

第9章 EM算法及其推广

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 $P(Y | \theta)$ ， Y 和 Z 的联合概率分布 $P(Y, Z | \theta)$

➤ 不完全数据 Y 的似然函数 $P(Y | \theta)$ ，对数似然函数 $L(\theta) = \log P(Y | \theta)$

➤ 完全数据的对数似然函数是 $\log P(Y, Z | \theta)$

➤ 【注】似然函数 $P(Y | \theta)$ 描述参数 θ 的条件下，出现观测值 Y 的合理性（可能性）

➤ 极大化 $\log P(Y, Z | \theta)$

➤ 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 $L(\theta) = \log P(Y, Z | \theta)$ 极大似然估计。

【注意】 $P(Y, Z | \theta)$ 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

【核心：迭代方式，过程单调递增，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 $P(Y, Z | \theta)$ ，条件分布 $P(Z | Y, \theta)$

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函数

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

【注】基于隐含变量 Z 分布（ $P(Z | Y, \theta^{(i)})$ ），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）的完全数据的对数似然函数（ $\log P(Y, Z | \theta)$ ）的期望。

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A, B, C, 它们正面朝上的概率分别是 π, 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：

$$\begin{aligned}P(y | \theta) &= \sum_z P(y, z | \theta) = \sum_z P(z | \theta) P(y | z, \theta) \\&= \pi p^y (1 - p)^{1-y} + (1 - \pi) q^y (1 - q)^{1-y}\end{aligned}$$

【注】 对 $P(y | z, \theta)$ 讨论

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

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

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

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

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

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

三硬币模型

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

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

即

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

模型参数 $\theta = (\pi, p, q)$ 的极大似然估计，即

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

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

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

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】

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

➤ 【注】

➤ 来自掷硬币B: $P(z | \theta)P(y | z, \theta) = \pi p^y (1 - p)^{1-y}$;

➤ 来自掷硬币C: $P(z | \theta)P(y | z, \theta) = (1 - \pi)q^y (1 - q)^{1-y}$

EM方法 – M步

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

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

EM算法第 $i + 1$ 次迭代:

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

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

➤ 【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 $(\sum_{j=1}^n (1 - \mu_j^{(i+1)}))$, 其中结果为正面 $(\sum_{j=1}^n (1 - \mu_j^{(i+1)}) y_j)$

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 $P(Y | \theta)$ ， Y 和 Z 的联合概率分布 $P(Y, Z | \theta)$

➤ 不完全数据 Y 的似然函数 $P(Y | \theta)$ ，对数似然函数 $L(\theta) = \log P(Y | \theta)$

➤ 完全数据的对数似然函数是 $\log P(Y, Z | \theta)$

➤ 极大化 $\log P(Y | \theta)$

➤ 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 $L(\theta) = \log P(Y | \theta)$ 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 $P(Y, Z | \theta)$ ，条件分布 $P(Z | Y, \theta)$

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

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

【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； $P(Z | Y, \theta^{(i)})$ 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

Q函数定义

【定义9.1(Q函数)】 完全数据的对数似然函数 $\log P(Y, Z | \theta)$ 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 $P(Z | Y, \theta^{(i)})$ 的期望称为 Q 函数，即

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

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

步骤2)E步求 $Q(\theta, \theta^{(i)})$

Q 函数式中 Z 是未观测数据， Y 是观测数据。 $Q(\theta, \theta^{(i)})$ 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 $Q(\theta, \theta^{(i)})$ 的极大化。得到 $\theta^{(i+1)}$ ，完成一次迭代 $\theta^{(i)} \rightarrow \theta^{(i+1)}$ 。

【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

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

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。

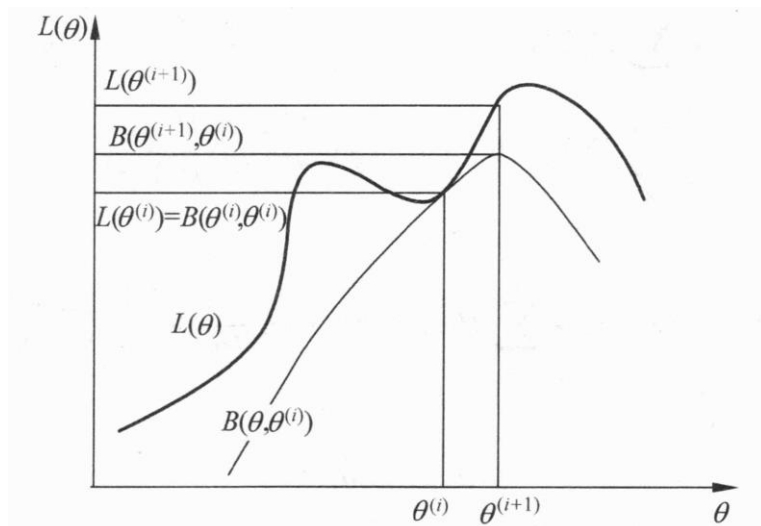
对于一个含有隐变量的概率模型，目标是极大化观测数据 (不完全数据) Y 关于参数 θ 的似然函数：

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

难点：包含未观测数据的计算

EM通过迭代逐步近似极大化 $L(\theta)$

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



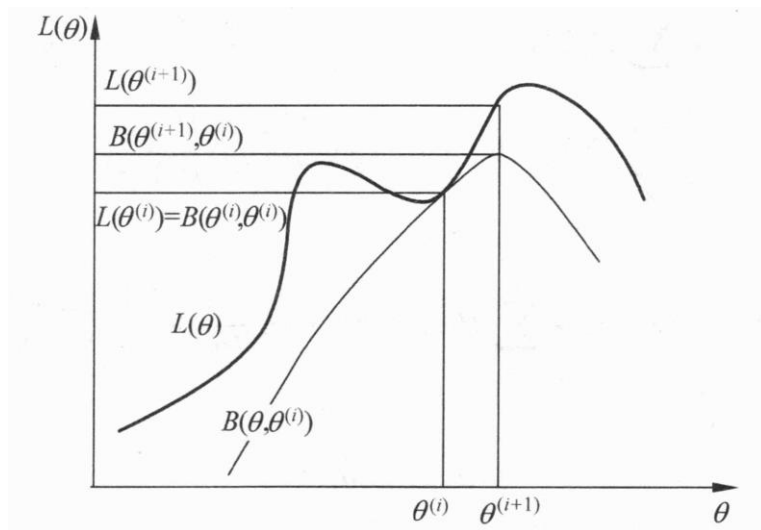
EM算法的导出

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

得到新的 $L(\theta^{(i+1)})$



EM算法的导出

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

利用Jason不等式估计下界：

$$\begin{aligned} L(\theta) - L(\theta^{(i)}) &= \log\left(\sum_Z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \frac{P(Y|Z, \theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y, \theta^{(i)})}\right) - \log P(Y|\theta^{(i)}) \\ &\geq \sum_Z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y|Z, \theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y, \theta^{(i)})} - \log P(Y|\theta^{(i)}) \\ &= \sum_Z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y|Z, \theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y, \theta^{(i)})} - \sum_Z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \log P(Y|\theta^{(i)}) \\ &= \sum_Z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y|Z, \theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y, \theta^{(i)})P(Y|\theta^{(i)})} \end{aligned}$$

整理上式， $L(\theta) \geq L(\theta^{(i)}) + \sum_Z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \log \frac{P(Y|Z, \theta)P(Z|\theta)}{P(Z|Y, \theta^{(i)})P(Y|\theta^{(i)})}$

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

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

EM算法的解释

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

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

EM算法的解释

现在求 $\theta^{(i+1)}$ 的表达式。省去与 θ 无关的项

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

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 $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)\}$ 学习条件概率分布 $P(Y | X)$ 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 $P(Y | \theta)$ 为观测数据的似然函数, $\theta^{(i)} (i = 1, 2, \dots)$ 为EM算法得到的参数估计序列, $P(Y | \theta^{(i)}) (i = 1, 2, \dots)$ 为对应的似然函数序列, 则 $P(Y | \theta^{(i)})$ 是单调递增

$$P(Y | \theta^{(i+1)}) \geq P(Y | \theta^{(i)})$$

【注】单调性

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

- 1) 如果 $P(Y | \theta)$ 有上界, 则 $L(\theta^{(i)}) = \log P(Y | \theta^{(i)})$ 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：

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

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

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

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 $y_1, y_2, \dots, y_N$ 由高斯混合模型生成

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

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

【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 $y_j, j = 1, 2, \dots, N$

【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 $\phi(y | \theta_k)$ 生成观测数据 y_j 】

隐变量 γ_{jk} ： y_j 来自第 k 个分模型

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

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

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， $P(y_j, \gamma_{j1}, \gamma_{j2}, \dots, \gamma_{jK} | \theta) = \prod_{k=1}^K [\alpha_k \phi(y_j | \theta_k)]^{\gamma_{jk}}$ （只有某一项 γ_{jk} 非0， $\alpha_k \phi(y_j | \theta_k)$ ）

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

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

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

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 $E[\gamma_{jk}] = P(\gamma_{jk} = 1)$

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

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

$\hat{\gamma}_{jk}$ 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

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

其中 $\theta^{(i+1)} = (\hat{\mu}_k, \hat{\sigma}_k^2, \hat{\alpha}_k, k = 1, \dots, K)$ 。将 $Q(\theta, \theta^{(i)})$ 分别对 μ_k, σ_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

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

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

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

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 $y_1, y_2, \dots, y_N$, 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

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

3)M步：计算新一轮迭代的模型参数

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_k &= \frac{\sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} y_j}{\sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk}}, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ \hat{\sigma}_k^2 &= \frac{\sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk} (y_j - \mu_k)^2}{\sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk}}, \quad k = 1, 2, \dots, K \\ \hat{\alpha}_k &= \frac{\sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{jk}}{N}, \quad k = 1, 2, \dots, K\end{aligned}$$

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