指数族分布

指数族是一类分布,包括高斯分布、伯努利分布、二项分布、泊松分布、Beta 分布、Dirichlet 分布、Gamma 分布等一系列分布。指数族分布可以写为统一的形式:

$$p(x|\eta) = h(x)\exp(\eta^T \phi(x) - A(\eta)) = \frac{1}{\exp(A(\eta))} h(x)\exp(\eta^T \phi(x))$$
 (1)

其中, η 是参数向量, $A(\eta)$ 是对数配分函数(归一化因子)。

在这个式子中, $\phi(x)$ 叫做充分统计量,包含样本集合所有的信息,例如高斯分布中的均值和方差。充分统计量在在线学习中有应用,对于一个数据集,只需要记录样本的充分统计量即可。

对于一个模型分布假设(似然),那么我们在求解中,常常需要寻找一个共轭先验,使得先验与后验的形式相同,例如选取似然是二项分布,可取先验是 Beta 分布,那么后验也是 Beta 分布。指数族分布常常具有共轭的性质,于是我们在模型选择以及推断具有很大的便利。

共轭先验的性质便于计算,同时,指数族分布满足最大熵的思想(无信息先验),也就是说对于经验分布利用最大熵原理导出的分布就是指数族分布。

观察到指数族分布的表达式类似线性模型,事实上,指数族分布很自然地导出广义线性模型:

$$y = f(w^T x)$$
 (2)
 $y|x \sim ExpFamily$

在更复杂的概率图模型中,例如在无向图模型中如受限玻尔兹曼机中,指数族分布也扮演着重要作用。 在推断的算法中,例如变分推断中,指数族分布也会大大简化计算。

一维高斯分布

一维高斯分布可以写成:

$$p(x|\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$
 (3)

将这个式子改写:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-\frac{1}{2\sigma^2} (x^2 - 2\mu x + \mu^2))
= \exp(\log(2\pi\sigma^2)^{-1/2}) \exp(-\frac{1}{2\sigma^2} (-2\mu - 1) \begin{pmatrix} x \\ x^2 \end{pmatrix} - \frac{\mu^2}{2\sigma^2})$$
(4)

所以:

$$\eta = \begin{pmatrix} \frac{\mu}{\sigma^2} \\ -\frac{1}{2\sigma^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}$$
(5)

于是 $A(\eta)$:

$$A(\eta) = -\frac{\eta_1^2}{4\eta_2} + \frac{1}{2}\log(-\frac{\pi}{\eta_2}) \tag{6}$$

充分统计量和对数配分函数的关系

对概率密度函数求积分:

$$\exp(A(\eta)) = \int h(x) \exp(\eta^T \phi(x)) dx \tag{7}$$

两边对参数求导:

$$\exp(A(\eta))A'(\eta) = \int h(x) \exp(\eta^T \phi(x))\phi(x)dx$$

$$\Longrightarrow A'(\eta) = \mathbb{E}_{p(x|\eta)}[\phi(x)]$$
(8)

类似的:

$$A''(\eta) = Var_{p(x|\eta)}[\phi(x)] \tag{9}$$

由于方差为正,于是 $A(\eta)$ 一定是凸函数。

充分统计量和极大似然估计

对于独立全同采样得到的数据集 $\mathcal{D} = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ 。

$$egin{aligned} \eta_{MLE} &= argmax \sum_{i=1}^{N} \log p(x_i | \eta) \ &= argmax \sum_{i=1}^{N} (\eta^T \phi(x_i) - A(\eta)) \ &\Longrightarrow A'(\eta_{MLE}) = rac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \phi(x_i) \end{aligned}$$
 (10)

由此可以看到,为了估算参数,只需要知道充分统计量就可以了。

最大熵

信息熵记为:

$$Entropy = \int -p(x)\log(p(x))dx \tag{11}$$

一般地,对于完全随机的变量(等可能),信息熵最大。

我们的假设为最大熵原则,假设数据是离散分布的,k 个特征的概率分别为 p_k ,最大熵原理可以表述为:

$$\max\{H(p)\} = \min\{\sum_{k=1}^{K} p_k \log p_k\} \ s. \ t. \ \sum_{k=1}^{K} p_k = 1$$
 (12)

利用 Lagrange 乘子法:

$$L(p,\lambda) = \sum_{k=1}^{K} p_k \log p_k + \lambda (1 - \sum_{k=1}^{K} p_k)$$
 (13)

于是可得:

$$p_1 = p_2 = \dots = p_K = \frac{1}{K} \tag{14}$$

因此等可能的情况熵最大。

一个数据集 \mathcal{D} ,在这个数据集上的经验分布为 $\hat{p}(x)=\frac{Count(x)}{N}$,实际不可能满足所有的经验概率相同,于是在上面的最大熵原理中还需要加入这个经验分布的约束。

对任意一个函数, 经验分布的经验期望可以求得为:

$$\mathbb{E}_{\hat{p}}\left[f(x)\right] = \Delta \tag{15}$$

于是:

$$\max\{H(p)\} = \min\{\sum_{k=1}^{N} p_k \log p_k\} \ s. \ t. \ \sum_{k=1}^{N} p_k = 1, \mathbb{E}_p[f(x)] = \Delta$$
 (16)

Lagrange 函数为:

$$L(p, \lambda_0, \lambda) = \sum_{k=1}^{N} p_k \log p_k + \lambda_0 (1 - \sum_{k=1}^{N} p_k) + \lambda^T (\Delta - \mathbb{E}_p[f(x)])$$
 (17)

求导得到:

$$\frac{\partial}{\partial p(x)} L = \sum_{k=1}^{N} (\log p(x) + 1) - \sum_{k=1}^{N} \lambda_0 - \sum_{k=1}^{N} \lambda^T f(x)$$

$$\Longrightarrow \sum_{k=1}^{N} \log p(x) + 1 - \lambda_0 - \lambda^T f(x) = 0$$
(18)

由于数据集是任意的,对数据集求和也意味着求和项里面的每一项都是0:

$$p(x) = \exp(\lambda^T f(x) + \lambda_0 - 1) \tag{19}$$

这就是指数族分布。