第9章 EM算法极其推广

1 EM算法的引入

EM方法

- 记号

  观察数据(observerd data, incomplete data) Y

  隐藏数据(unobserved data, latent variable) Z

  完全数据(complete-data) (Y,Z)

  模型参数θ【模型为某个参数θ未知的概率分布】

- 给定观测数据Y，其概率分布是$P(Y \mid \theta)$，Y和Z的联合概率分布$P(Y,Z \mid \theta)$
  - 不完全数据Y的似然函数$P(Y \mid \theta)$，对数似然函数$L(\theta) = \log P(Y \mid \theta)$
  - 完全数据的对数似然函数是$\log P(Y,Z \mid \theta)$
  - 【注】 $P(Y \mid \theta)$可用于描述出现观测值的可能性
- 极大化$\log P(Y \mid \theta)$
  - 挑战：包含了有未观测数据并有包含和(或积分)的对数

EM算法

EM算法通过迭代方式，对期望$L(\theta)=\log P(Y \mid \theta)$极大似然估计。

【注意】$P(Y \mid \theta)$可用于描述出现观测值的可能性，极大似然寻到使得出现观测值可能性最大的参数

每次迭代：E步求期望；M步求极大化【单调递增，且有上界=>收敛】

【算法9.1(EM算法)】

输入：观测变量数据Y，隐变量数据Z，联合分布$P(Y,Z \mid \theta)$，条件分布$P(Z \mid Y,\theta)$

输出：模型参数θ

EM算法

1)选择参数的初值$\theta^{(0)}$

2)E步

记$\theta^{(i)}$为第i次迭代参数θ的估计值，在第$i+1$次迭代的E步，计算

$$Q(\theta,\theta^{(i)})=E_Z[\log P(Y,Z\mid\theta)\mid Y,\theta^{(i)}]=\sum_Z\log P(Y,Z\mid\theta)P(Z\mid Y,\theta^{(i)})$$

【注】基于Z 的完全数据的似然函数的期望【对看不到的数据取平均】。即以Z的分布作为权重；$P(Z\mid Y,\theta^{(i)})$在给定观测数据Y和当前的参数估计$\theta^{(i)}$下，估算出来的隐变量Z的条件概率分布。Y是由Z决定的

3)M步

求使$Q(\theta,\theta^{(i)})$极大化的θ。确定第$i+1$次迭代的参数的估计值$\theta^{(i+1)}$

$$\theta^{(i+1)}=\arg\max_{\theta}Q(\theta,\theta^{(i)})$$

4)重复第2)步和第3)步，直到收敛

三硬币模型

例 9.1 (三硬币模型)

假设有3枚硬币$\mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{C}$，它们正面朝上的概率分别是$\pi, p$和$q$。进行如下掷硬币试验：

先掷硬币 A, 根据其结果选出硬币B或硬币C。A正面选硬币B, A 反面选硬币C;

掷硬币的结果, 出现正面记作1 , 出现反面记作 0 ;

独立地重复n次试验 ($n = 5$), 观测结果如下:

$$1,1,0,1,0,0,1,0,1,1$$

假设只能观测到掷硬币的结果, 不能观测掷硬币的过程。

如何估计三硬币正面出现的概率？即三硬币模型的参数π, p和q。

三硬币模型

A, B, C 正面出现的概率分别是π, p和q； A正面选硬币B, A 反面选硬币C

【解】y是观测变量，观测值为1或0；z表示未观测到的掷硬币A的结果，是隐变量(不可观测)；

$\theta = (\pi, p, q)$模型参数。实验一次/轮(先抛一次硬币A，然后B或者C)，得到y概率为：

$$P(y \mid \theta) = \sum_z P(y, z \mid \theta) = \sum_z P(z \mid \theta) P(y \mid z, \theta)$$
$$= \pi p^y (1-p)^{1-y} + (1-\pi) q^y (1-q)^{1-y}$$

【注】对$P(y \mid z, \theta)$讨论

$z = 1$时，A正面，$P(z \mid \theta) = \pi$；第二次选硬币B。$P(y \mid z, \theta)$对y分情况

- $y = 1$，$P(y \mid z, \theta) = p = p^y (1-p)^{1-y}$;
- $y = 0$，$P(y \mid z, \theta) = 1 - p = p^y (1-p)^{1-y}$；

总之$P(y \mid z, \theta) = p^y (1-p)^{1-y}$；即， $z = 1$时， $P(z \mid \theta) P(y \mid z, \theta) = \pi p^y (1-p)^{1-y}$

同理，$z = 0$，A反面，$P(z \mid \theta) = 1 - \pi$；第二次选硬币C，$P(y \mid z, \theta) = q^y (1-q)^{1-y}$

$z = 0$时，$(z \mid \theta) P(y \mid z, \theta) = (1-\pi) q^y (1-q)^{1-y}$

三硬币模型

观测数据$Y=(Y_1,Y_2,\cdots,Y_n)^{\mathrm{T}}$，未观测数据$Z=(Z_1,Z_2,\cdots,Z_n)^{\mathrm{T}}$，观测数据的似然函数

$$P(Y\mid\theta)=\sum_Z P(Z\mid\theta)P(Y\mid Z,\theta)$$

即

$$P(Y\mid\theta)=\prod_{j=1}^{n}\left[\pi p^{y_j}(1-p)^{1-y_j}+(1-\pi)q^{y_j}(1-q)^{1-y_j}\right]$$

模型参数$\theta=(\pi,p,q)$的极大似然估计，即

$$\hat{\theta}=\arg\max_{\theta}\log P(Y\mid\theta)$$

此问题没有解析解，只能迭代求解。EM算法为此类问题的一种迭代算法

EM方法 – E步

初值：$\theta^{(0)}=\left(\pi^{(0)},p^{(0)},q^{(0)}\right)$， A, B, C正面出现的概率分别是$\pi,p,q$

第i步：$\theta^{(i)}=\left(\pi^{(i)},p^{(i)},q^{(i)}\right)$

EM算法第i + 1次迭代：

E步：给定参数$\theta^{(i)}$下，对观测数据y_j，其结果来自掷硬币B的概率$\mu_j^{(i+1)}$

【估算隐变量Z的状态，出现B占出现硬币B以及硬币C的总和的比例】

【E步估算观测值相关的期望，此处根据当前参数估计观测值的（平均的）状态】

$$\mu_j^{(i+1)}=\frac{\pi^{(i)}\left(p^{(i)}\right)^{y_j}\left(1-p^{(i)}\right)^{1-y_j}}{\pi^{(i)}\left(p^{(i)}\right)^{y_j}\left(1-p^{(i)}\right)^{1-y_j}+\left(1-\pi^{(i)}\right)\left(q^{(i)}\right)^{y_j}\left(1-q^{(i)}\right)^{1-y_j}}$$

- 【注】
  - 来自掷硬币B：$P(z\mid\theta)P(y\mid z,\theta)=\pi p^y(1-p)^{1-y}$；
  - 来自掷硬币C：$P(z\mid\theta)P(y\mid z,\theta)=(1-\pi)q^y(1-q)^{1-y}$

EM方法 – M步

初值：$\theta^{(0)}=\left(\pi^{(0)},p^{(0)},q^{(0)}\right)$， A,B,C正面出现的概率分别是π,p,q

第i步：$\theta^{(i)}=\left(\pi^{(i)},p^{(i)},q^{(i)}\right)$

EM算法第i + 1次迭代：

M步： 估算$\theta^{(i+1)}=\left(\pi^{(i+1)},p^{(i+1)},q^{(i+1)}\right)$

$$\pi^{(i+1)}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mu_j^{(i+1)},\quad p^{(i+1)}=\frac{\sum_{j=1}^{n}\mu_j^{(i+1)}y_j}{\sum_{j=1}^{n}\mu_j^{(i+1)}},\quad q^{(i+1)}=\frac{\sum_{j=1}^{n}\left(1-\mu_j^{(i+1)}\right)y_j}{\sum_{j=1}^{n}\left(1-\mu_j^{(i+1)}\right)}$$

- 【注】：古典概率计算
  - A正面概率$\pi^{(i+1)}$：出现正面的次数($\sum_{j=1}^{n}\mu_j^{(i+1)}$)/总次数;
  - B正面的概率：出现掷硬币B的情形($\sum_{j=1}^{n}\mu_j^{(i+1)}$)，其中结果为正面($\sum_{j=1}^{n}\mu_j^{(i+1)}y_j$)
  - C正面的概率：出现掷硬币C的情形($\sum_{j=1}^{n}\left(1-\mu_j^{(i+1)}\right)$)，其中结果为正面($\sum_{j=1}^{n}\left(1-\mu_j^{(i+1)}\right)y_j$)

EM方法

- 记号

  观察数据(observerd data, incomplete data) Y

  隐藏数据(unobserved data, latent variable) Z

  完全数据(complete-data) (Y,Z)

  模型参数θ

- 给定观测数据Y，其概率分布是$P(Y\mid\theta)$，Y和Z的联合概率分布$P(Y,Z\mid\theta)$
  - 不完全数据Y的似然函数$P(Y\mid\theta)$，对数似然函数$L(\theta)=\log P(Y\mid\theta)$
  - 完全数据的对数似然函数是$\log P(Y,Z\mid\theta)$
- 极大化$\log P(Y\mid\theta)$
  - 挑战：包含了有未观测数据并有包含和(或积分)的对数

EM算法

EM算法通过迭代方式，对$L(\theta)=\log P(Y\mid\theta)$极大似然估计。

每次迭代：E步求期望；M步求极大化【单调递增，且有上界=>收敛】

【算法9.1(EM算法)】

输入：观测变量数据Y，隐变量数据Z，联合分布$P(Y,Z\mid\theta)$，条件分布$P(Z\mid Y,\theta)$

输出：模型参数θ

1)选择参数的初值$\theta^{(0)}$

2)E步：记$\theta^{(i)}$为第i次迭代参数θ的估计值，在第$i+1$次迭代的E步，计算

$$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)=E_Z\left[\log P(Y,Z\mid\theta)\mid Y,\theta^{(i)}\right]=\sum_Z\log P(Y,Z\mid\theta)P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)$$

【注】基于Z的完全数据的似然函数的期望。即以Z的分布作为权重；$P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)$在给定观测数据$Y$和当前的参数估计$\theta^{(i)}$下，估算出来的隐变量$Z$的条件概率分布。$Y$是由$Z$决定的

3)M步：求使$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$极大化的$\theta$。确定第$i+1$次迭代的参数的估计值$\theta^{(i+1)}$

$$\theta^{(i+1)}=\arg\max_\theta Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$$

4)重复第2)步和第3)步，直到收敛

Q函数定义

【定义9.1(Q函数)】 完全数据的对数似然函数$\log P(Y,Z\mid\theta)$关于在给定观测数据Y和当前参数$\theta^{(i)}$下对未观测数据Z的条件概率分布$P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)$的期望称为$Q$函数，即

$$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)=E_Z\left[\log P(Y,Z\mid\theta)\mid Y,\theta^{(i)}\right]$$

【说明】步骤1)参数的初值。可以任意选择，但EM算法对初值敏感

【注】 $Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)=E_Z\left[\log P(Y,Z\mid\theta)\mid Y,\theta^{(i)}\right]=\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log P(Y,Z\mid\theta)$

步骤2)E步求$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$

Q函数式中Z是未观测数据，Y是观测数据。$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$的第1个变元表示要极大化的参数，第2个变元为参数的当前估计值。每次迭代实际在求Q函数及其极大化。

步骤3)M步求$Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$的极大化。得到$\theta^{(i+1)}$，完成一次迭代$\theta^{(i)}\to\theta^{(i+1)}$。

【注】可以证明每次迭代使似然函数增大或达到局部极值。

步骤4)给出停止迭代的条件。一般地，对较小的正数$\varepsilon_1,\varepsilon_2$，若满足

$$\|\theta^{(i+1)}-\theta^{(i)}\|<\varepsilon_1 \quad \text{或} \|Q\left(\theta^{(i+1)},\theta^{(i)}\right)-Q\left(\theta^{(i)},\theta^{(i)}\right)\|<\varepsilon_2$$

则停止迭代。

EM算法的导出

通过近似求解观测数据的对数似然函数的极大化问题来导出EM算法。

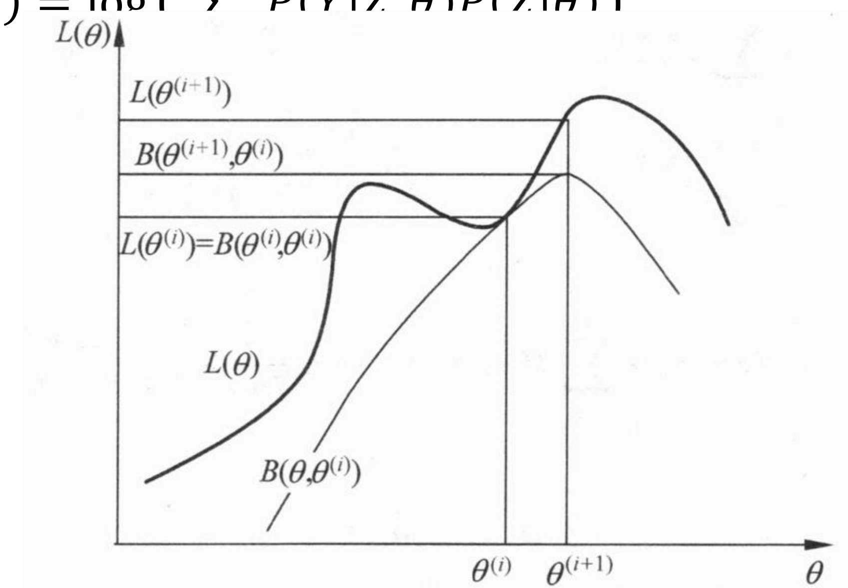
对一个含有隐变量的概率模型，目标是**极大化观测数据 (不完全数据)Y关于参数θ的似然函数：**

$$L(\theta) = \log P(Y|\theta) = \log \sum_Z P(Y,Z|\theta) = \log\left(\sum P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)\right)$$

难点：包含未观测数据的计算

EM通过迭代逐步近似极大化$L(\theta)$

$L\left(\theta^{(i)}\right)$：第$i$次$\theta^{(i)}$



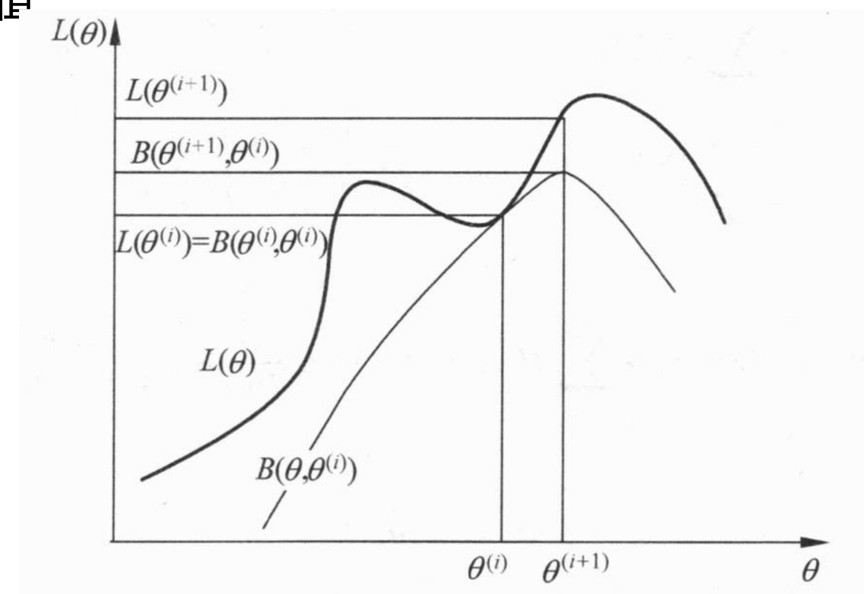
EM算法的导出

$L(\theta)$：新估计值，期望$L(\theta)$越来越大

迭代计算策略【单调递增，且有上界】

从$L\left(\theta^{(\mathrm{i})}\right)$出发，估算相关的下界$B\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$极大值

得到新的$L\left(\theta^{(i+1)}\right)$



EM算法的导出

二者的差： $L(\theta)-L\left(\theta^{(i)}\right)=\log\left(\sum_Z P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)\right)-\log P\left(Y\middle|\theta^{(i)}\right)$

利用Jason不等式估计下界：

$$L(\theta)-L\left(\theta^{(i)}\right)=\log\left(\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)}\right)-\log P\left(Y\mid\theta^{(i)}\right)$$

$$\geqslant\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)}-\log P\left(Y\mid\theta^{(i)}\right)$$

$$=\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)}-\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log P\left(Y\mid\theta^{(i)}\right)$$

$$=\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log\frac{P(Y\mid Z,\theta)P(Z\mid\theta)}{P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)P\left(Y\mid\theta^{(i)}\right)}$$

整理上式， $\mathrm{L}(\theta)\geqslant L\left(\theta^{(\mathrm{i})}\right)+\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log\frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P\left(Z|Y,\theta^{(i)}\right)P\left(Y|\theta^{(i)}\right)}$

记 $B\left(\theta,\theta^{(i)}\right)\equiv L\left(\theta^{(\mathrm{i})}\right)+\sum_Z P\left(Z\mid Y,\theta^{(i)}\right)\log\frac{P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)}{P\left(Z|Y,\theta^{(i)}\right)P\left(Y|\theta^{(i)}\right)}$，

则 $L(\theta)\geqslant B\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$，令 $\theta=\theta^{(i)}$，有 $B\left(\theta^{(i)},\theta^{(i)}\right)=L\left(\theta^{(i)}\right)$

EM算法的解释

因此，任何可以使$B\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$增大的$\theta$,也可以使$L(\theta)$增大。为了使$L(\theta)$有尽可能大的增长，选择

$$\theta^{(i+1)}=\arg\max_{\theta}B\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$$

EM算法的解释

现在求$\theta^{(i+1)}$的表达式。省去与θ无关的项

$$\theta^{(i+1)} = \arg = \max_{\theta}\left(L(\theta^{(i)}) + \sum_Z \frac{P\left(Z|Y,\theta^{(i)}\right)\log\left(P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)\right)}{P\left(Z|Y,\theta^{(i)}\right)P\left(Y|\theta^{(i)}\right)}\right)$$

$$= \arg\max_{\theta}\left(\log\left(\sum_Z P\left(Y|Z,\theta^{(i)}\right)P\left(Z|\theta^{(i)}\right)\right) + \sum_Z \frac{P\left(Z|Y,\theta^{(i)}\right)\log\left(P(Y|Z,\theta)P(Z|\theta)\right)}{P\left(Z|Y,\theta^{(i)}\right)P\left(Y|\theta^{(i)}\right)}\right)$$

$$= \arg\max_{\theta}\left(\sum_Z P\left(Z \mid Y,\theta^{(i)}\right)\log\left(P(Y \mid Z,\theta)P(Z \mid \theta)\right)\right)$$

$$= \arg\max_{\theta}\left(\sum_Z P\left(Z \mid Y,\theta^{(i)}\right)\log P(Y,Z \mid \theta)\right)$$

$$= \arg\max_{\theta} Q\left(\theta,\theta^{(i)}\right)$$

等价于EM算法的一次迭代, 即求Q函数及其极大化

EM在无监督学习中的应用

- 监督学习是由训练数据$\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_N,y_N)\}$学习条件概率分布$P(Y \mid X)$或决策函数$Y=f(X)$作为模型。训练数据中的每个样本点由输入和输出对组成

- 训练数据只有输入没有对应的输出$\{(x_1,.),(x_2,.),\dots(x_N,.)\}$，从这样的数据学习模型称为无监督学习问题

- EM算法可以用于生成模型的无监督学习。生成模型由联合概率分布$P(X,Y)$表示，可以认为无监督学习训练数据是联合概率分布产生的数据。X为观测数据，Y为未观测数据

2 EM算法的收敛性

EM算法的收敛性

- EM算法
  - 提供一种近似计算含有隐变量概率模型的极大似然估计的方法
  - 最大优点：简单性和普适性
- 问题：
  - EM算法得到的估计序列是否收敛？
  - 如果收敛，是否是全局极大值或局部极大值？

EM算法的收敛性

定理 9.1 设 $P(Y \mid \theta)$为观测数据的似然函数，$\theta^{(i)}(i=1,2,\cdots)$为EM算法得到的参数估计序列，$P\left(Y \mid \theta^{(i)}\right)(i=1,2,\cdots)$为对应的似然函数序列，则$P\left(Y \mid \theta^{(i)}\right)$是单调递增的，即

$$P\left(Y \mid \theta^{(i+1)}\right) \geqslant P\left(Y \mid \theta^{(i)}\right)$$

【注】单调性

定理9.2 设$L(\theta)=\log P(Y \mid \theta)$为观测数据的对数似然函数，$\theta^{(i)}(i=1,2,\cdots)$为EM算法得到的参数估计序列，$L\left(\theta^{(i)}\right)(i=1,2,\cdots)$ 为对应的对数似然函数序列。

1)如果$P(Y \mid \theta)$有上界，则$L\left(\theta^{(i)}\right)=\log P\left(Y \mid \theta^{(i)}\right)$收敛到某一值$L^*$;

2)在函数$Q(\theta, \theta')$与$L(\theta)$满足一定条件下，由EM算法得到的参数估计序列$\theta^{(i)}$的收敛值θ^*是$L(\theta)$的稳定点。

【注】1)单调递增且有上界，收敛

3 EM算法在高斯混合模型学习中的应用

高斯混合模型

【定义9.2(高斯混合模型)】高斯混合模型是指具有如下形式的概率分布模型：

$$P(y\mid\theta)=\sum_{k=1}^{K}\alpha_k\phi(y\mid\theta_k)$$

其中，$\alpha_k\geqslant 0$, $\sum_{k=1}^{K}\alpha_k=1$， $\phi(y\mid\theta_k)$是高斯分布密度，$\theta_k=(\mu_k,\sigma_k^2)$,

$$\phi(y\mid\theta_k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(y-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)$$

称为第k个分模型。

完全数据的对数似然函数

假设观测数据$y_1, y_2, \cdots, y_N$由高斯混合模型生成

$$P(y \mid \theta) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \phi(y \mid \theta_k)$$

其中,$\theta = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_K; \theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_K)$。用EM算法估计高斯混合模型的参数$\theta$

【注意】混合不是多个模型加权平均，而是每次以概率选择多个模型之一，何整体效果混合

1) 明确隐变量，写出完全数据的对数似然函数

观测数据$y_j, j = 1,2,\cdots,N$

【依概率α_k选择第k个高斯分布，然后依第k个模型的概率分布$\phi(y \mid \theta_k)$生成观测数据y_j】

隐变量γ_{jk}：y_j来自第k个分模型

$$\gamma_{jk} = \begin{cases} 1, & \text{第}j\text{个观测来自第}k\text{个分模型} \\ 0, & \text{否则} \end{cases} \quad j = 1,2,\cdots,N; \quad k = 1,2,\cdots,K$$

则第j个的完全数据为$(y_j, \gamma_{j1}, \gamma_{j2}, \cdots, \gamma_{jK})$, $\quad j = 1,2,\cdots,N$

完全数据的对数似然函数

完全数据的似然函数：

【注】根据γ_{jk}定义，$P(y_j,\gamma_{j1},\gamma_{j2},\cdots,\gamma_{jK} \mid \theta) = \prod_{k=1}^{K}[\alpha_k\phi(y_j \mid \theta_k)]^{\gamma_{jk}}$（只有某一项$\gamma_{jk}$非0，$\alpha_k\phi(y_j \mid \theta_k)$）

$$
\begin{aligned}
P(y,\gamma \mid \theta) &= \prod_{j=1}^{N} P(y_j,\gamma_{j1},\gamma_{j2},\cdots,\gamma_{jK} \mid \theta) = \prod_{j=1}^{N}\prod_{k=1}^{K}[\alpha_k\phi(y_j \mid \theta_k)]^{\gamma_{jk}} \\
&= \prod_{k=1}^{K}\prod_{j=1}^{N}[\alpha_k\phi(y_j \mid \theta_k)]^{\gamma_{jk}} \\
&= \prod_{k=1}^{K}\alpha_k^{n_k}\prod_{j=1}^{N}[\phi(y_j \mid \theta_k)]^{\gamma_{jk}} \\
&= \prod_{k=1}^{K}\alpha_k^{n_k}\prod_{j=1}^{N}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k}\exp\left(-\frac{(y_j-\mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)\right]^{\gamma_{jk}}
\end{aligned}
$$

其中，属于模型k的样本数$n_k = \sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}$，$\sum_{k=1}^{K}n_k = N$，那么

$$
\log P(y,\gamma \mid \theta) = \sum_{k=1}^{K}\left\{n_k\log\alpha_k + \sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) - \log\sigma_k - \frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\}
$$

E step

2) E step：确定Q函数。【注】$n_k=\sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}$, $E[cX]=cE[X]$, 根据概率定义$E[\gamma_{jk}]=P(\gamma_{jk}=1)$

$$Q(\theta,\theta^{(i)})=E\left[\log P(y,\gamma\mid\theta)\mid y,\theta^{(i)}\right]$$

$$=E\left\{\sum_{k=1}^{K}\left\{n_k\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}\gamma_{jk}\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\}\right\}$$

$$=\sum_{k=1}^{K}\left\{\sum_{j=1}^{N}(E[\gamma_{jk}])\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}(E[\gamma_{jk}])\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\}$$

$$\hat{\gamma}_{jk}=E[\gamma_{jk}|y,\theta]=P(\gamma_{jk}=1\mid y,\theta)=\frac{P(\gamma_{jk}=1,y_j\mid\theta)}{\sum_{k=1}^{K}P(\gamma_{jk}=1,y_j\mid\theta)}$$

$$=\frac{P(y_j\mid\gamma_{jk}=1,\theta)P(\gamma_{jk}=1\mid\theta)}{\sum_{k=1}^{K}P(y_j\mid\gamma_{jk}=1,\theta)P(\gamma_{jk}=1\mid\theta)\ (\gamma_{jk}\mid y,\theta)}$$

$\hat{\gamma}_{jk}$是在当前模型参数下第j个观测数据来自第k个分模型的概率，称为分模型k对观测数据y_j的响应度

将$\hat{\gamma}_{jk}=E[\gamma_{jk}]$及$n_k=\sum_{j=1}^{N}E[\gamma_{jk}]$代入式$Q(\theta,\theta^{(i)})$,得

$$Q(\theta,\theta^{(i)})=\sum_{k=1}^{K}\left\{n_k\log\alpha_k+\sum_{j=1}^{N}\hat{\gamma}_{jk}\left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)-\log\sigma_k-\frac{1}{2\sigma_k^2}(y_j-\mu_k)^2\right]\right\}$$

M step

3) 确定EM算法的M步

$$\theta^{(i+1)} = \arg\max_{\theta} Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right)$$

其中$\theta^{(i+1)} = (\hat{\mu}_k, \hat{\sigma}_k^2, \hat{\alpha}_k,\ k = 1, \cdots, K)$。将$Q\left(\theta, \theta^{(i)}\right)$分别对$\mu_k, \sigma_k^2$求偏导数并令其为0，求$\hat{\alpha}_k$是在$\sum_{k=1}^{K} \alpha_k = 1$条件下求偏导并令其为0，得到

$$\hat{\mu}_k = \frac{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} y_j}{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk}}, \quad k = 1,2, \cdots, K$$

$$\hat{\sigma}_k^2 = \frac{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} \left(y_j - \mu_k\right)^2}{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk}}, \quad k = 1,2, \cdots, K$$

$$\hat{\alpha}_k, = \frac{n_k}{N} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk}}{N}, \quad k = 1,2, \cdots, K$$

重复2)-3)，直到对数似然函数值不再有明显的变化为止

高斯混合模型参数估计的EM算法

【算法9.2(高斯混合模型参数估计的EM算法)】

输入：观测数据$y_1, y_2, \cdots, y_N$,高斯混合模型;

输出：高斯混合模型参数。

1)取参数的初始值开始迭代;

2)E步：依据当前模型参数，计算分模型k对观测数据y_j的响应度

$$\hat{\gamma}_{jk} = \frac{\alpha_k \phi(y_j \mid \theta_k)}{\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \phi(y_j \mid \theta_k)}, \quad j = 1,2,\cdots,N; \quad k = 1,2,\cdots,K$$

3)M步：计算新一轮迭代的模型参数

$$\hat{\mu}_k = \frac{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} y_j}{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk}}, \quad k = 1,2,\cdots,K$$

$$\hat{\sigma}_k^2 = \frac{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk} (y_j - \mu_k)^2}{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk}}, \quad k = 1,2,\cdots,K$$

$$\hat{\alpha}_k = \frac{\sum_{j=1}^{N} \hat{\gamma}_{jk}}{N}, \quad k = 1,2,\cdots,K$$

4)重复第(2)步和第(3)步，直到收敛。

4 EM算法的推广

EM算法的推广

- EM 算法还可以解释为F函数(F function) 的极大极大算(maximization algorithm)，基于这个解释有若干变形与推广，如广义期望极大(generalized expectation maximization, GEM) 算法