aligned}$$

令  $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \Sigma_i} = 0$ ，两边同时右乘  $2\Sigma_i$  可将  $\frac{1}{2}\Sigma_i^{-1}$  消掉，移项即得

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top + \sum_{(\mathbf{x}_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \Sigma_i^{-1} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top \\ = \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot \mathbf{I} + \sum_{(\mathbf{x}_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} \mathbf{I} \\ = \left( \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} + l_i \right) \mathbf{I} \end{aligned}$$

两边同时左乘以  $\Sigma_i$ ，上式变为

$$\sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} \cdot (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top + \sum_{(\mathbf{x}_j, y_j) \in D_l \wedge y_j = i} (\mathbf{x}_j - \mu_i) (\mathbf{x}_j - \mu_i)^\top = \left( \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} + l_i \right) \Sigma_i$$

即得式(13.7)；

## 13.8

$$\alpha_i = \frac{1}{m} \left( \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \gamma_{ji} + l_i \right)$$

[推导]：类似于式(9.36)，写出  $LL(D_l \cup D_u)$  的拉格朗日形式

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(D_l \cup D_u, \lambda) &= LL(D_l \cup D_u) + \lambda \left( \sum_{s=1}^N \alpha_s - 1 \right) \\ &= LL(D_l) + LL(D_u) + \lambda \left( \sum_{s=1}^N \alpha_s - 1 \right) \end{aligned}$$

类似于式(9.37)，对  $\alpha_i$  求偏导。对于  $LL(D_u)$ ，求导结果与式(9.37)的推导过程一样：

$$\frac{\partial LL(D_u)}{\partial \alpha_i} = \sum_{\mathbf{x}_j \in D_u} \frac{1}{\Sigma_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(\mathbf{x}_j | \mu_s, \Sigma_s)} \cdot p(\mathbf{x}_j | \mu_i, \Sigma_i)$$

对于  $LL(D_l)$ ，类似于类似于(13.6)和(13.7)的推导过程

$$\begin{aligned}
\frac{\partial LL(D_l)}{\partial \alpha_i} &= \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{\partial \ln(\alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i))}{\partial \alpha_i} \\
&= \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{1}{\alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)} \cdot \frac{\partial(\alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i))}{\partial \alpha_i} \\
&= \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} \frac{1}{\alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)} \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i) \\
&= \frac{1}{\alpha_i} \cdot \sum_{(x_i, y_i) \in D_l \wedge y_j = i} 1 \\
&= \frac{l_i}{\alpha_i}
\end{aligned}$$

上式推导过程中，重点注意变量是 $\alpha_i$ ， $p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)$ 是常量；最后一行 $\alpha_i$ 相对于求和变量为常量，因此作为公因子提到求和号外面；为第 $i$ 类样本的有标记样本数目。综合两项结果，则 $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \alpha_i}$ 为

$$\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \mu_i} = \frac{l_i}{\alpha_i} + \sum_{x_j \in D_u} \frac{p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)}{\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j | \mu_s, \Sigma_s)} + \lambda$$

令 $\frac{\partial LL(D_l \cup D_u)}{\partial \alpha_i} = 0$ 并且两边同乘以 $\alpha_i$ ，得

$$\alpha_i \cdot \frac{l_i}{\alpha_i} + \sum_{x_j \in D_u} \frac{\alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)}{\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j | \mu_s, \Sigma_s)} + \lambda \cdot \alpha_i = 0$$

结合式(9.30)发现，求和号内即为后验概率 $\gamma_{ji}$ ，即

$$l_i + \sum_{x_i \in D_u} \gamma_{ji} + \lambda \alpha_i = 0$$

对所有混合成分求和，得

$$\sum_{i=1}^N l_i + \sum_{i=1}^N \sum_{x_i \in D_u} \gamma_{ji} + \sum_{i=1}^N \lambda \alpha_i = 0$$

这里 $\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1$ ，因此 $\sum_{i=1}^N \lambda \alpha_i = \lambda \sum_{i=1}^N \alpha_i = \lambda$ 根据(9.30)中 $\gamma_{ji}$ 表达式可知

$$\sum_{i=1}^N \gamma_{ji} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)}{\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j | \mu_s, \Sigma_s)} = \frac{\sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot p(x_j | \mu_i, \Sigma_i)}{\sum_{s=1}^N \alpha_s \cdot p(x_j | \mu_s, \Sigma_s)} = 1$$

再结合加法满足交换律，所以

$$\sum_{i=1}^N \sum_{x_i \in D_u} \gamma_{ji} = \sum_{x_i \in D_u} \sum_{i=1}^N \gamma_{ji} = \sum_{x_i \in D_u} 1 = u$$

以上分析过程中， $\sum_{x_j \in D_u}$ 形式与 $\sum_{j=1}^u$ 等价，其中 $u$ 为未标记样本集的样本个数； $\sum_{i=1}^N l_i = l$ 其中 $l$ 为有标记样本集的样本个数；将这些结果代入

$$\sum_{i=1}^N l_i + \sum_{i=1}^N \sum_{x_i \in D_u} \gamma_{ji} + \sum_{i=1}^N \lambda \alpha_i = 0$$

解出  $l + u + \lambda = 0$  且  $l + u = m$  其中  $m$  为样本总个数，移项即得  $\lambda = -m$  最后带入整理解得

$$l_i + \sum_{X_j \in D_u} \gamma_{ji} - m \alpha_i = 0$$

整理即得式(13.8)；