

极客大学机器学习训练营

机器学习基本概念

王然

众微科技 AI Lab 负责人

二〇二一年五月二十日

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- ▶ AI 的语言 → 不理解数学，不可能理解模型；
- ▶ 创新的根基 → 创新可以很简单；
- ▶ 数学锻炼思维。

- ▶ 把数学当做一门语言来学习：不管它的意思，严格按照要求 → 我们主要讲方法；
- ▶ 数学真正的学法，是以证明为目的的。

- ▶ 对于熟悉的方法能够解出来；
- ▶ 对于新的概念能够迅速根据常用解题方法解出来；
- ▶ 对于新的概念能够通过一定的 trick 解出来；
- ▶ 对于新的概念可以通过非常完整的解题策略逐渐探索出来；
- ▶ 构建新的概念并进行探讨；
- ▶ 我们目标是达到第二层；
- ▶ 例子见拓扑的概念。

核心：

- ▶ Frame and Hypotheses
- ▶ Elements and Relationships
- ▶ Patterns
- ▶ Intuition
- ▶ Retrospect and Empathetic
- ▶ Bucket(In/Out/New)
- ▶ Strategic minds

- ▶ 一定要理解概念的直观含义：很多概念的含义是逐渐在应用中才逐渐“理解”的，直觉有时候会误导；
- ▶ 没有策略的解题：解题前最好想好策略；
- ▶ 认为数学的难度是均衡的：事实上，对于同一个概念，不同的人的理解速度是不同；
- ▶ 跳到自己感兴趣的地方：数学是有前置知识铺垫的；
- ▶ 注意：不同的教材对概念的定义不同，一定要根据实际材料的定义来理解。

- ▶ 即使完全听不懂这一章的内容，也可以进行后续实践的学习；
- ▶ 学习本章的好处：
 - ▶ 更好地理解机器学习领域中的概念，为快速学习新概念打基础；
 - ▶ 看到问题的本质；
 - ▶ 容易对算法（尤其深度学习部分）进行创新。

- ▶ 面对现实：如果没有任何基础，不太可能一遍就全部听懂；
- ▶ 体验过程：听天书 → 课下手动推导 → 原来很简单；
- ▶ 面对问题：有问题写在问题收集文档里，或有问助教、老师；
- ▶ 循序渐进：如果前面的概念不清楚，理解后面的内容也会有些难度。

- ▶ 机器学习的各种角度和建模流程；
- ▶ 概率论和统计学基础概念复习；
- ▶ 极大似然体系和 EM 算法；
- ▶ 贝叶斯体系和 Variational Bayes 算法；
- ▶ 矩阵代数的基本概念复习和 Tensor 求导。

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

为什么要掌握各种角度

- ▶ 最终目的：效果好，即准确性高；
- ▶ 为了达到最终目的，必须从不同的角度考虑。

- ▶ 最简单的是视角;
- ▶ 目标: 给定 X 预测 y ;
- ▶ 假设: 存在真实的 $y = f_0(X)$;
- ▶ 如果知道 f_0 , 那么就不需要做任工作。

- ▶ 观测 $\{X_i, y_i; i \in \mathcal{I}\}$;
- ▶ 可以假设 $f \in \mathcal{F}$;
- ▶ 目标：给定一个损失函数 c , 最小化 $\sum_i c(f(X_i), y_i)$;
- ▶ 这个估计可以称之为 \hat{f} 。

什么样的 \hat{f} 是好的

- ▶ 最理想状况 $\hat{f} = f_0$ 。
- ▶ 不可能原因 (一): 没有所有的 x 和 y 的组合;
- ▶ 不可能原因 (二): $f_0 \notin \mathcal{F}$;
- ▶ 不可能原因 (三): 求解 \hat{f} 时候有困难;
- ▶ 一个自相矛盾的启示: 要找到一个足够大的 \mathcal{F} 使它包含 f_0 , 并且要求 \mathcal{F} 应该足够小使得求解比较容易。

- ▶ 本质上来说，世界上是随机的。
- ▶ 随机的来源：
 - ▶ 缺乏信息 → 最主要的原因（在表格化数据中最为明显）；
 - ▶ 测量误差 → 大部分信息都有误差；
 - ▶ 比如说年龄 800 岁，收入 400 万亿；
 - ▶ 模型误差 → 假设模型形式和现实的差别；
 - ▶ 估计误差 → 得到模型过程中造成的误差；
 - ▶ 优化误差 → 求解过程中的误差；
 - ▶ 评估误差 → 评估本身也存在误差。

- ▶ 假设目标是用身高预测体重；
- ▶ 为什么不可以进行插值？

请思考

- ▶ 缺乏信息：人有胖有瘦，仅仅给定身高，不可能判断；
- ▶ 导致结果：如果要求身高必须解释体重，身高就承担了非理性的要求；
- ▶ 相关结果：bias 较大。
- ▶ 统计学根本区别于函数逼近的原因：
 - ▶ 函数逼近： $y = f_0(X)$ ；
 - ▶ 统计学 $y = f_0(X) + \epsilon$ 。

- ▶ Bias: 话说得很详细，但是很不准；
 - ▶ 北京明天下午两点四十分会发生里氏 2.6 级地震；
- ▶ Variance: 含糊其词，但是很准；
 - ▶ 在这个世界上有一天会发生地震；
- ▶ 往往存在 Bias 和 Variance 的权衡（它本身的数学理论只是针对回归的）；
- ▶ Bias 大：过拟合；
- ▶ Variance 大：欠拟合。

- ▶ 往往难以处理；
- ▶ 是数据预处理一个重要部分。

- ▶ 假设背景：存在一个真实的模型，但无法知道全部误差，所以模型一定会有损失；
 - ▶ 但就该损失函数而言，这个真实的模型一定是预测最好的；
- ▶ 现实情况：无法知道真实的模型，所以只能采用一些模型来逼近；
- ▶ 一般的模型可能估计方差较大，但如果采用的模型与真实模型接近，则效果应该是最好的。

- ▶ 即使对于同样的模型或问题，也有不同的办法得到模型参数；
 - ▶ 极大似然估计和贝叶斯估计；
 - ▶ 增强学习中的 Q-learning 和 Policy Gradient；
- ▶ 好的方法可以减少其中误差。

- ▶ 求解的过程，就是迭代的过程；
- ▶ 迭代是否会收敛是一个重要的问题；
- ▶ 在神经网络中尤其明显，但在传统模型中也存在。

- ▶ 因为不知道真实的损失函数（除非有无限多的测试样本），所以必须评估；
- ▶ 评估的越多，训练样本就越少 → 出现了交叉验证的概念；
- ▶ 注意避免不公平的评估。

- ▶ 只用训练集 → 不公平；
- ▶ 无数次的测试训练集 → 不可以；
- ▶ 建模数据和实际场景不同：在 2019 年建模预测 2020 年上半年旅游业情况。

- ▶ **重要原则：**一定要看评估本身的误差多大，然后决定做法是否有提升。
- ▶ 越是误差大的领域，需要概率的角度越多；
- ▶ 误差小的领域，概率的角度可能作用有限，更应该找可以优化的地方。

- ▶ 从概率理论上来说，预训练不应该有任何帮助：预训练和当前任务无关(?)，而且模型表达力没有变。
- ▶ 预训练是深度学习最重要发明之一：
 - ▶ 例子：从一个字预测出词语和预测情感没关系；
 - ▶ 现实：预测词语表示了对语义的理解，所以对预测情感有帮助；
 - ▶ 从优化的角度来说：有利于优化。

- ▶ 很多问题需要根据具体场景具体分析；
- ▶ 重点：从不同角度出发（数学思维）；
- ▶ 从不同角度看同一个问题：其他角度的进展也可以帮助解决这个问题。

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- ▶ 概率论是描述随机的语言；
- ▶ 概率论分为朴素概率论和公理性概率论；
- ▶ 重点讲朴素概率论。

- ▶ 一维离散意味着可以直接讨论概率；
- ▶ 一维离散意味着可以假设概率取值只是整数。
- ▶ 例子：男 = 1，女 = 2，未知 = 3
 - ▶ $P(X < 3) = \dots$
 - ▶ $p(X = 1) = \dots$
 - ▶ $P(X \leq x) = \sum_{i \leq x} p(X = i)$, 或者用更标准的写法 $P(X \leq t) = \sum_{x \leq t} p(x)$

- ▶ 连续意味着可能性是无限的；
- ▶ 还是可以定义 $P(X \leq x)$ ；
- ▶ 但是定义 $p(x)$ 的时候却不合适。

思考：为什么？

- ▶ 在给定一个连续变量时，只能定义 $P(X \leq m) = \int_{-\infty}^m p(x) dx$;
- ▶ 虽然离散和连续的定义有所不同，但是积分本身就是一种非常复杂的加法；
- ▶ $F_X(t) := P(X \leq t)$ ；就是所谓的**概率累积分布函数**（Probability Cumulative Distribution Function）；
- ▶ $p(x)$ 就是所谓的**概率密度函数**（Probability Density Function），不是概率值。

习题：CDF 和 PDF 的转换

指数分布的 PDF 为 $\lambda e^{-\lambda x}$, $x \geq 0$, 求其 CDF。

习题：不同参数之间的转换

- ▶ 假设 X 服从正态分布，即 $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2})$;
- ▶ 请问 $Y = aX + b$ 的 PDF 是什么？
- ▶ 请问 $Z = X^2$ 的 PDF 是什么？

- ▶ 以二维为例: $P(X \leq m, Y \leq n) = \int_{-\infty}^m \int_{-\infty}^n p(x, y) dx dy;$
- ▶ 对于边际分布 $p(x) = \int p(x, y) dy;$
- ▶ 条件概率 $p(x|y) = p(x, y)/p(y)。$

练习：边际分布

假如 $p(x, y) = \begin{cases} x + y & \text{if } 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1 \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$ 求 Y 的边际分布。

- ▶ 一般来说，给定随机变量 X, Y ，两者的联合概率分布不能由各自的概率分布单独计算得出；
- ▶ 但是当两者独立时，以下为定价条件：
 - 对任何事件 A, B ，我们有 $P(X \in A, Y \in B) = P(X \in A)P(Y \in B)$ ；
 - $p(x, y) = p(x)p(y)$ ；
 - $p(x|y) = p(x)$ 。
- ▶ 我们常说 i.i.d，即独立同分布。

练习：独立变量等价性

请证明 $p(x, y) = p(x)p(y)$ 等价于 $p(x|y) = p(x)$ 。

给定一个概率密度函数 $p(x)$ ，再给定一个函数 $f(x)$ ，我们定义他的数学期望 (Expectation) 为

$$E_p[f(X)] := \int f(x)p(x)dx$$

给定一个条件概率密度函数 $p(x|y)$ ，再给定一个函数 $f(x)$ ，我们定义他的条件数学期望 (Conditional Expectation) 为

$$E_p[f(X)|Y=y] := \int f(x)p(x|y)dx$$

习题：重期望公式

$$E_Y[E_p(f(X))|Y] = E_p[f(X)].$$

习题：贝叶斯公式

$$p(y|x) = \frac{p(y)p(x|y)}{\int p(x|y)p(y)dy}$$

- ▶ Multinomial: $P(X = x_i) = p_i$;
- ▶ 正态分布: $p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$, 其中 μ 是 σ 是参数。这时候, 我们常常写成 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$;
- ▶ 其它常见的概率分布可以参见Shao (2003)。

如果 $X \sim N(0, 1)$ ，则 $aX + b \sim N(b, a^2)$ ， $a \neq 0$ 。

- ▶ 期望: EX ;
- ▶ 方差: $V(X) := E(X - EX)^2 = EX^2 - (EX)^2$;
- ▶ 协方差: $\text{Cov}(X, Y) = E(XY) - EXEY$ 。
- ▶ 当两个变量为协方差为 0 时, 我们说两个随机变量是不相关的;
- ▶ 两个随机变量独立意味着两个随机变量不相关, 但是反过来则不是如此;
- ▶ 对于正态分布, 不相关意味着独立。

练习：独立推出不相关

假设 X, Y 相互独立，则 $\text{Cov}(X, Y) = 0$;

练习：不相关不能推出独立

- ▶ 假设 X 服从 $[-4, 4]$ 的均匀分布；换言之， X 的 pdf 在 $[-4, 4]$ 为 $\frac{1}{8}$ ，在其他位置为 0；
- ▶ 假设 $Y = X^2$ ；
- ▶ 求证： X 和 Y 不相关，但两者不独立。

练习：矩母函数

假设 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ ，请求出 $E_X[e^{\lambda X}]$ 。

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
 - 极大似然估计基本思路 ■ (可选) EM 算法和 HMM
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
 - 极大似然估计基本思路 ■ （可选）EM 算法和 HMM
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- ▶ 考虑最简单的情况，即掷一个不公平的硬币：
- ▶ 每一个硬币向上的概率为 $p(x_i)$ ，用 $y_i = 1$ 记载硬币向上；
- ▶ 由此得到硬币向下的概率为 $1 - p(x_i)$ ，用 $y_i = 0$ 表示；
- ▶ 整体观测到目前情况的概率为 $p(x_i)^{y_i} \times (1 - p(x_i))^{(1-y_i)}$ ，这就是所谓的**似然函数**；
- ▶ 这个形式比较难看，所以不妨取个 \log ，这就是**对数似然函数**：
 $y_i \log(p(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - p(x_i))$ 。

思考：什么是好的 p

- ▶ 如果我们知道 p ，那什么都不需要做；
- ▶ 但实际上我们既不知道 p ，还想知道什么是一个好的 p ；
- ▶ 假设只抛一次硬币，思考下面哪个概率更好？
 - ▶ 一个估计 p 的似然函数为 0.3；
 - ▶ 另一个估计 p 的似然函数为 0.9。

- ▶ 找到使目前似然函数最大的那个观测；
- ▶ 或者由于对数变换是单调变化，找到负的对数似然函数最小的解。

- ▶ 只抛一次硬币，当然没有任何做推断的价值；
- ▶ 现在假设抛 N 次硬币，得到观测 $\{x_i, y_i; i \leq N\}$ ；
- ▶ 继续假定每次抛硬币的结果不影响下一次抛硬币的概率分布，即观测独立；
- ▶ 则似然函数为 $\prod_i p(x_i)^{y_i} (1 - p(x_i))^{(1-y_i)}$ ；
- ▶ 连乘带来的问题：因为如果连乘一个 0 到 1 之间的数，得到的乘积会越来越小，特别小的时候，电脑就会出现数值问题（比如说 10^{-10} 的负十万次方）。

- ▶ 取个 \log 即可: $\log(xy) = \log(x) + \log(y)$;
- ▶ 则负的对数似然函数为: $-\sum_i (y_i \log(p(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - p(x_i)))$;
- ▶ 这就是 Binary Cross Entropy。

如何选择 $p(x_i)$ 的形式

- ▶ $p(x_i)$ 长什么样呢？
- ▶ 要控制 $p(x_i)$ 取值在 0 到 1 之间；
- ▶ 一个常见选择 $p(x_i) = \frac{1}{1+\exp(-f(x_i))}$ ；
- ▶ 如果 $f(x_i) = \sum_k \beta_k x_{ik}$ ，其中 β_k 为未知参数（需要求解），则得到了逻辑回归的数学表达形式；
- ▶ 注意：这种 f 的函数形式被称为线性函数，近似于多个线性函数组合的函数是最重要的一类函数形式。

- ▶ 现在假设有 y_i ，服从期望为 $f(x_i)$ 且方差为 1 的正态分布；
- ▶ 也就是说 $p(y_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-(y_i - f(x_i))^2/2)$ ；
- ▶ 让我们来共同推导他的对数似然函数。

我们需要的负的对数似然函数等于

$$-\sum_i \log p(y_i) = -\sum_i (-(y_i - f(x_i))^2)/2 + K$$

其中 K 是一个跟 f 无关的常数，所以这里最小化的距离是 $\sum_i (y_i - f(x_i))^2$ ，这就是最小二乘法。

- ▶ 第一种情况，称之为二分类问题，对应多分类问题也可以进行对应推导；
- ▶ 第二种情况，称之为回归问题；
- ▶ 即使在监督学习的框架下，还有很多其他类型的问题。

练习：均匀分布的极大似然估计

- ▶ 假设 X 服从 $[0, p]$ 的均匀分布，其中 p 为未知参数；
- ▶ 假设我们得到的样本为 X_1, X_2, \dots, X_n ；
- ▶ 求 p 的极大似然估计。

- ▶ 目标：确定小企业的贷款额度。
- ▶ 考虑方向：
 - ▶ 违规可能性：要把风险控制在一定范围内；
 - ▶ 需求：对贷款需求越高的企业应该给更多贷款。
- ▶ 第一个问题可以作为分类问题解决；
- ▶ 第二个问题不好解决。

- ▶ 虽然观测不到企业的真实需求，但可以假设存在一个真实需求。
- ▶ 我们知道实际放款额和实际使用金额，所以存在两种情况：
 - ▶ 放款额度大于实际使用金额，这时可以假定实际需求即为实际使用金额；
 - ▶ 放款额度等于实际使用金额，这时虽然不知道实际需求，但是知道实际需求一定大于等于放款额度。

- ▶ 假设真实需求为 y_i^* ;
- ▶ 进一步假设 $y_i^* = f(x_i) + \epsilon_i$, 且假设 ϵ_i 为正态分布;
- ▶ 银行所给的真实的额度假设为 y_i ;
- ▶ 当发生截断时, 其似然函数为 $P(y_i^* \geq y_i)$;
- ▶ 当不发生截断时, 其似然函数为 $p(y_i)$;
- ▶ 两者结合, 即可以得到估计方式。

见黑板；

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
 - 极大似然估计基本思路 ■ (可选) EM 算法和 HMM
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- ▶ 通常情况下，在极大似然框架中，如果容易推导出对数似然函数的话，那么求解将会非常容易；
- ▶ 但是如果存在隐变量，则推导变得非常困难；
- ▶ 在一些情况下，EM 算法是解决隐变量问题的一个非常通用的框架（现实情况少见）。

- ▶ HMM 算法的估计方法称之为 Baum-Welch 算法；
- ▶ 现场去“推导”该算法是不可能的；
- ▶ 现场去“默写”该算法是有可能的；
- ▶ 默写跟数学能力毫无关系。

考虑以下关系：用 $l(\theta; X)$ 表示对数似然函数，则

$$\begin{aligned}l(\theta; X) &= \log p_{\theta}(X) \\&= \log \int p_{\theta}(X, y) dy \\&= \log \int \frac{p_{\theta}(X, y)}{p_{\tilde{\theta}}(y|X)} p_{\tilde{\theta}}(y|X) dy \\&\geq \int \log(p_{\theta}(X, y)) p_{\tilde{\theta}}(y|X) dy - \int \log(p_{\tilde{\theta}}(y|X)) p_{\tilde{\theta}}(y|X) dy \\&= E_{\tilde{\theta}}[\log p_{\theta}(X, y)|X] - E_{\tilde{\theta}}[\log p_{\tilde{\theta}}(y|X)|X]\end{aligned}$$

其中

注意在这里：

- ▶ y 是一个隐变量；
- ▶ $\tilde{\theta}$ 是当前的估计，目标是通过迭代的方法找到下一步的估计 θ ，因为 $E_{\tilde{\theta}}[\log P_{\tilde{\theta}}(y|X)|X]$ 跟 θ 没有关系，所以可以忽略；
- ▶ 定义 $Q(\theta, \tilde{\theta}) = E_{\tilde{\theta}}[\log p_{\theta}(X, y)|X]$ ，则 EM 算法可以定义为：
 - ▶ 计算 $Q(\theta, \tilde{\theta})$ ；
 - ▶ 最大化 $\theta := \operatorname{argmax}_{\theta'} Q(\theta', \tilde{\theta})$ 。

- ▶ 假设对于每一个观测 d 可以观测到 $\{X_t^{(d)}, 1 \leq t \leq T\}$;
- ▶ 它的概率分布取决于隐变量 $z_t^{(d)}$ 。并且该变量服从马尔可夫性质，因此如果知道 $t-1$ 的信息，就不需要知道更早的信息，就可以得到 $z_t^{(d)}$ 的概率分布；
- ▶ 假设 X 's 和 z 's 都只能取有限多个值。

我们有

$$P(z, \mathcal{X}; \theta) = \prod_{d=1}^D \left(\pi_{z_1^{(d)}} B_{z_1^{(d)}} \left(x_1^{(d)} \right) \prod_{t=2}^T A_{z_{t-1}^{(d)} z_t^{(d)}} B_{z_t^{(d)}} \left(x_t^{(d)} \right) \right)$$

- (d) 上标表示观测 d ;
- $\pi_{z_1^{(d)}}$ 为初始分布;
- $A_{z_{t-1}^{(d)} z_t^{(d)}}$ 为转移概率;
- $B_{z_t^{(d)}}(x_t^{(d)})$ 为发射概率。

对上式取 \log 之后

$$\begin{aligned}\log P(z, \mathcal{X}; \theta) = & \sum_{d=1}^D [\log \pi_{z_1^{(d)}} + \sum_{t=2}^T \log A_{z_{t-1}^{(d)} z_t^{(d)}} \\ & + \sum_{t=1}^T \log B_{z_t^{(d)}}(x_t^{(d)})]\end{aligned}$$

放到 Q 函数中，假设目前的参数 θ^s ：

$$\begin{aligned} Q(\theta, \theta^s) = & \sum_{z \in \mathcal{Z}} \sum_{d=1}^D \log \pi_{z_1^{(d)}} P(z, \mathcal{X}; \theta^s) \\ & + \sum_{z \in \mathcal{Z}} \sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T \log A_{z_{t-1}^{(d)} z_t^{(d)}} P(z, \mathcal{X}; \theta^s) \\ & + \sum_{z \in \mathcal{Z}} \sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T \log B_{z_t^{(d)}} \left(x_t^{(d)} \right) P(z, \mathcal{X}; \theta^s) \end{aligned}$$

加上拉格朗日乘子：

$$\begin{aligned}\hat{L}(\theta, \theta^s) &:= Q(\theta, \theta^s) - \lambda_{\pi} \left(\sum_{i=1}^M \pi_i - 1 \right) \\ &\quad - \sum_{i=1}^M \lambda_{A_i} \left(\sum_{j=1}^M A_{ij} - 1 \right) \\ &\quad - \sum_{i=1}^M \lambda_{B_i} \left(\sum_{j=1}^N B_i(j) - 1 \right)\end{aligned}$$

下面让我们来首先求解 π_i 。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{L}(\theta, \theta^s)}{\partial \pi_i} &= \frac{\partial}{\partial \pi_i} \left(\sum_{z \in \mathcal{Z}} \sum_{d=1}^D \log \pi_{z_1^{(d)}} P(z, \mathcal{X}; \theta^s) \right) - \lambda_\pi = 0 \\ &= \frac{\partial}{\partial \pi_i} \left(\sum_{j=1}^M \sum_{d=1}^D \log \pi_j P(z_1^{(d)} = j, \mathcal{X}; \theta^s) \right) - \lambda_\pi = 0 \\ &= \sum_{d=1}^D \frac{P(z_1^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s)}{\pi_i} - \lambda_\pi = 0\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \hat{L}(\theta, \theta^s)}{\partial \lambda_{\pi}} = - \left(\sum_{i=1}^M \pi_i - 1 \right) = 0$$

求解，我们可以得到

$$\begin{aligned}\pi_i &= \frac{\sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right)}{\sum_{j=1}^M \sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = j, \mathcal{X}; \theta^s\right)} = \frac{\sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right)}{\sum_{d=1}^D \sum_{j=1}^M P\left(z_1^{(d)} = j, \mathcal{X}; \theta^s\right)} \\&= \frac{\sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right)}{\sum_{d=1}^D P(\mathcal{X}; \theta^s)} = \frac{\sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right)}{DP(\mathcal{X}; \theta^s)} \\&= \frac{\sum_{d=1}^D P(\mathcal{X}; \theta^s) P\left(z_1^{(d)} = i \mid \mathcal{X}; \theta^s\right)}{DP(\mathcal{X}; \theta^s)} = \frac{1}{D} \sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = i \mid \mathcal{X}; \theta^s\right) \\&= \frac{1}{D} \sum_{d=1}^D P\left(z_1^{(d)} = i \mid \mathcal{X}^{(d)}; \theta^s\right)\end{aligned}$$

采用类似方法：

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j, \mathcal{X}; \theta^s\right)}{\sum_{j=1}^M \sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j, \mathcal{X}; \theta^s\right)} \\ &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j, \mathcal{X}; \theta^s\right)}{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right)} \\ &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P(\mathcal{X}; \theta^s) P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j \mid \mathcal{X}; \theta^s\right)}{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P(\mathcal{X}; \theta^s) P\left(z_{t-1}^{(d)} = i \mid \mathcal{X}; \theta^s\right)} \\ &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j \mid \mathcal{X}^{(d)}; \theta^s\right)}{\sum_{d=1}^D \sum_{t=2}^T P\left(z_{t-1}^{(d)} = i \mid \mathcal{X}^{(d)}; \theta^s\right)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_i(j) &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T P\left(z_t^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right) I\left(x_t^{(d)} = j\right)}{\sum_{j=1}^N \sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T P\left(z_t^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right) I\left(x_t^{(d)} = j\right)} \\ &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T P\left(z_t^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right) I\left(x_t^{(d)} = j\right)}{\sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T P\left(z_t^{(d)} = i, \mathcal{X}; \theta^s\right)} \\ &= \frac{\sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T P\left(z_t^{(d)} = i \mid \mathcal{X}^{(d)}; \theta^s\right) I\left(x_t^{(d)} = j\right)}{\sum_{d=1}^D \sum_{t=1}^T P\left(z_t^{(d)} = i \mid \mathcal{X}^{(d)}; \theta^s\right)} \end{aligned}$$

- ▶ 为什么要推导 $P\left(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j \mid X^{(d)}; \theta^s\right)$ 和 $P\left(z_t^{(d)} = i \mid X^{(d)}; \theta^s\right)$?
- ▶ 这是因为这两者可以用动态规划来求解。
- ▶ 细节作为（可选）练习题。

难点在哪里？

$P(z_{t-1}^{(d)} = i, z_t^{(d)} = j \mid X^{(d)}; \theta^s)$ 和 $P(z_t^{(d)} = i \mid X^{(d)}; \theta^s)$ 可以动态求解有效动态求解这件事情不可能一眼看出来，甚至我们在开始推导的时候也不可能考虑到动态求解的问题。

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
 - 贝叶斯估计 ■ 变分贝叶斯法
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
 - 贝叶斯估计 ■ 变分贝叶斯法
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- ▶ 在之前所有的模型中，我们均假设有所谓的真实参数或模型，目的是为了推导出该真实的模型。
- ▶ 贝叶斯学派的视角不同：
 - ▶ 假设参数是 θ ，将会对其有一个 prior，表示为 $p(\theta)$ ，而 θ 本身就是随机的；
 - ▶ 现在得到了观测 X ，目标是得到 posterior: $p(\theta|X)$ 。
- ▶ 根据贝叶斯公式，有

$$p(\theta|X) = \frac{p(X|\theta)p(\theta)}{\int p(X|\theta)p(\theta)d\theta}$$

假设 $\mu \sim N(0, 1)$, $X|\mu \sim N(\mu, 1)$, 我们一起来推导 μ 的 posterior

$$\begin{aligned} p(\mu|X) &\propto \exp(-\mu^2/2)) \exp(-\sum_i (X_i - \mu)^2/2) \\ &\propto \exp(-(\frac{N+1}{2}\mu^2 - \mu \sum_i X_i)) \\ &\propto \exp\left(-(\mu^2 - \frac{2\sum_i X_i}{N+1}\mu)/(\frac{2}{N+1})\right) \\ &\propto \exp\left((\mu - \frac{\sum_i X_i}{N+1})^2 / \frac{2}{N+1}\right) \end{aligned}$$

- ▶ $\mu|X \sim N(\frac{\sum_i x_i}{N+1}, \frac{1}{(N+1)^2})$;
- ▶ 因此, posterior 也是正态分布;
- ▶ 这称之为 Conjugate Priors。

- ▶ 好处：
 - ▶ 方便处理隐变量；
 - ▶ 可以对不确定性进行估计。
- ▶ 坏处：计算麻烦 → 就目前的深度学习应用来说，最方便的是变分法，我们将通过介绍 VAE 的方式来介绍该方法。

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
 - 贝叶斯估计 ■ 变分贝叶斯法
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

证明下式：

$$\log p(X) - \mathcal{D}[q(z) \| p(z | X)] = E_{z \sim q}[\log[p(X) | z]] - \mathcal{D}[Q(z) \| P(z)]$$

其中 \mathcal{D} 为 KL-divergence，即 $\mathcal{D}(P(x) \| Q(x)) = E_{x \sim P}(\log p(x) - \log q(x))$ 。

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

见附件内容

- 1 怎样学数学
- 2 机器学习的各种角度和建模流程
- 3 概率论和统计学复习
- 4 极大似然估计
- 5 贝叶斯估计和变分贝叶斯
- 6 矩阵和张量求导
- 7 总结

- ▶ 对于大部分人来说，本章的难度都是相当大的；
- ▶ 核心：需要反复练习极大似然函数和张量求导；
- ▶ 建议自己找数学题反复练习，直到掌握为止；
- ▶ HMM 推导背下来就好（可选）；
- ▶ VAE 的推导和应用我们将会在后文当中讲到。

- ▶ 极大似然求导的推导；
- ▶ 张量求导。

- ▶ 能力允许的情况下，尽可能阅读英文原文，中文版有大量错误；
- ▶ 建议阅读章节：1、2、3、5、6、7、9、10、11；
- ▶ 建议跳过理论部分：例如 Asymptotic Normality 可以暂时跳过；
- ▶ 由于成书时间较早，后续章节的大部分内容应用性已经不是很高。