模式识别第三章概率密度函数的估计

郭园方北京航空航天大学计算机学院

贝叶斯决策的实际使用

* 计算贝叶斯后验概率进行决策如何实现?

$$P(\omega_i \middle| x) = \frac{p(x \middle| \omega_i) P(\omega_i)}{\sum_{j=1}^2 p(x \middle| \omega_j) P(\omega_j)}$$

*实现中有问题吗?能直接计算吗?

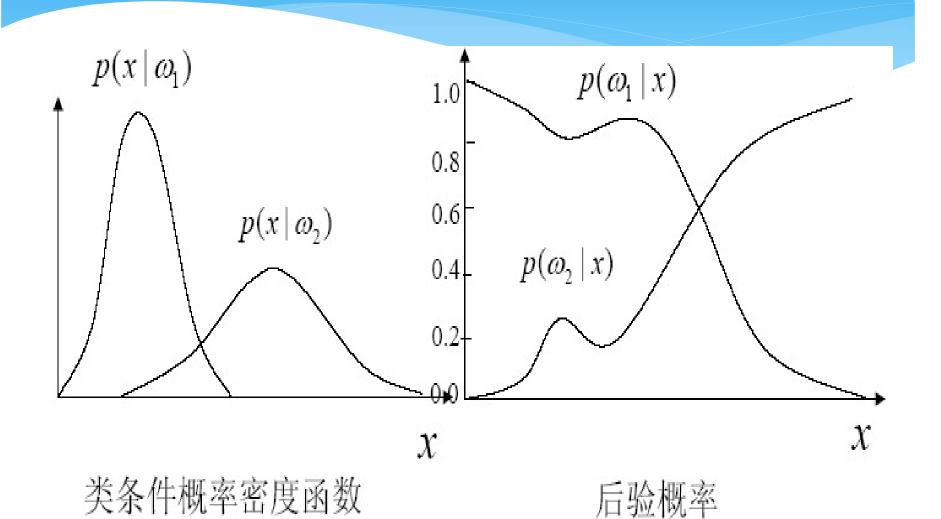
贝叶斯决策的实际使用

* 以第二章医生诊病为例:

$$P(\omega_1), P(\omega_2)$$

 $P(x|\omega_1), P(x|\omega_2)$

- * 先验概率未知,医生可大致估计
- * 类条件概率密度呢?
- * 只能通过已知的一些数据去估计



- * 利用样本集估计 $P(\omega_i)$ 和 $p(x|\omega_i)$
- * 得到 $\hat{P}(\omega_i)$ 和 $\hat{p}(x|\omega_i)$
- *然后将估计量带入贝叶斯决策规则中
- * 得到决策结果

- * 首先通过训练样本估计概率密度函数
 - * 先验概率估计-训练样本分布情况/根据领域知识认定
 - * 类条件概率密度估计难,本章重点
- * 统计决策进行类别判定
- *注意!与上一章的贝叶斯决策有区别,什么区别?

- *训练样本有限,难以涵盖所有情况!
- *当训练样本无限多,基于样本的两步贝叶斯决策可无限趋近第二章中的理论贝叶斯决策 $3N \to \infty$

$$\widehat{P}(\omega_i) \to P(\omega_i)$$

$$\widehat{p}(x|\omega_i) \to p(x|\omega_i)$$

概率密度估计方法

- * 由训练样本集估计总体概率密度的方法可分为:
 - * 监督参数估计: 样本所属类别及类条件总体概率密度函数形式已知, 表征概率密度函数的某些参数未知。
 - * 非监督参数估计:已知总体概率密度函数形式但未知样本所属类别,要求推断出概率密度函数的某些参数。
 - * 非参数估计:已知样本所属类别,未知总体概率 密度函数的形式,直接推断概率密度函数本身。

参数估计的基本概念

- *统计量:样本中包含着总体的信息,针对不同要求构造出样本的某种函数,这种函数在统计学中称统计量。
- * 参数空间: 假设总体概率密度函数形式已知, 未知分布中的参数 θ , θ 的全部可容许值组成的集合称为参数空间,记为 Θ

参数估计的基本概念

- *点估计:点估计问题就是要构造一个统计量 $d(x_1,x_2,...,x_N)$ 作为参数 θ 的估计 $\hat{\theta}$ 。
- *估计量: $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 被称为 $\boldsymbol{\theta}$ 的估计量。
- *估计值:如果 $x_1^i, x_2^i, ..., x_N^i$ 是属于类别 ω_i 的样本的观察值,代入统计量d就得到对于第i类的 $\widehat{\theta}$ 的具体数值,这一数值被称为 θ 的估计值。

参数估计的基本概念

*区间估计:估计出区间(d₁,d₂)作为θ可能的取值范围,这个区间叫置信区间,这类问题称为区间估计。

概率密度估计的评估

- *如何评估概率密度估计的好坏?
- *单次抽样得到的估计值与真实值的偏差?
- *基于平均和方差进行评估较为公平!
- *常用标准:
 - * 无偏性
 - * 有效性
 - *一致性

概率密度估计的评估

- * 无偏性: θ 的估计量 $\widehat{\theta}(x_1, x_2, ..., x_N)$ 的数学期望是 θ
- * 渐进无偏: N趋于无穷时估计具有无偏性
- *有效性:一种估计比另一种的方差小,此种估计更有效
- * 对于任意正数 ϵ ,有 $\lim_{n\to\infty} P(|\widehat{\theta}_n \theta| > \epsilon) = 0$

则 $\hat{\theta}$ 是 θ 的一致估计

最大似然估计基本假设

- * Maximum Likelihood Estimation.
- * 参数θ是确定(非随机)的而未知的量。
- *按类别把样本集分开, \Re_j 类中的每个样本都是独立地从概率密度为 $\mathbf{p}(x|\omega_j)$ 的总体中独立地抽取出来的-独立同分布。

最大似然估计基本假设

* 类条件概率密度 $\mathbf{p}(x|\omega_j)$ 为已知分布,参数向量未知

$$\mathbf{p}(x|\boldsymbol{\omega}_j) \to \mathbf{p}(x|\boldsymbol{\omega}_j,\boldsymbol{\theta}_j)$$

*假设 \Re_i 中不包含关于 $\theta_j(j \neq i)$ 的信息,即不同类别的参数在函数上是独立的。

最大似然估计似然函数的定义

- *在一类中独立抽取样本集来估计未知参数
- * 假设某类样本集中包含有 \mathbb{N} 个样本 $\Re = \{x_1, x_2, ..., x_N\}$
- *因样本独立抽取,样本出现在样本集中的概率为

$$P(\mathfrak{R}|\boldsymbol{\theta}) = p(x_1, x_2, ..., x_N|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^N p(x_k|\boldsymbol{\theta})$$

最大似然估计似然函数的定义

- * $P(\mathfrak{R}|\theta)$ 也被称为相对于样本集 \mathfrak{R} 的 θ 的似然 函数(likelihood function)
- *似然函数的定义

$$l(\theta) = p(x_1, x_2, ..., x_N | \theta)$$
$$= p(x_1 | \theta) p(x_2 | \theta) ... p(x_N | \theta)$$

最大似然估计似然函数的定义

- *似然函数示例
- *假设N = 1, x为一维,均值为6,方差为1的 正态分布
- *最可能出现的样本 $x_1' = 6$
- * 此时, 似然函数为 $l(\theta) = p(x_1'|6,1) = \max_{x} p(x|6,1)$

最大似然估计量

* 令 $l(\theta)$ 为样本集 \Re 的似然函数 $\Re = \{x_1, x_2, ..., x_N\}$

*如果

 $\widehat{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{d}(\mathfrak{R}) = \boldsymbol{d}(x_1, x_2, \dots, x_N)$

 $\hat{\theta}$ 是参数空间中能使似然函数最大化的 θ 则 $\hat{\theta}$ 是 θ 的最大似然估计量

最大似然估计。最大似然估计的求解

* 假设第i类样本的类条件概率密度:

$$p(x^i|\omega_i) = p(x^i|\omega_i, \theta^i) = p(x^i|\theta^i)$$

- * 属于i类的训练样本为 $X^i = (x_1, x_2, ..., x_N)$
- * 求 θ^i 的最大似然估计即为将 $p(x^i|\theta^i)$ 看成 θ^i 的 函数,求使它最大时 θ^i 的值

最大似然估计最大似然估计的求解

* 由于训练样本独立从总体样本集中抽取的

$$P(X^{i}|\omega_{i},\theta^{i}) = P(X^{i}|\theta^{i}) = \prod_{k=1}^{N} p(x_{k}|\theta^{i})$$

* 对N个训练样本出现概率的乘积取对数:

$$\log \prod_{k=1}^{N} p(x_k|\theta^i) = \sum_{k=1}^{N} \log p(x_k|\theta^i)$$

最大似然估计。最大似然估计的求解

* 对 θ^i 求导,令其等于0

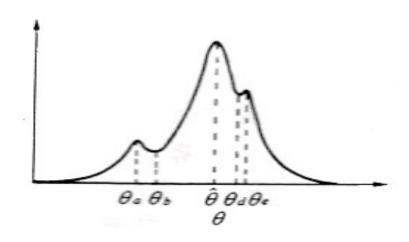
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial \theta_p} \end{bmatrix}_{k=1}^{N} \log P(X_k \mid \theta^i) = 0$$

最大似然估计的求解

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \theta_{1}} \log P(X_{k} | \theta^{i}) = 0 \\ \dots \\ \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \theta_{p}} \log P(X_{k} | \theta^{i}) = 0 \end{cases}$$

最大似然估计最大似然估计的求解

- *利用上式可以求出 θ^i 的估值 $\hat{\theta}$
- * 则 $oldsymbol{ heta}^i = \widehat{oldsymbol{ heta}}$
- *注意:有时上式是多解的
- *例:此图有5个解,只有一个解最大



- *情况1: ∑已知, µ未知,估计µ
- $*P(X^i|\theta^i)$ 服从正态分布
- * 待估计参数为 $\theta^i = \theta_1 = \mu$
- * 求解方程

$$\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \mu} \log p(x_k|\mu) = 0$$

* 正态分布时
$$p(x_k|\mu)$$
 = $-\frac{1}{2}\log[(2\pi)^n|\Sigma|] - \frac{1}{2}(x_k - \mu)^T \Sigma^{-1}(x_k - \mu)$ * 求偏导

* 所以

$$\Sigma^{-1} \sum_{k=1}^{N} (x_k - N\mu) = 0$$

$$\mu = \widehat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} x_k$$

*说明未知均值的最大似然估计正好是训练样本的算术平均

- *情况2:∑, µ均未知
- * 一维时, \mathbf{n} =1对于每个训练样本只有一个特征的简单情况: $\theta_1 = \mu_1, \theta_2 = \sigma_1^2$

$$\therefore \log P(X_k | \theta^i) = -\frac{1}{2} \log 2\pi \theta_2 - \frac{1}{2\theta_2} \left(X_k - \theta_1 \right)^2$$

$$\text{PR} \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \log P(X_k | \theta^i) = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{\theta_2} (X_k - \theta_1) = 0$$

$$\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial \theta_{2}} \log P(X_{k} | \theta^{i}) = \sum_{k=1}^{N} \left[-\frac{1}{2\theta_{2}} + \frac{(X_{k} - \theta_{1})^{2}}{2\theta_{2}^{2}} \right] = 0$$

$$\therefore \hat{\theta}_1 = \hat{\mu}_1 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N X_k$$
 训练样本的算术平均

$$\therefore \hat{\theta}_2 = \hat{\sigma}_1^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(X_k - \hat{\mu} \right)^2 \quad \text{样本方差}$$

*一维的结论:

- * 正态总体均值的最大似然估计即为训练样本的 算术平均
- * 正态总体方差的最大似然估计与样本的方差不同(一个是算术平均,一个是期望值),当N较大的时候,二者的差别不大。
- *注意,这两个也正是人们经常使用的对于均值和方差的估计!

- *多维情况: N个特征
- *与一维时的情况类似
- *估计值:

$$\hat{\theta}_1 = \hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N X_k$$

$$\hat{\theta}_2 = \hat{\Sigma} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left(X_k - \hat{\mu} \right) \left(X_k - \hat{\mu} \right)^T$$

- * 结论:
- * µ的估计即为训练样本的算术平均
- *估计的协方差矩阵是如下矩阵的算数平均

$$\left(X_{k}-\stackrel{\wedge}{\mu}\right)\left(X_{k}-\stackrel{\wedge}{\mu}\right)^{T}$$

- *这两个估计是否为无偏的估计量?
- * 01 为无偏估计量
- $*\theta_2$ 并不是无偏的
- *小作业:无偏的 θ_2 的估计量是什么?

贝叶斯估计和贝叶斯学习

* Bayesian Estimation

- * 贝叶斯估计实质: 贝叶斯决策来决策参数的取值
- *与最大似然估计同为概率密度估计中的主要参数估计方法
- * 结果多数情况下与最大似然估计相同
- * 区别:
 - * 最大似然估计把待估计的参数当作未知但固定的量
 - * 贝叶斯估计把待估计的参数也看为随机变量

贝叶斯估计和贝叶斯学习

- * Bayesian Learning
- *把贝叶斯估计的原理用于直接从数据对概率密度函数进行迭代估计

贝叶斯估计和贝叶斯学习最小风险贝叶斯决策回顾

* 回顾最小风险贝叶斯决策 $R(a_i|x) = E[\lambda(a_i,\omega_j)]$ $= \sum_{j=1}^{c} \lambda(a_i,\omega_j)P(\omega_j|x), i = 1,2,...,a$ $R(a_k|x) = min_{i=1...a}R(a_i|x)$

*则ak就是最小风险贝叶斯决策

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯估计量

- * $R(\hat{\theta}|x)$ 为给定x条件下估计量 $\hat{\theta}$ 的期望损失,称为条件风险
- *定义:如果 θ 的估计量 $\hat{\theta}$ 使得条件风险最小,则称 $\hat{\theta}$ 是 θ 的贝叶斯估计量

贝叶斯估计和贝叶斯学习损失函数

- *决策分类时我们需要事先定义决策风险表即损失表
- *估计连续随机变量时我们需要定义损失函数
- * 损失函数有许多种, 最常见的损失函数为平方误差损失函数

$$\lambda(\widehat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}) = (\widehat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^2$$

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯估计

- * 定理:
- *如果损失函数为二次函数,即

$$\lambda(\widehat{\boldsymbol{\theta}},\boldsymbol{\theta}) = (\widehat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^2$$

*则 θ 的贝叶斯估计量 $\hat{\theta}$ 为在给定x时 θ 的条件期望,如下

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}} = E[\boldsymbol{\theta}|x] = \int_{\boldsymbol{\Theta}} \boldsymbol{\theta} p(\boldsymbol{\theta}|x) d\boldsymbol{\theta}$$

贝叶斯估计和贝叶斯学习 参数估计问题

*假设有一个样本集组,要求我们找出估计量θ 用来估计组所属的总体分布的某个真实参数θ 使带来的贝叶斯风险最小,这就是贝叶斯估 计

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯估计

- *最大似然估计是把待估的参数看作固定的未知量,而贝叶斯估计则是把待估的参数作为具有某种先验分布的随机变量
- *通过对第i类训练样本Xi的观察,使得概率密度分布P(Xi|θ)转化为后验概率P(θ|Xi),再求贝叶斯估计

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯估计具体步骤

- *确定θ的先验分布P(θ),待估参数为随机变量
- * 用第i类样本 $X^i=(X_1,X_2,....X_N)$ 求出样本的联合概率密度分布 $P(X^i|\theta)$,它是 θ 的函数
- *利用贝叶斯公式,求O的后验概率

$$P(\theta \mid X^{i}) = \frac{P(X^{i} \mid \theta).P(\theta)}{\int_{\theta} P(X^{i} \mid \theta)P(\theta)d\theta}$$

* 最后

求贝叶斯估计 $\hat{\theta} = \int_{\theta} \theta P(\theta \mid X^i) d\theta$ (证明略)

- *一维正态分布:
- *已知σ²,估计μ
- *假设概率密度服从正态分布
- * $P(X|\mu) = N(\mu, \sigma^2)$
- * $P(\mu) = N(\mu_0, \sigma_0^2)$

* 第i类样本Xⁱ=(X₁, X₂,.... X_N)

* 后验概率:

$$P(\mu \mid X^{i}) = \frac{P(X^{i} \mid \mu).P(\mu)}{\int P(X^{i} \mid \mu)P(\mu)d\mu}$$

* 因为N个样本是独立抽取的:

$$\therefore P(\mu \mid X^i) = a \prod_{k=1}^N P(X_k \mid \mu) . P(\mu)$$

其中a为比例因子,只与x有关,与μ无关

$$a = \int P(X^i \mid \mu) P(\mu) d\mu$$

* 由

$$P(X|\mu) = N(\mu, \sigma^2)$$

$$P(\mu) = N(\mu_0, \sigma_0^2)$$

$$\therefore P(\mu \mid X^{i}) = a \prod_{k=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\{-\frac{1}{2} \left(\frac{X_{k} - \mu}{\sigma}\right)^{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp[-\frac{1}{2} \left(\frac{\mu - \mu_{0}}{\sigma_{0}}\right)^{2}]\}$$

$$= a' \exp\{-\frac{1}{2} \left[\sum_{k=1}^{N} \left(\frac{X_{k} - \mu}{\sigma}\right)^{2} + \left(\frac{\mu - \mu_{0}}{\sigma_{0}}\right)^{2}\right]\}$$

$$= a'' \exp\{-\frac{1}{2} \left[\left(\frac{N}{\sigma^{2}} + \frac{1}{\sigma_{0}^{2}}\right) \mu^{2} - 2\left(\frac{1}{\sigma^{2}} \sum_{k=1}^{N} X_{k} + \frac{\mu_{0}}{\sigma_{0}^{2}}\right) \mu\right]\}$$
其中a',a"包含了所有与 μ 无关的因子

- $*P(\mu|X^i)$ 是 μ 的二次函数的指数函数
- * $P(\mu|X^i)$ 仍然是一个正态函数, $P(\mu|X^i) = N(\mu_N, \sigma_N^2)$
- * 另外后验概率可以直接写成正态形式:

$$P(\mu \mid X^{i}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{N}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\mu - \mu_{N}}{\sigma_{N}}\right)^{2}\right]$$

*比较以上两个式子,对应的系数应该相等

$$\begin{cases} \frac{1}{\sigma N^2} = \frac{N}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma_0^2} \\ \frac{\mu_N}{\sigma N^2} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{k=1}^N X_k + \frac{\mu_0}{\sigma_0^2} \end{cases}$$

* 求解,可得:

$$\mu_{N} = \frac{\sigma_{0}^{2}}{N \sigma_{0}^{2} + \sigma^{2}} \sum_{k=1}^{N} X_{k} + \frac{\sigma^{2}}{N \sigma_{0}^{2} + \sigma^{2}} \mu_{0}$$

$$\sigma_N^2 = \frac{\sigma_0^2 \sigma^2}{N \sigma_0^2 + \sigma^2}$$

* 将 μ_N 和 σ_N^2 代入 $P(\mu|X^i)$ 可以得到后验概率,再用

$$\mu = \int \mu P(\mu \mid X^i) d\mu = \mu_N$$
 (因为正态分布)

$$\hat{\mu}_{N} = \mu_{N} = \frac{\sigma_{0}^{2}}{N \sigma_{0}^{2} + \sigma^{2}} \sum_{k=1}^{N} X_{k} + \frac{\sigma^{2}}{N \sigma_{0}^{2} + \sigma^{2}} \mu_{0}$$

$$P(\mu_N) = N(\mu_0, \sigma_0) = N(0,1)$$

$$\therefore \hat{\mu}_{N} = \frac{1}{N+1} \sum_{k=1}^{N} X_{k}$$

*与最大似然估计结果相似,分母不同

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯学习

*前面学习了两种参数估计的方法. 最终目的是估计总体分布

$$p(x|\mathfrak{R}) \quad \mathfrak{R} \to X^i$$

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯估计的另一计算方式

- *确定θ的先验分布P(θ),待估参数为随机变量
- * 用第i类样本 $X^i=(X_1,X_2,....X_N)$ 求出样本的联合概率密度分布 $P(X^i|\theta)$,它是 θ 的函数
- *利用贝叶斯公式,求θ的后验概率

$$P(\theta \mid X^{i}) = \frac{P(X^{i} \mid \theta).P(\theta)}{\int_{\theta} P(X^{i} \mid \theta)P(\theta)d\theta}$$

* 最后

求贝叶斯估计 $\hat{\theta} = \int_{\theta} \theta P(\theta \mid X^{i}) d\theta$ (证明略)

贝叶斯估计和贝叶斯学习贝叶斯估计的另一计算方式

*我们在第三步后可以直接通过联合密度求类条件概率密度

$$p(x|X^{i})\int p(x,\theta|X^{i})d\theta = \int p(x|\theta)p(\theta|X^{i})d\theta$$

- *在未知样本类别的条件下的参数估计称为非监督参数估计。
- * 几个基本假设:
 - * 样本来自类数为c的各类中,但不知道每个样本究竟来自哪一类
 - * 每类的先验概率 $P(\omega_i)$, j=1,2,...,c已知
 - * 类条件概率密度的形式 $p(x|\omega_i,\theta_i)$ 已知
 - * 未知的只是c个参数向量 $\theta_1, \theta_2, ..., \theta_c$ 的值

* 似然函数:为样本集的联合密度 $l(\theta) = p(\Re \theta)$

$$l(\theta) = p(\Re | \theta)$$

*假设每个样本的类别未知,但样本从混合密 度为

$$p(x|\theta) = \sum_{j=1}^{c} p(x|\omega_j, \theta_j) P(\omega_j)$$

*的总体中独立被抽出来,被观察函数的似然 函数定义为

$$l(\theta) = p(\mathfrak{R}|\theta) = \prod_{k=1}^{N} p(x_k|\theta)$$

*对数似然函数为:

$$H(\theta) = \ln[l(\theta)] = \sum_{k=1}^{N} \ln p(x_k | \theta)$$

*最大似然估计 $\hat{\theta}$ 就是使似然函数最大的 θ

*满足

$$l(\hat{\theta}) = \max_{\theta \in \Theta} \prod_{k=1}^{N} p(x_k | \theta)$$

$$H(\hat{\theta}) = \max_{\theta \in \Theta} \sum_{k=1}^{N} \ln[p(x_k | \theta)]$$

*如何求得估计量?

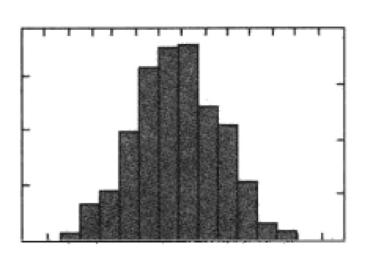
$$\nabla_{\theta_i} H(\theta) = \sum_{k=1}^N \frac{1}{p(x_k | \theta)} \nabla_{\theta_i} \left[\sum_{j=1}^c p(x_k | \omega_j, \theta_j) P(\omega_j) \right] = 0$$

贝叶斯估计和贝叶斯学习 非参数设计

- *多数情况下我们对样本的分布没有充分的了解,无法给出密度函数形式,部分样本情况难以用简单的函数来描述。
- *此时,非参数设计-不对密度函数进行假设, 直接利用样本估计整个函数,登场
- * 只有数值形式, 无封闭函数形式。
- * 从所有可能的函数中进行一种选择

贝叶斯估计和贝叶斯学习非参数设计

- * 几种常见的非参数设计
 - * 直方图方法
 - * K近邻估计方法
 - * Parzen窗法

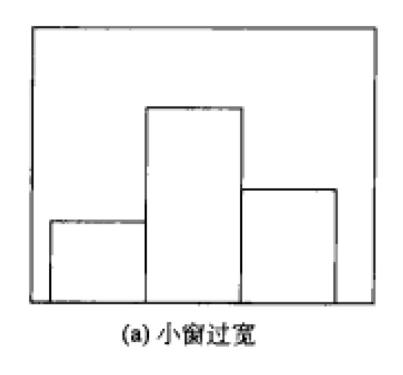


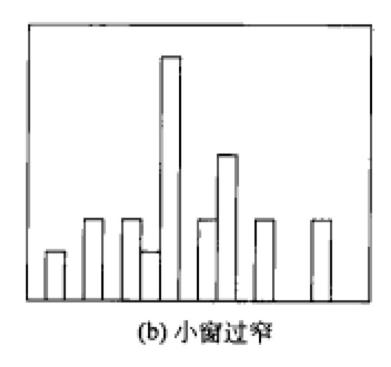
贝叶斯估计和贝叶斯学习非参数设计-直方图估计

- * 直方图方法为日常人们常用之方法
- * 过程:
 - *将样本x的每个分量在其取值范围内分割成k个等间隔小窗。如果x是d维向量,则这种分割会得到kd个小舱、每个小舱体积为V
 - * 统计落入每个小舱内的样本数目qi
 - *把每个小舱的概率密度看为常数,并用q_i/(NV) 作为其估计值,N为样本总数。

贝叶斯估计和贝叶斯学习非参数设计-直方图估计

* 小舱的选择与估计效果息息相关





大作业1

- *1. 学习总体分布的非参数估计
- * 2. 阅读文章
 - * Density Estimation based on Parzen Window
 - * K-nearest Algorithm
- *3. 实现PARZEN窗估计和K近邻算法(非分类)
- * 4. 以PPT形式口头报告,包括两种算法的原理实现

谢谢