机器学习导论

第6章 贝叶斯分类器

谢茂强

南开大学软件学院

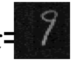
目录

基于概率模型的分类器（回顾）

- 定义
  - X：图像集合=

{  }

  - Y:识别结果集合={0，1，9，M，z}

- 任务:估计以下的概率
  - P(Y=0 | x= )=0.01
  - P(Y=1 | x= )=0.02
  - P(Y=9 | x= )=0.95
  - P(Y=M | x= )=0.01
  - P(Y=z | x= )=0.01

- 选择最大估计概率对应的Y作为预测结果
- 也可以使用函数来$y = f(x)$表示，其中

$$f(\boldsymbol{x}) = \underset{c \in \{0,1,9,M,z\}}{\arg\max} \; P(y = c|\boldsymbol{x})$$

1. 贝叶斯公式（1763年）

- 由条件概率公式 $$P(A \mid B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

$$P(A \cap B) = P(A \mid B)P(B) = P(B \mid A)P(A)$$

- 可得贝叶斯公式 $$P(A \mid B) = \frac{P(B \mid A)P(A)}{P(B)}$$

- 全概率公式： $$P(B) = \sum_{i=1}^{n} P(A_i)P(B|A_i)$$

1.从预测角度看估计后验概率 $P(c \mid \boldsymbol{x})$

$$P(c \mid \boldsymbol{x}) = \frac{P(c, \boldsymbol{x})}{P(\boldsymbol{x})} = \frac{P(c)P(\boldsymbol{x}|c)}{P(\boldsymbol{x})}$$

$P(\boldsymbol{x})$：样本 $\boldsymbol{x}$ 在样本空间中出现的概率

$P(\boldsymbol{x}|c)$：代表样本x相对于类别 c 的类条件概率（class-conditional probability），或称为似然（likelyhood）

$P(c)$：$\mathcal{Y}$ 中各 $c \in \mathcal{Y}$ 的先验概率

2. 朴素贝叶斯分类器(Naïve Bayes Classifier)

- 在估计$P(\boldsymbol{x}|c)$ 时很难估计$\boldsymbol{x}$所有维联合发生的概率，原因在于很难用频率估计概率，因此，通过假设“各维度条件独立”，将联合概率的估计变成各维度概率连乘。

$$P(c\,|\,\boldsymbol{x}) = \frac{P(c)P(\boldsymbol{x}|c)}{P(\boldsymbol{x})} = \frac{P(c)}{P(\boldsymbol{x})}\prod_{i=1}^{d} P(x_i\,|\,c)$$

2.朴素贝叶斯分类器的判决函数

- 由于对于给定 $\boldsymbol{x}$，其 $P(\boldsymbol{x})$ 对于所有 $c \in \mathcal{Y}$ 是一样的。
- 朴素贝叶斯的判决函数简化为：

$$h_{nb}(\boldsymbol{x}) = \arg\max_{c \in \mathcal{Y}} P(c) \prod_{i=1}^{d} P(x_i \mid c)$$

2.类先验概率、类条件概率的估计

$P(c)$：使用样本空间中各类样本所占比重来估计。根据大数定理，当训练集包含充足的独立同分布样本时，可使用高频率来估计概率。

$$P(\boldsymbol{x}|c) = P(x_1, x_2, \cdots, x_d|c) = \prod_{i=1}^{d} P(x_i|c)$$

直接使用样本出现频率来估计对关于　所有特征的联合概率将会遇到严重困难——很多种取值未在训练集中出现。（“未被观测到” v.s. “出现概率为0”）

假设样本 d 维特征都是二值的。联合随机事件数 2^d，独立的事件数 $2d$

2. 判决函数中的各概率的估计

$$h_{nb}(\boldsymbol{x}) = \arg\max_{c \in \mathcal{Y}} P(c) \prod_{i=1}^{d} P(x_i \mid c)$$

- 类先验概率： $$P(c) = \frac{|D_c|}{|D|}$$

- 类条件概率： $$P(x_i|c) = \frac{|D_{c,x_i}|}{|D_c|}$$

(离散属性)

2. 判决函数中的各概率的估计

$$h_{nb}(\boldsymbol{x}) = \arg\max_{c \in \mathcal{Y}} P(c) \prod_{i=1}^{d} P(x_i \mid c)$$

- 类先验概率：$P(c) = \frac{|D_c|}{|D|}$
- 类条件概率：$P(x_i|c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{c,i}} \exp\left(-\frac{(x_i - \mu_{c,i})^2}{2\sigma_{c,i}^2}\right)$

  (连续属性)
- 第c类样本在第i个属性上取值的 $\mu_{c,i}$ 和 $\sigma_{c,i}^2$

2. 参数化方法估计类条件概率

- 形式上简单
- 估计的准确性严重依赖于“假设是否成立”
- 实际应用中需要融合任务本身的经验知识，用先验知识引导类条件概率的分布假设。

2.估计 $P(x|c)$ 和 $P(c)$ 时碰到的问题

- 训练样本不充足，导致概率估计为零。
- 可以进行“平滑”smoothing。比如拉普拉斯修正（Laplacian Correction）

$$\hat{P}(c) = \frac{|D_c| + 1}{|D| + N},$$

N: 数据集中的类别数

$$\hat{P}(x_i \mid c) = \frac{|D_{c,x_i}| + 1}{|D_c| + N_i}.$$

N_i: 第 i 维特征的可能取值数

P153

2.总结：朴素Bayes分类器的训练算法

1. 数据预处理（特征的离散化，样本分布与样本采集）
2. 估计每个类别的类先验概率 $P(c)$
3. 估计每个类别条件下各特征下每种取值出现的概率 $P(\boldsymbol{x}_i|c)$

2. 总结：朴素Bayes分类器的预测算法

1. 数据预处理(按照训练的预处理方法进行)

2. 利用预计算好的 $P(c)$和 $P(\boldsymbol{x}_i|c)$，根据贝叶斯公式为每个类别 c 计算

$$P(c \mid \boldsymbol{x}) = \frac{P(c)P(\boldsymbol{x}|c)}{P(\boldsymbol{x})} = \frac{P(c)}{P(\boldsymbol{x})}\prod_{i=1}^{d} P(x_i \mid c)$$

3. 选择最大后验概率对应的类别作为结果输出。

2. 从最小化风险的角度来看NB

训练Naïve Bayes其实也是寻找判别模型 $h: \mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$ 以最小化总体风险

$$R(h) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}[R(h(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{x})]$$

基于 $P(c_i|\boldsymbol{x})$，可获得将样本 $\boldsymbol{x}$ 分类为 c_i 所产生的条件风险（或损失）

$$R(c_i|\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_{ij} P(c_j|\boldsymbol{x})$$

$$\lambda_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{if } i = j; \\ 1, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

贝叶斯最优分类器与贝叶斯风险

Bayes Decision Rule：为最小化总体风险，只需在每个样本上选择使条件风险 $R(c|\boldsymbol{x})$ 最小的类别标记，即

$$h^*(\boldsymbol{x}) = \underset{c \in \mathcal{Y}}{\arg\min}\, R(c \mid \boldsymbol{x})$$

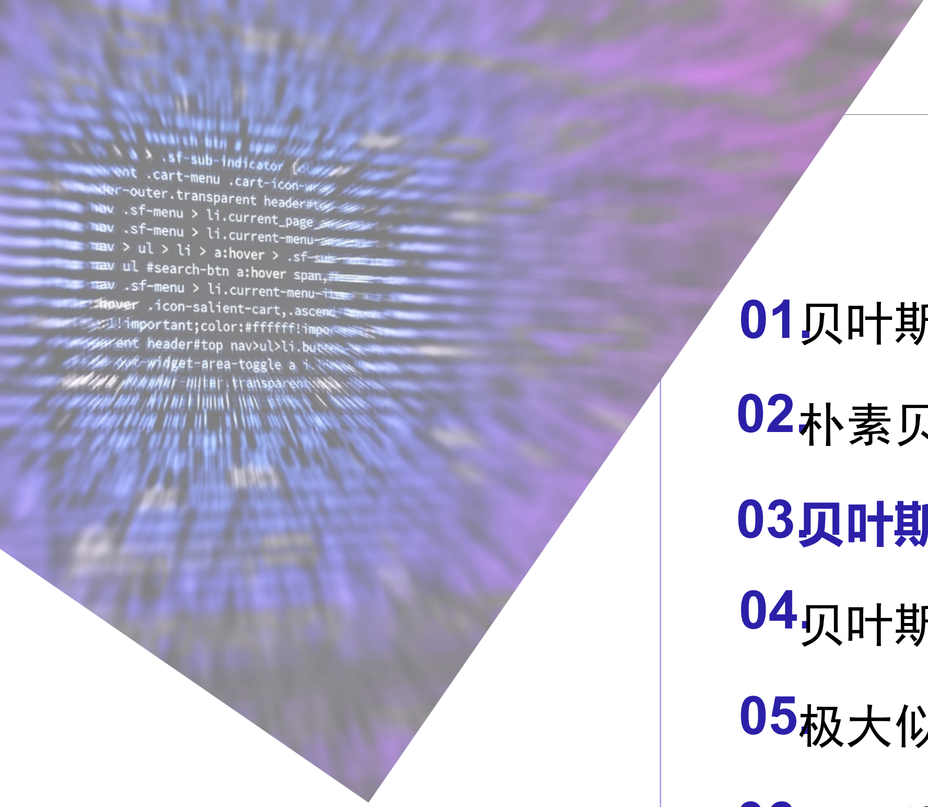
h*：Bayes Optimal Classifier，对应的总体风险 $R(h^*)$ 被称为 Bayes Risk。 $1 - R(h^*)$ 是通过机器学习所能产生的模型精度的理论上限。

插播：贝叶斯分类器是生成式模型

- 生成式模型（Generative Models）
  - 需要对生成样本的分布进行建模(如下述3个分布)，然后估计

$$P(c\,|\boldsymbol{x}) \quad P(\boldsymbol{x}, c) \quad P(\boldsymbol{x}|c) \quad P(c)$$

- 判决式模型（Discriminative Models）
  - 直接建模 $P(y=c|\boldsymbol{x})$（即直接求解判决模型(参数)）



目录

3. 贝叶斯信念网(Bayes Belief Network)

- 使用条件概率表（Conditional Probability Table, CPT）来描述属性的联合概率分布。

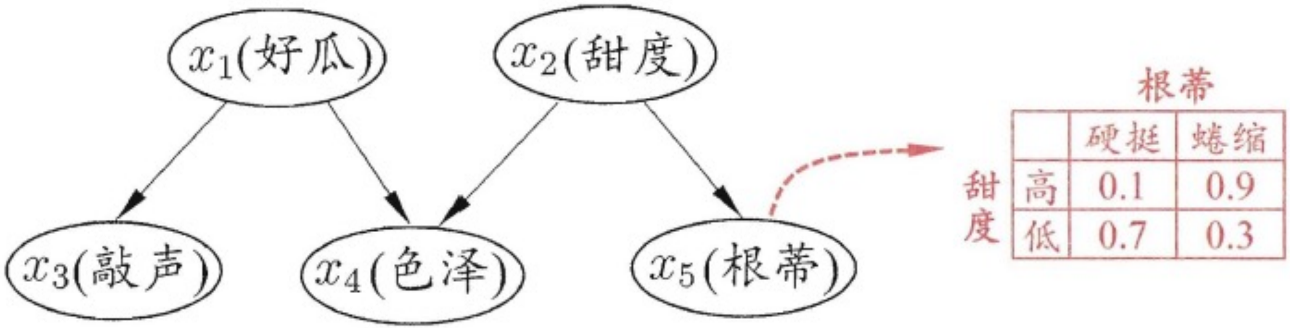
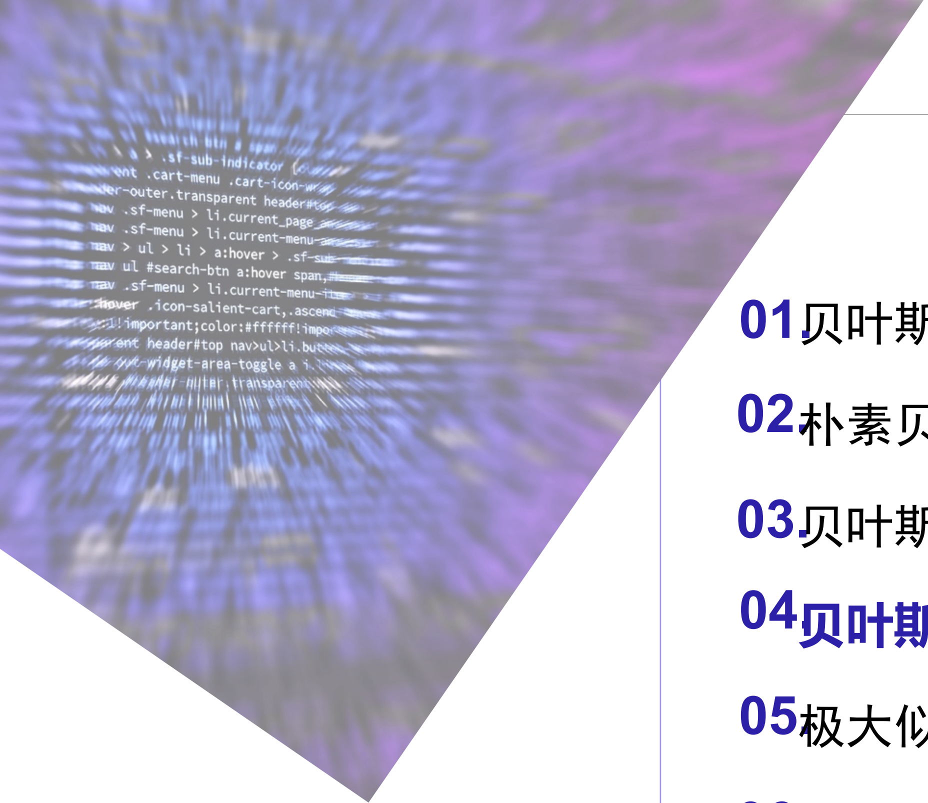


图 7.2 西瓜问题的一种贝叶斯网结构以及属性“根蒂”的条件概率表

$$P(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = P(x_1)P(x_2)P(x_3|x_1)P(x_4|x_1, x_2)P(x_5|x_1)$$

3. 贝叶斯信念网的特点

- 多维变量中联合概率估计时属性组合爆炸问题，对样本分布和样本量要求剧增
- 样本稀疏导致概率估计值为0的问题
- 朴素贝叶斯分类器属性条件独立性假设不满足的问题
  - 只需各类条件概率排序正确、无需精准概率值即可
  - 若属性间依赖对所有类别影响相同，或依赖关系的影响能够相互抵消，则假设不符合对性能影响不大
  - 在信息检索领域中，应用效果很好


.sf-sub-indicator
.cart-menu .cart-icon-
-outer.transparent header
.sf-menu > li.current_page
.sf-menu > li.current-menu-
> ul > li > a:hover > .sf-
ul #search-btn a:hover span,
.sf-menu > li.current-menu-
.icon-salient-cart,.ascend
!important;color:#ffffff!impo
header#top nav>ul>li.but
-widget-area-toggle a i
transparent

目录

4. 语言模型(Language Model)

- 语言模型的核心是估计句子(Sentence)被生成的概率

$$\begin{aligned} P(S) &= P(w_1, w_2, w_3, \cdots, w_k) \\ &= P(w_1)P(w_2|w_1)P(w_3|w_2, w_1)\cdots P(w_k|w_{k-1}, w_{k-2}\cdots w_1) \end{aligned}$$

其中，句子S由单词w_i组合而成。

- 条件概率估计对样本量的需求巨大，例如，在估计下述概率得0可能性很大

$$P(w_k|w_{k-1}, w_{k-2}\cdots w_1)$$

4. N-gram for Language Model

Markov 假设:下一个词出现的概率仅依赖前面一个或几个词

- 1-gram（Unigram,不依赖前面的词）

$$P(S) = P(w_1)P(w_2)P(w_3)\cdots P(w_k)$$

- 2-gram（Bigram,依赖前面一个词）

$$P(S) = P(w_1)P(w_2|w_1)P(w_3|w_2)\cdots P(w_k|w_{k-1})$$

- 3-gram（Trigram,依赖前面两个词）

$$P(S) = P(w_1)P(w_2|w_1)P(w_3|w_2,w_1)\cdots P(w_k|w_{k-1},w_{k-2})$$

4.文本情感分类（Sentiment Classification）

基于贝叶斯公式和语言模型

- 该问题可建模为二分类问题

  1：正向情感、0：负向情感

$$Sentiment = \frac{P(Y=1|S)}{P(Y=0|S)} = \frac{P(S|Y=1)P(Y=1)}{P(S|Y=0)P(Y=0)}$$

- 使用语言模型N-gram来估计 $P(Y=1|S)$

5. 参数估计：Frequentist v.s. Bayesian

- 频率主义学派(Frequentist)
  - 认为参数未知，但客观存在一个定值
  - 通过极大似然估计（Maximum Likelihood Estimation）确定概率模型参数

- 贝叶斯学派(Bayesian)
  - 参数是未观测到的随机变量，本身可能也有分布。
  - 可假设参数服从一个分布，然后使用数据估计参数的后验分布。

两派区别：参看教材的参考文献[Efron, 2005]和[Samaniego, 2010]

5. 极大似然估计

- 概率分布的参数估计(parameter estimation)
  - 先假定某随机事件的概率符合某种确定的分布形式，可基于抽样数据（训练数据）对概率分布的参数进行估计。
  - 从机器学习的角度可以将参数估计看成模型训练
- 对于NB所需的 $P(\boldsymbol{x}|c)$ ，可假设其形式，且被参数$\boldsymbol{\theta}_c$ 唯一确定，那么使用训练集训练概率模型的任务，其实就是数理统计中的估计参数 $\boldsymbol{\theta}_c$

- 以估计类条件概率分布为例

令 D_c 表示训练集 D 中第 c 类样本组成的集合，假设这些样本是独立同分布的，则参数 $\boldsymbol{\theta}_c$ 对于数据集 D_c 的似然是

$$P(D_c \mid \boldsymbol{\theta}_c) = \prod_{\boldsymbol{x} \in D_c} P(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta}_c) \; . \tag{7.9}$$

对 $\boldsymbol{\theta}_c$ 进行极大似然估计，就是去寻找能最大化似然 $P(D_c \mid \boldsymbol{\theta}_c)$ 的参数值 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_c$. 直观上看，极大似然估计是试图在 $\boldsymbol{\theta}_c$ 所有可能的取值中，找到一个能使数据出现的“可能性”最大的值.

5.Log-likelihood: 对似然进行对数化

式(7.9)中的连乘操作易造成下溢, 通常使用对数似然(log-likelihood)

$$
\begin{aligned}
LL(\boldsymbol{\theta}_c) &= \log \ P(D_c \mid \boldsymbol{\theta}_c) \\
&= \sum_{\boldsymbol{x} \in D_c} \log P(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\theta}_c) \ ,
\end{aligned} \tag{7.10}
$$

此时参数 $\boldsymbol{\theta}_c$ 的极大似然估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_c$ 为

$$
\hat{\boldsymbol{\theta}}_c = \underset{\boldsymbol{\theta}_c}{\arg\max} \ LL(\boldsymbol{\theta}_c) \ . \tag{7.11}
$$

极大对数似然估计的特点

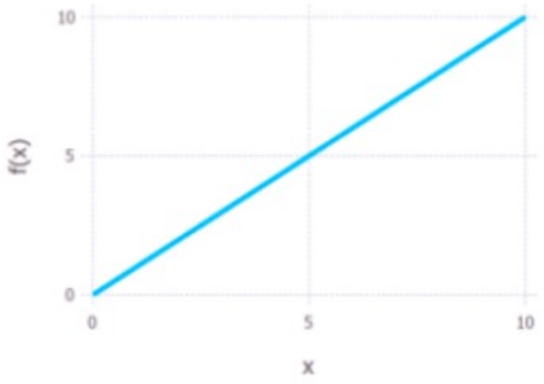
- 每一个样本均是由同一个分布相互独立生成。
  - 生成整个数据集的联合概率是生成每个样本概率的乘积
- 使用对数似然可以将连乘化为连加

$$p(X \mid \Theta) = \prod_{i=1}^{N} p(x_i \mid \Theta) \quad \Rightarrow \quad \ln p(X \mid \Theta) = \sum_{i=1}^{N} \ln p(x_i \mid \Theta)$$

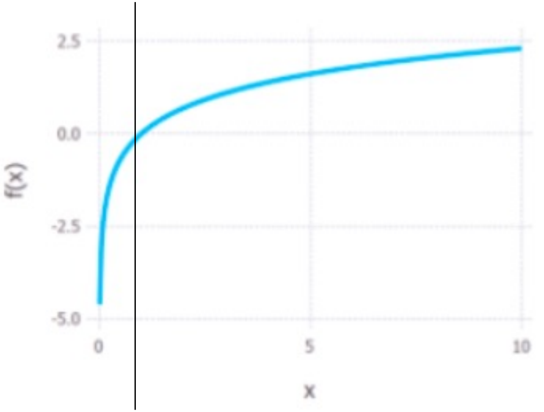
- 遏制概率连乘导致的浮点数下溢
- 概率密度中如有指数项，使用对数似然有利计算

对数似然不影响单调，最大似然处参数相同

$$p(x \mid \Theta_1) > p(x \mid \Theta_2) \Leftrightarrow \ln p(x \mid \Theta_1) > \ln p(x \mid \Theta_2)$$



(a) $f(x) = x$



(b) $f(x) = \ln(x)$

因为相同的单调性，它确保了概率的最大对数值出现在与原始概率函数相同的点上。因此，可以用更简单的对数似然来代替原来的似然。

最大似然估计的其他应用

- 估计正态分布的参数：μ σ
- 教材“3.3 Logistic回归”中，使用极大似然法估计代价函数的参数
  - P59
  - 对比本课2.2节“基于交叉熵的代价函数”。

6. EM算法

- 最初解决数据缺失条件下的参数估计问题
- 思路
  - 用现有数据估计分布（模型参数）
  - 用估计的分布（模型参数）估计缺失数据
  - 整合原有数据和补齐数据重新估计分布
  - 反复迭代直至收敛
- 目前：认为分布未被现有观测数据完全体现，存在隐含变量，因此，在分布参数估计时要考虑隐含变量的存在。

Dempster A P, Laird N M, Rubin D B. Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm. Journal of the royal statistical society. Series B (methodological), 1977: 1-38.

6. EM算法

- 分布生成的未被观测的随机事件用Z表示

$$P(X|\theta) = P(X, Z|\theta) = \sum_{Z} P(X|Z, \theta)P(Z|\theta)$$

- 使用极大似然法估计模型参数

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} \ln P(X, Z|\theta)$$

交替执行E步和M步，直至收敛到局部最优解

- E步(Expectation)：
  - 基于Θ^t推断因变量Z的期望，记为Z^t

$$Q(\Theta|\Theta^t) = \mathbb{E}_{Z|X,\Theta^t} LL(\Theta|X,Z)$$

- M步(Maximization):
  - 寻找参数最大化期望似然

$$\Theta^{t+1} = \arg\max_{\Theta} Q(\Theta|\Theta^t)$$

6. EM算法用途

- EM算法多用于高斯混合模型的参数估计
  - 隐变量是样本属于混合模型中的拿个高斯分布
- 隐变量估计
  - 在极大似然估计因隐变量存在失效时，可以考虑用EM算法
- 典型应用：高斯混合模型(Gaussian Mixture Model)

高斯混合模型将在本课第10章中讲解，也可参看教材9.4.3节

总结

- 贝叶斯理论
- 朴素贝叶斯分类器 (Naïve Bayes Classifier)
- 极大似然估计(Maximum Likelihood Estimation, MLE)
- 贝叶斯信念网 (Bayes Belief Network)
- 贝叶斯与NLP中的语言模型(Language Model)
- EM（期望最大化）算法