实验三：参数估计与非参数估计

Parameter estimation & Nonparameter estimation

参数估计 — Eager Learning

- 已知：
  - 样本的概率密度分布
- 求解：
  - 解析表达式的参数
- 主要方法有：

	最大似然估计	最大后验概率估计	贝叶斯估计
学习过程	**训练数据 D**	**D + 先验概率** $\mathbf{p}(\theta)$	**D + 先验概率** $\mathbf{p}(\theta)$
估计过程	$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} p(D\mid\theta)$	$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} p(\theta\mid D)$	$\hat{\theta} = \int \theta p(\theta\mid D)d\theta$
预测过程	$y = p(x\mid\hat{\theta})$	$y = p(x\mid\hat{\theta})$	$y = p(x\mid\hat{\theta})$

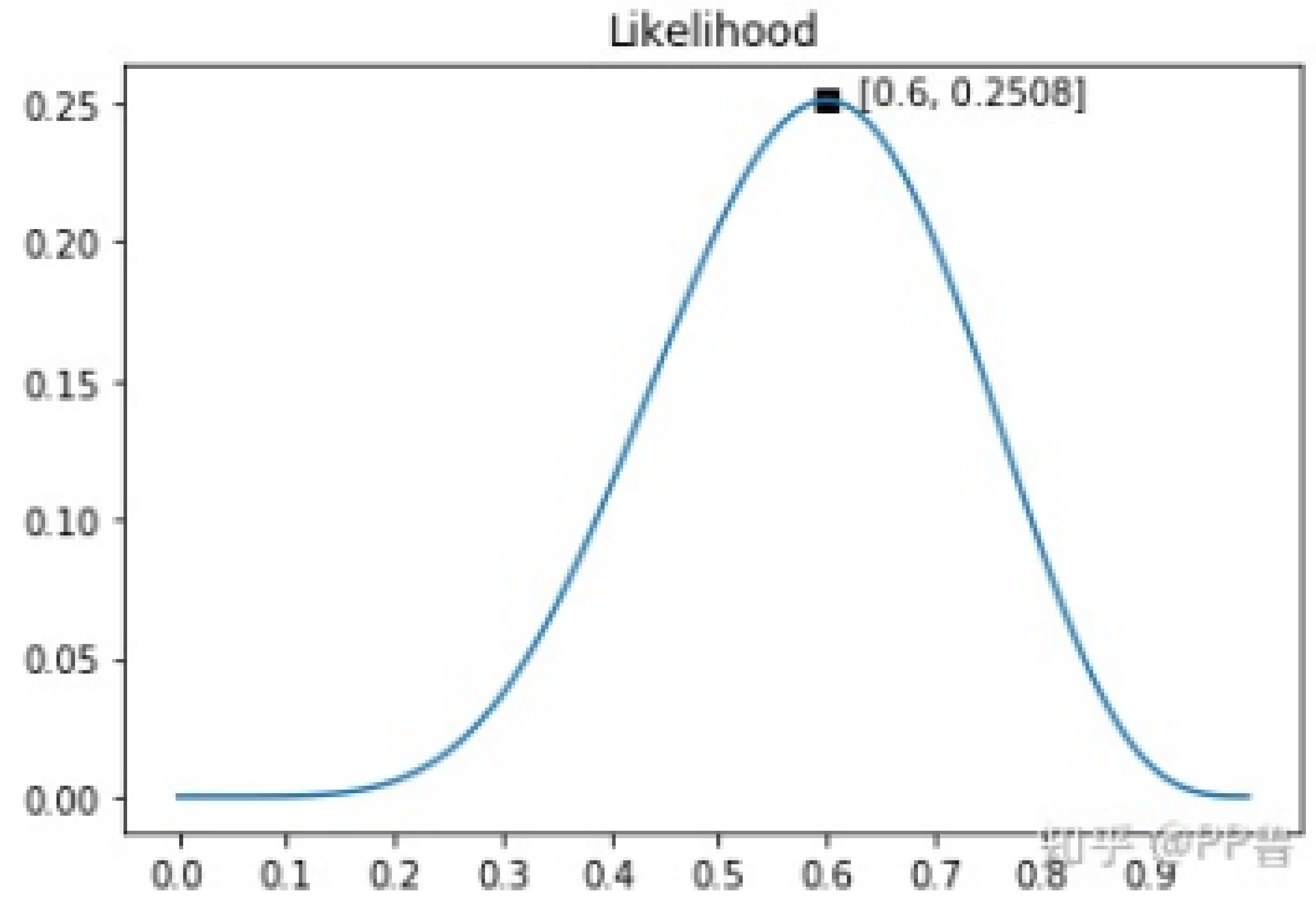
·似然估计

似然反映的是：已知结果，反推原因。似然函数表示的是基于观察的数据，取不同的参数θ时，统计模型以多大的可能性接近真实观察数据。例如：已经给你了一系列硬币正反情况，但你并不知道硬币的构造，下次下注时你要根据已有事实，反推硬币的构造。例如，当观察到硬币“10正0反”的事实，猜测硬币极有可能每次都是正面；当观察到硬币“6正4反”的事实，猜测硬币有可能不是正反均匀的，每次出现正面的可能性是0.6。

似然函数通常用L表示。观察到抛硬币“6正4反”的事实，硬币参数θ取不同值时，似然函数表示为：

$$L(\theta; 6\text{正}4\text{反}) = C_{10}^{6} \times \theta^{6} \times (1-\theta)^{4} \tag{2}$$

$$L(\theta; \mathbf{X}) = P_1(\theta; X_1) \times P_2(\theta; X_2) \ldots \times P_n(\theta; X_n) = \prod P_i(\theta; X_i)$$



最大似然估计 (MLE)

- 给定随机样本 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\} = \{\mathbf{x}_k\}_{k=1}^N$ 来自概率密度 $p(\mathbf{x} \,|\, \theta)$
- 假设样本是独立同分布的，则它们的联合概率分布为

$$p(\mathbf{X} \,|\, \theta) = p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N \,|\, \theta) = \prod_{k=1}^{N} p(\mathbf{x}_k \,|\, \theta)$$

- 估计使似然函数取最大值的参数 $\hat{\theta}$ ： $\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} \prod_{k=1}^{N} p(\mathbf{x}_k \,|\, \theta)$
- 令似然函数对 θ 的偏导数为零，求解 $\hat{\theta}$: $\frac{\partial}{\partial \theta} log \prod_{k=1}^{N} p(\mathbf{x}_k \,|\, \theta) = 0$

最大似然估计 (MLE)

- 定义对数似然函数： $L(\theta) = log\prod_{k=1}^{N} p(\mathbf{x}_k | \theta)$

- 令似然函数对 θ 的偏导数为零：

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial\theta} L(\theta) \\
&= \frac{\partial}{\partial\theta} log\prod_{k=1}^{N} p(\mathbf{x}_k | \theta) \\
&= \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial}{\partial\theta} log p(\mathbf{x}_k | \theta) \\
&= \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{p(\mathbf{x}_k | \theta)} \frac{\partial}{\partial\theta} p(\mathbf{x}_k | \theta)
\end{aligned}
$$

- 求得 $\hat{\theta}$，对于样本点进行预测 $y = p(x | \hat{\theta})$

最大似然估计 (MLE)

- 例：假设数据集 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\}$，服从高斯分布 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$，其中标准差 σ 已知，求均值 μ 的最大似然估计。

$$\theta = \mu \Rightarrow \hat{\theta} = \arg\max_{\theta} \sum_{k=1}^{N} logp(x_k \mid \theta)$$

$$= \arg\max_{\theta} \sum_{k=1}^{N} log\left(\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}} exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x_k - \mu)^2\right)\right)$$

$$= \arg\max_{\theta} \sum_{k=1}^{N} \left\{ log\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}} - \frac{1}{2\sigma^2}(x_k - \mu)^2 \right\}$$

$$\frac{\partial}{\partial\mu} \sum_{k=1}^{N} \left\{ log\frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}} - \frac{1}{2\sigma^2}(x_k - \mu)^2 \right\} = 0 \Rightarrow \boxed{\hat{\theta} = \mu = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} x_k}$$

数据集的样本均值

最大后验概率估计 (MAP)

- 已知：随机样本 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\}$，先验概率 $p(\theta)$
- 求解：后验概率 $p(\theta \mid \mathbf{X})$
- 根据贝叶斯规则：

$$p(\theta \mid \mathbf{X}) = \frac{\overset{\text{MLE}}{\boxed{p(\mathbf{X} \mid \theta)}}\overset{\text{Prior}}{\boxed{p(\theta)}}}{\cancel{p(\mathbf{X})}} \quad \text{常数项}$$

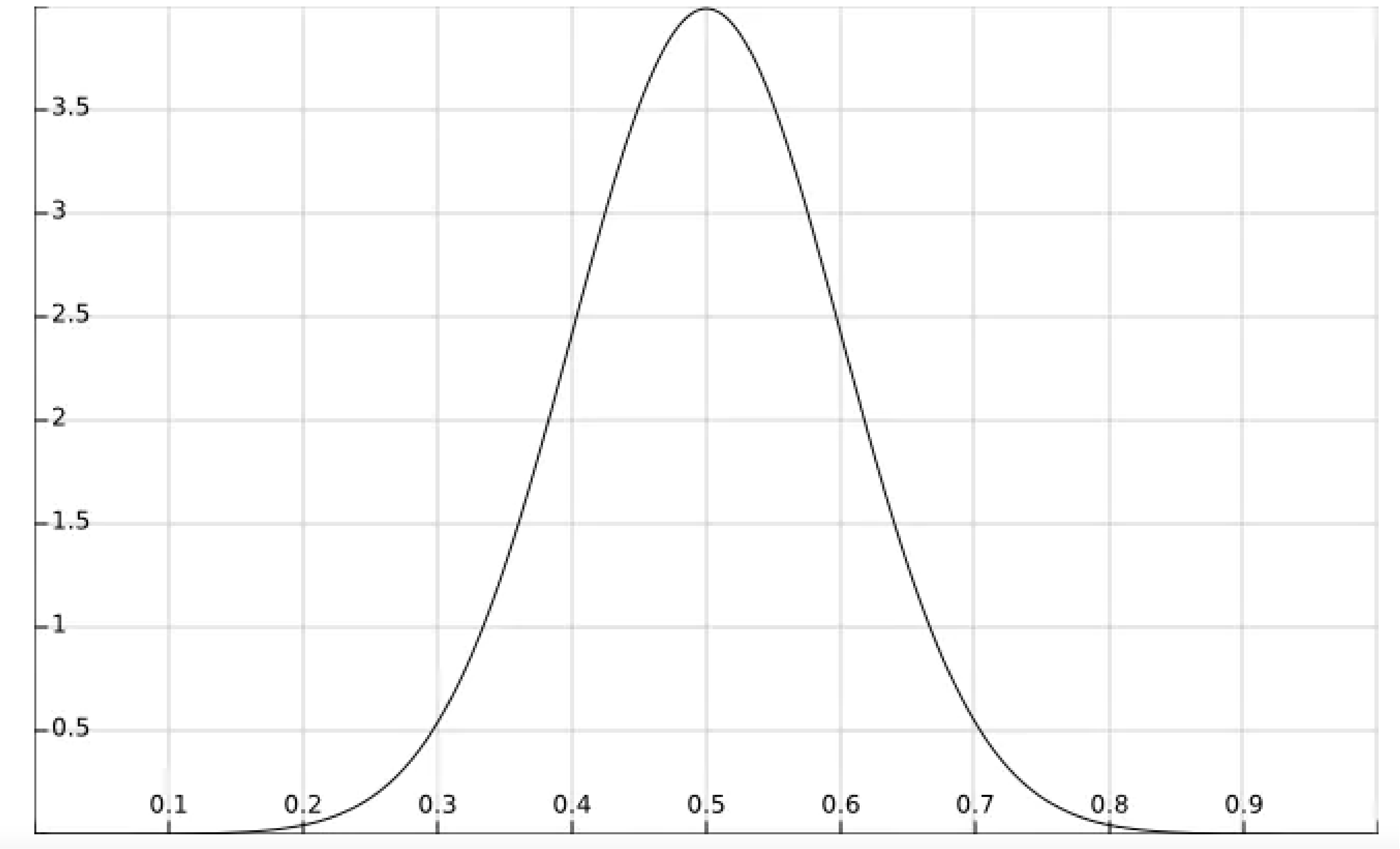
- 估计使最大后验概率取最大值的参数 $\hat{\theta}_{MAP}$ ：

$$\frac{\partial}{\partial\theta} p(\theta \mid \mathbf{X}) = 0 \text{ 或 } \frac{\partial}{\partial\theta}\left(p(\mathbf{X} \mid \theta)p(\theta)\right) = 0$$

在抛硬币的例子中，通常认为 $\theta=0.5$ 的可能性最大，因此我们用均值为 0.5，方差为 0.1 的高斯分布来描述 θ 的先验分布，当然也可以使用其它的分布来描述 θ 的先验分布。θ 的先验分布为：

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(\theta-\mu)^2}{2\sigma^2}}=\frac{1}{10\sqrt{2\pi}}e^{-50(\theta-0.5)^2}$$

先验分布的函数图如下：

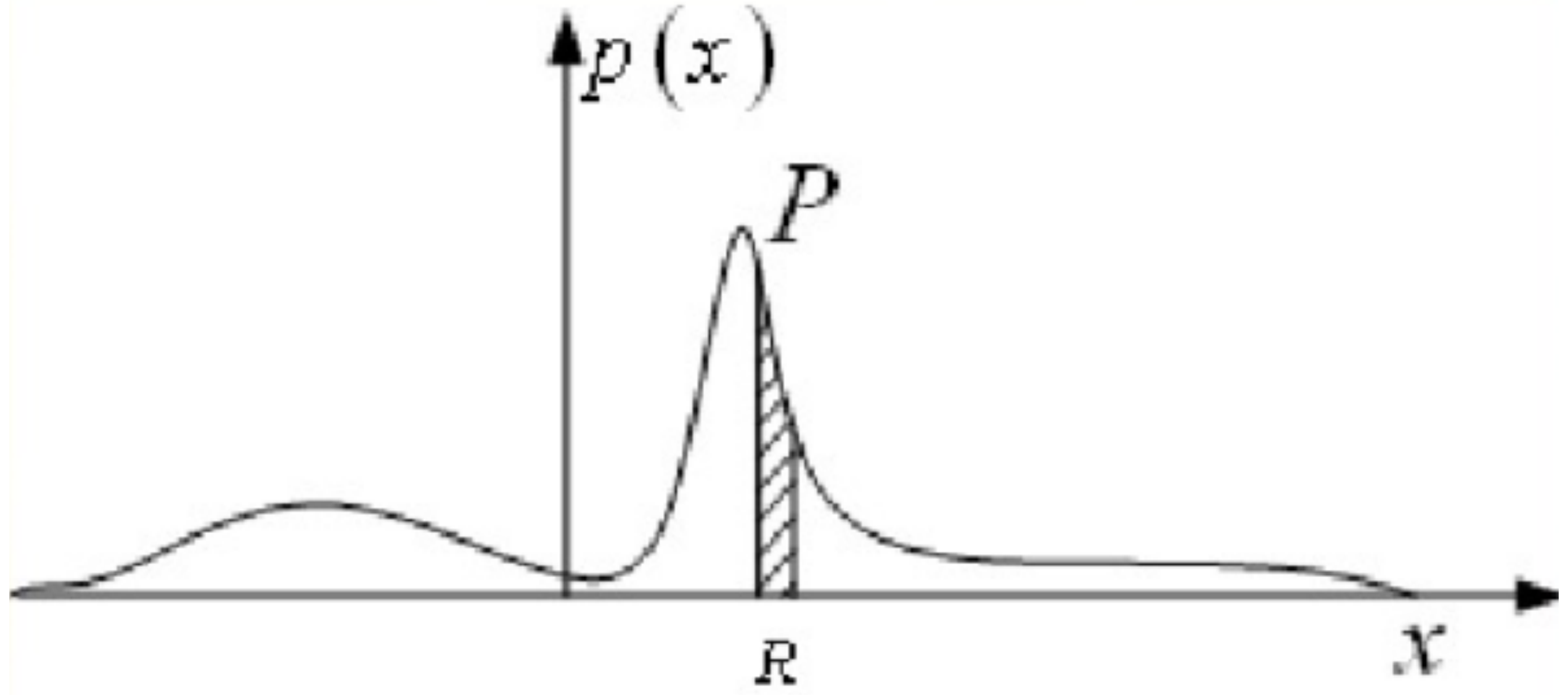


在最大似然估计中，已知似然函数为 $P(X|\theta)=\theta^6(1-\theta)^4$，因此：

$$P(X|\theta)P(\theta)=\theta^6\times(1-\theta)^4\times\frac{1}{10\sqrt{2\pi}}\times e^{-50(\theta-0.5)^2}$$

非参数估计 — Lazy Learning

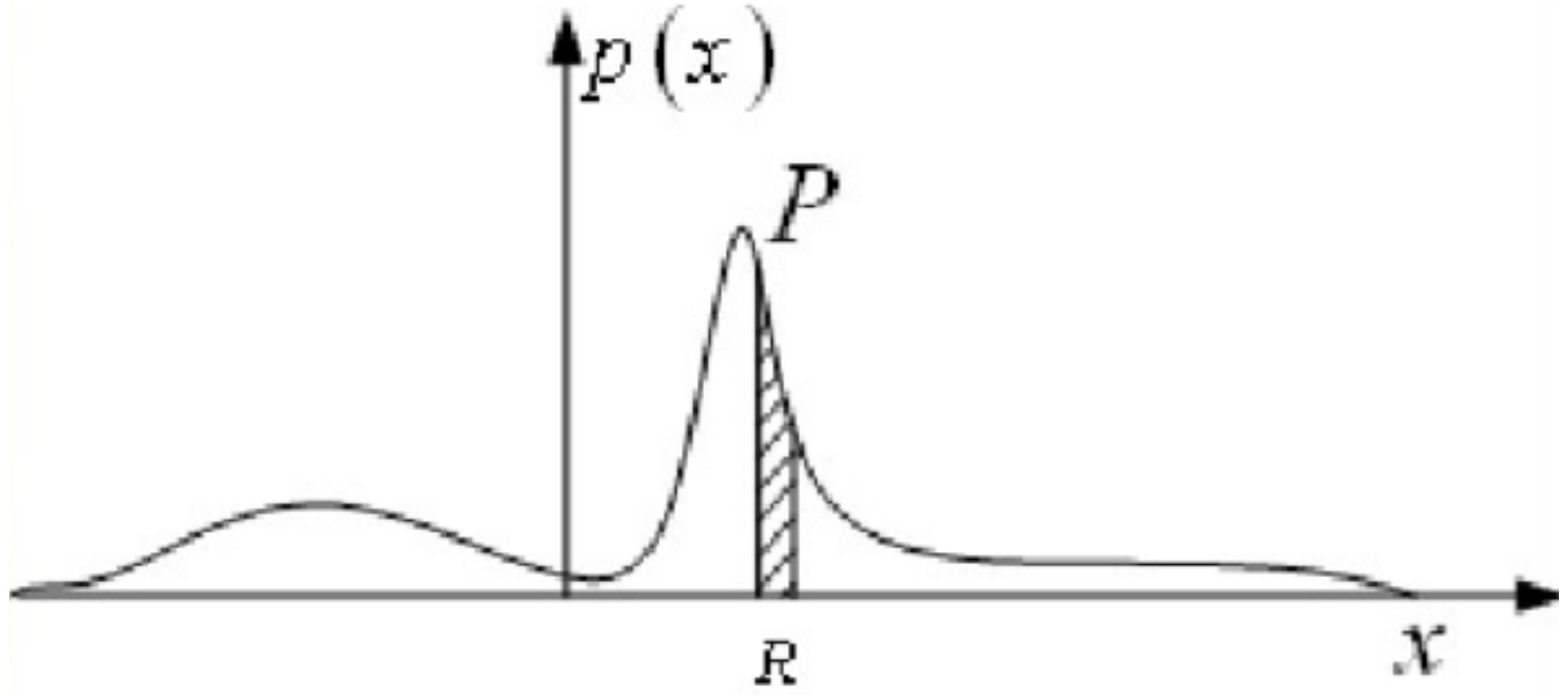
- 在非参数估计中，假定相似的输入具有相似的输出，不对基础密度假定任何形式的先验参数
- 非参数模型的复杂性依赖于训练集的大小，依赖于数据中问题的固有复杂性
- 当给定训练集时，并不计算模型，而将模型的计算推迟到给定一个检验实例时才进行，这会导致存储和计算量的增加。(比如：开卷考试)
- 核心思路：一个向量 $\mathbf{x}$ 落入区间 R 中的概率为 $p = \int_R p(x)dx$
- 主要方法：
  - 直方图估计
  - 核估计
  - k最近邻估计

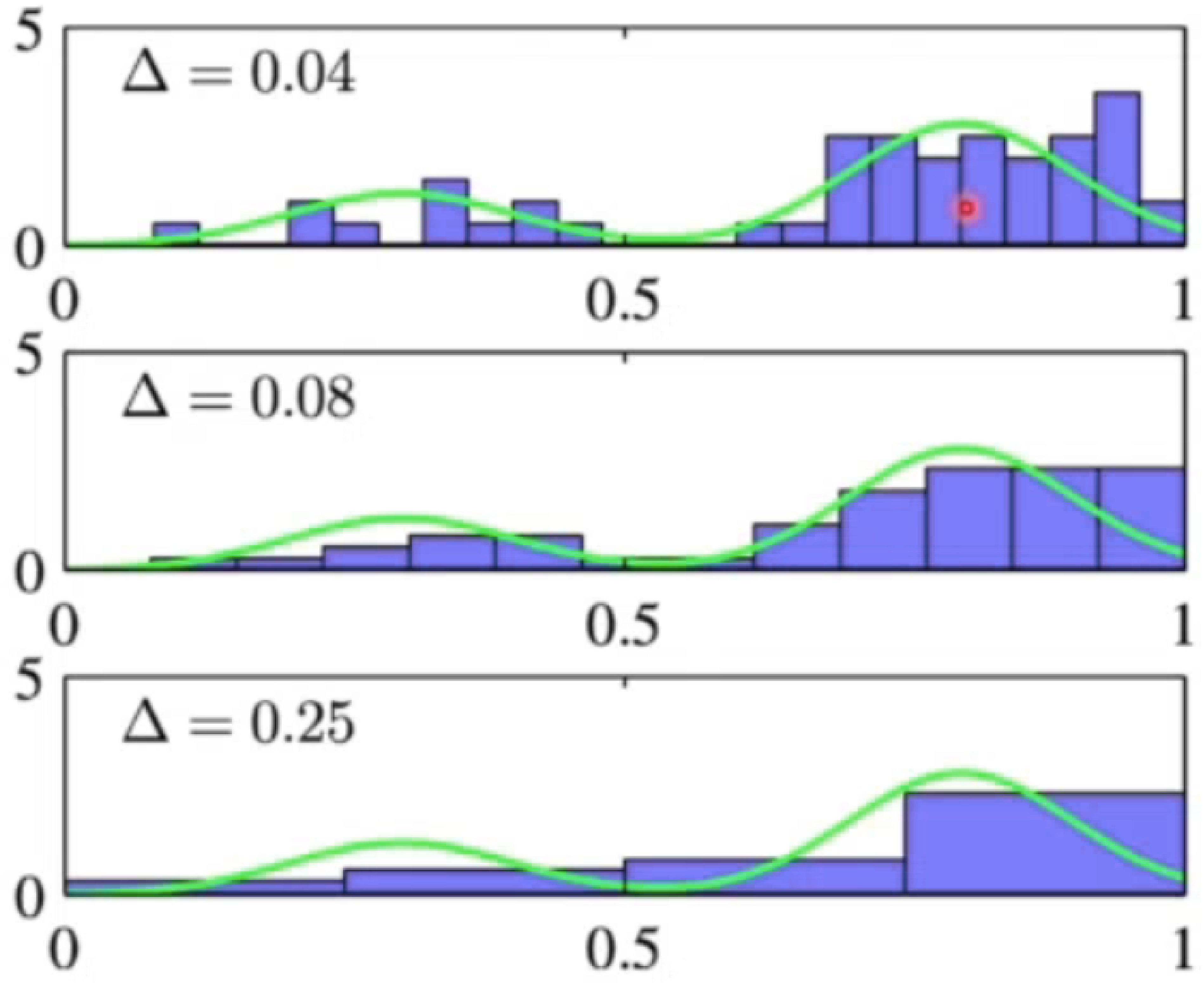


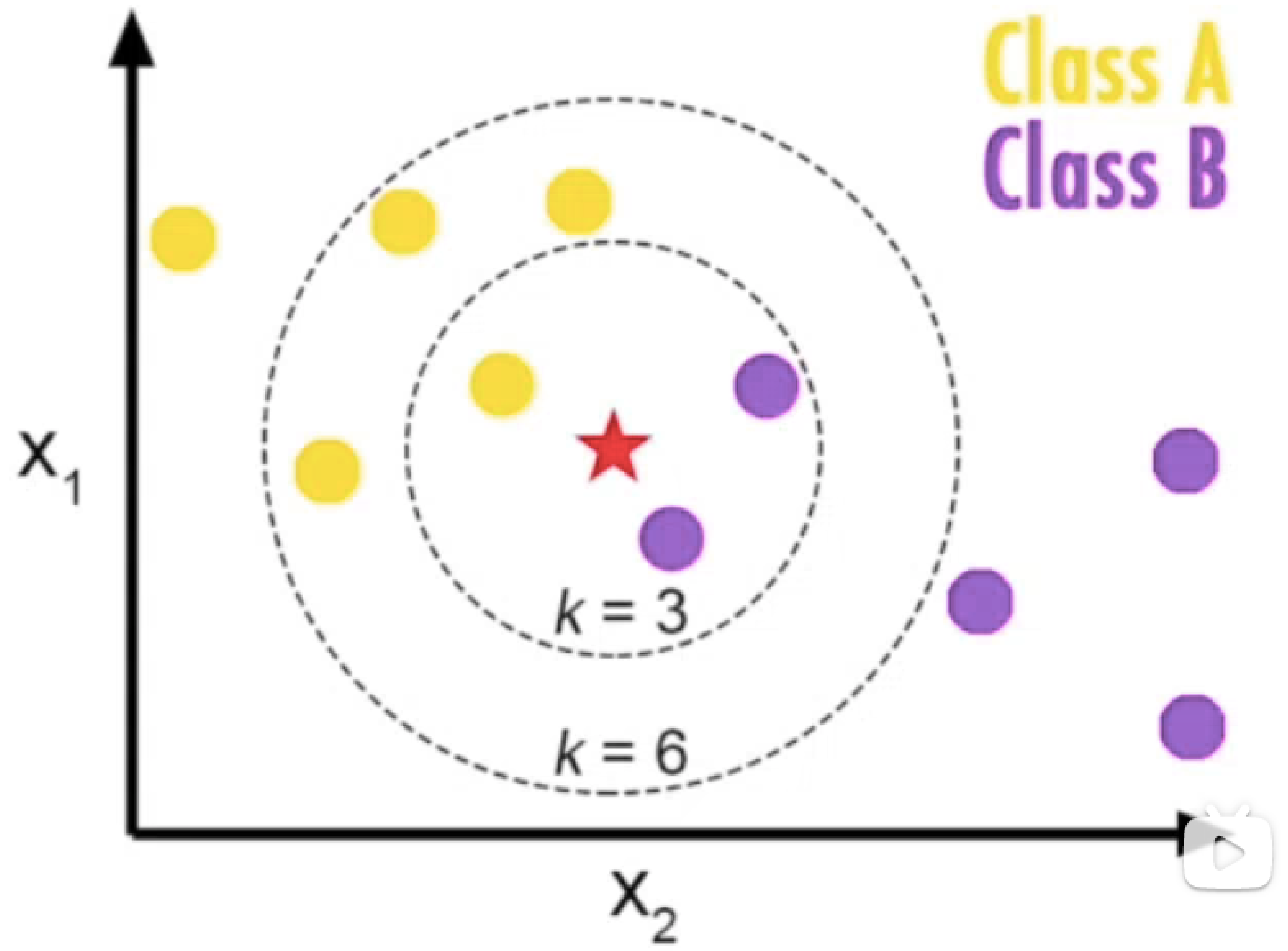
非参数估计

- 核心思路：一个向量 $\mathbf{x}$ 落入区间 R 中的概率为 $p = \int_R p(x)dx$
- 当样本数 n 足够大时， 可以近似地认为 $P \approx \dfrac{k}{n}$，其中 k 是出现该特征的频数。
- 假设密度函数 $p(x)$ 是连续的，那么在区域 R 足够小时，我们可以近似地认为 $p(x)$ 是一个常值函数，因此 $P \approx p(x)V$，其中 V **在多维情况下**是区域 R 的体积。

$$\boxed{\frac{k}{n} \approx P \approx p(x)V \ \Rightarrow\ p(x) \cong \frac{k}{nV}}$$




5
$\Delta = 0.04$
0
0
0.5
1
5
$\Delta = 0.08$
0
0
0.5
1
5
$\Delta = 0.25$
0
0
0.5
1


Class A
Class B
x_1
x_2
$k = 3$
$k = 6$

非参数估计

$$\boxed{p(x) \cong \frac{k}{nV}}$$

积分近似：$\lim V_n = 0$

固定 V 值，使用样本确定 K 值——核函数密度估计

频率近似：$\lim k_n = \infty$ & $\lim \frac{k_n}{n} = 0$

固定 K 值，使用样本确定 V 值——最近邻密度估计

- 当 $n \to \infty$ 时，V 值适当减小，k 值适当增加，上述两种方法均收敛于真实的概率密度函数。
- 优点：不需要任何对分布形式的假设，能根据数据特性自适应地估计出相应地密度函数

核函数密度估计

- **方窗函数**

$$\varphi(u) = \begin{cases} 1, |u| \le 1/2 \\ 0, otherwise \end{cases}$$

- **高斯窗口函数**

$$\varphi(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp\{-\frac{1}{2} \parallel u \parallel^2\}$$

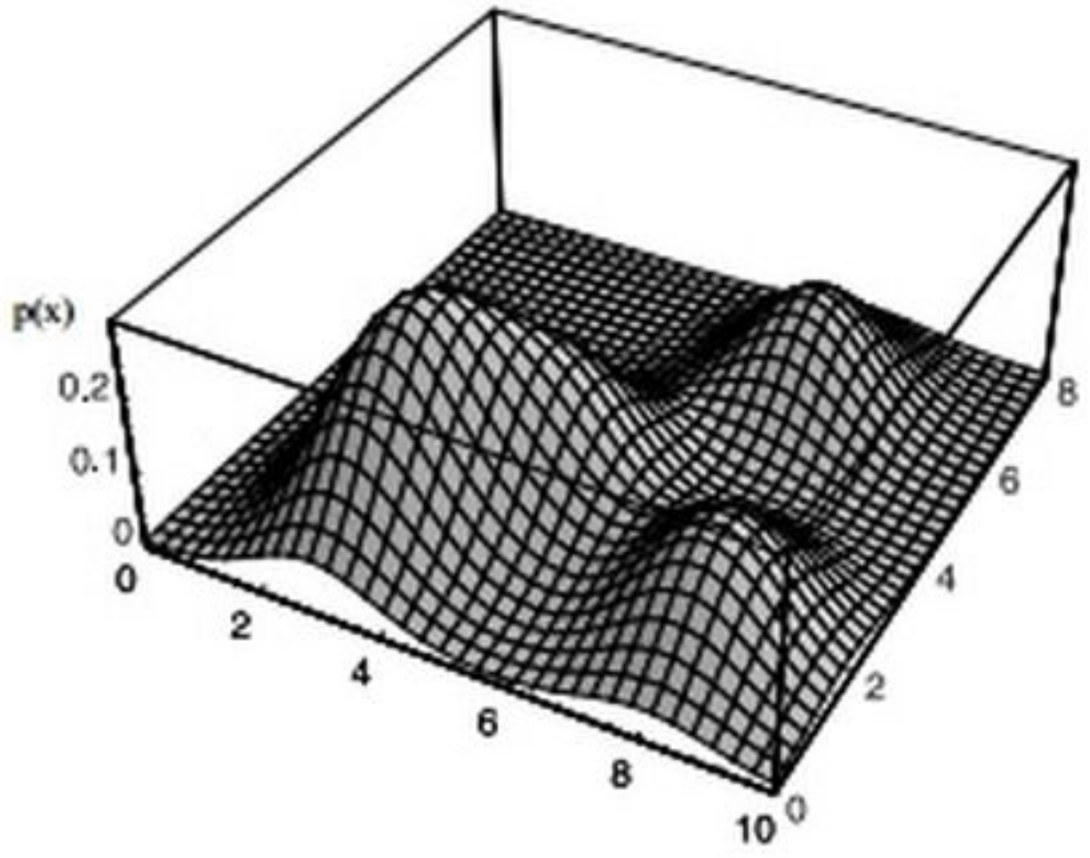
$$p(x) = \frac{k}{NV} \qquad K = \sum_{n=1}^{N} \varphi(\frac{x - x_n}{h}) \qquad V = h^D$$

密度函数的估计

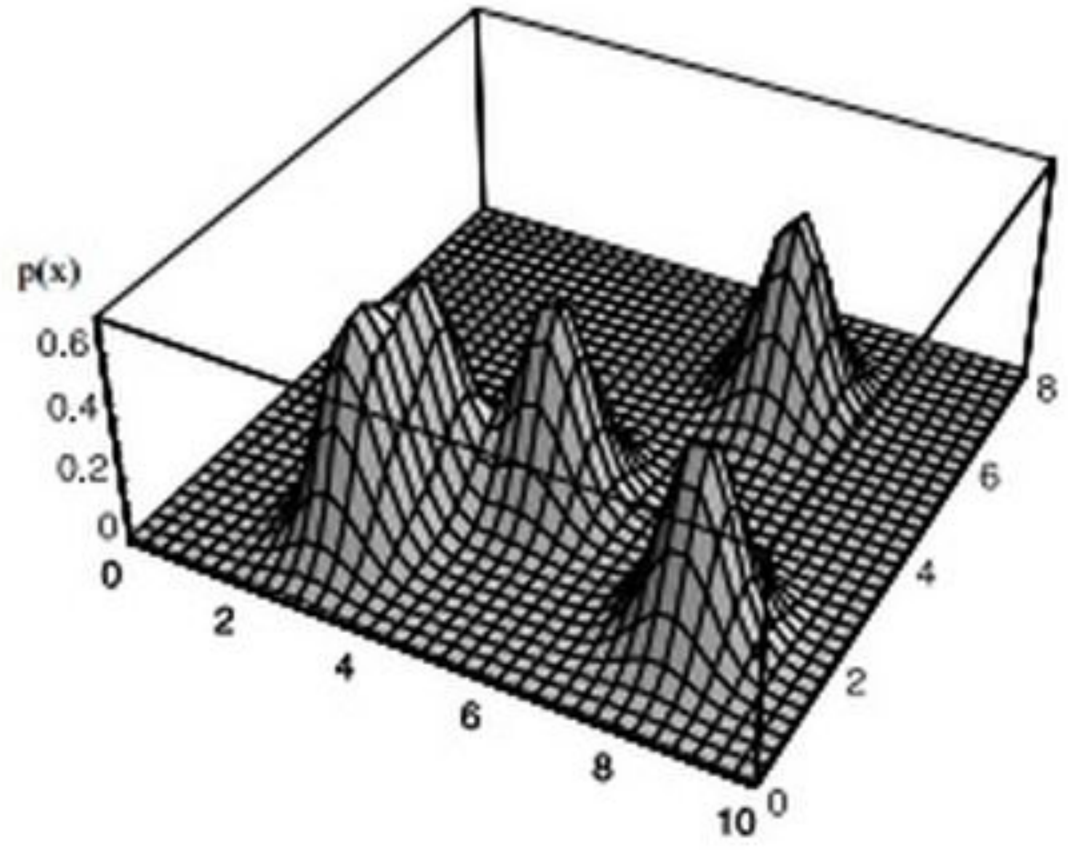
$$p(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{h^D} \varphi(\frac{x - x_n}{h})$$

$$p(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi h^2}} exp\left\{ - \frac{\parallel x - x_n \parallel^2}{2h^2} \right\}$$

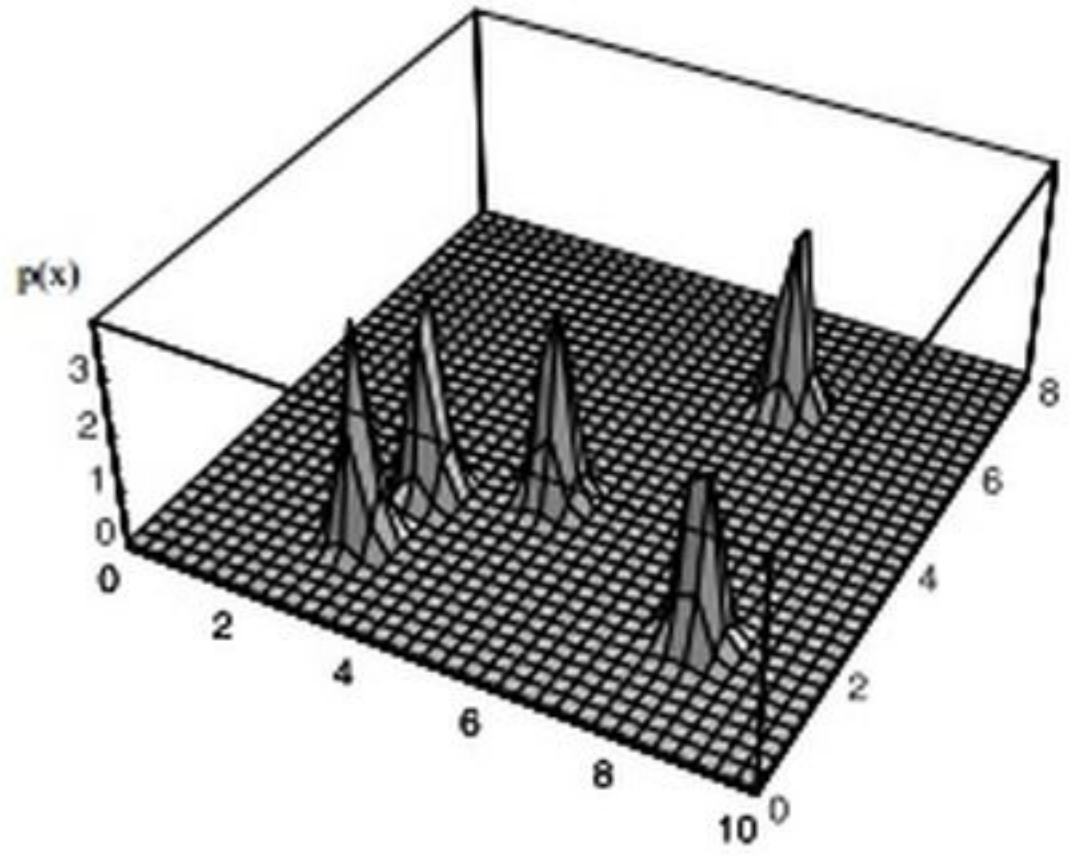
核函数密度估计



h=1



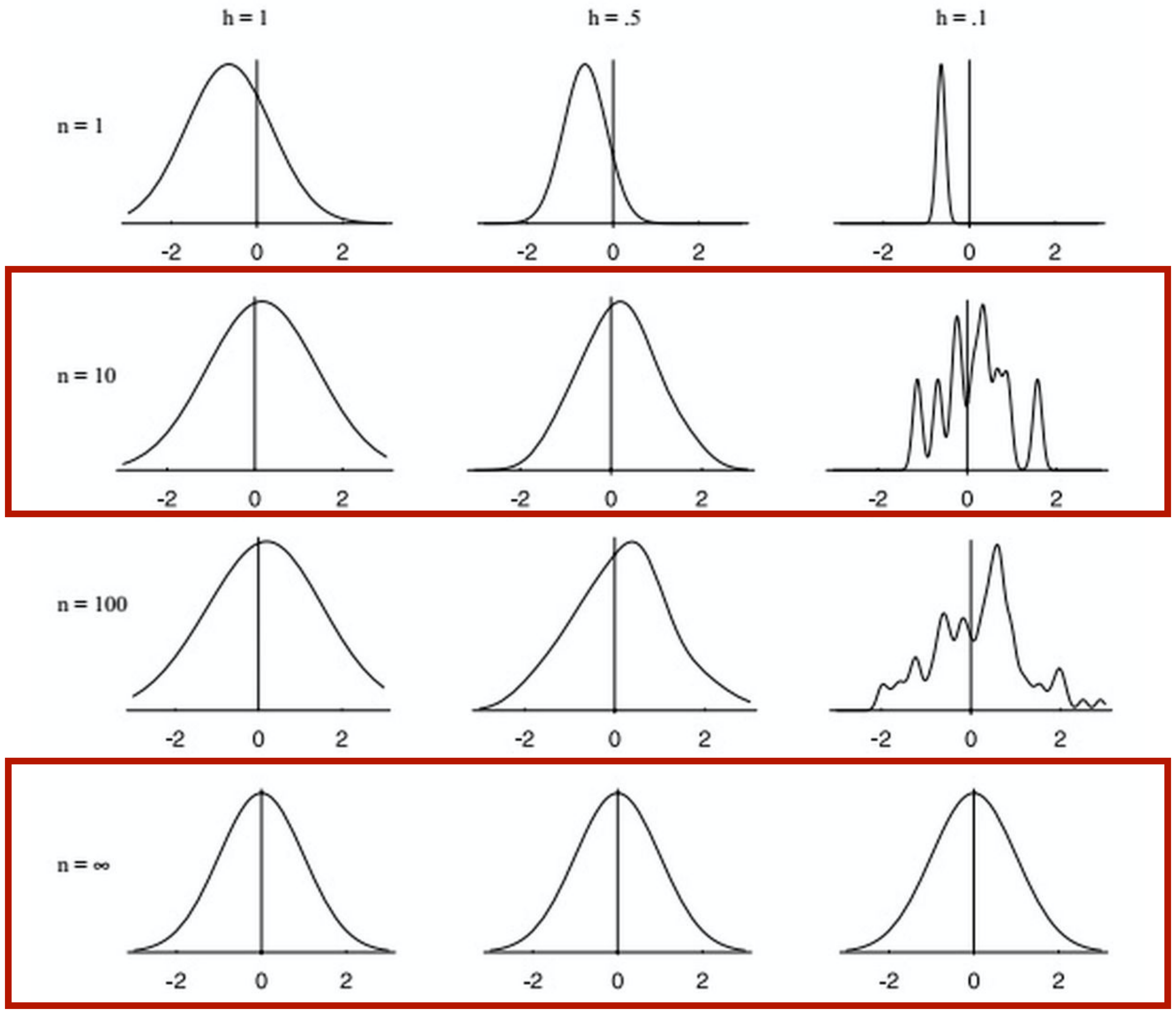
h=0.5



h=0.2

- **如何选择合适的窗口 h 是合理估计密度函数的关键问题**
    - 较大取值将产生过度平滑的密度估计，模糊了数据的空间结构。
    - 较小取值将产生又长又尖的密度估计，解释比较困难。

核函数密度估计



交叉检验确定最优 h 值

在样本量有限的情况下

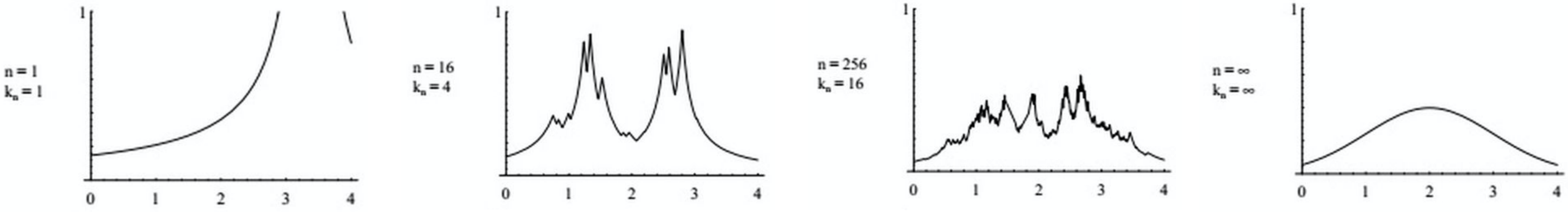
不同的 h 对非参估计的影响很大

当样本量趋于无穷时

非参估计都和真实的生成密度函数相匹配

k最近邻密度估计

- 在 k 近邻法中，区域大小 V 不再是样本数量 N 的函数，而是这 k 个训练数据的函数
- 窗口函数集中于 V or h 的选取，而 k 近邻法集中于 k 的选取
- 最近邻法可以看做是 k 近邻法的一种平凡情况（ n=1, k=1 ）
- 当样本量 n 足够大时，k 近邻法能有效地估计出真实的密度函数



k最近邻密度估计

用于分类时，非参估计可以直接用于估计类条件密度

- 已知：一个体积为 V_n 的区域 R_n，区域内共有 k_n 个样本，其中 k_n^i 个样本属于第 i 个类别 w_i
- 求解：w_i 类条件密度 $p(x|w_i)$

密度估计为：

$$p(x|w_i) = \frac{k_n^i}{nV_n}$$

先验密度的最大似然估计为：

$$p(w_i) = \frac{n_i}{N}$$

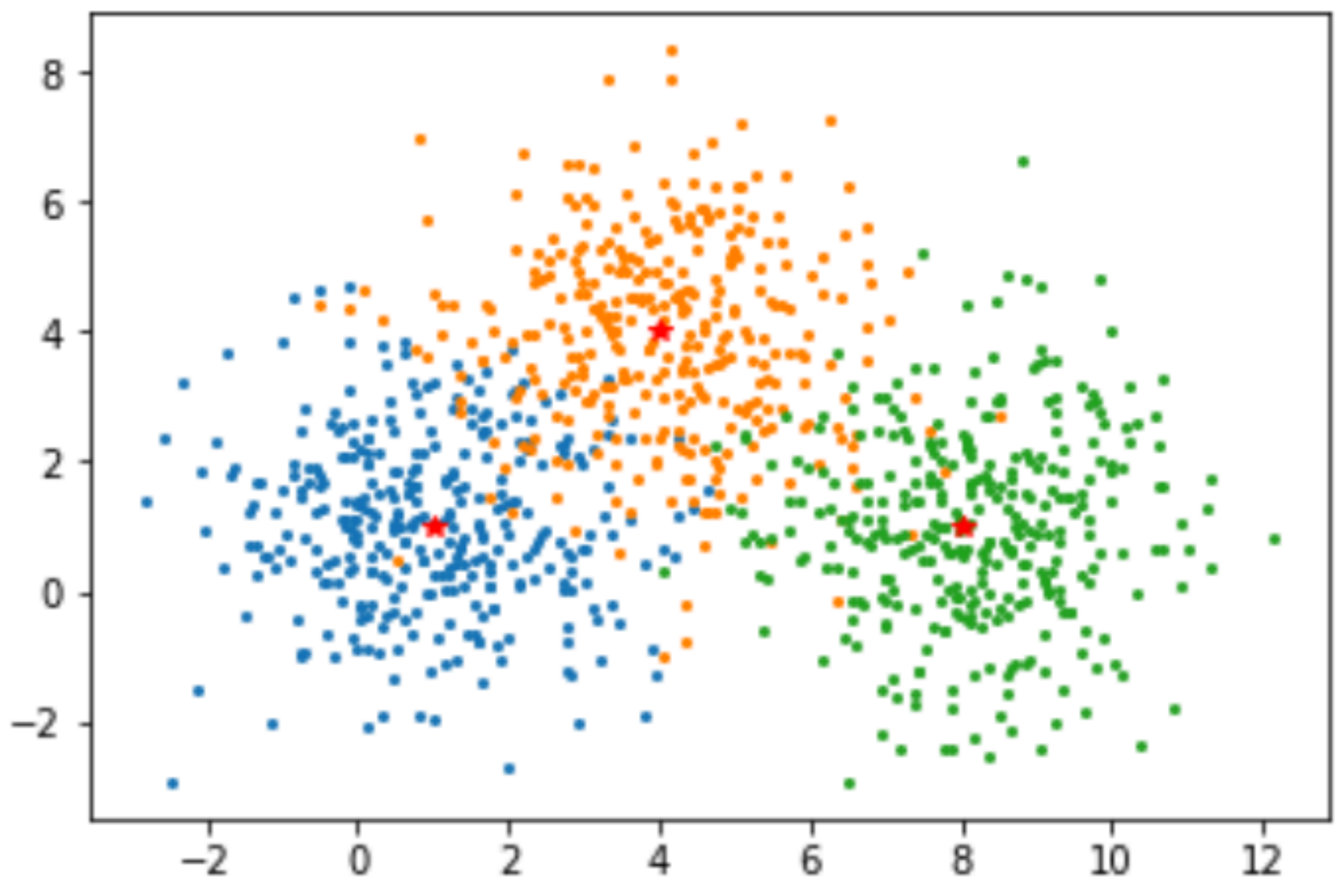
后验密度为：

$$p(w_i|x) = \frac{p(x|w_i)p(w_i)}{p(x)} = \frac{\frac{k_i}{n_i V} \cdot \frac{n_i}{N}}{\frac{k}{NV}} = \frac{k_i}{k}$$

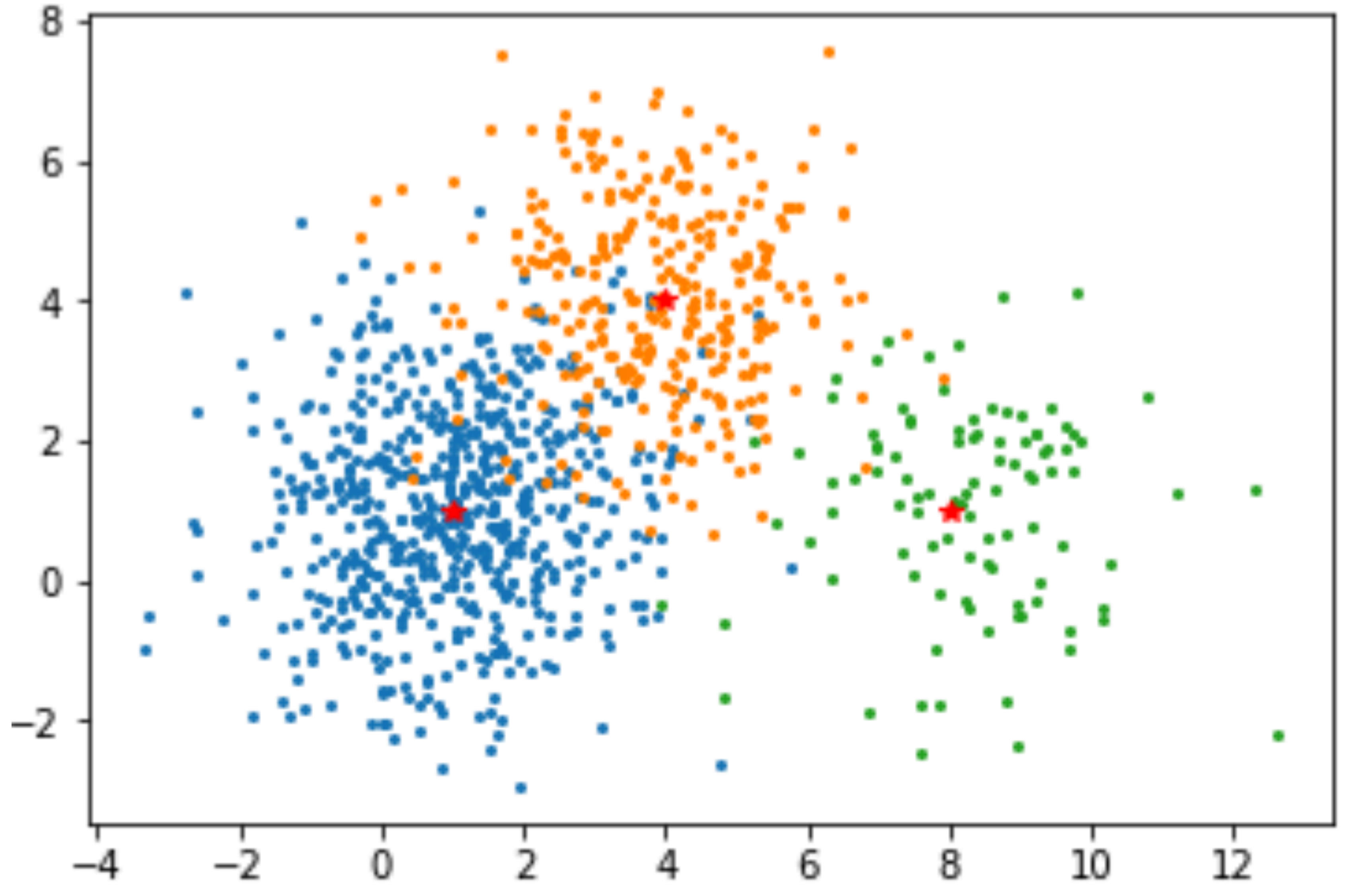
实验要求

np.random.multivariate_normal(mean, cov, temp_num)

- 数据: 生成两个各包含 N=1000 个二维随机矢量的数据集合 X_1 和 X_2，数据集合中随机矢量来自于三个分布模型，分别满足均值矢量 $\mathbf{m}_1=[1,1]^T,\mathbf{m}_2=[4,4]^T,\mathbf{m}_3=[8,1]^T$ T和协方差矩阵 $\mathbf{S}_1=\mathbf{S}_2=\mathbf{S}_3=2\mathbf{I}$，其中 $\mathbf{I}$ 是 2×2的单位矩阵。在生成数据集合 X 时，假设来自三个分布模型的先验概率相同 $p(w_1)=p(w_2)=p(w_3)=1/3$；而在生成数据集合 X ' 时，先验概率分别为 $p(w_1)=0.6,\ p(w_2)=0.3,\ p(w_3)=0.1$。



X_1



X_2

实验要求

以“学号+姓名(3)”的命名格式打包代码.py文件和实验报告.pdf文件发送至邮箱 jipeng.huang@mail.nankai.edu.cn

- 基本要求 (3’)

  在两个数据集合上应用“最大后验概率规则” 进行分类实验，计算分类错误率，分析实验结果。

- 中级要求 (2’)

  在两个数据集合上使用高斯核函数估计方法，应用“似然率测试规则”分类，在 [0.1, 0.5, 1, 1.5, 2] 范围内交叉验证找到最优 h 值，分析实验结果。

- 提高要求

  在两个数据集合上使用进行k-近邻概率密度估计，计算并分析 k=1，3，5 时的概率密度估计结果。

- 拓展要求

  在两个数据集合上应用“贝叶斯规则” 进行分类实验，计算分类错误率，分析实验结果。