MLE, MAP和Bayesian Estimation 概述

Created by **Qi Yang**

内容目录

1. 贝叶斯公式

需要先从贝叶斯公式谈起了:
数据集（观测集）的误差和局限导致了不确定性，为了量化和估计，就产生了概率论的研究。

举例说明: $$P = \frac{\text{发生数}}{\text{总观察数}}$$

$n_{1,1}$ $n_{1,2}$ ... $n_{1,j}$ ... $n_{1,n}$
$n_{2,1}$ $n_{2,2}$ ... ... $n_{2,n}$
... ...
$n_{i,1}$ ... ... $n_{i,j}$ ... $n_{i,n}$
... ...
$n_{m,1}$ $n_{m,2}$ ... $n_{m,j}$ ... $n_{m,n}$

如上图，推导概率的加和规则和乘积规则：如西瓜书（周志华著）中的选西瓜案例，行m可以表示西瓜的好坏（结果，观察值），列n可以表示西瓜的特征，其他实例同理，比如病症和病人体检结果等。
考虑两个变量X，取值$\{x_i\}$，其中$i = 1, \ldots, m$（第i行），和变量Y，取值$\{y_j\}$，其中$j = 1, \ldots, n$（第j列）。注意，这里我用x表示行，用y表示列，这和PRML原文中略有出入，但不影响推论和结果。

显然，**边缘概率** $p(X = i) = \frac{c_j}{N_{total}}$，其中$c_j = \sum_{k=1}^{n} n_{i,k}$
也即**加和规则**。

$$p(x = i) = \sum_{k=1}^{n} \frac{n_{i,k}}{N_{total}}$$

$p(Y = j)$ 同理，由其他变量的边缘化或者加和求得。

条件概率，我们可以考虑在$x = i$的势力中，$y = j$的概率（比例），可以写作条件概率$p(y = j|x = i)$,计算方式可以为为单元格i, j的值与列i总数的比例，即:

$$p(y = j|x = i) = \frac{n_{i,j}}{c_j}$$

进一步，**全概率**：$p(x = i, y = j) = \frac{n_{i,j}}{N_{total}}$
所以可以得到**乘法规则**:

$$p(x = i, y = j) = \frac{n_{i,j}}{N_{total}} = \frac{n_{i,j}}{c_j} \cdot \frac{c_j}{N_{total}} = p(y = j|x = i)p(X = i)$$

所以有:

- 加和规则 sum -> 边缘概率 -> $p(x) = \sum_{Y} p(x|y)$

- 乘积规则 product -> 联合概率 -> $p(x,y)=p(x|y)p(y)=p(y|x)p(x)$

可以得到**贝叶斯公式**:

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

先验知识 prior: $p(\theta)$
后验概率 posterior: $p(\theta|x)$
- $p(\theta|x)=\frac{p(x|\theta)p(\theta)}{p(x)}$
- $posterior=\frac{likehood\cdot prior}{evidence}$

频率学派（Frequentist） 和 贝叶斯学派（Bayesian）的争论:
频率学家认为参数是固定值，所以应该通过“估计”来确定
贝叶斯学派的观点是在仅有实际的观察数据集的时候，参数的不确定性通过概率分布来表示，需要应用先验知识。他们将概率解释成信念（belief）的度量，或者一个事件发生的信心（confidence）。

举例，事件A发生:

- P(A): 抛硬币，猜正反面。P(A|X): 庄家的口碑，表示该信息为X，比如是韦小宝，抽老千的概率就很高了
- P(A): 代码可能有一个bug。P(A|X): 写代码的是个新手，或者是个老鸟

一名贝叶斯主义者在看到证据后的信念的更新,表示为P(A|X)，解释为在给定证据X后的A事件发生的概率(后验概率）。

---

2. 最大似然估计

到这里就可以继续介绍最大似然了，简而言之，是给定数据集的情况下最大化概率的参数：给定一堆数据，假如我们知道它是从某一种分布中随机取出来的，可是我们并不知道这个分布具体的参，即**“模型已定，参数未知”**。例如，我们知道这个分布是正态分布，但是不知道均值和方差；或者是二项分布，但是不知道均值。 最大似然估计（MLE，Maximum Likelihood Estimation）就可以用来估计模型的参数。MLE的目标是找出一组参数，使得模型产生出观测数据的概率最大:

$$L(\theta)=L(x_1,x_2,\ldots,x_n|\theta)=\prod_{i=1}^{n}p(x_i|\theta),\theta\in\Theta$$

假设样本是独立同分布得到。
最大似然:
$\hat{\theta}=\mathrm{argmax}\,\hat{l}\,(\theta)$

$$H(\theta)=\ln(L(\theta))=\ln\prod_{i=1}^{n}p(x_i|\theta)=\sum_{i=1}^{n}\mathrm{ln}p(x_i|\theta)$$

怎么求一个函数的最值？当然是求导，然后让导数为0，那么解这个方程得到的θ就是了（当然，前提是函数L(θ)连续可微）。那如果θ是包含多个参数的向量那怎么处理啊？当然是求L(θ)对所有参数的偏导数，也就是梯度了，那么n个未知的参数，就有n个方程，方程组的解就是似然函数的极值点了，当然就得到这n个参数了。
即：
- 单个变量：$\frac{dH(\theta)}{d\theta}=\frac{dlnl(\theta)}{d_\theta}=0$
- 多个变量：θ 可以用向量表示

- 未知参数：$\theta=[\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_s]^T$
- 梯度算子：$\nabla_\theta H(\theta)=\left[\frac{\partial}{\partial\theta_1},\frac{\partial}{\partial\theta_2},\ldots\frac{\partial}{\partial\theta_s}\right]^T$
- 解方程: $\nabla_\theta H(\theta)=\nabla_\theta \mathrm{ln} l(\theta)=\sum_{i=0}^N\nabla_\theta \mathrm{ln} P(x_i|\theta)=0$

求最大似然函数估计值的一般步骤：

- （1）写出似然函数；
- （2）对似然函数取对数，并整理；
- （3）求导数，令导数为0，得到似然方程；
- （4）解似然方程，得到的参数即为所求；

以高斯分布为例，参数分别是μ 和 σ^2
- 似然函数的取对数：
$\mathrm{ln}L(\mu,\sigma^2)=-\frac{n}{2}ln(2\pi)-\frac{n}{2}ln(\sigma^2)-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^n(x_i-\mu)^2$
- 求导后的方程组：$\begin{cases}\frac{\partial \mathrm{ln}L(\mu,\sigma^2)}{\partial\mu}=\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^n(x_i-\mu)=0\\ \frac{\partial \mathrm{ln}L(\mu,\sigma^2)}{\partial\sigma^2}=-\frac{n}{2\sigma^2}+\frac{1}{2\sigma^4}\sum_{i=1}^n(x_i-\mu)^2=0\end{cases}$
- 求解的结果：$\begin{cases}\mu^\star=\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i\\ \sigma^{\star2}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n(x_i-\bar{x})^2\end{cases}$
- $\left(\mu^\star,\sigma^{\star2}\right)$

我们首先考虑高斯分布的有偏估计的情况。无偏估计中，参数的期望值应该和参数值相同，—— 理解样本方差和分布方差的区别。

$$E(\sigma^{\star2})=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n(x_i-\bar{x})^2=\frac{n-1}{n}\sigma^2$$

所以对高斯分布的概率估计是有偏估计，整个推导也比较简单：

$$E(\sigma^{\star2})=E[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n(X_i-\bar{X})^2]=\frac{1}{n}(E[\sum_{i=1}^n X_i^2-2\sum_{i=1}^n X_i\bar{X}-\sum_{i=1}^n\bar{X}^2])$$

$$= \frac{1}{n}\left(E[\sum_{i=1}^{n} X_i^2] - E[2\bar{X}\sum_{i=1}^{n} X_i] - E[\bar{X}^2]\right) = \frac{1}{n}\left(nE[X_i^2] - nE[\bar{X}^2]\right)$$

所以有:

$$E(\sigma^{\star 2}) = E[X_i^2] - E[\bar{X}^2]$$

又有:
$V(x) = E(x^2) - (E(x))^2$,
$E(x_i^2) = V(x_i^2) + (E(x_i))^2 = \sigma^2 + \mu^2$,
$E(\bar{x}^2) = V(\bar{x}^2) + (E(\bar{x}))^2 = \frac{\sigma^2}{n} + \mu^2$ ，带入即得。加入因子 $\frac{N-1}{N}$ 可变为无偏。

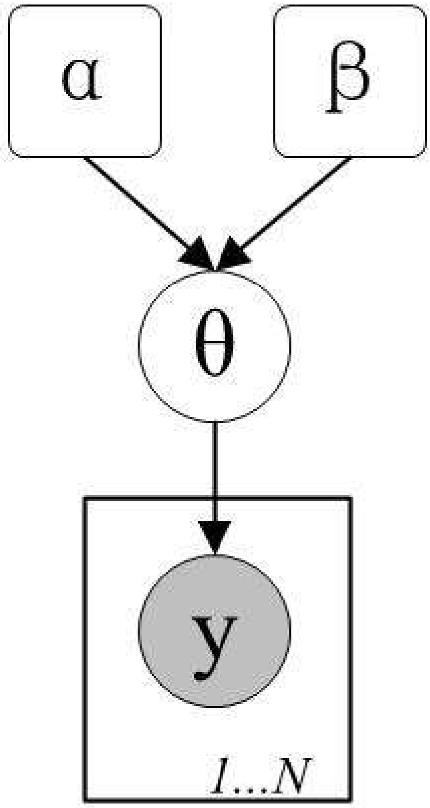
---

3. 极大后验估计

MAP与MLE最大区别是MAP中加入了模型参数本身的概率分布

MAP允许我们把先验知识加入到估计模型中，这在样本很少的时候是很有用的，因为样本很少的时候我们的观测结果很可能出现偏差，此时先验知识会把估计的结果“拉”向先验，实际的预估结果将会在先验结果的两侧形成一个顶峰。通过调节先验分布的参数，比如beta分布的，我们还可以调节把估计的结果“拉”向先验的幅度，越大，这个顶峰越尖锐。这样的参数，我们叫做预估模型的“超参数”。

我们以棒球比赛的击球为例，在棒球比赛中存在的击球率的概念，就是用一个运动员击中棒球的次数除以他总的击球数量。一般情况下，棒球运动员的击球概率在0.266左右。高于这个值就是不错的运动员了。假设我们要预测一个运动员在某个赛季的击球率，我们可以使用已有的数据计算。但是假如我们要预测该运动员本次比赛或者赛季某段的击球率，直接拿来用是不合适的，因为球员状态会起伏。
我们用beta分布来修正观测到的球员击球率，用二项式分布表示击球成功与否。如图:



假设所有的球员的正常水平在0.27，可以用参数$\alpha = 81, \beta = 219$表示，因为这个分布的均值为0.27.

那么参数该怎么估计呢？。MAP要考虑的问题既包括了参数的先验，也包括参数最大化的似然。 MAP优化的是一个后验概率，即给定了观测值后使概率最大：

$$\hat{\mu}_{\text{MAP}} = \textbf{argmax}_\mu p(\mu|X) = \textbf{argmax}_\mu \frac{p(X|\mu)p(\mu)}{p(X)} \propto \textbf{argmax}_\mu p(X|\mu)p(\mu)$$

我们可以看出第一项就是似然函数，第二项就是参数的先验知识。取log之后就是:

$$\textbf{argmax}_\mu \text{Pr}(\mu|X) = \textbf{argmax}_\mu log\text{P}r(\mu|X) = \textbf{argmax}_\mu log \prod_{x_i \in X} \text{P}r(x_i|\mu) \cdot \text{P}r(\mu)$$

$$= \textbf{argmax}_\mu log \sum_{x_i \in X} \{log\text{P}r(x_i|\mu)\} + log\text{P}r(\mu)$$

那么目标函数的导数即为：

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \mathcal{L} = \sum_i \frac{\partial}{\partial \mu} log\text{Binomial}(x_i|\mu) + \frac{\partial}{\partial \mu} log\text{Beta}(\mu|\alpha, \beta)$$

令导数为0，即的所求。
在击球的这个案例中，最后求得不同运动员的击球命中概率为$\text{Beta}(\alpha + x, \beta + n - x)$, n为总击球数，x为命中数。假设某个用户击球300次，成功100次，那么，根据计算的结果，用户的击球率的分布应当是$\text{Beta}(181, 419)$，其概率大约是均值0.303，要比平均水平略高。

---

4. Bayesian Estimation

MLE和MAP都属于频率学派，而贝叶斯推断为贝叶斯学派（显而易见）。

在贝叶斯公式中，

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

分母为归一化常数，确保了后验概率分布的合理性，积分为1.
则：

$$p(X)=\int p(X|\theta)p(\theta)d\theta=\int \text{likelihood}\cdot\text{prior}$$

也被称为边缘似然度(Marginal likelihood)或证据(evidence)，

在贝叶斯方法中，需要对参数的所有值进行积分。如上，贝叶斯方法通常考虑的是整个后验概率（这意味着我们不会因为与θ无关而忽略掉贝叶斯公式中的归一化项）。简单的说，对于贝叶斯方法，需要自始至终的使用加和和乘积。

如话题模型（上帝掷色子）

在对新的数据进行预测的时候：

$$p(x_{new})=\int_\theta p(x|\theta)p(\theta|X)d\theta$$

得到后验分布$p(\theta|X)$,需要对在整个参数空间进行全局积分，所以需要用到采样。
即：

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

5. 总结

Frequentist vs. Bayesian：
- 频率学派:
- 数据是可重复的随机采样(frequency)，eg. bootstrap
- 参数固定

- 贝叶斯：
    - 数据是可信采样
    - 参数未知，服从特定分布
    - 数据不变

MLE vs. MAP vs. Bayesian
- 数据X，参数θ, 新数据 $\theta^\star$
- Maximum likelihood estimation:
- 目标函数： $\text{argmax}P(X|\theta)$
- Maximum a Posteri estimation:

- 目标函数： $\text{argmax}P(\theta|X)$
- Bayesian estimation：
- 目标函数： $\int p(x|\theta)p(\theta|X)d\theta$

最大似然估计是最简单的形式，其假定参数虽然未知，但是为确定数值，就是找到使得样本的似然分布最大的参数。最大后验估计，和最大似然估计很相似，也是假定参数未知，但是为确定数值，只是目标函数为后验概率形式，多了一个先验概率项, **先验知识的加入，优化损失函数。**

而贝叶斯估计和二者最大的不同在于，假定把待估计的参数看成是符合某种先验概率分布的随机变量，而不是确定数值。在样本分布上，计算参数所有可能的情况，并通过计算参数的期望，得到后验概率密度:**ML和MAP只会给出一个最优的解， 然而贝叶斯模型会给出对参数的一个分布**

对样本进行观测的过程，就是把先验概率密度转化为后验概率密度，这样就利用样本的信息修正了对参数的初始估计值。在贝叶斯估计中，一个典型的效果就是，每得到新的观测样本，都使得后验概率密度函数变得更加尖锐，使其在待估参数的真实值附近形成最大的尖峰。——这个后续的同学讲解共轭和话题模型的时候会更多的涉及到。

supplement

需要补充的内容，用来加深理解。
在线性回归的问题中，给定了N个观察值$\{x_n\}$，对应其目标值的$\{t_n\}$的数据集，我们的目标是可以在给定新的x值的情况下，预测出t的值。直观的解决办法，构建函数$y(x)$,直接求出变量x的函数值即为预测值。

1. 线性基函数
   最简单的线性回归模型：

   $$y(x,w) = w_0 + w_1 \cdot x_1 + \ldots + w_D \cdot x_D$$

   这个模型中最关键的是参数集合 $\mathbf{w}$ 和 变量集合 $\mathbf{x}$, 为了克服线性模型的局限性，可以将输入变量转变为非线性的函数进行线性组合，即：

   $$y(x,w) = w_0 + \sum_{j=1}^{M-1} w_j \phi_j(x)$$

   其中，$\phi_j(x)$被称为基函数。通常会定义$\phi_0(x) = 1$,这时候：

   $$y(x,w) = \sum_{j=1}^{M-1} w_j \phi_j(x) = \mathbf{w}^T \phi(x)$$

   M为参数的总数，基函数的选择可以多样,sigmoid, gaussian, polynormial

对于给定的参数$\mathbf{w}$，我们利用误差函数来衡量预测值与真实数据集的差别：

$$E(\mathbf{w})=\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{(y(x_n,w)-t_n\}^2$$

通过最小化$E(\mathbf{w})$来解决曲线拟合问题。

进一步，为了控制过拟合的现象，会加入惩罚项（正则化）。

$$E(\mathbf{w})=\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{(y(x_n,w)-t_n\}^2+\frac{\lambda}{2}\left|\left|\mathbf{w}\right|\right|^2$$

,
其中 $\left|\left|\mathbf{w}\right|\right|^2=\mathbf{w}^T\mathbf{w}$

2. 曲线拟合
   在另一方面，我们可以使用概率分布来表达关于目标变量的值的不确定性。即假设目标变量满足均值为$y(x,w)$，方差为超参数$\beta=\frac{1}{\sigma^2}$ 的高斯分布——中心极限定律。这时候给出变量x,得到目标值t的概率：

$$p(t|x,\mathbf{w},\beta)=\mathcal{N}(t|y(x,(w),\beta))$$

   利用最大似然估计的方法，得到对数似然函数：

$$\mathbf{ln}L(t|x,\mathbf{w},\beta)=-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\{y(x_n,\mathbf{w})-t_n\}^2-\frac{n}{2}\,ln(2\pi)-\frac{n}{2}\,ln(\sigma^2)$$

   求得多项式系数的最大似然解（后两项无关），等价的最小化平方和误差函数。接着确定精度（方差），然后带入预测公式即可。

   同样的，我们可以进一步引入多项式系数$\mathbf{w}$的先验分布，假设分布为均值为0，精度为α（方差倒数）。使用贝叶斯定律，$\mathbf{w}$ 的后验概率正比于先验概率和似然函数的乘积：

$$p(\mathbf{w}|x,t,\alpha,\beta)\propto p(t|x,\mathbf{w},\beta)p(\mathbf{w}|\alpha)$$

   同理，此时我们最大化后验概率，只需要最小化下式：

$$\frac{\beta}{2}\sum_{n=1}^{N}\{y(x_n,\mathbf{w})-t_n\}^2+\frac{\alpha}{2}\,\mathbf{w}^T\mathbf{w}$$

   显然，等价于正则后的平方和误差函数。

3. Beyesian 拟合

当我们讨论了曲线拟合中的最大似然估计和最大后验估计的方法后，其实依然在进行对参数的点估计，在前面讨论贝叶斯估计的时候，我们给出的预测概率：$p(x_{new}) = \int_\theta p(x|\theta)p(\theta|X)d\theta$应该改写成：

$$p(t|x,\mathbf{x},\mathbf{t}) = \int_w p(t|x,w)p(w|\mathbf{x},\mathbf{t})d\mathbf{w}$$

,
其中，$\mathbf{x},\mathbf{t}$为训练集合，而x为新的测试点，t为预测值(省略了超参数α,β)。
类似的，对积分进行解析求解，得到预测分布的高斯形式：

$$p(t|x,\mathbf{x},\mathbf{t}) = \mathcal{N}(t|m(x),s^2(x))$$

其中，均值和方差分别为：

$$m(x) = \beta\phi(x)^T S\sum_{n=1}^{N}\phi(x_n)t_n$$

$$s^2(x) = \beta^{-1} + \phi(x)^T S\phi(x)$$

可以看出，预测分布的均值和方差都依赖与x，而且，方差的第一项表示了预测值的不确定性，有目标变量的噪声造成。第二项为参数的不确定性。具体的推导和S的含义，还请继续阅读PRML-2.3和3.5节，这里不多介绍了。

---

reference:

1. PRML-1.2
2. https://blog.csdn.net/zengxiantao1994/article/details/72787849
3. https://www.cnblogs.com/sylvanas2012/p/5058065.html
4. http://www.datalearner.com/blog/1051505532393058