华东师范大学数据科学与工程学院实验报告

课程名称：数据科学与工程算法基础	年级： 2020级	上机实践成绩：
指导教师： 高明	**姓名**： 杨舜	**学号**： 10205501415
上机实践名称： EM算法		**上机实践日期**：2022.10.10
上机实践编号：	**组号**：	**上机实践时间**：2022.10.10

一. 实验目的

了解EM算法的构建过程以及利用python代码实现，应用EM算法解决简单的实际问题

二. 实验任务

利用客户购买历史和购物偏好的数据，采用高斯混合模型（GMM）来预测哪些类型的客户更有可能购买新产品。

三. 实验过程

1. 实验假设
   本次实验中我们将已知变量定义为*x*，将未知标签定义为*y*，并做了两个假设：先验分布*p(y)是二项式的，每个集群中的p(x|y)是高斯分布。即对于用户信息，我们认为用户的类别分为2类且分布满足二项式分布，不同类别的用户的特征信息为二维信息x_1,x_2,*且满足二维高斯分布
2. 实验数据介绍
   在文件/data/unlabeled.csv,/data/labeled.csv中分别存放了1000个不同用户的数据，分为未进行类别标注的用户信息（用于无监督学习）以及进行了类别标注的用户信息（用于半监督学习），每个用户有2个特诊信息*x_1,x_2,(x_1,x_2)满足二维高斯分布对于标注分类的数据中还有y,y*满足二项式分布取值(0,1),为类别信息
3. 数据读入
   客户个人偏好未知，x1、x2表示客户的 2 个特征（假设客户数据服从高斯分布），我们的目标是预测客户是否喜欢该产品（y=1）或不喜欢（y=0）。

x1	x2
-0.187	0.747
2.824	0.377
0.713	0.766
1.635	1.846
2.711	1.996

```
data_unlabeled = pd.read_csv("data/unlabeled.csv")
x_unlabeled = data_unlabeled[["x1", "x2"]].values
```

4. 随机初始化参数
   对于无监督GMM，所有参数都是随机初始化的。为简单起见，我们使用 θ 来表示以下等式中的所有参数。
   $\theta := \phi, \mu_0, \mu_1, \Sigma_0, \Sigma_1$

```python
def get_random_psd(n):#生成协方差矩阵
    x = np.random.normal(0, 1, size=(n, n))
    return np.dot(x, x.transpose())

def initialize_random_params():
    params = {'phi': np.random.uniform(0, 1),
              'mu0': np.random.normal(0, 1, size=(2,)),
              'mu1': np.random.normal(0, 1, size=(2,)),
              'sigma0': get_random_psd(2),
              'sigma1': get_random_psd(2)}
    return params
```

5. E步

将初始化的参数传递给 `e_step()` 并计算每个数据点的Q: `Q(y=1|x)` 和 `Q(y=0|x)` 以及我们将在 M 步中最大化的平均对数似然。（Q由猜测的参数 θ 计算。）

E step:

for each $i \in \{1, \dots, n\}$: set

$$Q(y^i = 1|x^i) := p(y^i = 1|x^i; \theta) = \frac{p(x^i|y^i = 1; \theta)p(y^i = 1; \theta)}{\sum_{y^i \in (0,1)} p(x^i|y^i; \theta)p(y^i; \theta)}$$

$$Q(y^i = 0|x^i) := p(y^i = 0|x^i; \theta) = \frac{p(x^i|y^i = 0; \theta)p(y^i = 0; \theta)}{\sum_{y^i \in (0,1)} p(x^i|y^i; \theta)p(y^i; \theta)}$$

```python
def e_step(self, x):
    # *****START OF YOUR CODE (DO NOT DELETE/MODIFY THIS LINE)*****

    pdf = super().get_pdf(x)
    ## pdf[:,0] -- p(x|y=0;theta)p(y=0;theta)
    ## pdf[:,1] -- p(x|y=1;theta)p(y=1;theta)
    # print("\npdf ",pdf)

    pdf = np.array(pdf)
    # print("\npdf.shape ",pdf.shape)

    Q_y0 = pdf[:,0]/(pdf[:,0]+pdf[:,1])  ## 记录每一个样本中y的取值为0的概率
    # print("\nQ_y1 ",Q_y1)
    # print("\nQ_y1.shape ",Q_y0.shape)
    # print(np.max(Q_y0))

    Q_y1 = 1 - Q_y0                      ## 记录每一个样本中y的取值为1的概率

    logLH = np.mean(np.log(pdf.sum(axis=1)))  ## 计算极大似然估计

    pass

    return Q_y0, Q_y1, logLH

    # *****END OF YOUR CODE (DO NOT DELETE/MODIFY THIS LINE)*****
```

其中e_step实现了利用当前记录的迭代的参数估计来估计**y**取值为1或者0的概率，并计算此时极大似然对数的均值

5. M步

$$\phi = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 1|x^i)}{n}$$

$$\mu_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} x^i Q(y^i = 0|x^i)}{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 0|x^i)}$$

$$\mu_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} x^i Q(y^i = 1|x^i)}{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 1|x^i)}$$

$$\Sigma_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 0|x^i)(x^i - \mu_0)(x^i - \mu_0)^T}{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 0|x^i)}$$

$$\Sigma_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 1|x^i)(x^i - \mu_1)(x^i - \mu_1)^T}{\sum_{i=1}^{n} Q(y^i = 1|x^i)}$$

利用之前实现的e_step()得到了最大化的似然期望以及y的先验概率，利用这些更新其他参数的先验概率，然后利用梯度上升来解决优化问题找到参数估计值

```python
    def m_step(self, x, Q_y0, Q_y1):
        # *****START OF YOUR CODE (DO NOT DELETE/MODIFY THIS LINE)*****

        # Q_y0, Q_y1 = self.e_step(x)

        N = x.shape[0] ## 样本数量

        phi = np.sum(Q_y1)/N

        # print("phi ",phi)
        # print("real phi ",self.params['phi'])

        Q_y0_re = Q_y0.reshape(N,1)
        Q_y1_re = Q_y1.reshape(N,1)
        mu0 = np.sum(Q_y0_re*x,axis = 0)/np.sum(Q_y0)
        mu1 = np.sum(Q_y1_re*x,axis = 0)/np.sum(Q_y1)

        # print("mu0 ",mu0)
        # print("real mu0 ",self.params['mu0'])
        # print("mu1 ",mu1)
        # print("real mu1 ",self.params['mu1'])

        sqrt_q_y0 = np.sqrt(Q_y0).reshape(N,1)
        sqrt_q_y1 = np.sqrt(Q_y1).reshape(N,1)
        x_mu0 = x - mu0
        x_mu1 = x - mu1
        x_mu0 = x_mu0*sqrt_q_y0
        x_mu1 = x_mu1*sqrt_q_y1
        x_mu0_T = x_mu0.T
        x_mu1_T = x_mu1.T
        sigma0 = x_mu0_T.dot(x_mu0)/np.sum(Q_y0)
        sigma1 = x_mu1_T.dot(x_mu1)/np.sum(Q_y1)
        # print(sigma0)
        # print(sigma1)
        # print( ((x[0,:]-mu0).T).dot(x[0,:]-mu0))
        # for i in range(N):


        pass

        # *****END OF YOUR CODE (DO NOT DELETE/MODIFY THIS LINE)*****
        self.params = {'phi': phi, 'mu0': mu0, 'mu1': mu1, 'sigma0': sigma0, 'sigma1': sigma1}
        return self.params
```

6. 迭代更新
   在E步中利用现在估计的参数迭代得到极大似然均值并获得新的Q,在M步中利用E步中得到的新的Q和似然均值根据梯度上升获取新的参数估计。EM算法所做的是重复运行以上步骤直至平均对数似然收敛。在本题实验使用数据中假设迭代更新30次。

```
    def run_em(self,x):
        # *****START OF YOUR CODE (DO NOT DELETE/MODIFY THIS LINE)*****
        echo_times = 30
        Q_y0 = Q_y1 = []
        predict_proba = []
        for _ in range(echo_times):
            Q_y0, Q_y1, logLH = self.e_step(x)
            self.logLHs.append(logLH)
            self.m_step(x,Q_y0,Q_y1)
            # self.visualization(x,'runing')
        # print(self.params)
        predict_proba.append(Q_y0)
        predict_proba.append(Q_y1)
        predict_proba = np.array(predict_proba)
        predict_proba = predict_proba.T
        # print("predict_proba.shape ",predict_proba.shape)
        # print(Q_y0)
        # plt.figure(figsize=(8,5))
        # x_axis = [i for i in range(echo_times)]
        # plt.plot(x_axis, logLHs, label="line L", color='lime', alpha=0.8, linewidth=2, linestyle="--")
        # plt.show()

        mask = Q_y1 > 0.5 ## 将多次迭代后y取1的概率大于0.5的样本预测为类别1
        forecast = 1*mask

        print("\tphi: {}\n \
            \tmu_0: {}\n \
            \tmu_1: {}\n \
            \tsigma0: {}\n \
            \tsigma1: {}\n".format(self.params['phi'],self.params['mu0'],self.params['mu1'],self.params[
        pass
        return forecast, predict_proba

        # *****END OF YOUR CODE (DO NOT DELETE/MODIFY THIS LINE)*****
```

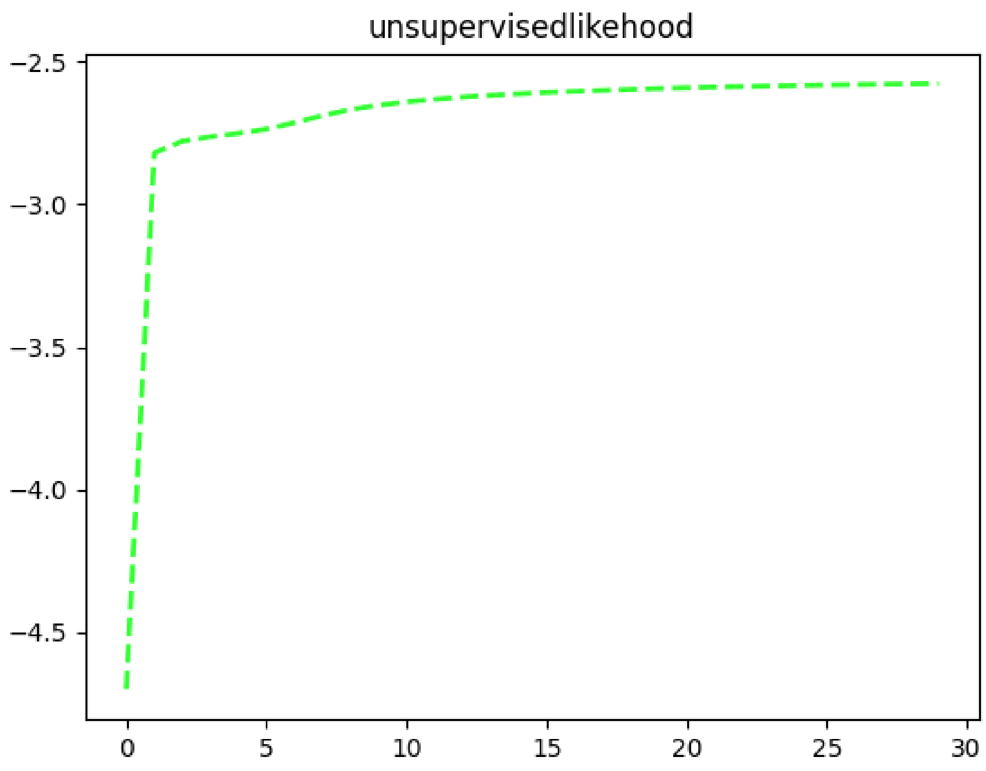
其中run_em得到对于样本类别的预测以及参数y的后验概率
样本的预测利用收敛后的y的后验概率在实现，将取值为0/1的概率大于0.5的样本分类为类别0/1

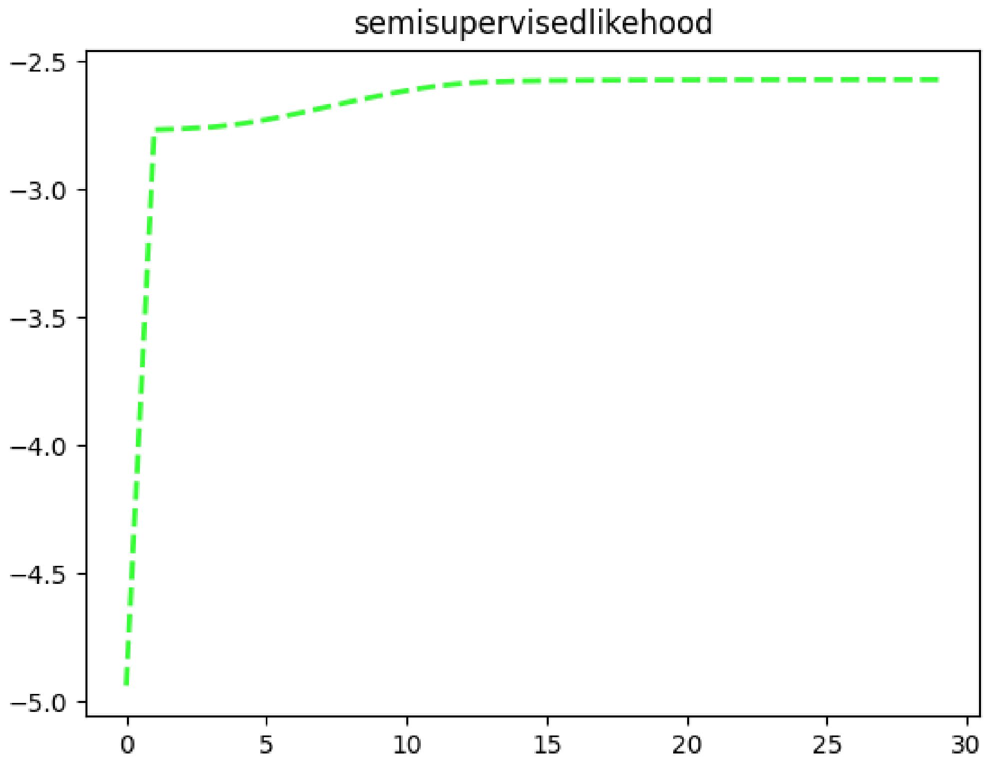
7. 实现可视化
   直接在EM类中实现可视化接口，对于求解过程中极大似然函数对数的变化、以及对应分类轮廓的变化进行记录

```
def visualization(self,X,name):
    print("visualization")
    # ax1.figure(figsize=(8,5))
    x_axis = [i for i in range(len(self.logLHs))]
    plt.plot(x_axis, self.logLHs, label="line L", color='lime', alpha=0.8, linewidth=2, linestyle="-
    plt.title(name+"likehood")
    plt.show()

    # def plot_clusters(X, Mu, Var, Mu_true=None, Var_true=None):
    colors = ['b', 'r', 'g']
    n_clusters = 2

    # plt.figure(figsize=(8, 5))
    plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=5,c = colors[2])
    ax = plt.gca()
    for i in range(n_clusters):
        Var = self.params['sigma'+str(i)]
        plot_args = {'fc': 'None', 'lw': 2, 'edgecolor': colors[i], 'ls': ':'}
        ellipse = Ellipse(self.params['mu'+str(i)], 5 * Var[0][0], 4 * Var[1][1], **plot_args)
        ax.add_patch(ellipse)
    plt.title(name)
    plt.show()

    return
```

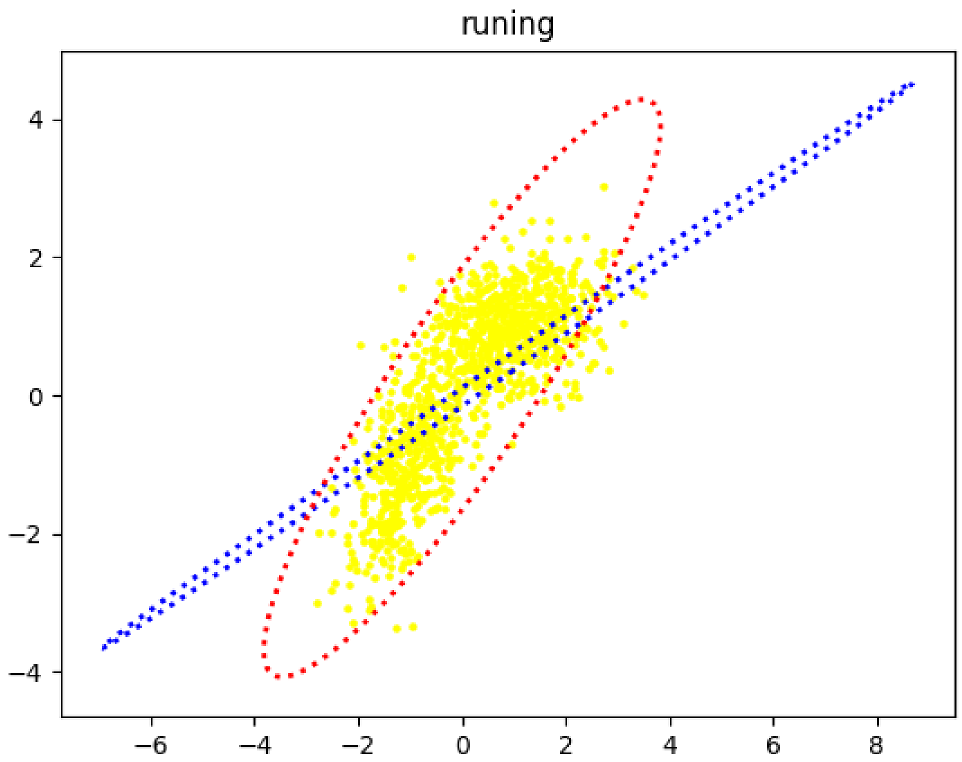
四. 实验分析

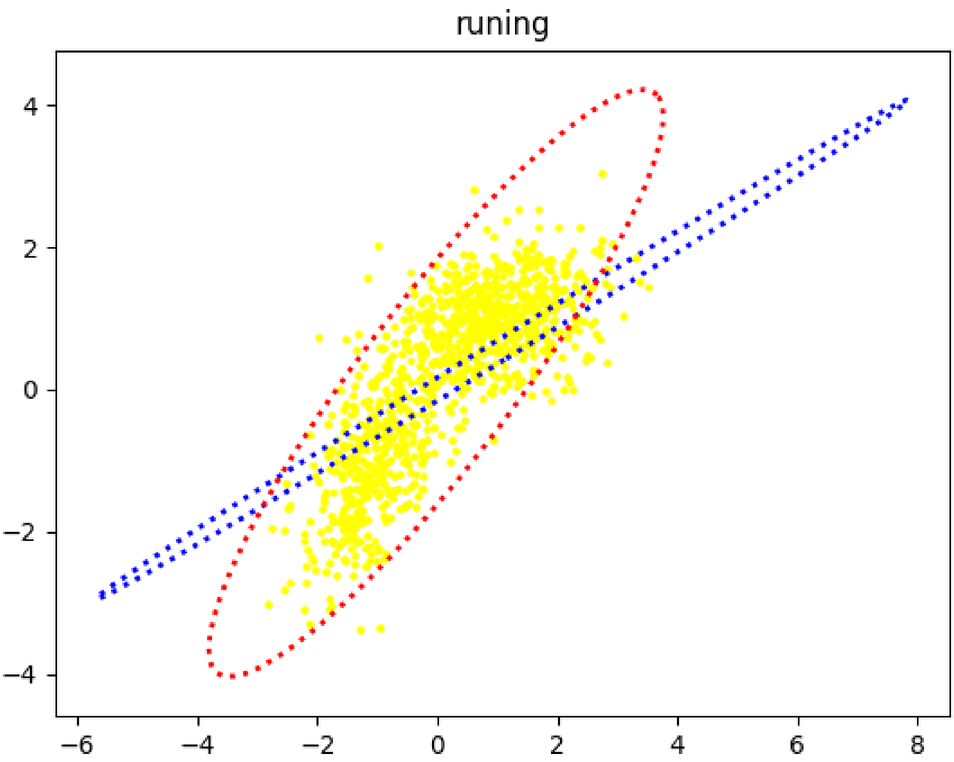
循环迭代30次，在此过程中极大似然函数对数的值的变化如下图：

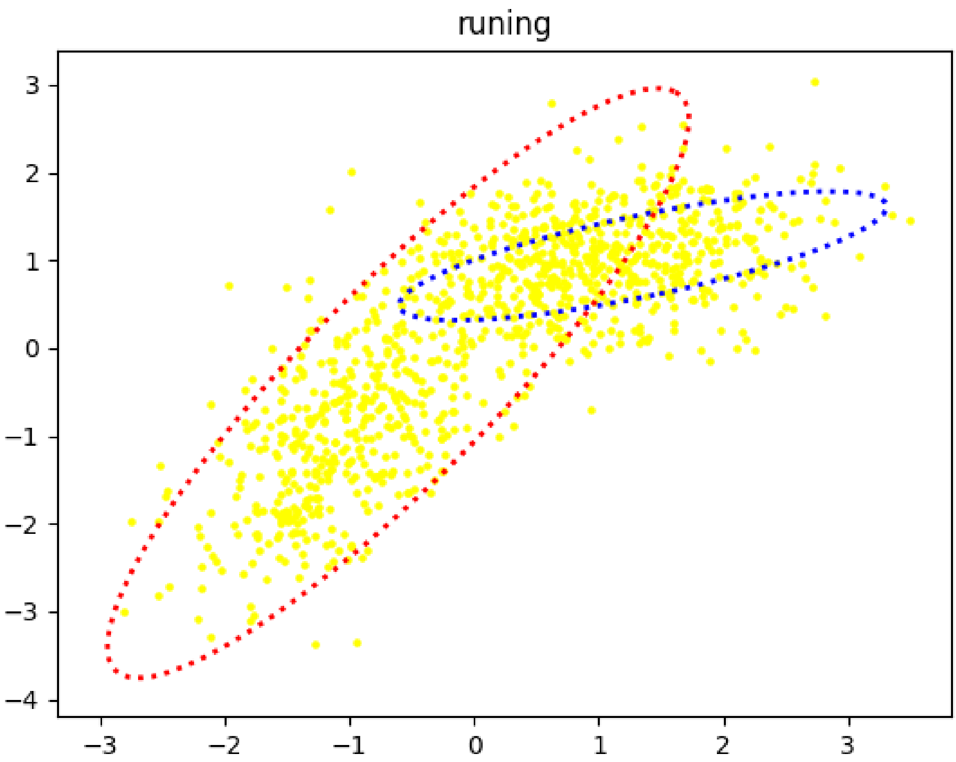


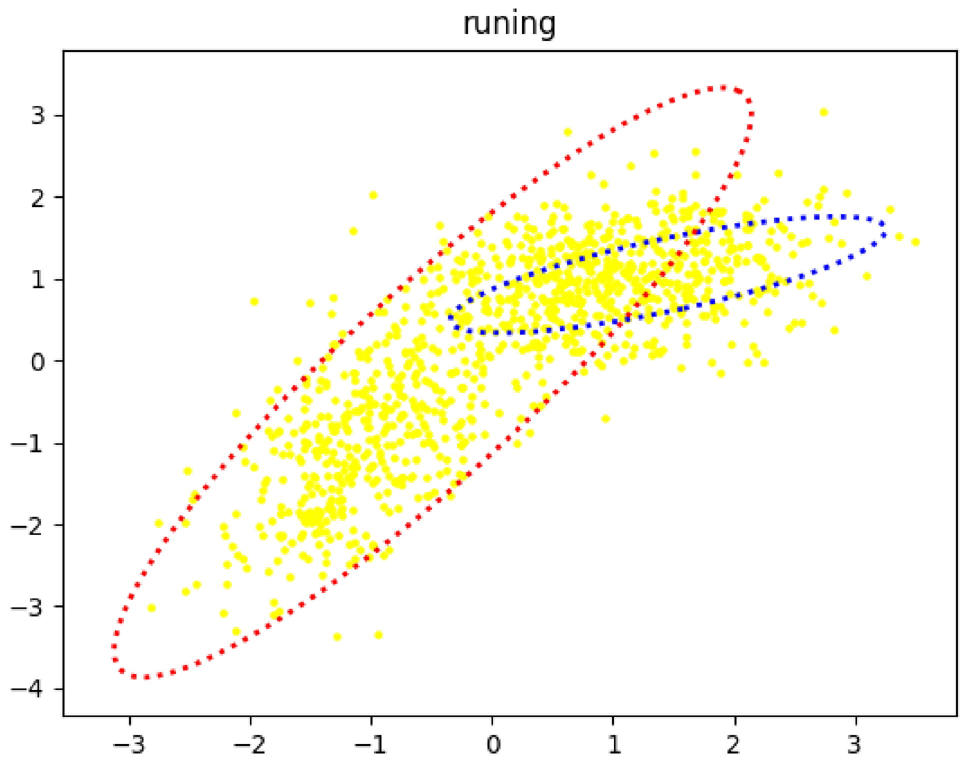


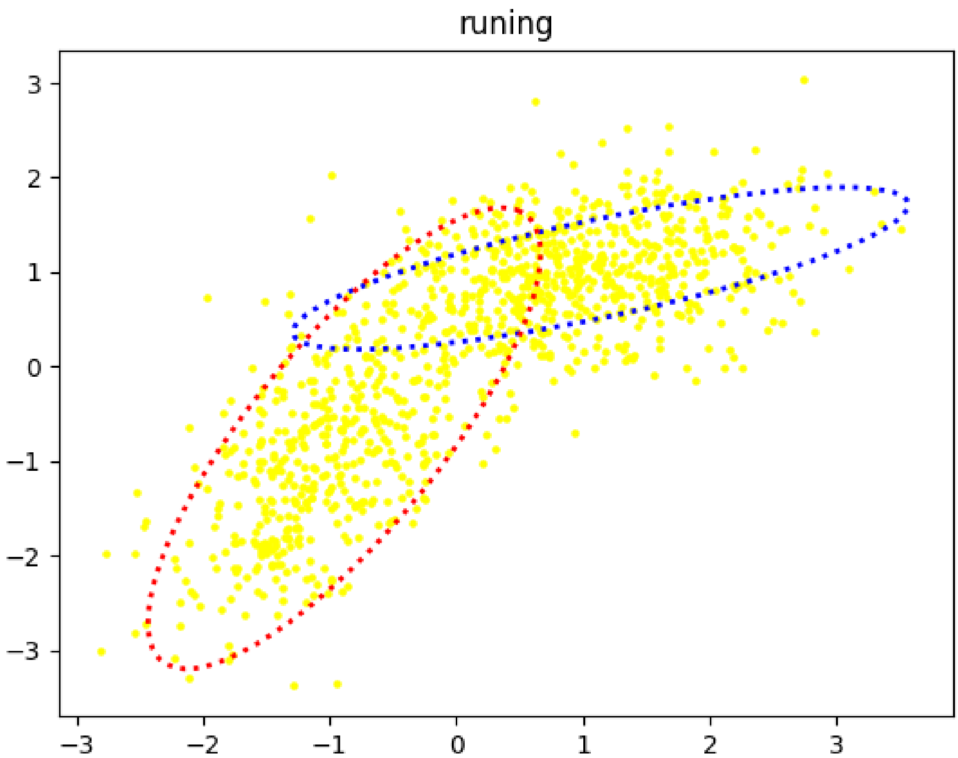
在循环迭代的过程中对于两类样本的分类边界（以半监督为例,以此时迭代得到的参数mu为圆心，sigma方差为椭圆的长轴和短轴做类别边界）的变化情况如下图所示

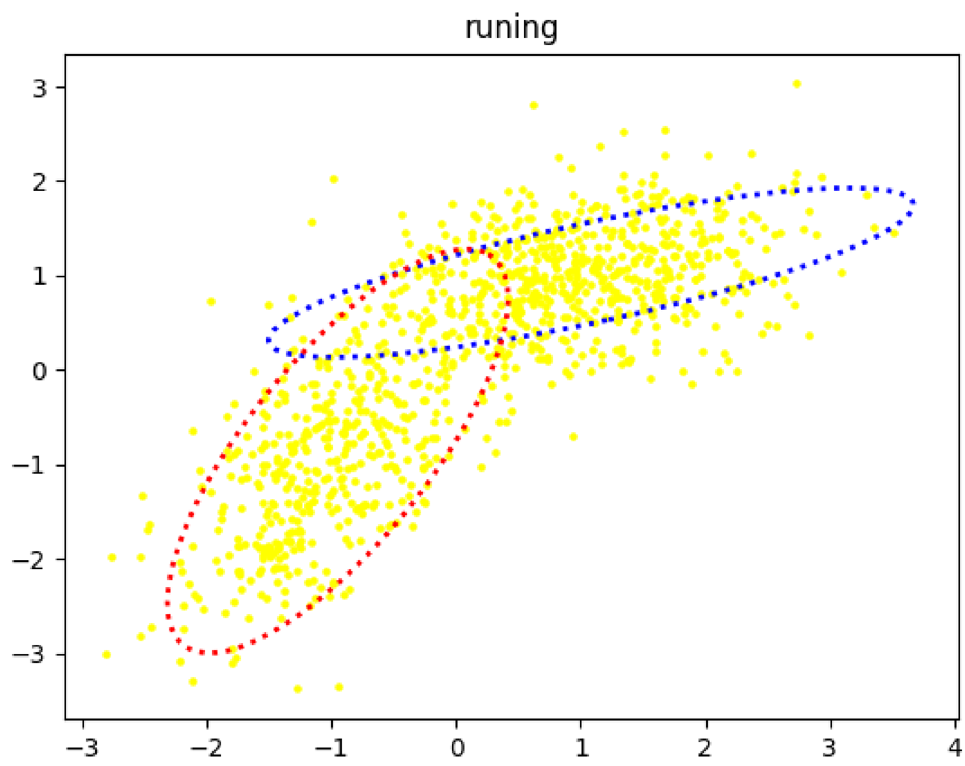



runing
4
2
0
−2
−4
−6
−4
−2
0
2
4
6
8

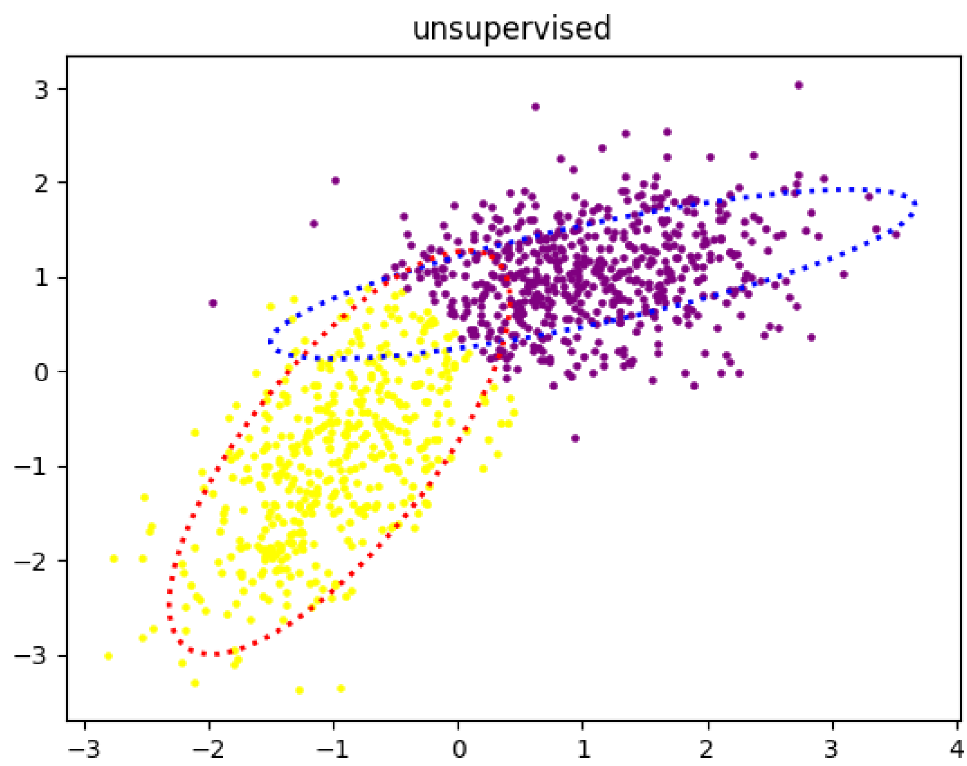

runing
3
2
1
0
−1
−2
−3
−4
−3
−2
−1
0
1
2
3

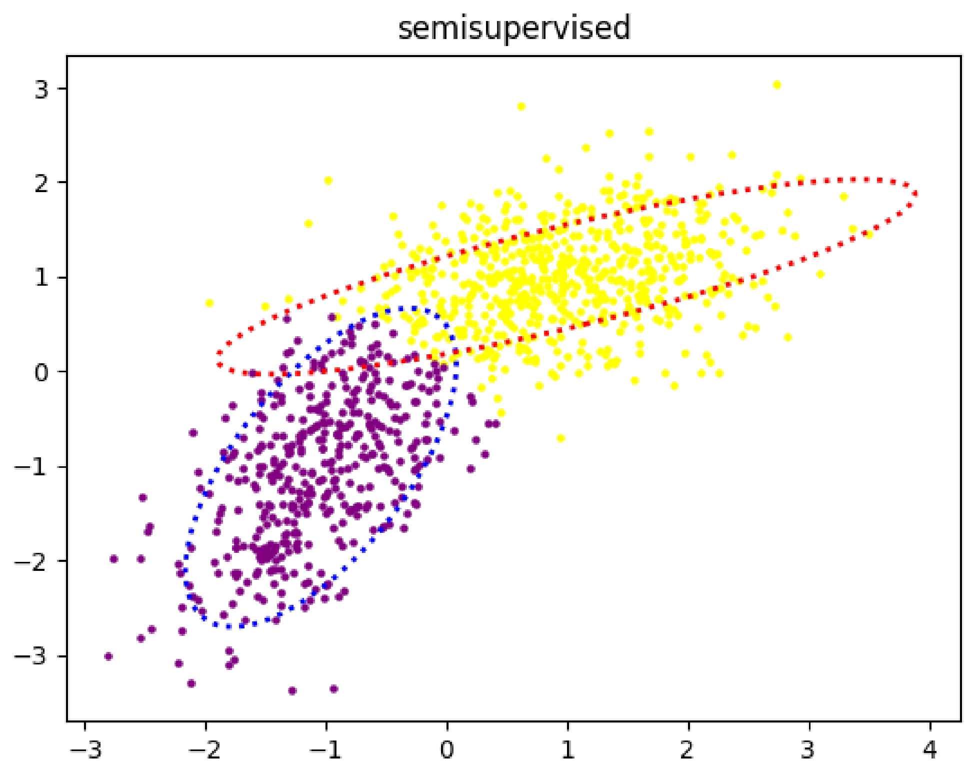

runing
3
2
1
0
−1
−2
−3
−4
−3
−2
−1
0
1
2
3


runing
3
2
1
0
−1
−2
−3
−3
−2
−1
0
1
2
3



迭代完成后得到的分类边界如下图





最后比较sklearn函数包有如下结果

```
0 1 0 1 1 1 1 1 1 1 1 0 1 1 1 1 0 1 1 1 0 1 1 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0
1 0 1 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 1 0 1 1 1 1 1 1 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 0 1 1 1 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 1 1 1 0 0 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 1 1 0 0 1 1 1 1 0 0
1 0 1 0 1 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 1 1
0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 1 1 1 1 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 1 0 0 1 1 1 0 1 0 0 1
0]

99.6% of forecasts matched.
```

结果基本一致。

五. 总结

- EM算法是一种优化迭代策略，最适合数据集不完全的情况， 常用来预测高斯混合模型的参数，隐式马尔科夫，该算法分为E步（期望步）和M布（极大步）。基本思想是：先根据已经观测的数据，估计出模型的参数，然后使用这些参数，估计缺失的数据，将缺失的数据和已经观测的数据再重新估计参数，如此反复，直到收敛。
- 在此次的实验中我们可以发现在EM算法的迭代过程中GMM模型的极大似然对数期望会在较少的迭代次数后就趋于平稳，并在此后的迭代过程中无明显变化
- 在迭代的过程中我们发现与初始化的参数无关，在有限次数的迭代之后样本分布参数会趋于收敛
- 在多次迭代之后，对于样本分类的后验概率的估计会会趋于0和1，即对于样本预测为类别1的后验概率会趋于0，1，因此对于样本类别的估计只需要基于上述的后验概率，以0.5为划分点来区分样本类别为0/1
- 高斯混合模型建模过程为多个高斯分布线性相加；不同的高斯分布组成视为模型中的隐变量。
- EM算法适合用于求解含有隐变量的生成模型，适合GMM的参数求解。