贝叶斯分类器

一、贝叶斯定理

1.1 贝叶斯定理

1. 设 $\mathbb{S}$ 为试验 E 的样本空间； $B_1,B_2,\cdots,B_n$ 为 E 的一组事件。若：
   - $B_i\bigcap B_j=\phi,i\ne j,i,j=1,2,\cdots,n$
   - $B_1\bigcup B_2\bigcup\cdots\bigcup B_n=\mathbb{S}$

   则称 $B_1,B_2,\cdots,B_n$ 为样本空间 $\mathbb{S}$ 的一个划分。
2. 如果 $B_1,B_2,\cdots,B_n$ 为样本空间 $\mathbb{S}$ 的一个划分，则对于每次试验，事件 $B_1,B_2,\cdots,B_n$ 中有且仅有一个事件发生。
3. 全概率公式：设试验 E 的样本空间为 $\mathbb{S}$ ， A 为 E 的事件， $B_1,B_2,\cdots,B_n$ 为样本空间 $\mathbb{S}$ 的一个划分，且 $p(B_i)\ge 0(i=1,2,\cdots,n)$ 。则有：

$$p(A)=p(A\mid B_1)p(B_1)+p(A\mid B_2)p(B_2)+\cdots+p(A\mid B_n)p(B_n)=\sum_{j=1}^n p(A\mid B_j)p(B_j)$$

4. 贝叶斯定理：设试验 E 的的样本空间为 $\mathbb{S}$， A 为 E 的事件， $B_1,B_2,\cdots,B_n$ 为样本空间 $\mathbb{S}$ 的一个划分，且 $p(A)>0,p(B_i)\ge 0(i=1,2,\cdots,n)$ ，则有： $p(B_i\mid A)=\frac{p(A|B_i)p(B_i)}{\sum_{j=1}^n p(A|B_j)p(B_j)}$ 。

1.2 先验概率、后验概率

1. 先验概率：根据以往经验和分析得到的概率。

   后验概率：根据已经发生的事件来分析得到的概率。
2. 例：假设山洞中有熊出现的事件为 Y ，山洞中传来一阵熊吼的事件为 X 。
   - 山洞中有熊的概率为 $p(Y)$ 。它是先验概率，根据以往的数据分析或者经验得到的概率。
   - 听到熊吼之后认为山洞中有熊的概率为 $p(Y\mid X)$ 。它是后验概率，得到本次试验的信息从而重新修正的概率。

二、朴素贝叶斯法

1. 朴素贝叶斯法是基于贝叶斯定理与特征条件独立假设的分类方法。

   对给定的训练集：
   - 首先基于特征条件独立假设学习输入、输出的联合概率分布。
   - 然后基于此模型，对给定的输入 $\vec{\mathbf{x}}$ ，利用贝叶斯定理求出后验概率最大的输出 y 。
2. 朴素贝叶斯法不是贝叶斯估计，贝叶斯估计是最大后验估计。

2.1 原理

1. 设输入空间 $\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^n$ 为 n 维向量的集合，输出空间为类标记集合 $\mathcal{Y}=\{c_1,c_2,\cdots,c_k\}$ 。

   令 $\vec{\mathbf{x}}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$ 为定义在 $\mathcal{X}$ 上的随机向量，y 为定义在 $\mathcal{Y}$ 上的随机变量。

令 $p(\vec{\mathbf{x}},y)$ 为 $\vec{\mathbf{x}}$ 和 y 的联合概率分布，假设训练数据集 $\mathbb{D}=\{(\vec{\mathbf{x}}_1,\tilde{y}_1),(\vec{\mathbf{x}}_2,\tilde{y}_2),\cdots,(\vec{\mathbf{x}}_N,\tilde{y}_N)\}$ 由 $p(\vec{\mathbf{x}},y)$ 独立同分布产生。

朴素贝叶斯法通过训练数据集学习联合概率分布 $p(\vec{\mathbf{x}},y)$。具体的学习下列概率分布：

- 先验概率分布： $p(y)$ 。
- 条件概率分布： $p(\vec{\mathbf{x}}\mid y)=p(x_1,x_2,\cdots,x_n\mid y)$ 。

2. 朴素贝叶斯法对条件概率做了特征独立性假设：$p(\vec{\mathbf{x}}\mid y)=p(x_1,x_2,\cdots,x_n\mid y)=\prod_{j=1}^n p(x_j\mid y)$ 。
   - 这意味着在分类确定的条件下，用于分类的特征是条件独立的。
   - 该假设使得朴素贝叶斯法变得简单，但是可能牺牲一定的分类准确率。
3. 根据贝叶斯定理：

$$p(y\mid\vec{\mathbf{x}})=\frac{p(\vec{\mathbf{x}}\mid y)p(y)}{\sum_{y'}p(\vec{\mathbf{x}}\mid y')p(y')}$$

考虑分类特征的条件独立假设有：

$$p(y\mid\vec{\mathbf{x}})=\frac{p(y)\prod_{i=1}^n p(x_i\mid y)}{\sum_{y'}p(\vec{\mathbf{x}}\mid y')p(y')}$$

则朴素贝叶斯分类器表示为：

$$f(\vec{\mathbf{x}})=\arg\max_{y\in\mathcal{Y}}\frac{p(y)\prod_{i=1}^n p(x_i\mid y)}{\sum_{y'}p(\vec{\mathbf{x}}\mid y')p(y')}$$

由于上式的分母 $p(\vec{\mathbf{x}})$ 与 y 的取值无关，则分类器重写为：$f(\vec{\mathbf{x}})=\arg\max_{y\in\mathcal{Y}}p(y)\prod_{i=1}^n p(x_i\mid y)$ 。

2.2 期望风险最小化

1. 朴素贝叶斯分类器是后验概率最大化，等价于期望风险最小化。
2. 令损失函数为：

$$L(y,f(\vec{\mathbf{x}}))=\begin{cases}1, & y\neq f(\vec{\mathbf{x}})\\ 0, & y=f(\vec{\mathbf{x}})\end{cases}$$
$$R_{exp}(f)=\mathbb{E}[L(y,f(\vec{\mathbf{x}}))]=\sum_{\vec{\mathbf{x}}\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}}L(y,f(\vec{\mathbf{x}}))p(\vec{\mathbf{x}},y)$$

3. 根据 $p(\vec{\mathbf{x}},y)=p(\vec{\mathbf{x}})p(y\mid\vec{\mathbf{x}})$ 有：

$$R_{exp}(f)=\mathbb{E}[L(y,f(\vec{\mathbf{x}}))]=\sum_{\vec{\mathbf{x}}\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}}L(y,f(\vec{\mathbf{x}}))p(\vec{\mathbf{x}},y)=\mathbb{E}_X[\sum_{y\in\mathcal{Y}}L(y,f(\vec{\mathbf{x}}))p(y\mid\vec{\mathbf{x}})]$$

为了使得期望风险最小化，只需要对 $\mathbb{E}_X$ 中的元素极小化。

令 $\hat{y}=f(\vec{\mathbf{x}})$ ，则有：

$$\begin{aligned}\arg\min_{\hat{y}}\sum_{y\in\mathcal{Y}}L(y,\hat{y})p(y\mid\vec{\mathbf{x}})&=\arg\min_{\hat{y}}\sum_{y\in\mathcal{Y}}p(y\neq\hat{y}\mid\vec{\mathbf{x}})\\&=\arg\min_{\hat{y}}(1-p(\hat{y}\mid\vec{\mathbf{x}}))=\arg\max_{\hat{y}}p(\hat{y}\mid\vec{\mathbf{x}})\end{aligned}$$

即：期望风险最小化，等价于后验概率最大化。

2.3 算法

1. 在朴素贝叶斯法中，学习意味着估计概率：$p(y)$， $p(x_i \mid y)$ 。
2. 可以用极大似然估计相应概率。
    - 先验概率 $p(y)$ 的极大似然估计为：$p(y=c_k)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N I(\tilde y_i=c_k)$
    - 设第 j 个特征 x_j 可能的取值为 $\{a_{j,1},a_{j,2},\cdots,a_{j,s_j}\}$，则条件概率 $p(x_j=a_{j,l}\mid y=c_k)$ 的极大似然估计为：

    $$p(x_j=a_{j,l}\mid y=c_k)=\frac{\sum_{i=1}^N I(x_{i,j}=a_{j,l},\tilde y_i=c_k)}{\sum_{i=1}^N I(\tilde y_i=c_k)}\\ j=1,2,\cdots,n;\ l=1,2,\cdots,s_j;\ k=1,2,\cdots,K$$

    其中：I 为示性函数， $x_{i,j}$ 表示第 i 个样本的第 j 个特征。
3. 朴素贝叶斯算法：
    - 输入：
        - 训练集 $\mathbb D=\{(\vec{\mathbf x}_1,\tilde y_1),(\vec{\mathbf x}_2,\tilde y_2),\cdots,(\vec{\mathbf x}_N,\tilde y_N)\}$ 。

          $\vec{\mathbf x}_i=(x_{i,1},x_{i,2},\cdots,x_{i,n})^T,x_{i,j}$ 为第 i 个样本的第 j 个特征。其中 $x_{i,j}\in\{a_{j,1},a_{j,2},\cdots,a_{j,s_j}\}$ ， $a_{j,l}$为第 j 个特征可能取到的第 l 个值。
        - 实例 $\vec{\mathbf x}$ 。
    - 输出：实例 $\vec{\mathbf x}$ 的分类
    - 算法步骤：
        - 计算先验概率以及条件概率：

        $$p(y=c_k)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N I(\tilde y_i=c_k),k=1,2,\cdots,K\\ p(x_j=a_{j,l}\mid y=c_k)=\frac{\sum_{i=1}^N I(x_{i,j}=a_{j,l},\tilde y_i=c_k)}{\sum_{i=1}^N I(\tilde y_i=c_k)}\\ j=1,2,\cdots,n;\ l=1,2,\cdots,s_j;\ k=1,2,\cdots,K$$

        - 对于给定的实例 $\vec{\mathbf x}=(x_1,\ x_2,\cdots,x_n)^T$，计算：$p(y=c_k)\prod_{j=1}^n p(x_j\mid y=c_k)$ 。
        - 确定实例 $\vec{\mathbf x}$ 的分类：$\hat y=\arg\max_{c_k} p(y=c_k)\prod_{j=1}^n p(x_j\mid y=c_k)$ 。

2.4 贝叶斯估计

1. 在估计概率 $p(x_i\mid y)$ 的过程中，分母 $\sum_{i=1}^N I(\tilde y_i=c_k)$ 可能为 0 。这是由于训练样本太少才导致 c_k 的样本数为 0 。而真实的分布中， c_k 的样本并不为 0 。

   解决的方案是采用贝叶斯估计（最大后验估计）。
2. 假设第 j 个特征 x_j 可能的取值为 $\{a_{j,1},a_{j,2},\cdots,a_{j,s_j}\}$ ，贝叶斯估计假设在每个取值上都有一个先验的计数 λ 。即：

   $$p_\lambda(x_j=a_{j,l}\mid y=c_k)=\frac{\sum_{i=1}^N I(x_{i,j}=a_{j,l},\tilde y_i=c_k)+\lambda}{\sum_{i=1}^N I(\tilde y_i=c_k)+s_j\lambda}\\ j=1,2,\cdots,n;\ l=1,2,\cdots,s_j;\ k=1,2,\cdots,K$$

   它等价于在 x_j 的各个取值的频数上赋予了一个正数 λ。

若 c_k 的样本数为0，则它假设特征 x_j 每个取值的概率为 $\frac{1}{s_j}$，即等可能的。

3. 采用贝叶斯估计后，$p(y)$ 的贝叶斯估计调整为:

$$p_\lambda(y=c_k)=\frac{\sum_{i=1}^N I(\tilde{y}_i=c_k)+\lambda}{N+K\lambda}$$

   - 当 $\lambda=0$ 时，为极大似然估计当 $\lambda=1$ 时，为拉普拉斯平滑
   - 若 c_k 的样本数为 0，则假设赋予它一个非零的概率 $\frac{\lambda}{N+K\lambda}$ 。

三、半朴素贝叶斯分类器

1. 朴素贝叶斯法对条件概率做了特征的独立性假设：$p(\vec{\mathbf{x}}\mid y)=p(x_1,x_2,\cdots,x_n\mid y)=\prod_{j=1}^n p(x_j\mid y)$ 。

   但是现实任务中这个假设有时候很难成立。若对特征独立性假设进行一定程度上的放松，这就是半朴素贝叶斯分类器`semi-naive Bayes classifiers` 。

2. 半朴素贝叶斯分类器原理：适当考虑一部分特征之间的相互依赖信息，从而既不需要进行完全联合概率计算，又不至于彻底忽略了比较强的特征依赖关系。

3.1 独依赖估计 OED

1. 独依赖估计`One-Dependent Estimator:OED`是半朴素贝叶斯分类器最常用的一种策略。它假设每个特征在类别之外最多依赖于一个其他特征，即:

$$p(\vec{\mathbf{x}}\mid y)=p(x_1,x_2,\cdots,x_n\mid y)=\prod_{j=1}^n p(x_j\mid y,x_j^P)$$

   其中 x_j^P 为特征 x_j 所依赖的特征，称作的 x_j 父特征。

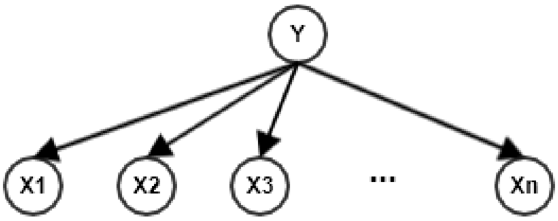
2. 如果父属性已知，那么可以用贝叶斯估计来估计概率值 $p(x_j\mid y,x_j^P)$ 。现在的问题是：如何确定每个特征的父特征?

   不同的做法产生不同的独依赖分类器。

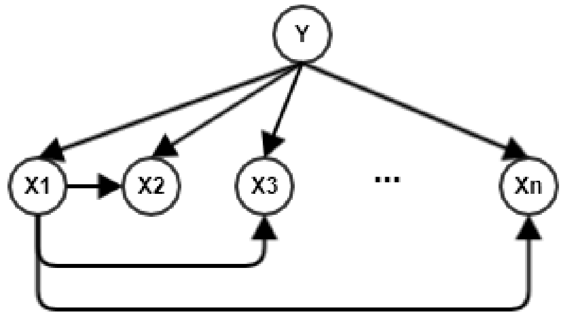
3.1.1 SPODE

1. 最简单的做法是：假设所有的特征都依赖于同一个特征，该特征称作超父。然后通过交叉验证等模型选择方法来确定超父特征。这就是`SPODE:Super-Parent ODE`方法。

   假设节点 `Y` 代表输出变量 y ，节点 `Xj` 代表属性 x_j 。下图给出了超父特征为 x_1 时的 `SPODE` 。



朴素贝叶斯



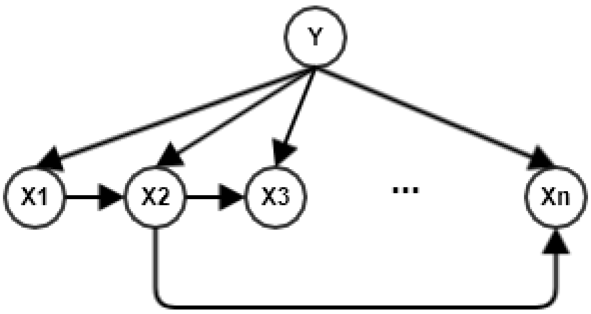
半朴素贝叶斯：SPODE

3.1.2 TAN

1. `TAN:Tree Augmented naive Bayes`是在最大带权生成树算法基础上，通过下列步骤将特征之间依赖关系简化为如下图所示的树型结构：
    - 计算任意两个特征之间的条件互信息。记第 i 个特征 x_i 代表的结点为 $\mathbf{X}_i$，标记代表的节点为 $\mathbf{Y}$ 则有：

    $$I(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j \mid \mathbf{Y}) = \sum_y \sum_{x_i} \sum_{x_j} p(x_i, x_j \mid y) \log \frac{p(x_i, x_j \mid y)}{p(x_i \mid y) p(x_j \mid y)}$$

      如果两个特征 x_i, x_j 相互条件独立，则 $p(x_i, x_j \mid y) = p(x_i \mid y) p(x_j \mid y)$ 。则有条件互信息 $I(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j \mid \mathbf{Y}) = 0$，则在图中这两个特征代表的结点没有边相连。
    - 以特征为结点构建完全图，任意两个结点之间边的权重设为条件互信息 $I(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j \mid \mathbf{Y})$ 。
    - 构建此完全图的最大带权生成树，挑选根结点（下图中根节点为节点 $\mathbf{X}_1$)，将边置为有向边。
    - 加入类别结点 $\mathbf{Y}$ ，增加 $\mathbf{Y}$ 到每个特征的有向边。因为所有的条件概率都是以 y 为条件的。



半朴素贝叶斯：TAN

四、其它讨论

1. 朴素贝叶斯分类器的优点：
    - 性能相当好，它速度快，可以避免维度灾难。
    - 支持大规模数据的并行学习，且天然的支持增量学习。

2. 朴素贝叶斯分类器的缺点：
    - 无法给出分类概率，因此难以应用于需要分类概率的场景。