第二章 贝叶斯模型及推断

Wang Shujia

Contents

1	点估计	2
2	区间估计	5
3	预测	8
	Beta-Binomial 和 Gamma-Poisson 模型 4.1 Beta-Binomial 模型	9
	4.2 Gamma-Poisson 模型	10

记号约定 (与教材不同)

X 随机变量

X 随即向量 $X = (X_1, X_2, ..., X_n)^T$

 \boldsymbol{x} 观察值向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$

θ 未知参数

 $\boldsymbol{\theta}$ 参数向量 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n)^T$

 $\pi(\theta)$ 先验分布密度或概率函数

 $f(x|\theta)$ 随机样本的联合分布或似然函数(看作 θ 的函数)

 $p(\theta|x)$ 后验分布密度或概率函数

A 常数矩阵

贝叶斯推断

贝叶斯的一切推断均基于后验分布: $p(\theta|x) \propto \pi(\theta)L(\theta|x)$ 贝叶斯推断包括:

- 点估计
- 区间估计
- 预测
- 假设检验

1 点估计

点估计的概念

定义 1. 假设总体分布为 $f(x|\theta)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 为样本观察值。把后验分布 $p(\theta|x)$ 归纳为一个数 $\hat{\theta}$, 用以估计未知参数 θ , 则 $\hat{\theta}$ 称为 θ 的一个点估计 (Point estimate)

常用的贝叶斯点估计:

- 1. 后验均值 $\hat{\theta}_E = E(\theta|\boldsymbol{x})$
- 2. 后验中位数 $\hat{\theta}_{Me} = \text{Median}(\theta|\boldsymbol{x})$
- 3. 后验众数 $\hat{\theta}_M = \text{Mode}(\theta|\boldsymbol{x})$
- 最大似然估计是后验众数估计的特例(无信息先验)

点估计的误差

定义 2 (MSE and SE). 设参数 θ 的后验分布为 $f(\theta|x)$, $\hat{\theta}$ 为 θ 的一个点估计值, 则 $(\hat{\theta}-\theta)^2$ 的后验均值称为后验均方误差 (Mean Square Error), 即

$$MSE(\hat{\theta}|\boldsymbol{x}) = E_{\theta|x}(\hat{\theta} - \theta)^2$$

 $SE = \sqrt{MSE}$ 称为后验标准误差 (Standar Error)

- 一般公式: $MSE(\hat{\theta}|\boldsymbol{x}) = Var(\theta|\boldsymbol{x}) + (\hat{\theta}_E \hat{\theta})^2$ - 当 $\hat{\theta} = \hat{\theta}_E$ 时,MSE 最小,等于 $Var(\theta|\boldsymbol{x})$
- 一般贝叶斯点估计取后验均值
- 后验方差 $Var(\theta|x)$ 反映点估计的精度

点估计的含义解释

- 假设总体分布为: $X|\theta \sim \text{Binomial}(n,\theta)$
- 先验分布为: $\theta \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$ (称为 Beta-Binomial 模型)
- 则后验分布为: $\theta | x \sim \text{Beta}(x + \alpha, n x + \beta)$, 其数学期望为

$$\begin{split} E(\theta|x) &= \frac{x + \alpha}{(x + \alpha + n - x + \beta)} \\ &= \left(\frac{\alpha + \beta}{\alpha + \beta + n}\right) \underbrace{\frac{\alpha}{\alpha + \beta}}_{prior\ mean} + \left(\frac{n}{\alpha + \beta + n}\right) \underbrace{\frac{x}{n}}_{sample\ mean} \end{split}$$

• 含义: 后验均值等于先验均值和样本均值的加权平均

后验均值
$$= w \times$$
 先验均值 $+ (1 - w) \times$ 样本均值

- 后验均值向先验均值"收缩",收缩多少取决于权重 w
- 如 w=1,则 $E(\theta|x)=E(\theta)$ (先验均值)
- 如果 $n \to \infty$, 则先验权重 w 趋向于 0, 后验均值 \approx MLE (解释?)
- 如果样本容量 n 很小,则先验权重 w 趋向于 1,此时:后验均值 \approx 先验均值

例: Florida 总统选举

- 美国 Florida 州在 2000 年 3 月对将于 11 月举行的总统选举进行一项民意调查,结果: n=621, Bush 45% ($n_1=279$), Gore 37% (230), Buchanan 3% (19) and undecided 15% (93).
- 简单起见, 仅考虑 Bush 和 Gore 两个候选人, 结果:
- n = 509, Bush $(55\%, n_1 = 279)$, Gore $(45\%, n_2 = 230)$.
- 以 θ 表示 Bush 的支持率,并假设该调查是简单随机抽样。
- 判断布什是否能获胜。

Florida 总统选举的贝叶斯推断

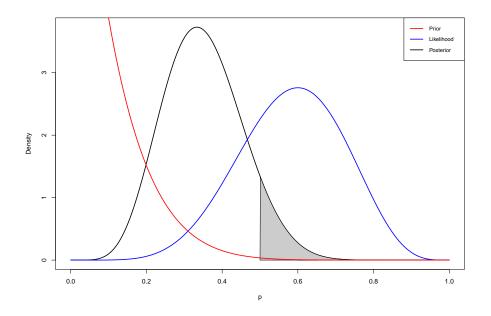
- 最大似然估计: X = 支持布什的人数,观察值 x = 279,则二项分布 $X | \theta \sim \text{Bin}(509, \theta)$
 - 似然函数: $L(\theta) = f(x|\theta) \propto \theta^{279} (1-\theta)^{509-279}$
 - 最大似然估计: $\hat{\theta} = 279/509 = 0.548$
- 这个点估计的精度(误差多少)?可能区间?
- 贝叶斯点估计
 - 无信息先验: $\theta \sim \text{Beta}(1,1) = U[0,1]$ $X|\theta \sim \text{Bin}(509,\theta)$
 - 后验分布: $\theta | X \sim \text{Beta}(280, 231)$
 - $-E(\theta|x) = 280/(280 + 231) = 0.548$
 - 标准差: sd(rbeta(10000,280,231))=0.022
 - 区间估计: > gbeta(c(0.025,0.975),280,231) =[0.5046756, 0.5908593]

女士品茶: 贝叶斯估计

假设女士、音乐家和醉汉都随机测试 10 次, 结果说对 6 次, 即 $X|\theta \sim \text{Bin}(10,\theta)$, x=6。

- 1. 女士品茶: 先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(1,1) = U[0,1]$
 - 后验分布: $\theta|X \sim \text{Beta}(7,5)$
 - 后验概率: $P(\theta > 0.5|x = 6) = 0.73$
 - 后验机会比: odds = 0.73/0.27 = 2.7
- 2. 音乐家识谱: 先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(2,1)$
 - 后验分布: $\theta|X \sim \text{Beta}(8,5)$
 - 后验概率: $P(\theta > 0.5|x = 6) = 0.81$
 - 后验机会比: odds = 0.81/0.19 = 4.3
- 3. 醉汉猜硬币: 先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(1,9)$
 - 后验分布: $\theta|X \sim \text{Beta}(7,13)$
 - 后验概率: $P(\theta > 0.5|x = 6) = 0.08$
 - 后验机会比: odds = 0.08/0.992 = 0.087

醉汉猜硬币的贝叶斯模型图示



醉汉猜硬币模型作图代码

2 区间估计

可信区间

定义 3 (Credible region). 对给定样本观察值 x, 参数 θ 的后验分布为 $p(\theta|x)$ 。如果一个区间 C=(L,U) 使得

$$P(\theta \in C|\boldsymbol{x}) = 1 - \alpha$$

则称区间 C 为参数 θ 的一个 $100(1-\alpha)\%$ 可信区间 (Credible Interval)。 一般取等尾可信区间 (Equal Tail):

$$P(\theta \le L|x) = \int_{-\infty}^{L} p(\theta|x) d\theta = \frac{\alpha}{2}$$
$$P(\theta \ge U|x) = \int_{U}^{\infty} p(\theta|x) d\theta = \frac{\alpha}{2}$$

频率学派的置信区间

Let $X = (X_1, X_2, ..., X_n)^T$ be a random sample from a population $X \sim f(x|\theta), x = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$ be the observed values, and θ be an unknown parameter.

Suppose that we can find L(X) and U(X) such that

$$P(L(\boldsymbol{X}) < \theta < U(\boldsymbol{X})) = 1 - \alpha$$

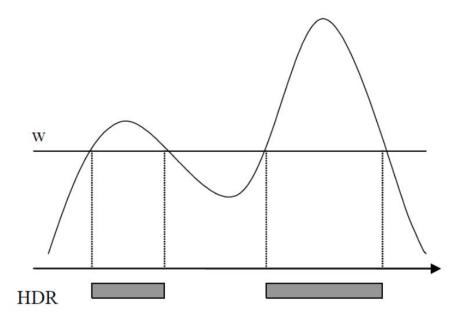
Then [L(x), U(x)] is called a *confidence interval* for θ , $(1-\alpha) \times 100\%$ is called the *confidence level*.

- $\alpha = 0.05$ is a standard 95% confidence interval.
- The random variable is X, not the θ .
- Interpret: the random interval will overlap the parameter θ 95% of the time.
- "The probability that a confidence interval $[L(\boldsymbol{x}), U(\boldsymbol{x})]$ contains the true population parameter is $(1-\alpha)$ " (not true).

HPD 区域

一个区域 C 称为 θ 的一个 $100(1-\alpha)\%$ 最高后验密度区域 (Highest Probability Density Region, HPD),如果 $C = \{\theta : p(\theta|x) > w\}$,其中 w 满足

$$\int_C p(\theta|\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\theta = 1 - \alpha$$



计算 HPD

1. 调用软件包 TeachingDemos:

```
hpd(posterior.icdf, conf=0.95, tol=1e-8,...)
```

2. 自定义 R 函数:

可信区间和 HPD

醉汉猜硬币: 先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(1,9)$, 后验分布 $\theta | X \sim \text{Beta}(7,13)$

- 可信区间: > qbeta(c(0.025,0.975),7,13) = [0.1628859, 0.5655016]
- 最高后验密度区间 (HPD):
 - 用 hpd 函数:

>library(TeachingDemos)
>hpd(qbeta, shape1 = 7, shape2= 13, conf=0.95)
[1] 0.1537483 0.5543178

- 用 R 自定义函数

(此处省略函数定义部分) >HPD(qbeta,shape1=7,shape2=13) [1] 0.1537483 0.5543178

• 可信区间与 HPD 不一致, HPD 区间长度稍短

3 预测

预测分布

总体分布为: $Y \sim f(y|\theta)$,先验分布为: $\theta \sim \pi(\theta)$,后验分布 $p(\theta|\mathbf{y})$ 。 已有观察值 $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$,设 \tilde{Y} 是一个未来可能的观察值,则其分布称为**预测分布**。 显然,未来观察值来自相同总体,因此: $\tilde{Y}|\theta \sim f(\tilde{y}|\theta)$ 给定观察值 \mathbf{y} , \tilde{Y} 的后验预测分布 (Posterior predictive distribution) 为:

$$p(\tilde{y}|\boldsymbol{y}) = \int f(\tilde{y}|\theta)p(\theta|\boldsymbol{y})d\theta$$

应用:

- 预测: 点预测, 预测区间
- 模型检验:数据分为两部分:训练样本 + 检验样本

预测分布的计算

- 直接计算积分: 经常积不出来
- 随机模拟法: 用 MCMC 抽样 (抽取预测分布的样本 $\tilde{y}^{(1)}, \tilde{y}^{(2)}, ..., \tilde{y}^{(m)}$)
 - 1. 抽取样本: $\theta^{(k)}|\boldsymbol{y} \sim p(\theta|\boldsymbol{y})$
 - 2. 抽取预测样本: $\tilde{y}^{(k)}|\theta^{(k)} \sim f(\tilde{y}|\theta^{(k)})$

条件分布的期望和方差 (重要公式)

定理 1 (Double Expectation). 设 u,v 是两个随机变量, 如果 u|v 的分布已知, 则

$$E(u) = E_v[E(u|v)]$$

$$Var(u) = Var_v[E(u|v)] + E_v[Var(u|v)]$$

例:假设一只母虫能孵化出 X 个下一代小虫,试求 X 的均值和方差(该母虫的产卵数 $U \sim \text{Poisson}(\lambda)$,每个卵能孵化成小虫子的概率是 p,且相互独立)。

• 应用: 计算预测分布的期望、方差和概率。

预测下一个黑天鹅出现的概率

- 一个人看到 n 只天鹅都是白天鹅,请预测他看到下一只天鹅仍是白天鹅的概率
- 传统方法: 假设 Ta 每次观察中看到白天鹅的概率为 θ , $Y_i = 1 (i = 1, ..., n)$ 表示第 i 次观察到白天鹅,否则为 0。设 Y 为 n 次观察中白天鹅的个数,则
 - $-Y \sim \text{Binomial}(n, \theta)$, 现在观察到 y = n
 - $-\theta$ 的最大似然估计为: $\hat{\theta} = \bar{y} = n/n = 1$,即预测下一只天鹅仍是白天鹅的概率为 100%。
 - 传统方法无法预测到黑天鹅
- 贝叶斯预测:
 - 无信息先验 $\theta \sim \text{Beta}(1,1)$,则后验分布为 Beta(y+1,n-y+1)
 - 设 \tilde{Y} 为下一只天鹅的颜色(白:1, 黑: 0), 则 $P(\tilde{Y}=1|\theta)=\theta$,
 - $-\tilde{Y}$ 的预测分布为:

$$\begin{split} p(\tilde{Y} = 1|y) &= \int_0^1 P(\tilde{Y} = 1|\theta) p(\theta|y) \mathrm{d}\theta \\ &= \int_0^1 \theta p(\theta|y) \mathrm{d}\theta = \mathrm{E}(\theta|y) = \frac{y+1}{n+2} \end{split}$$

- 观察值 y = n,下一只天鹅是白天鹅的预测概率为: (n+1)/(n+2)

4 Beta-Binomial 和 Gamma-Poisson 模型

4.1 Beta-Binomial 模型

Beta-Binomial Model

在 n 次独立重复试验中,每次试验事件 A 发生的概率为 θ ,设 X 为事件 A 发生的次数,则 $X|\theta\sim \mathrm{Bin}(n,\theta)$ 。现在某实际试验中观察到 X=x,试对概率 θ 进行贝叶斯估计。

- 贝叶斯模型:
 - 先验分布: $\theta \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$
 - 总体模型: 二项分布 $X|\theta \sim \text{Bin}(n,\theta)$: $f(x|\theta) = \binom{n}{x}\theta^x(1-\theta)^{n-x}$
 - 后验分布: $\theta|X \sim p(\theta|x) = \pi(\theta)f(x|\theta) \propto \theta^{\alpha+x-1}(1-\theta)^{\beta+n-x-1}$
 - 即 $\theta|X \sim \text{Beta}(x+\alpha, n-x+\beta)$
- 先验分布与后验分布属于同一个分布族 (Beta 分布), 称为共轭先验 (Conjugate prior)
- 称为 Beta-Binomial 模型

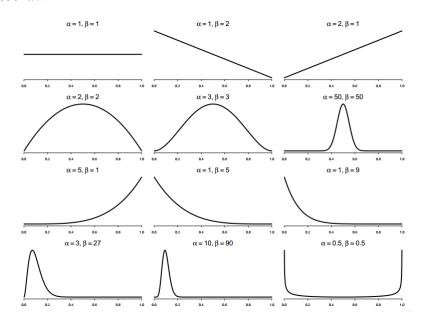
Beta 分布

定义 4. 称随机变量 X 服从 $Beta(\alpha, \beta)$ 分布, 如果其 pdf 为

$$f(\theta|\alpha,\beta) = \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \theta^{\alpha-1} (1-\theta)^{\beta-1} (0 < \theta < 1; \ \alpha > 0, \beta > 0)$$

- 当 $\alpha = 1, \beta = 1$, Beta(1,1) = U[0,1), 均匀分布
- 均值 $E(\theta) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta}$
- 方差 $D(\theta) = \frac{\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}$
- 众数 Mode = $\frac{\alpha-1}{\alpha+\beta-2}$ $(\alpha>1,\beta>1)$

Beta 分布密度函数



4.2 Gamma-Poisson 模型

泊松分布定义

定义 5. X = 计数数据 (Count data, 如单位时间内事件发生次数), 如果

$$P(X = x | \lambda) = \frac{\lambda^x}{x!} e^{-\lambda}, \ x = 0, 1, \dots, \lambda > 0$$

则称 $X|\lambda \sim \text{Poisson}(\lambda)$

• 某地一年发生恐怖袭击的次数

- 某大学每位教师发表论文数
- $E(X|\lambda) = D(X|\lambda) = \lambda$
- 参数 λ 取什么先验分布?

Gamma 分布定义

定义 6. 随机变量 X 的密度函数

$$f(x|a,b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} x^{a-1} e^{-bx}, \ (x > 0, \ a > 0, b > 0)$$

记为 $X \sim \text{Gamma}(a, b)$

- Shape: a; rate: $b \not \equiv \text{scale} = 1/b$
- $E(X) = ab^{-1}, D(X) = ab^{-2}, Mod(X) = (a-1)/b \ (a > 1)$
- 如果 $X \sim \text{Gamma}(n/2, 1/2)$,则 $X \sim \chi^2(n)$
- 如果 $X \sim \text{Gamma}(1, b)$,则 $X \sim \exp(b)$ (指数分布)

Gamma-Poisson Bayesian Model

假设 X_1, X_2, \dots, X_n 是泊松分布 Poisson(λ) 的独立同分布样本, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^{\mathrm{T}}$

- 先验分布: $\lambda \sim \text{Gamma}(a,b)$
- 似然函数: $L(\lambda|\mathbf{x}) = \prod_{\mathbf{x},i} \frac{\lambda^{x_i}}{x_i!} e^{-\lambda} \propto \lambda^{\sum x_i} e^{-n\lambda}$
- 后验分布为:

$$p(\lambda|\mathbf{x}) \propto \lambda^{a-1} e^{-b\lambda} \cdot \lambda^{\sum x_i} e^{-n\lambda} \sim \text{Gamma}(a + \sum x_i, b + n)$$

- 也是共轭先验
- 后验均值:

$$E(\lambda|\mathbf{x}) = \frac{b}{b+n} \frac{a}{b} + \frac{n}{b+n} \frac{\sum x_i}{n} = wE(\lambda) + (1-w)\bar{x}$$

- 当 $n \to \infty$ 和 $n \to 0$ 时,后验分布结果如何?

Gamma-Poisson Model: 美国大规模枪击案

2012年12月,美国康涅狄格州发生校园枪击案,造成28人死亡。

资料显示,1982 年至 2012 年,美国共发生 62 起(大规模)枪击案。其中,2012 年发生了 7 起,是次数最多的一年。

2012 年有这么多枪击案,正常吗?这是巧合,还是美国治安恶化?



1982-2012 年美国枪击案数据

一年中发生枪击案次数	年数
0	3
1	13
2	5
3	5
4	3
5	1
6	0
7	1

数据来源:http://www.motherjones.com/politics/2012/12/mass-shootings-mother-jones-full-data 参考:Aatish Bhatia,2012:Are mass shootings really random events? A look at the US numbers, http://www.wired.com/2012/12/are-mass-shootings-really-random-events-a-look-at-the-us-numbers/

美国枪击案: MLE

- 目的:利用过去 30 年数据(不包含 2012 年),判断 2012 年是否属于正常的泊松分布
- 总体分布: $X \sim \text{Poisson}(\theta), \theta$ 为平均每年枪击案发生率, 观察值 X_1, \ldots, X_{30}
- 最大似然估计: $\hat{\theta} = \bar{x} = 1.83$

美国枪击案: 贝叶斯模型

• 先验分布: 选共轭先验 $\theta \sim \text{Gamma}(a,b)$, 如何确定参数 a,b? 观察过去数据,先验分布均值为 1.83,出现次数最多的年数为 1 年,因此

$$E(\theta) = a/b = 1.8; Mod(\theta) = (a-1)/b = 1$$

得到超参数估计值:a = 2.25, b = 1.25

- 后验分布: $\theta | x \sim \text{Gamma}(57.25, 31.25),$ 其中 $\sum x_i = 55, n = 30$
- 95%CI: > qgamma(c(0.025, 0.975), 57.25, 31.25) = (1.388, 2.336)
- 95%CI for noninformative prior: $(1.410,\,2.386)$
- 无论那种先验, $X_{31}=7$ 都远离该可信区间,属于异常。