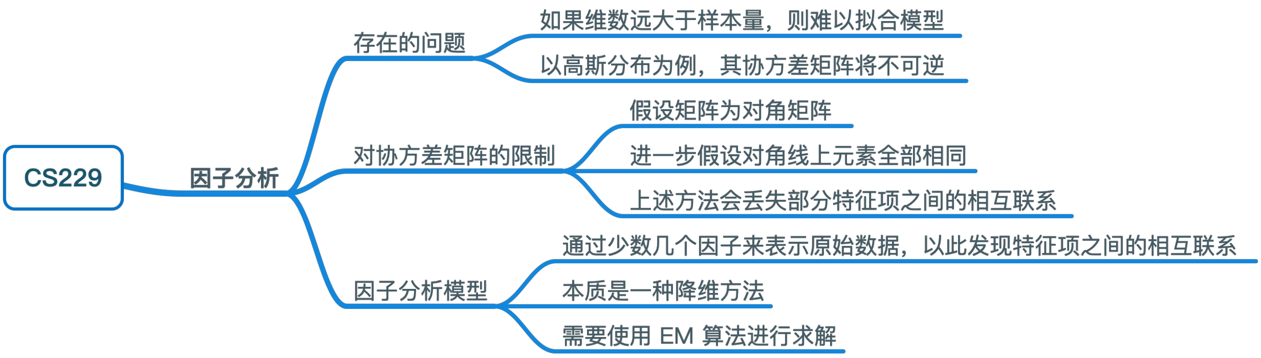
第十章 因子分析



存在的问题

- 在之前的推导中，我们通常假定拥有足够的数据来拟合模型，即 $m \gg n$（样本量远大于维数）
- 但是如果维数远大于样本量，则难以对模型进行拟合
    - 以简单的高斯分布为例，通过极大似然法可以得到：

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

$$\Sigma = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)} - \mu)(x^{(i)} - \mu)^T$$

        - 可以发现 Σ 是奇异矩阵，即特征值为 0，不满秩的矩阵
            - 这意味着我们无法对 Σ 求逆，且 $1/|\Sigma|^{1/2} = 0$
            - 因此我们无法写出该分布的概率密度函数，也就无法对其建模
        - 可以将其理解为线性方程组求解，未知数的个数比方程数目多，因而无法完全求出所有未知数
            - 原文使用仿射空间进行解释，并不是很懂(⊙ o ⊙)
- 我们可以通过一些方法解决这个问题，在接下来的几节中：
    - 我们首先会对协方差矩阵添加两种可能的限制，来帮助求解
        - 但这些方法并不能完美解决问题
    - 之后我们会介绍高斯分布的某些性质，并提出因子分析模型及其 EM 求解

对协方差矩阵的限制

- 对协方差矩阵的限制可以分为两种
- 第一种限制是假设矩阵为对角矩阵
    - 基于该假设，最大似然估计的结果为：

$$\Sigma_{jj} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_j^{(i)} - \mu_j)^2$$

        - 对二维高斯分布来说，其概率密度在平面上的投影轮廓为椭圆

        - 当协方差矩阵为对角矩阵时，椭圆的轴与坐标轴**平行**
- 第二种限制是进一步假设对角线上的元素全部相同
    - 此时 $\Sigma=\sigma^2 I$，其中最大似然估计表明：

$$\sigma^2=\frac{1}{mn}\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m}(x_j^{(i)}-\mu_j)^2$$

        - 此时投影轮廓为圆（高维情况下为球面或超球面）
- 在没有限制的情况下，我们需要 $m>n+1$ 来保证 Σ 的最大似然估计不是奇异矩阵
    - 在上述两个限制中的任意一个下，我们只需要 $m\geq 2$ 来保证非奇异
    - 但是在上述限制下，我们会丢失部分特征项之间的相互联系
        - 因子分析模型能够解决上述问题

高斯分布的边缘和条件分布

- 在介绍因子分析前，我们先介绍联合多元高斯分布的 边缘分布 和条件分布
- 假定我们有一个由两个变量组合而成的随机变量：

$$x=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}$$

    - 其中 $x_1\in\mathbb{R}^r$，$x_2\in\mathbb{R}^s$，因此 $x\in\mathbb{R}^{r+s}$
    - 假定 $x\sim\mathcal{N}(\mu,\Sigma)$，其中

$$\mu=\begin{bmatrix}\mu_1\\\mu_2\end{bmatrix},\quad\Sigma=\begin{bmatrix}\Sigma_{11}&\Sigma_{12}\\\Sigma_{21}&\Sigma_{22}\end{bmatrix}$$

        - 这里 $\mu_1\in\mathbb{R}^r$，$\mu_2\in\mathbb{R}^s$，$\Sigma_{11}\in\mathbb{R}^{r\times r}$，$\Sigma_{12}\in\mathbb{R}^{r\times s}$，以此类推
        - 因为协方差矩阵 Σ 是对称的，所以 $\Sigma_{12}=\Sigma_{21}^T$
- 基于上述定义，我们可以求出 x_1 的**边缘分布**：

$$\mathrm{E}[x_1]=\mu_1$$
$$\mathrm{Cov}(x_1)=\mathrm{E}[(x_1-\mu_1)(x_1-\mu_1)^T]=\Sigma_{11}$$

    - 关于协方差公式的证明如下：

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(x)&=\Sigma\\&=\begin{bmatrix}\Sigma_{11}&\Sigma_{12}\\\Sigma_{21}&\Sigma_{22}\end{bmatrix}\\&=\mathrm{E}[(x-\mu)(x-\mu)^T]\\&=\mathrm{E}\left[\begin{pmatrix}x_1-\mu_1\\x_2-\mu_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1-\mu_1\\x_2-\mu_2\end{pmatrix}^T\right]\\&=E\begin{bmatrix}(x_1-\mu_1)(x_1-\mu_1)^T&(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)^T\\(x_2-\mu_2)(x_1-\mu_1)^T&(x_2-\mu_2)(x_2-\mu_2)^T\end{bmatrix}\end{aligned}$$

    - 因为边缘分布本身也是高斯分布，所以有：

$$x_1\sim\mathcal{N}(\mu_1,\Sigma_{11})$$

- 类似地，我们可以推导出条件分布 $x_1|x_2\sim\mathcal{N}(\mu_{1|2},\Sigma_{1|2})$，其中：

$$\mu_{1|2} = \mu_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(x_2 - \mu_2) \tag{1}$$
$$\Sigma_{1|2} = \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} \tag{2}$$

   - 推导过程省略

因子分析模型

模型的提出

- 因子分析模型是指通过少数几个潜在变量（因子）来表示原始数据，以此发现特征项之间的相互联系，探求原始数据的基本结构
   - 其本质是一种**降维**方法
- 在因子模型中，我们提出如下的联合分布 (x, z)：

$$z \sim \mathcal{N}(0, I)$$
$$x|z \sim \mathcal{N}(\mu + \Lambda z, \Psi)$$

   - 其中 $z \in \mathbb{R}^k$ 是潜在随机变量
   - 模型的参数包括：
      - 向量 $\mu \in \mathbb{R}^n$
      - 矩阵 $\Lambda \in \mathbb{R}^{n\times k}$
      - 对角矩阵 $\Psi \in \mathbb{R}^{n\times n}$
   - k 应该小于 n
- 因此我们可以想象 $x^{(i)}$ 是通过对 k 维多元高斯分布 $z^{(i)}$ 进行采样生成的
   - 首先通过计算 $\mu + \Lambda z^{(i)}$ 将其映射至 k 维仿射空间 $\mathbb{R}^n$
   - 然后通过加上协方差噪声 Ψ 生成 $x^{(i)}$
- 我们也可以将上述模型表示为如下形式：

$$z \sim \mathcal{N}(0, I)$$
$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \Psi)$$
$$x = \mu + \Lambda z + \epsilon$$

   - 其中 ϵ 和 z 是独立的

模型的求解

- 我们的随机变量 z 和 x 有如下的联合高斯分布：

$$\begin{bmatrix} z \\ x \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}(\mu_{zx}, \Sigma)$$

   - 下面将分别求解 μ_{zx} 和 Σ
- 根据 $z \sim \mathcal{N}(0, I)$，我们有 $\mathrm{E}[z] = 0$，而

$$\begin{aligned} \mathrm{E}[x] &= \mathrm{E}[\mu + \Lambda z + \epsilon] \\ &= \mu + \Lambda \mathrm{E}[z] + \mathrm{E}[\epsilon] \\ &= \mu \end{aligned}$$

- 将两者结合在一起，得到：

$$\mu_{zx} = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \mu \end{bmatrix}$$

- 为了求解 Σ，我们需要计算 Σ_{zz}（矩阵左上角）、Σ_{zx}（矩阵右上角）和 Σ_{xx}（矩阵右下角）
  - 矩阵左下角与右上角对称，计算其一即可
- 由于 $z \sim \mathcal{N}(0, I)$，根据之前提出的边缘分布性质，有 $\Sigma_{zz} = \mathrm{Cov}(z) = I$
- Σ_{zx} 的求解如下：

$$\begin{aligned}
\Sigma_{zx} &= \mathrm{E}[(z - \mathrm{E}[z])(x - \mathrm{E}[x])^T] \\
&= \mathrm{E}[z(\mu + \Lambda z + \epsilon - \mu)^T] \\
&= \mathrm{E}[zz^T]\Lambda^T + \mathrm{E}[z\epsilon^T] \\
&= \Lambda^T
\end{aligned}$$

  - 最后一步的推导使用了 $\mathrm{E}[zz^T] = \mathrm{Cov}(z) + (\mathrm{E}[z])^2 = \mathrm{Cov}(z)$
  - 以及 $\mathrm{E}[z\epsilon^T] = \mathrm{E}[z]\mathrm{E}[\epsilon^T] = 0$
    - 因为 z 和 ϵ 相互独立
- 类似地，Σ_{xx} 的求解如下：

$$\begin{aligned}
\Sigma_{xx} &= \mathrm{E}[(x - \mathrm{E}[x])(x - \mathrm{E}[x])^T] \\
&= \mathrm{E}[(\mu + \Lambda z + \epsilon - \mu)(\mu + \Lambda z + \epsilon - \mu)^T] \\
&= \mathrm{E}[\Lambda zz^T\Lambda^T + \epsilon z^T\Lambda^T + \Lambda z\epsilon^T + \epsilon\epsilon^T] \\
&= \Lambda\mathrm{E}[zz^T]\Lambda^T + \mathrm{E}[\epsilon\epsilon^T] \\
&= \Lambda\Lambda^T + \Psi
\end{aligned}$$

- 综上所述，得：

$$\begin{bmatrix} z \\ x \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}(\begin{bmatrix} \vec{0} \\ \mu \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} I & \Lambda^T \\ \Lambda & \Lambda\Lambda^T + \Psi \end{bmatrix}) \tag{3}$$

- 因此，x 的边缘分布为 $x \sim \mathcal{N}(\mu, \Lambda\Lambda^T + \Psi)$
  - 给定一个训练集 $\{x^{(i)}; i = 1, \ldots, m\}$，我们可以得出如下的对数似然函数：

$$\begin{aligned}
\ell(\mu, \Lambda, \Psi) &= \sum_{i=1}^m \log p(x^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi) \\
&= \log \prod_{i=1}^m \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Lambda\Lambda^T + \Psi|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu)^T(\Lambda\Lambda^T + \Psi)^{-1}(x^{(i)} - \mu)\right)
\end{aligned}$$

    - 对该函数进行最大化估计是难以求出闭合解的
    - 我们将使用 EM 算法来求解该问题

因子分析模型的 EM 求解

E-step

- 在 E-step 中，我们需要计算 $Q_i(z^{(i)}) = p(z^{(i)}|x^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi)$
- 将 (3) 式代入之前推导出的条件分布公式 (1) 和 (2)，可以得出 $z^{(i)}|x^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi \sim \mathcal{N}(\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}, \Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}})$，其中：

$$\begin{aligned}
\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}} &= \Lambda^T(\Lambda\Lambda^T + \Psi)^{-1}(x^{(i)} - \mu), \\
\Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}} &= I - \Lambda^T(\Lambda\Lambda^T + \Psi)^{-1}\Lambda
\end{aligned}$$

- 因此，基于上述定义，我们有：

$$Q_i(z^{(i)}) = \frac{1}{(2\pi)^{k/2}|\Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(z^{(i)} - \mu_{z^{(i)}|x^{(i)}})^T (\Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}})^{-1} (z^{(i)} - \mu_{z^{(i)}|x^{(i)}})\right)$$

M-step

- 在 M-step 中，我们需要最大化：

$$\sum_{i=1}^{m} \int_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)}, z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi)}{Q_i(z^{(i)})} dz^{(i)} \tag{4}$$

- 下面介绍关于参数 Λ 的优化方法，其他两个参数的推导省略
- 我们可以将 (4) 式简化为：

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{m} \int_{z^{(i)}} Q_i(z^{(i)}) [\log p(x^{(i)}, z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi) + \log p(z^{(i)}) - \log Q_i(z^{(i)})] dz^{(i)} &(5) \\ &= \sum_{i=1}^{m} \mathrm{E}_{z^{(i)} \sim Q_i} [\log p(x^{(i)}, z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi) + \log p(z^{(i)}) - \log Q_i(z^{(i)})] &(6) \end{aligned}$$

  - 因为 $z \sim \mathcal{N}(0, I)$，所以 $\log p(z^{(i)})$ 与 Λ 无关
  - $\log Q_i(z^{(i)})$ 中的参数来自上一次迭代，与本次迭代中的参数无关
- 综上所述，我们需要优化的函数为：

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{m} \mathrm{E}\left[\log p(x^{(i)}, z^{(i)}; \mu, \Lambda, \Psi)\right] \\ &= \sum_{i=1}^{m} \mathrm{E}\left[\log \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Psi|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu - \Lambda z^{(i)})^T \Psi^{-1} (x^{(i)} - \mu - \Lambda z^{(i)})\right)\right] \\ &= \sum_{i=1}^{m} \mathrm{E}\left[-\frac{1}{2}\log|\Psi| - \frac{n}{2}\log(2\pi) - \frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu - \Lambda z^{(i)})^T \Psi^{-1} (x^{(i)} - \mu - \Lambda z^{(i)})\right] \end{aligned}$$

- 具体的求导过程如下（上式只有最后一项与参数相关）：

$$\begin{aligned} &\nabla_\Lambda \sum_{i=1}^{m} -\mathrm{E}\left[\frac{1}{2}(x^{(i)} - \mu - \Lambda z^{(i)})^T \Psi^{-1} (x^{(i)} - \mu - \Lambda z^{(i)})\right] \\ &= \sum_{i=1}^{m} \nabla_\Lambda \mathrm{E}\left[-\mathrm{tr}\frac{1}{2} {z^{(i)}}^T \Lambda^T \Psi^{-1} \Lambda z^{(i)} + \mathrm{tr} {z^{(i)}}^T \Lambda^T \Psi^{-1} (x^{(i)} - \mu)\right] \\ &= \sum_{i=1}^{m} \nabla_\Lambda \mathrm{E}\left[-\mathrm{tr}\frac{1}{2} \Lambda^T \Psi^{-1} \Lambda z^{(i)} {z^{(i)}}^T + \mathrm{tr} \Lambda^T \Psi^{-1} (x^{(i)} - \mu) {z^{(i)}}^T\right] \\ &= \sum_{i=1}^{m} \mathrm{E}\left[-\Psi^{-1} \Lambda z^{(i)} {z^{(i)}}^T + \Psi^{-1} (x^{(i)} - \mu) {z^{(i)}}^T\right] \end{aligned}$$

  - 第一步首先将连乘打开，然后由于结果均为实数，所以用迹替换（$\mathrm{tr} a = a$）
  - 第二步使用迹的性质 $\mathrm{tr} AB = \mathrm{tr} BA$
  - 第三步使用了迹的多条性质：

$$\begin{aligned} \nabla_{A^T} f(A) &= (\nabla_A f(A))^T \\ \nabla_{A^T} \mathrm{tr}\, ABA^T C &= B^T A^T C^T + BA^T C \\ \nabla_A \mathrm{tr}\, AB &= B^T \end{aligned}$$

- 将求导结果设为 0 并简化，得到：

$$\sum_{i=1}^{m}\Lambda \mathrm{E}_{z^{(i)}\sim Q_i}\left[z^{(i)}z^{(i)^T}\right]=\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)}-\mu)\mathrm{E}_{z^{(i)}\sim Q_i}\left[z^{(i)^T}\right]$$

  - 因此，我们可以解得：

$$\Lambda=\left(\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)}-\mu)\mathrm{E}_{z^{(i)}\sim Q_i}\left[z^{(i)^T}\right]\right)\left(\sum_{i=1}^{m}\mathrm{E}_{z^{(i)}\sim Q_i}\left[z^{(i)}z^{(i)^T}\right]\right)^{-1} \tag{7}$$

    - 该结果与线性回归中正规方程的解在形式上类似，因为二者都是在寻找两个变量之间的线性关系

- 对 (7) 式中的期望值进行求解，得到：

$$\begin{aligned}\mathrm{E}_{z^{(i)}\sim Q_i}\left[z^{(i)^T}\right]&=\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}^T\\ \mathrm{E}_{z^{(i)}\sim Q_i}\left[z^{(i)}z^{(i)^T}\right]&=\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}^T+\Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}}\end{aligned}$$

  - 第二项的求解在源于公式 $\mathrm{E}(YY^T)=\mathrm{E}(Y)\mathrm{E}(Y^T)+\mathrm{Cov}(Y)$
  - 协方差项在求解中容易被忽略，需要注意

- 综上所述，可以得到 Λ 在 M-step 的更新公式为：

$$\Lambda=\left(\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)}-\mu)\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}^T\right)\left(\sum_{i=1}^{m}\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}^T+\Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}}\right)^{-1} \tag{8}$$

- M-step 的其他两个参数的更新公式如下：

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

  - 该公式与参数无关，因此只需要计算一次即可

$$\Phi=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}x^{(i)^T}-x^{(i)}\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}^T\Lambda^T-\Lambda\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}x^{(i)^T}+\Lambda(\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}\mu_{z^{(i)}|x^{(i)}}^T+\Sigma_{z^{(i)}|x^{(i)}})\Lambda^T$$

  - 只取 Ψ 的对角元素组成 Ψ（即令 $\Psi_{ii}=\Phi_{ii}$）