

模式识别与计算机视觉

推理和决策(Inference and Decision)

密度估计(Density Estimation)

张振宇

南京大学智能科学与技术学院

2025

作业

- ✓ 第一次作业课后会发在群里
- ✓ 截止时间3.30号，提交至
 - nju_prcv_2025@163.com
- ✓ 要求：请手写或通过 Word/LaTeX 等软件记录答案，回答尽量简洁，一般每次作业的答案（只要答案，不要抄写题目）不超过 3 页为佳。
- ✓ 手写答案的同学可以用拍照、扫描等方式提交电子版，但应在保证内容清晰可见的前提下尽量减少文件大小。
- ✓ 邮件名，作业名：姓名+学号+第一次作业。作业开头也请写上姓名+学号。

目标

- ✓ 理解并掌握各名词的含义，最低要求是使用这些名词的时候不能混淆
- ✓ 掌握基本的点估计方法，能在不查表（简单情况）或查表（复杂情况）下自主推导估计结果
- ✓ 掌握Bayesian相关方法的概念
- ✓ 理解、掌握非参数估计的基本方法
- ✓ 提高目标
 - 进一步能通过独立阅读、了解Bayesian方法
 - 进一步能通过独立阅读、了解非参数估计（如解决计算效率、核的选择等）

推理和决策

Inference and Decision

为什么要用概率方法

- ✓ 处理不确定性
- ✓ 灵活表达复杂关系
- ✓ 结合先验知识
- ✓ 模型解释与可扩展性
- ✓ 生成与判别能力结合
- ✓ 处理缺失数据与部分观测

从统计学statistics的观点看

- ✓ 目的是得到映射: $\mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$
 - 数据分布 $p(\mathcal{X})$
 - 先验分布 prior distribution $p(\mathcal{Y})$
 - *a priori*: Knowable without appeal to particular experience
 - *a priori* distribution: special meaning, do not misuse
 - 联合joint分布 $p(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$
 - 类条件分布 $p(\mathcal{X} | y = i)$
 - 后验分布posterior distribution $p(y = i | \mathbf{x})$

如何表示/估计概率密度

- ✓ Parametric: 假设PDF服从某种函数形式functional form
 - 如高斯分布的函数形式，其包含若干参数
 - 当指定其所有参数值之后，PDF就完全确定
 - 不同的概率分布由不同的参数值决定
 - 估计PDF就是估计参数parameter estimation!
- 所以叫参数估计

非参数估计

- ✓ Non-parametric: 不假设PDF是任何已知形式的函数
 - 从直观上更合理
 - 那么，如何估计？
 - 使用训练数据直接估计空间中任意点的密度
- ✓ 非参数不代表无参数！
 - 实际上是可以允许**无穷多**的参数
 - 而参数估计的参数个数是有限的
- ✓ 参数估计与非参数估计
 - Parametric and non-parametric estimate
 - 可能参数化估计与非参数化估计更切合其含义

推理与决策inference & decision

✓ 生成模型和判别模型

- Generative (probabilistic) models: 估计 $p(\mathbf{x}|y = i)$ 和 $p(\mathbf{x})$
 - 然后用贝叶斯定理求 $p(y = i|\mathbf{x})$
- Discriminative (probabilistic) models: 直接估计 $p(y = i|\mathbf{x})$

✓ 这些模型分为两个步骤:

- 推理inference: 估计各种密度函数
- 决策decision: 根据估计得到的PDF对任意的 \mathbf{x} 给出输出

参数估计

点估计 point estimation

贝叶斯估计 Bayesian estimation

KDE

以高斯分布为例

- ✓ 假设 $x \sim N(\mu, \sigma^2)$, 从数据 $D = \{x_1, \dots, x_n\}$ 估计
 - 数据独立同分布 **i.i.d.** (independently identically distributed)
- ✓ 参数记为 θ , 这里 $\theta = (\mu, \sigma)$, 如何估计? 形式化?
- ✓ 一种直觉: 如果有两个不同的参数 θ_1 和 θ_2
 - 假设 θ 是参数的真实值, 似然 (likelihood) 是 $p(D|\theta) = \prod_i p(x_i|\theta) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$
 - 若 $p(D|\theta_1) > p(D|\theta_2)$, 该选择哪个?

易混淆的表示法notation

- ✓ 目前 θ 不是随机变量，所以 $p(D|\theta)$ 不是条件分布
 - D 固定， θ 是变量， $p(D|\theta)$ 是 θ 的函数，不是一个PDF!
 - $p(x_i|\theta)$ 是一个PDF，因为 θ 不是随机变量，这不是一个条件分布，只是习惯上这么写，表明这个分布依赖于参数 θ 的值， x_i 是PDF的变量
- ✓ 较好的表示法：定义似然函数likelihood function
 - $\ell(\theta) = p(D|\theta) = \prod_i p(x_i|\theta)$ (或者 \mathbf{x}_i)
- ✓ 为了方便，定义对数似然函数log-likelihood function
 - $\ell\ell(\theta) = \ln p(D|\theta) = \sum_i \ln p(x_i|\theta)$

最大似然估计

- ✓ Maximum likelihood estimation, MLE

$$\boldsymbol{\theta}^* = \operatorname{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \ell(\boldsymbol{\theta})$$

- ✓ 高斯分布的最大似然估计

- 参数为 $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$, 数据为 $D = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$
- 通过对 $\ell(\boldsymbol{\theta})$ 求导发现最佳的参数值, 需要查表

$$\ln L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = -\frac{nd}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}).$$

$$\nabla_{\boldsymbol{\mu}} (\mathbf{a}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{b}) = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{a} + \mathbf{b}) \quad \longrightarrow \quad \nabla_{\boldsymbol{\mu}} \ln L = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}).$$

$$\sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) = \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \right) \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \ln L}{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}} = \frac{n}{2} \boldsymbol{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbf{S} = \mathbf{0}.$$

$$\ln L = \text{常数} + \frac{n}{2} \ln |\boldsymbol{\Sigma}^{-1}| - \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{S}). \quad \frac{\partial \ln |\boldsymbol{\Sigma}^{-1}|}{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}} = \boldsymbol{\Sigma} \quad \frac{\partial \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{S})}{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}} = \mathbf{S}$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\text{MLE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{MLE}})(\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{MLE}})^\top.$$

最大后验估计及其他

✓ Maximum a posteriori estimation, MAP

- $\theta^* = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \ell(\theta) p(\theta)$

- 将参数 θ 自身不同取值的可能性 $p(\theta)$ 考虑进来

✓ 与MLE的关系

- 假设我们对 θ 一无所知，那么应该怎样设定 $p(\theta)$ ？

- noninformative prior时，MLE等价于MAP

- 若 θ 是离散的随机变量，离散的均匀分布， $p(\theta) = \frac{1}{N}$

- 若 θ 是有限区间 $[a, b]$ 的连续随机变量， $p(\theta) = \frac{1}{b-a}$

- 若 θ 是 $(-\infty, +\infty)$ 上的连续随机变量，？

- 假设 $p(\theta) = \text{const}$ ，称为improper prior

最大后验估计及其他

✓ 与正则化之间的关系:

- 假设参数服从某个高斯分布:

$$\ln P(\theta) = -\frac{1}{2\sigma^2} \|\theta\|_2^2 + \text{常数},$$

- 假设参数服从拉普拉斯分布:

$$\ln P(\theta) = -\frac{1}{b} \|\theta\|_1 + \text{常数},$$

- 线性回归问题中, 假设参数服从拉普拉斯分布, 则转化为Lasso回归:

$$\arg \min_{\theta} \left(\sum_{i=1}^n (y_i - \theta^\top x_i)^2 + \lambda \|\theta\|_1 \right).$$

参数估计的一些性质

- ✓ 如果只有一个样例，参数估计会怎么样？
- ✓ 样例越多，估计越准！
- ✓ 渐进性质asymptotic property：研究 $n \rightarrow \infty$ 时的性质，如
 - 一致性consistency：随样本容量增大收敛到参数真值的估计量
- ✓ 其他性质如
 - 无偏估计unbiased estimate：指估计量的期望和被估计量的真值相等
- ✓ 进一步阅读：关于一致和无偏

贝叶斯参数估计

✓ Bayesian parameter estimation

- MLE: 视 θ 为固定的参数，假设存在一个最佳的参数（或参数的真实值是存在的），目的是找到这个值
 - MAP: 将 $p(\theta)$ 的影响代入MLE中，仍然假设存在最优的参数
 - 以上均称为点估计point estimation
- ✓ 在贝叶斯观点中， θ 是一个分布/随机变量，所以估计应该是估计一个分布，而不是一个值（点）！
- $p(\theta|D)$: 这是贝叶斯参数估计的输出，是一个完整的分布，而不是一个点

高斯分布参数的贝叶斯估计

- ✓ 参数 θ 的先验分布 $p(\theta)$ ，数据 $D = \{x_1, \dots, x_n\}$ ，估计 $p(\theta|D)$ 。这里假设单变量，只估计 μ ，方差 σ 已知
 - 第一步：设定 $p(\mu)$ 的参数形式： $p(\mu) = N(\mu_0, \sigma_0^2)$ ，目前假设参数 μ_0, σ_0^2 已知
 - 第二步：贝叶斯定理和独立性得到 $p(\mu|D) = \frac{p(D|\mu)p(\mu)}{\int p(D|\mu)p(\mu)d\mu} = \alpha p(D|\mu)p(\mu) = \alpha \prod_{i=1}^n p(x_i|\mu)p(\mu)$
 - 第三步，应用高斯的性质，进一步得到其解析形式
 - 教材第十三章
 - 注意这里所有 $p(\cdot)$ 都是合法的密度函数

解的形式

$$p(\mu|D) = N(\mu_n, \sigma_n^2)$$

✓ 均值为 $\mu_n = \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} \mu_0 + \frac{n\sigma_0^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2} \mu_{\text{ML}}$

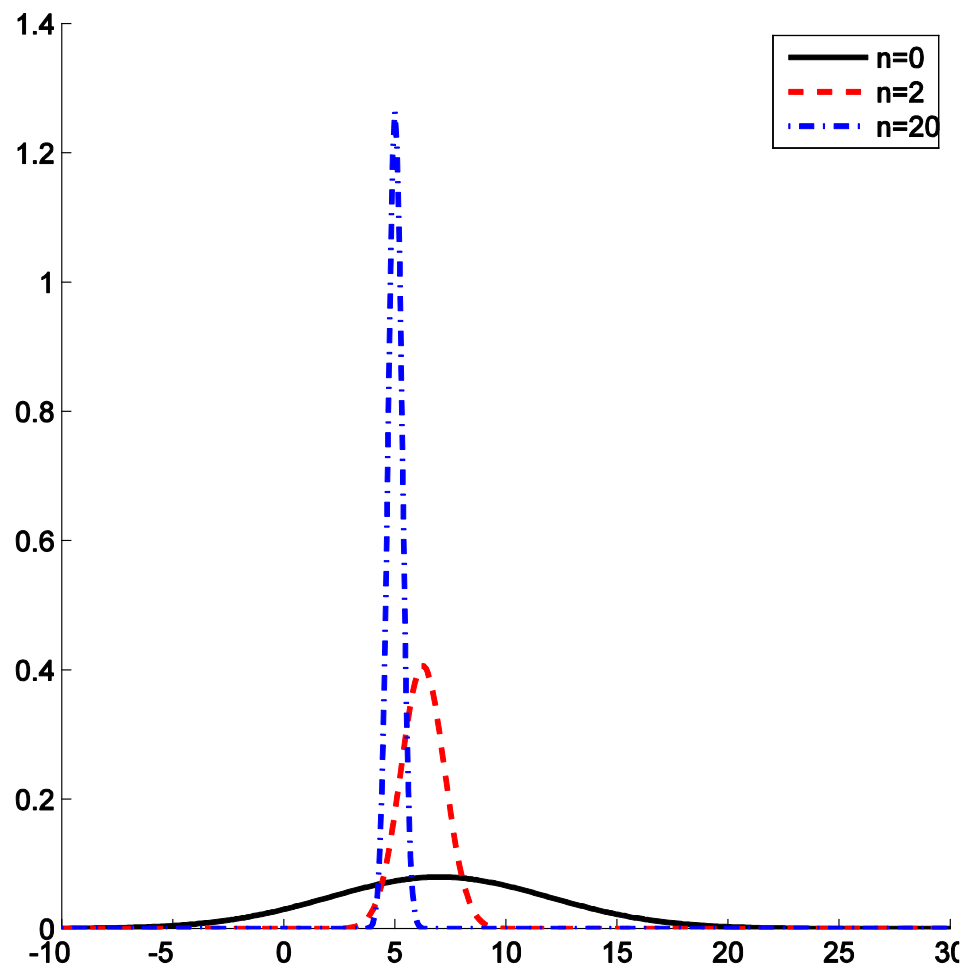
• 其中 μ_{ML} 为MLE的估计值, 即 $\mu_{\text{ML}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$

✓ 方差为 σ_n^2 , 其值由如下公式确定: $\frac{1}{\sigma_n^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2}$,
或者为了便于记忆

$$(\sigma_n^2)^{-1} = (\sigma_0^2)^{-1} + \left(\frac{\sigma^2}{n}\right)^{-1} \quad \sigma_n^2 = \frac{\sigma_0^2 * \frac{\sigma^2}{n}}{\sigma_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}}$$

✓ 先验和数据的综合!

Bayes估计的例子



贝叶斯的进一步讨论

✓ 共轭先验conjugate prior

- 若 $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$ ，存在先验 $p(\boldsymbol{\theta})$ ，使得 $p(\boldsymbol{\theta}|D)$ 和 $p(\boldsymbol{\theta})$ 有相同的函数形式，从而简化推导和计算
- 如高斯分布的共轭先验分布仍然是高斯分布

✓ 优缺点：

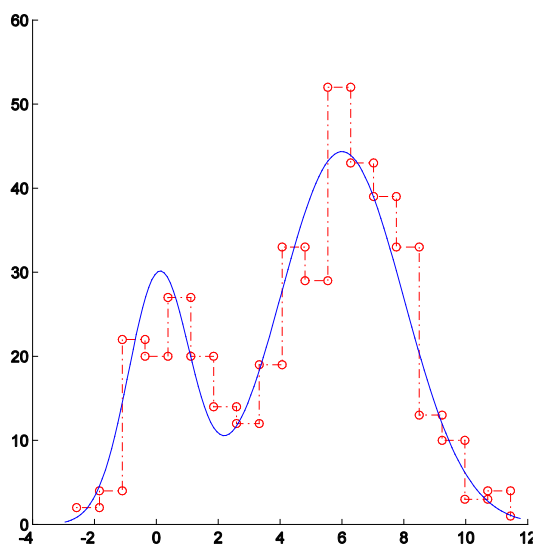
- 理论上非常完备，数学上很优美
- 推导困难（怎样求任意分布的共轭？怎样用于决策？ μ_0 的prior）、计算量极大（需要很多积分）
- 在数据较多时，学习效果常不如直接用discriminant function

非参数估计：介绍

Non-parametric estimation: an introduction

非参数估计

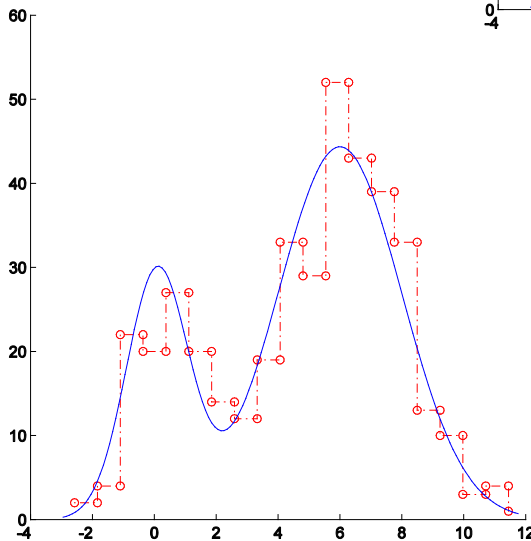
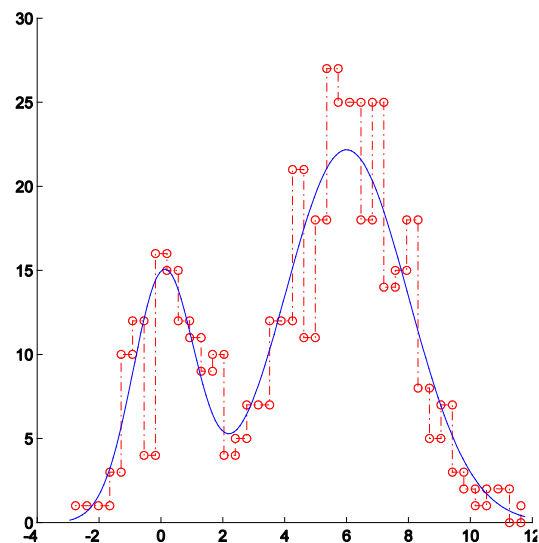
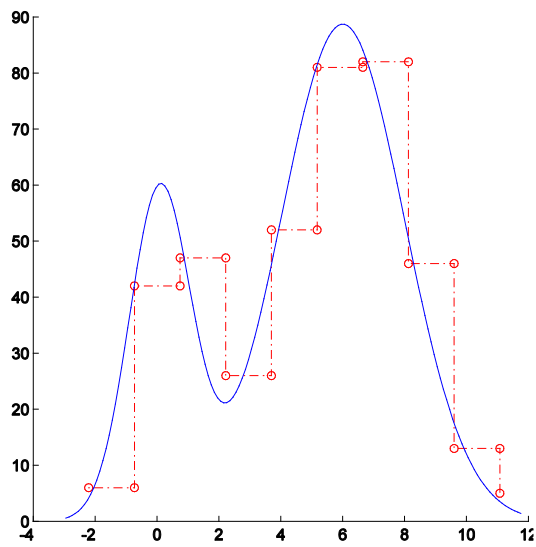
- ✓ 常用的参数形式基本都是单模single modal的，不足以描述复杂的数据分布：即应该直接以训练数据自身来估计分布
 - 例如直方图histogram，基于计数counting



有很多问题：

- 多维怎么办？
- 怎么确定bin的个数？
- 连续？
- 需要保存数据吗？

Bin个数（宽度）的影响



维数灾难

✓ Curse of dimensionality

- 以直方图为例，需要保存的参数是什么？
- 如果每维 n 个参数，那么 d 维应该保存多少个参数？
- 如果 $n = 4, d = 100$ ，那么应该保存多少个参数？

- $4^{100} = 2^{200} \approx 10^{60}$! 那么，需要多少样例来学习？

■ $1G = 10^9$

- ## ✓ 不仅局限于直方图、非参数估计，在参数估计、以及很多其他统计学习方法中都是如此

Kernel density estimation

- ✓ KDE，注意这里的kernel与SVM中的核含义不完全一致，其要求的条件也不完全一致
- ✓ 核密度估计的基本形式

$$p(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{h} K\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$$

- ✓ 核函数K（非负、积分为1、对称）
- ✓ 带宽h，控制核的宽度，决定估计的平滑程度。

Kernel density estimation

- ✓ KDE，注意这里的kernel与SVM中的核含义不完全一致，其要求的条件也不完全一致
- ✓ 举例：Parzen window（一维，使用高斯核）

$$p(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{(2\pi h^2)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{|x - x_i|^2}{2h^2}\right)$$

问题：

- 连续吗？
- 多维：多个维度乘积
- 需要保存数据吗？
 - 存储和计算实际代价大
 - 无穷多的参数
- 怎么确定 h ？

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n \det(\mathbf{H})} \sum_{i=1}^n K\left(\mathbf{H}^{-1/2}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_i)\right)$$

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{nh_1 h_2 \cdots h_d} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^d K\left(\frac{x_j - X_{ij}}{h_j}\right)$$

决策

Decision, 或预测 prediction

决策、预测

- ✓ 当inference完成之后，如果给定输入 \mathbf{x}
 - 应当给出什么样的输出？
 - 怎么给出？
- ✓ 点估计：
 - 根据参数得到后验概率 $p(y|\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$
 - 根据其给出结果（如分类，如何输出？）
- ✓ Bayesian decision
 - 输出，也是一个随机变量，称为预测分布predictive distribution
 - 结果通常根据其期望决定，同时还可以给出方差

点估计下的例子

- ✓ 在0-1风险时，选择后验概率最大的那个类别

$$\operatorname{argmax}_i p(y = i | \mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$$

- ✓ 在discriminant function观点下，可以定义函数

$$g_i(\mathbf{x}) = p(y = i | \mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = \frac{p(\mathbf{x} | y = i; \boldsymbol{\theta}) p(y = i)}{p(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})}$$

- ✓ 或者定义为 $g_i(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x} | y = i; \boldsymbol{\theta}) p(y = i)$ ，为什么？

- ✓ 或者定义为

$$g_i(\mathbf{x}) = \ln(p(\mathbf{x} | y = i; \boldsymbol{\theta})) + \ln(p(y = i))$$

高斯分布条件下的判别函数

- ✓ 假设 $p(\mathbf{x}|y = i) = N(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma})$ ，即在一个2分类问题中，各类条件分布都是高斯分布，虽期望不同，但协方差矩阵是一样的。若同时假设两类的先验概率均为0.5，那么
 - g_1 和 g_2 的最简化的表达式是什么？
 - 在两类分类问题中，可以使用单个判别函数而不是两个来进行分类。对此问题，其单个判别函数是？
 - 和FLD的关系？

进一步的阅读

- ✓ 如果对本章的内容感兴趣，可以参考如下文献
 - All of statistics, All of Nonparametric Statistics: 两本书
 - PRML—这本书非常Bayesian!
 - ESL
 - EM算法和GMM
 - 参数估计的常用优化算法
 - 讲义第十四章
 - 共轭分布见第十三章讲义的习题