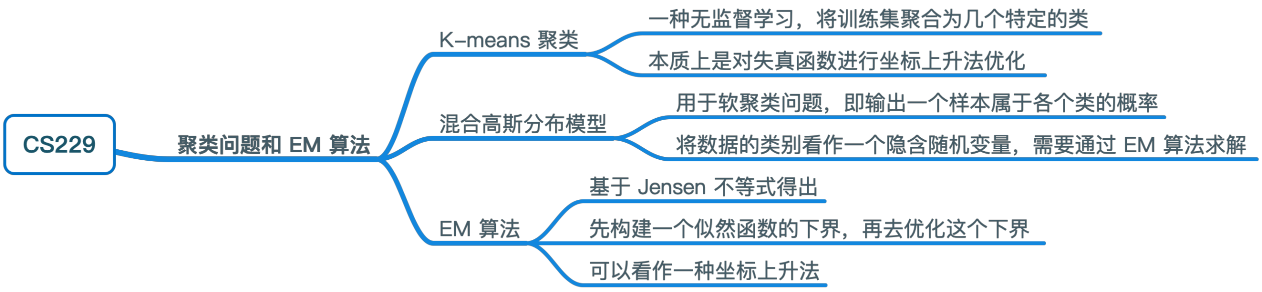
第九章 聚类问题与 EM 算法



K-means聚类

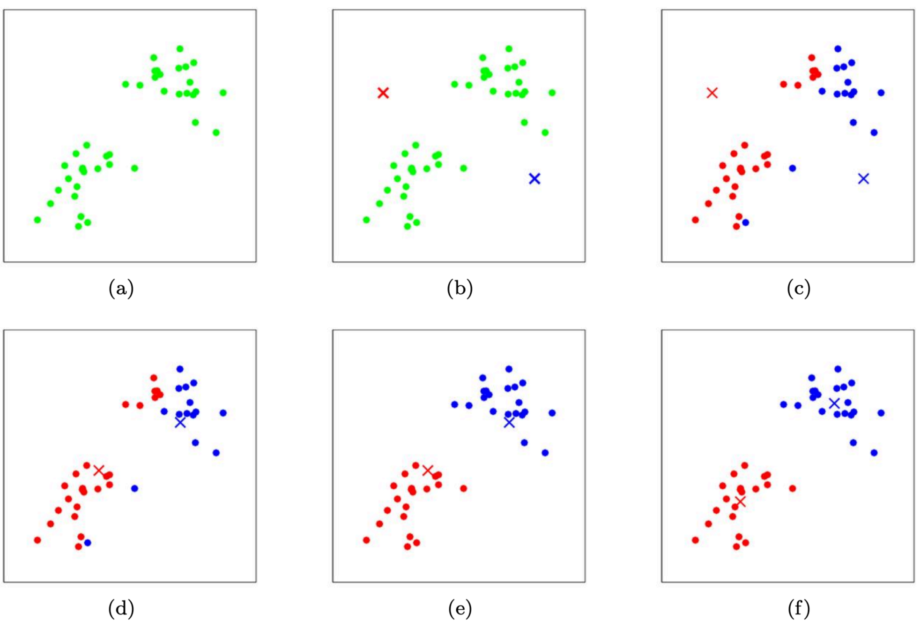
- 聚类问题是一种无监督学习，给定训练集 $\{x^{(1)}, \ldots, x^{(m)}\}$，我们希望将其聚合成几个特定的类
- k-means 聚类算法的流程如下：
  1. 随机初始化**聚类中心** $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_k \in \mathbb{R}^n$
  2. 重复以下步骤直至收敛：
     - 对于每个 i（训练集大小），令

$$c^{(i)} := \arg\min_j ||x^{(i)} - \mu_j||^2$$

     - 对于每个 j（聚类数量），令

$$\mu^{(j)} := \frac{\sum_{i=1}^m 1\{c^{(i)} = j\} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^m 1\{c^{(i)} = j\}}$$

- 该算法的思想为：
  1. 将每个训练样本 $x^{(i)}$ 分配到距离其最近的中心 μ_j
  2. 将每个聚类中心移动到第一步中分配到该中心的样本的均值
- 下图可视化了 k-means 算法的运行流程：



- 为了证明 k-means 算法能否保证收敛，我们定义**失真函数**（distortion function）为：

$$J(c,\mu)=\sum_{i=1}^{m}||x^{(i)}-\mu_{c^{(i)}}||^2$$

  - 可以发现 k-means 本质上就是对失真函数进行坐标上升法优化
  - 其内层循环首先保持 μ 不变关于 c 最小化 J，然后保持 c 不变关于 μ 最小化 J
  - 因此，J 一定会持续下降，最终达到收敛
  - 一般 c 和 μ 也会收敛，但理论上存在同时出现多种聚类组合的可能性，使得失真函数的值一样
- 失真函数是一个非凸函数，这意味着坐标上升并不能保证其收敛至全局最优，存在收敛到局部最优的可能性
  - 一般情况下这不会发生
  - 可以通过多次运行 k-means 算法，选择最优解来解决这个问题

混合高斯分布

- 混合高斯分布可以用于软聚类问题，即输出一个样本属于各个类的概率
- 我们可以将数据的类别看作一个隐含随机变量 z，并给出如下假设：
  1. z 服从多项式分布 $z^{(i)}\sim \text{Multinomial}(\phi)$
  2. 给定不同的 z，x 服从不同的高斯分布 $x^{(i)}|z^{(i)}=j\sim\mathcal{N}(\mu_i,\Sigma_j)$
- 使用极大似然法求解该优化问题，可以得到如下的似然函数：

$$\begin{aligned}\ell(\phi,\mu,\Sigma)&=\sum_{i=1}^{m}\log p(x^{(i)};\phi,\mu,\Sigma)\\&=\sum_{i=1}^{m}\log\sum_{z^{(i)}=1}^{k}p(x^{(i)}|z^{(i)};\mu,\Sigma)p(z^{(i)};\phi)\end{aligned}$$

- 该问题无法求出闭合解
- 如果 $z^{(i)}$ 已知，即我们知道每个样本来自于哪个高斯分布，那么极大似然估计的求解是容易的，似然函数如下：

$$\ell(\phi,\mu,\Sigma)=\sum_{i=1}^{m}\Big(\log p(x^{(i)}|z^{(i)};\mu,\Sigma)+\log p(z^{(i)};\phi)\Big)$$

  - 求解的结果是：

$$\begin{aligned}\phi_j&=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}\\\mu_j&=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}}\\\Sigma_j&=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}(x^{(i)}-\mu_j)(x^{(i)}-\mu_j)^T}{\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}}\end{aligned}$$

    - 该结果与之前的高斯判别分析的结论类似（GDA 的协方差矩阵必须相同）

EM 算法初步

- 实际上，我们并不知道 $z^{(i)}$ 的值

- 我们可以通过 EM 算法进行迭代估计出 z^i 从而得到参数，其基本思想如下：
  - 重复以下步骤直至收敛：
    1. （**E-step**）对于每个 i, j，令：

$$w_j^{(i)} := p(z^{(i)} = j|x^{(i)}; \phi, \mu, \Sigma)$$

    2. （**M-step**）更新参数：

$$\begin{aligned} \phi_j &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m w_j^{(i)} \\ \mu_j &= \frac{\sum_{i=1}^m w_j^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^m w_j^{(i)}} \\ \Sigma_j &= \frac{\sum_{i=1}^m w_j^{(i)} (x^{(i)} - \mu_j)(x^{(i)} - \mu_j)^T}{\sum_{i=1}^m w_j^{(i)}} \end{aligned}$$

- 关于 EM 算法的几点解释：
  - 在 E-step 中，给定 $x^{(i)}$，我们使用当前的参数值来计算 $z^{(i)}$ 的后验概率，即

$$p(z^{(i)} = j|x^{(i)}; \phi, \mu, \Sigma) = \frac{p(x^{(i)}|z^{(i)} = j; \mu, \Sigma)p(z^{(i)} = j; \phi)}{\sum_{l=1}^k p(x^{(i)}|z^{(i)} = l; \mu, \Sigma)p(z^{(i)} = l; \phi)}$$

    - 该概率代表我们对 $z^{(i)}$ 值的软猜测（即以概率值代替具体的值）
  - 在 M-step 中，参数的更新公式与之前已知 $z^{(i)}$ 的公式相比，只是把指示函数替换为了概率
  - 与 K-means 算法相比，EM 算法输出的是样本属于各个类的概率，这是一种软聚类
    - 与 K-means 相似，EM 算法容易陷入局部最优，因此多次尝试不同的初始参数可能是一个好主意
  - 下一节将给出 EM 算法的一般形式，并证明其收敛性

Jensen 不等式

函数的凹凸性

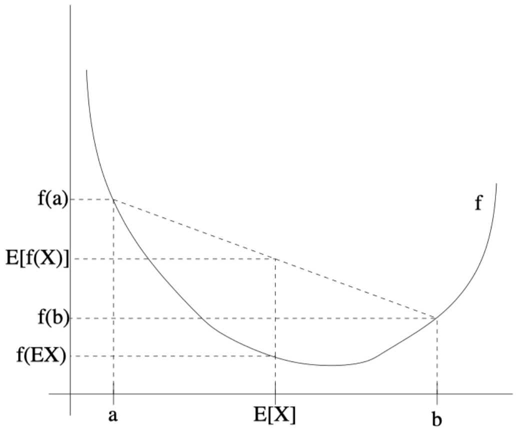
- 在介绍 Jensen 不等式之前，先回顾一下函数的凹凸性
- 对于一个实数域的函数 f，其为凸函数的条件为 $f''(x) \geq 0$
  - 如果输入为向量形式，则该条件可推广为其 Hessian 矩阵半正定（$H \geq 0$）
  - 如果 $f''(x) > 0$（$H > 0$），则函数**严格凸**
- 凹函数的判定条件与凸函数完全相反

定理

- 令 f 是一个凸函数，X 是一个随机变量，则：

$$\mathrm{E}[f(X)] \geq f(\mathrm{E}X)$$

  - 如果 f 严格凸，那么当且仅当 $X = \mathrm{E}[X]$ 时等号成立（即 X 为常量）
- 可以通过下图对该不等式有一个直观的理解：



- 当 f 为凹函数时，不等式方向对调，仍然成立

EM 算法

算法的导出

- 假定我们有一个包含 m 个独立样本的训练集，我们希望去拟合一个概率模型 $p(x, z)$，其对数似然函数为：

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

    - 这里假定 z 是离散变量（连续变量需要使用积分）
    - 直接最大化 $\ell(\theta)$ 是难以求解的
- EM 算法的思想是先构建一个 ℓ 的下界（E-step），然后去优化这个下界（M-step），达到间接最大化 ℓ 的目的
    - 对于每个 i，设 Q_i 是 z 的某种概率分布（$\sum_z Q_i(z) = 1, Q_i(z) \geq 0$）
    - 根据期望的定义以及 Jensen 不等式，我们有：

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

        - $\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}$ 可以看做 $z^{(i)}$ 的随机变量，其概率分布为 Q_i，期望可以通过 $\sum_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})}$ 得到
        - $f(x) = \log x$ 是一个凹函数，应用 Jensen 不等式时注意方向对调
- 为了执行 EM 算法，我们需要选择合适的 Q_i 以保证在当前的参数设置下取到下界，即目前的 θ 值能够使得 (3) 式的等号成立
    - 之前的定理表明等号成立的条件是随机变量为**常数**

$$\frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{Q_i(z^{(i)})} = c$$

- 因此只要 $Q_i(z^{(i)})$ 和 $p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$ 成比例即可

$$Q_i(z^{(i)}) \propto p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$$

- 实际上，因为 $\sum_z Q_i(z^{(i)}) = 1$，将其代入上述公式，可以得到：

$$\sum_z Q_i(z^{(i)}) = \frac{\sum_z p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)}{c} = 1$$

- 因此 $c = \sum_z p(x^{(i)}, z^{(i)}; \theta)$，从而有：

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

- 根据上述推导，我们只需要将 Q_i 设置为给定 $x^{(i)}$ 时 $z^{(i)}$ 的后验分布即可（以 θ 为参数）

- 综上所述，EM 算法的具体步骤为：
  - **E-step**：对于每个 i，令

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

  - **M-step**：更新参数

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

  - 重复以上两个步骤直至收敛

收敛性证明

- 下面证明该算法的收敛性
  - 假定 $\theta^{(t)}$ 和 $\theta^{(t+1)}$ 来自于 EM 算法的两次成功的迭代，那么通过证明 $\ell(\theta^{(t)}) \le \ell(\theta^{(t+1)})$，就可以表明 EM 算法是单调收敛的（对数似然函数单调递增）
  - 当参数为 $\theta^{(t)}$ 时，根据算法步骤，我们令 $Q_i^{(t)}(z^{(i)}) := p(z^{(i)} | x^{(i)}; \theta^{(t)})$，这一选择保证了等号成立，即：

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

  - 而参数 $\theta^{(t+1)}$ 是通过最大化上式的右边部分得出的（更新 θ），因此有：

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

    - (4) 式的得出来源于 (3) 式

        - (5) 式的得出来源于 $\theta^{(t+1)}$ 是上一步的下界最大化的结果
        - (6) 式的得出之前已经证明（满足等号成立的条件）
    - 综上所述，EM 算法可以保证似然函数的**单调收敛**
        - 一个可取的收敛条件是 $\ell(\theta)$ 的增长速度小于某个临界值

坐标上升法

- 如果我们定义：

$$J(Q,\theta)=\sum_{i}\sum_{z^{(i)}}Q_i(z^{(i)})\log\frac{p(x^{(i)},z^{(i)};\theta)}{Q_i(z^{(i)})}$$

    - 从之前的推导可以知道 $\ell(\theta)\geq J(Q,\theta)$
- EM 算法可以看做是对 J 的坐标上升法
    - 在 E-step 中，关于 Q 最大化 J
    - 在 M-step 中，关于 θ 最大化 J

混合高斯模型复盘

- 下面将使用 EM 算法的一般形式来对之前混合高斯模型中的公式进行推导
    - 由于篇幅所限，这里只给出 ϕ 和 μ_j 的推导过程
- 之前我们得出的参数更新公式如下：

$$\begin{aligned}\phi_j&=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}w_j^{(i)}\\ \mu_j&=\frac{\sum_{i=1}^{m}w_j^{(i)}x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m}w_j^{(i)}}\\ \Sigma_j&=\frac{\sum_{i=1}^{m}w_j^{(i)}(x^{(i)}-\mu_j)(x^{(i)}-\mu_j)^T}{\sum_{i=1}^{m}w_j^{(i)}}\end{aligned}$$

- 根据 E-step 的定义，我们可以得到：

$$w_j^{(i)}=Q_i(z^{(i)}=j)=P(z^{(i)}=j|x^{(i)};\phi,\mu,\Sigma)$$

- 在 M-step 中，我们需要通过上述三个参数去最大化下式：

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

- 我们首先关于 μ_j 去进行最大化，求导可得：

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

- 上述推导首先去除了不相关的项，然后去除了求和符号（导数性质），最后合并同类项得到结果
- 将上式设为 0 求解 μ_j，可得：

$$
\mu_j = \frac{\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)} x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} w_j^{(i)}}
$$

- 下面关于 ϕ_j 去进行最大化，将与 ϕ_j 相关的部分提取出来，可以得到需要最大化的项为：

$$
\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} \log \phi_j
$$

  - 这里我们还有一个额外的约束条件：$\sum_{j=1}^{k} \phi_j = 1$
  - 因此，我们需要构建拉格朗日算子：

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

    - 其中 β 是拉格朗日乘数，对上式求导可得：

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

      - 将其设为 0，可得：

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

      - 由于 $\sum_j \phi_j = 1$，因此 $-\beta = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} w_j^{(i)} = \sum_{i=1}^{m} 1 = m$，所以：

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