贝叶斯定理及其在机器学习中的应用总结

一. 简单的说贝叶斯定理：

贝叶斯定理用数学的方法来解释生活中大家都知道的常识

形式最简单的定理往往是最好的定理，比如说中心极限定理，这样的定理往往会成为某一个领域的理论基础。机器学习的各种算法中使用的方法，最常见的就是贝叶斯定理。

下面用一个小例子来推出贝叶斯定理：

已知：有 N 个苹果，和 M 个梨子，苹果为黄色的概率为 20%，梨子为黄色的概率为 80%，问，假如我在这堆水果中观察到了一个黄色的水果，问这个水果是梨子的概率是多少。

用数学的语言来表达，就是已知 P(apple) = N / (N + M), P(pear) = M / (N + M), P(yellow|apple) = 20%, P(yellow|pear) = 80%, 求 P(pear|yellow).

要想得到这个答案，我们需要 1. 要求出全部水果中为黄色的水果数目。 2. 求出黄色的梨子数目

对于 1) 我们可以得到 P(yellow) * (N + M), P(yellow) = p(apple) * P(yellow|apple) + P(pear) * p(yellow|pear)

对于 2) 我们可以得到 P(yellow|pear) * M

2) / 1) 可得：P(pear|yellow) = P(yellow|pear) * p(pear) / [P(apple) * P(yellow|apple) + P(pear) * P(yellow|pear)]

化简可得：P(pear|yellow) = P(yellow,pear) / P(yellow), 用简单的话来表示就是在已知是黄色的，能推出是梨子的概率 P(pear|yellow)是黄色的梨子占全部水果的概率 P(yellow,pear)除上水果颜色是黄色的概率 P(yellow). 这个公式很简单吧。

我们将梨子代换为 A，黄色代换为 B 公式可以写成：P(A|B) = P(A,B) / P(B), 可得：P(A,B) = P(A|B) * P(B).贝叶斯公式就这样推出来了。

二. 贝叶斯机器学习框架

对于贝叶斯学习，每本书都有每本书的观点和讲解的方式方法，有些讲得很生动，有些讲得很突兀，对于贝叶斯学习里面到底由几个模块组成的，我一直没有看到很官方的说法，我觉得要理解贝叶斯学习，下面几个模块是必须的：

1) 贝叶斯公式

机器学习问题中有一大类是分类问题，就是在给定观测数据 D 的情况下，求出其属于类别（也可以称为是假设 h，h ∈ {h0, h1, h2…})的概率是多少, 也就是求出:

P(h|D), 可得：

P(h,D) = P(h|D) * P(D) = P(D|h) * P(h), 所以：P(h|D) = P(D|h) * P(h) / P(D), 对于一个数据集下面的所有数据，P(D)，恒定不变。所以可以认为 P(D)为常数， 得到：P(h|D) ∝ P(D|h) * P(h)。我们往往不用知道 P(h|D)的具体的值，而是知道例如 P(h1|D)，P(h2|D)值的大小关系就是了。这个公式就是机器学习中的贝叶斯公 式，一般来说我们称 P(h|D)为模型的后验概率，就是从数据来得到假设的概率，P(h)称为先验概率，就是假设空间里面的概率，P(D|h)是模型的 likelihood 概率。

Likelihood（似然）这个概率比较容易让人迷惑，可以认为是已知假设的情况下，求出从假设推出数据的概率，在实际的机器学习过程中，往往加入了很多的假设，比如一个英文翻译法文的问题：

给出一个英文句子，问哪一个法文句子是最靠谱的，P(f=法文句子|e=英文句子) = P(e|f) * p(f)，p(e|f)就是 likelihood 函数，P(e|f) 写成下面的更清晰一点：p(e|f∈{f1,f2…})可以认为，从输入的英文句子 e，推出了很多种不同的法文句子 f，p(e|f)就是从这些法文句子中的某一个推出原句子 e 的概率。

2) 先验分布估计，likelihood 函数选择

贝叶斯方法中，等号右边有两个部分，先验概率与 likelihood 函数。先验概率是得到，在假设空间中，某一个假设出现的概率是多少，比如说在街上看到一个动物是长有毛的，问 1. 这个动物是哈巴狗的概率是多少，2. 这个动物是爪哇虎的概率是多少。虽然两个假设的 likelihood 函数都非常的接近于 1（除非这个动物病了），但是由于爪哇虎已经灭绝了，所以爪哇虎的先验概率为 0，所以 P(爪哇虎|有毛的动物)的概率也为 0。

先验概率分布估计

在观测的时候，对于变量是连续的情况下，往往需要一个先验分布来得到稀疏数据集中没有出现过的，给出的某一个假设，在假设空间中的概率。比如说有一个很大很大的均匀金属圆盘，问这个金属圆盘抛到空中掉下来，正面朝上的概率，这个实验的成本比较高（金属圆盘又大又重），所以只能进行有限次数的实验，可能出现的是，正面向上 4 次，反面向上 1 次，但是我们如果完全根据这个数据集去计算先验概率，可能会出现很大的偏差。不过由于我们已知圆盘是均匀的，我们可以根据这个知识，假设 P(X=正面) = 0.5。

我们有的时候，已知了分布的类型，但是不知道分布的参数，还需要根据输入的数据，对分布的参数进行估计、甚至对分布还需要进行一些修正，以满足我们算法的需求：比如说我们已知某一个变量 x 的分布是在某一个连续区间均匀分布，我们观察了 1000 次该变量，从小到大排序结果是：1,1.12,1.5 … 199.6, 200, 那我们是否就可以估计变量的分布是从[1,200]均匀分布的？如果出现一个变量是 0.995，那我们就能说 P(0.995) = 0？如果出现一个 200.15 怎么办呢？所以我们这个时候可能需要对概率的分布进行一定的调整，可能在 x<1,x>200 的范围内的概率是一个下降的直线，整个概率密度函数可能是一个梯形的，或者对区域外的值可以给一个很小很小的概率。这个我在之后还将会举出一些例子来说明。

Likelihood 函数选择

对于同一个模型，likelihood 函数可能有不同的选择，对于这些选择，可能有些比较精确、但是会搜索非常大的空间，可能有些比较粗糙，但是速度会比较快，我们需要选择不同的 likelihood 函数来计算后验概率。对于这些 Likelihood 函数，可能还需要加上一些平滑等技巧来使得最大的降低数据中噪声、或者假设的缺陷对结果的影响。

我所理解的用贝叶斯的方法来估计给定数据的假设的后验概率，就是通过 prior * likelihood，变换到后验分布。是一个分布变换的过程。

3) loss function(损失函数)

$$E[L]=\int\int L(t,y(x))p(y,x)dxdy$$

x 是输入的数据，y(x)是推测出的结果的模型，t 是 x 对应的真实结果，L(t,y(x))就是 loss function，E[L]表示使用模型 y 进行预测，使用 L 作为损失函数的情况下，模型的损失时多少。通常来说，衡量一个模型是否能够准确的得到结果，损失函数是最有效的一个办法，最常用、最简单的一种损失函数是：

$$L(t,y(x))=[y(x)-t]^2$$

4) Model Selection(模型选择)

前文说到了对于 likelihood 函数可以有不同的选择，对于先验的概率也可以有不同的选择，不过假设我们一个构造完整的测试集和一个恰当的损失函数，最终的结果将会是确定的，量化的，我们很容易得到两个不同参数、方法的模型的优劣性。不过通常情况下，我们的测试集是不够完整，我们的损失函数也是不那么的精确，所以对于在这个测试集上表现得非常完美的模型，我们常常可能还需要打一个问号，是否是训练集和测试集过于相像，模型又过于复杂。导致了 over-fitting?

Model Selection 本质上来说是对模型的复杂度与模型的准确性做一个平衡，下面将有一些类似的例子。

Example 1：Sequential 概率估计

注：此例子来自 PRML chapter 2.1.1

对于概率密度的估计，有很多的方法，其中一种方法叫做 Sequential 概率估计。

这种方法是一个增量的学习过程，在每看到一个样本的时候都是把之前观测的数据作为先验概率，然后在得到新数据的后验概率后，再把当前的后验概率作为下一次预测时候的先验概率。

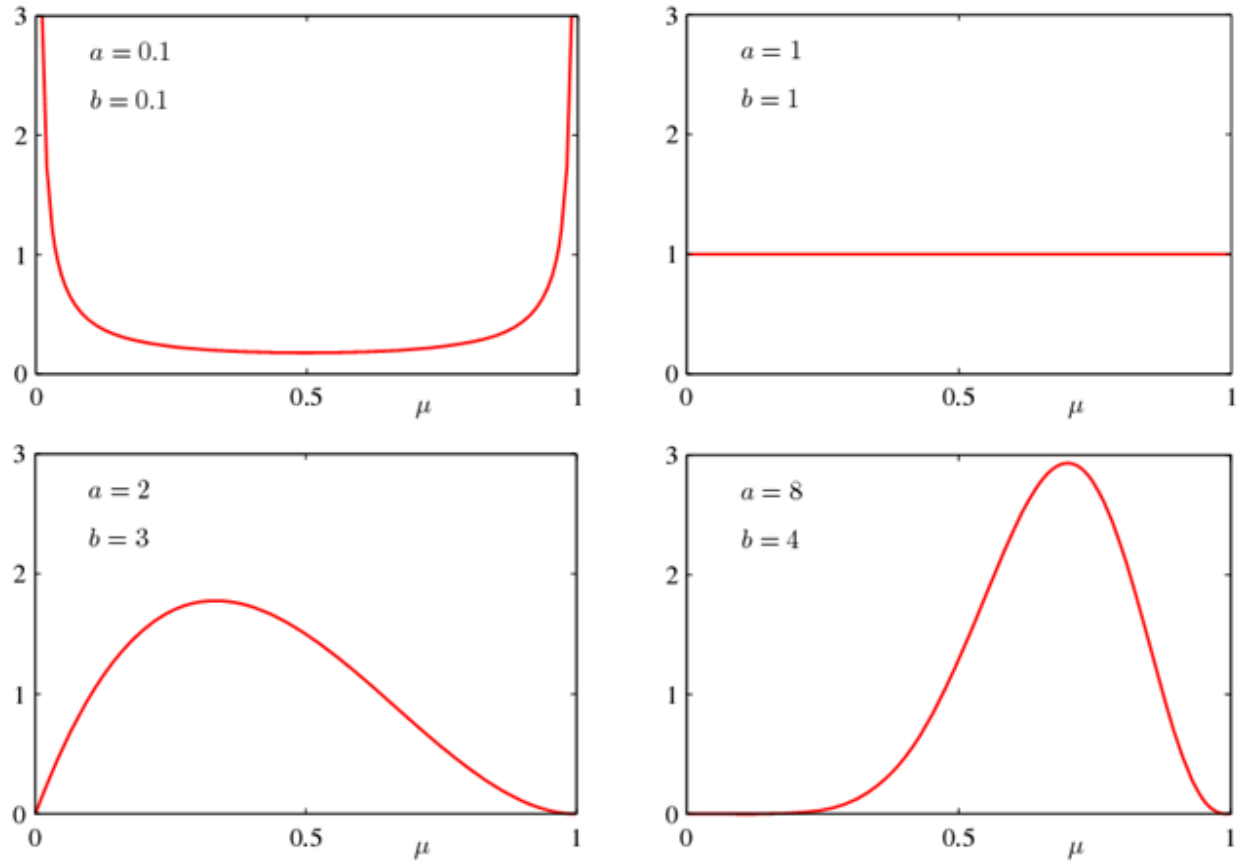
传统的二项式分布是：

$$Bin(m\mid N,\mu)=\binom{N}{m}\mu^m(1-\mu)^{N-m}$$

由于传统的二项式分布的概率 μ 是完全根据先验概率而得到的，而这个先验分布之前也提到过，可能会由于实验次数不够而有很大的偏差，而且，**我们无法得知 μ 的分布，只知道一个 μ 的期望**，这样对于某些机器学习的方法是不利的。为了减少先验分布对 μ 的影响，获取 μ 的分布，我们加入了两个参数，a，b，表示 X=0 与 X=1 的出现的次数，这个取值将会改变 μ 的分布，beta 分布的公式如下：

$$Beta(\mu\mid a,b)=\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}$$

对于不同 a，b 的取值，将会对 μ 的概率密度函数产生下面的影响：（图片来自 PRML）



在观测数据的过程中，我们可以随时的利用观测数据的结果，改变当前 μ 的先验分布。我们可以将 Beta 分布加入两个参数，m，l，表示观测到的 X=0，X=1 的次数。（之前的 a，b 是一个先验的次数，不是当前观测到的）

我们令：

$$a' = a + m$$

$$b' = b + l$$

a’，b’表示加入了观测结果的新的 a，b 。带入原式，可以得到

$$p(\mu \mid m, l, a, b) = \frac{\Gamma(m+a+l+b)}{\Gamma(m+a)\Gamma(l+b)} \mu^{m+a-1}(1-\mu)^{l+b-1}$$

我们可以利用观测后的 μ 后验概率更新 μ 的先验概率，以进行下一次的观测，这样对不时能够得到新的数据，并且需要 real-time 给出结果的情况下很有用。不过 Sequential 方法有对数据一个 i.i.d（独立同分布）的假设。要求每次处理的数据都是独立同分布的。

Example 2：拼写检查

本例子主要谈谈先验分布对结果的影响。

直接给出拼写检查器的贝叶斯公式：

$$P(c \mid w) \propto P(w \mid c) p(c)$$

P(c|w)表示，单词 w(wrong)正确的拼写为单词 c(correct)的概率，P(w|c)表示 likelihood 函数，在这里我们就简单的认 为，两个单词的编辑距离就是它们之间的 likelihood，P(c)表示，单词 c 在整体文档集合中的概率，也就是单词 c 的先验概率。

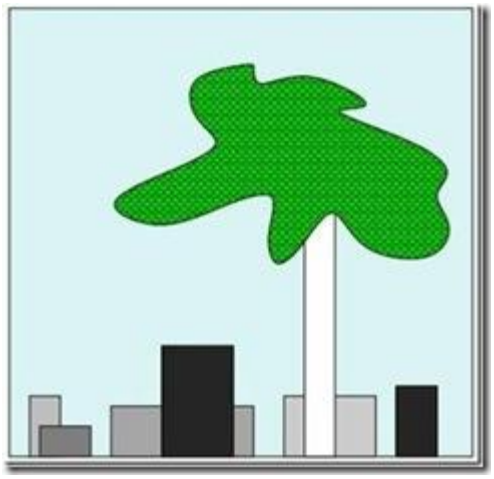
我们在做单词拼写检查的时候肯定会直观的考虑：如果用户输入的单词如果在字典中没有出现过，则应该将其修正为一个字典中出现了的，而且与用户输入最接近的词；如果用户输入的词在字典中出现过了，但是词频非常的小，则我们可以为用户推荐一个比较接近这个单词，但是词频比较高的词。

先验概率 P(c)的统计是一个很重要的内容，一般来说有两种可行的办法，一种是利用某些比较权威的词频字典，一种是在自己的语料库（也就是待进行拼写检查的语料）中进行统计。我建议是用后面的方法进行统计，这样词的先验概率才会与测试的环境比较匹配。比如说一个游戏垂直搜索网站需要对用户输入的信息进行拼写纠正，那么使用通用环境下统计出的先验概率就不太适用了。

Example 3：奥卡姆剃刀与 Model Selection

给出下面的一个图：（来自 Mackey 的书）

问：大树背后有多少个箱子



其实，答案肯定是有很多的，一个，两个，乃至 N 箱子都是有可能的（比如说后面有一连排的箱子，排成一条直线），我们只能看到第一个：

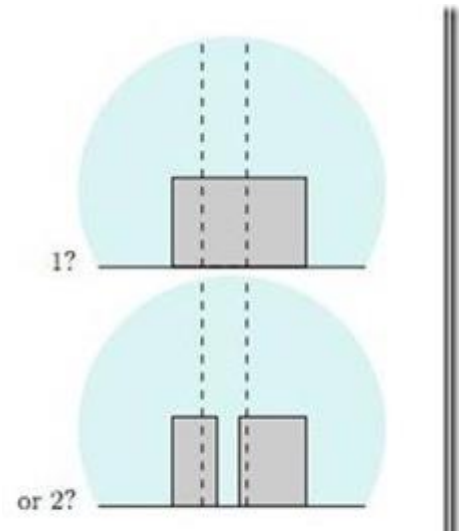


Figure 28.2. How many boxes are behind the tree?

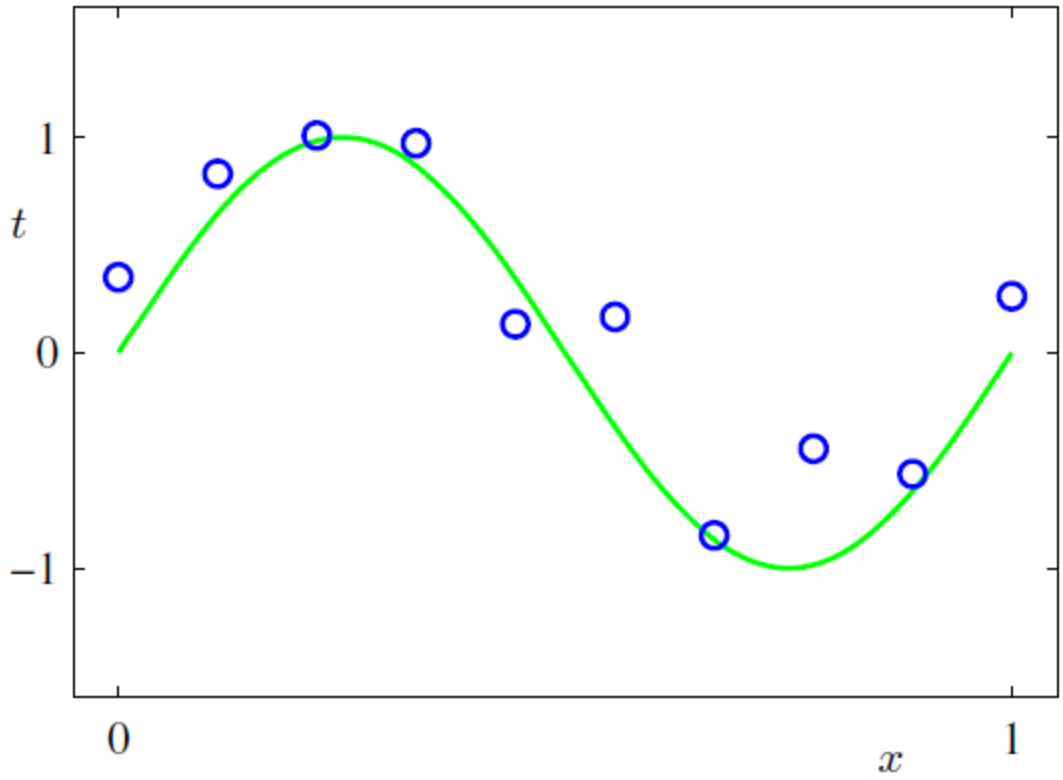
但是，最正确，也是最合理的解释，就是一个箱子，因为如果大树背后有两个乃至多个箱子，为什么从大树正面看起来，两边的高度一样，颜色也一样，这样是不是太巧合了。如果我们的模型根据这张图片，告诉我们大树背后最有可能有两个箱子，这样的模型的泛化能力是不是太差了。

所以说，本质上来说，奥卡姆剃刀，或者模型选择，也是人生活中的一种通常行为的数学表示，是一种化繁为简的过程。**数学之美番外篇：平凡而又神奇的贝叶斯方法**这篇文章中说的，奥卡姆剃刀工作在 likelihood 上，对于模型的先验分布并没有什么影响。**我这里不太同意这个说法：**奥卡姆剃刀是剪掉了复杂的模型，复杂的模型也是不常见的、先验概率比较低的，最终的结果是选择了先验概率比较高的模型。

Example 4: 曲线拟合:

（该例子来自 PRML）

问题：给定一些列的点，**x** = {x1,x2...xn}， **t** = {t1,t2 .. tn}，要求用一个模型去拟合这个观测，能够使得给定一个新点 x'，能够给出一个 t'.



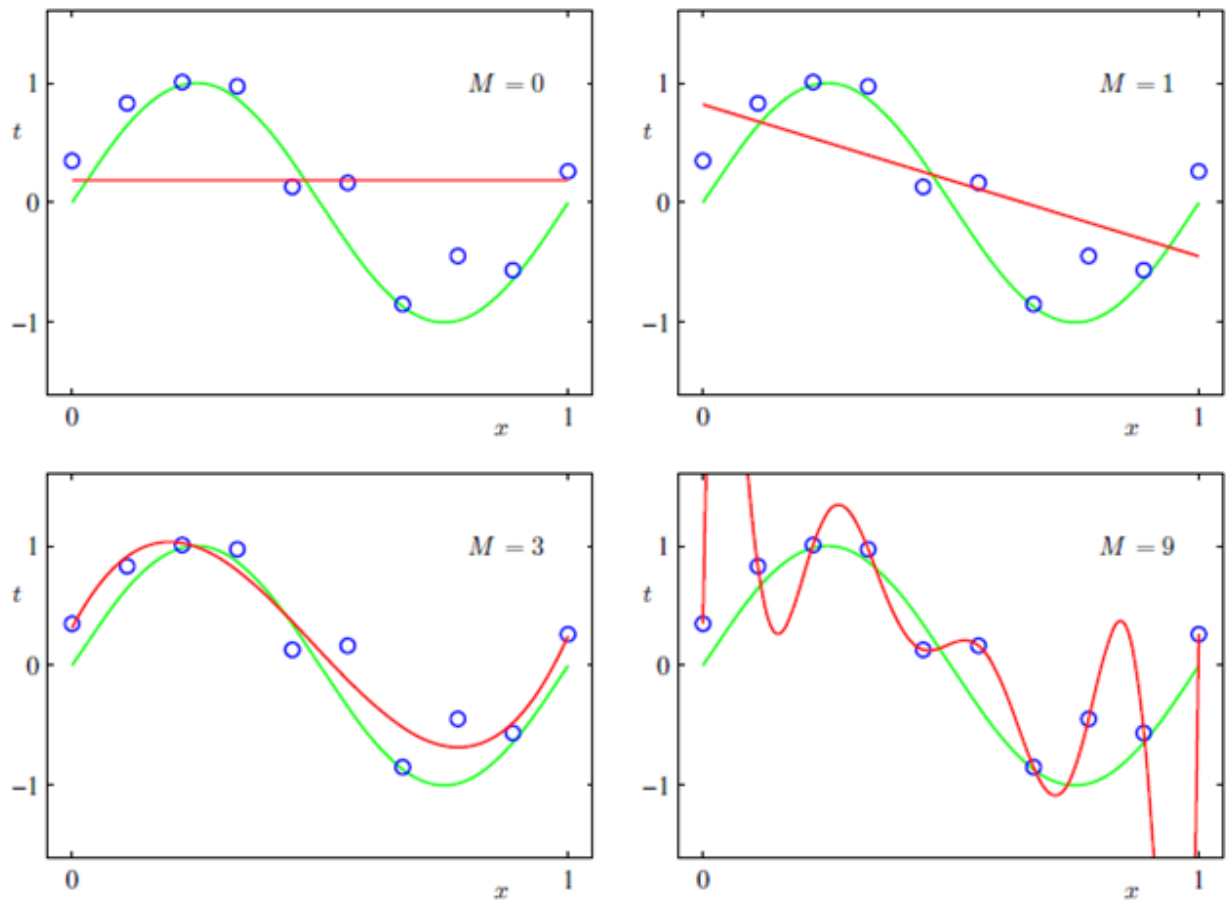
已知给定的点是由 y=2πx 加上正态分布的噪声而得到的 10 个点，如上图。为了简单起见，我们用一个多项式去拟合这条曲线:

$$y = \sum_{j=0}^{M} w_j x^j$$

为了验证我们的公式是否正确，我们加入了一个 loss function：

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

在 loss function 最小的情况下，我们绘制了不同维度下多项式生成的曲线：



在 M 值增高的情况下，曲线变得越来越陡峭，当 M=9 的时候，该曲线除了可以拟合输入样本点外，对新进来的样本点已经无法预测了。我们可以观测一下多项式的系数：

	$M=0$	$M=1$	$M=6$	$M=9$
w_0^*	0.19	0.82	0.31	0.35
w_1^*		-1.27	7.99	232.37
w_2^*			-25.43	-5321.83
w_3^*			17.37	48568.31
w_4^*				-231639.30
w_5^*				640042.26
w_6^*				-1061800.52
w_7^*				1042400.18
w_8^*				-557682.99
w_9^*				125201.43

可以看出，当 M（维度）增加的时候，系数也膨胀得很厉害，为了消除这个系数带来的影响，我们需要简化模型，我们为 loss function 加入一个惩罚因子：

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

我们把 w 的 L2 距离乘上一个系数 λ 加入新的 loss function 中，这就是一个**奥卡姆剃刀**，把原本复杂的系数变为简单的系数（如果要更具体的量化的分析，请见 PRML 1.1 节）。如果我们要考虑如何选择最合适的维度，我们也可以把维度作为一个 loss function 的一部分，这就是 Model Selection 的一种。

但是这个问题还没有解决得很好，目前我们得到的模型只能预测出一个准确的值：输入一个新的 x，给出一个 t，但是不能描述 t 有什么样的概率密度函数。**概率密度函数是很有用的**。假如说我们的任务修正为，给出 N 个集合，每个集合里面有若干个点，表示一条曲线，给出一个新的点，问这个新的点最可能属于哪一条曲线。如果我们仅仅用新的点到这些曲线的距离作为一个衡量标准，那很难得到一个比较有说服力的结果。为了能够获取 t 值的一个分布，我们不妨假设 t 属于一个均值为 y(x),方差为 1/β 的一个高斯分布：

$$p(t \mid x, w, \beta) = \prod_{n=1}^{N} N(t_n \mid y(x_n, w), \beta^{-1})$$

在之前的 E(w)，我们加入了一个 w 的 L2 距离，这个看起来有一点突兀的感觉，为什么要加上一个这样的距离呢？为什么不是加入一个其他的东西。我们可以用一个贝叶斯的方法去替代它，得到一个更有说服力的结果。我们令 p(w)为一个以 0 为均值， α 为方差的高斯分布，这个分布为 w 在 0 点附近密度比较高，作为 w 的先验概率，这样在计算最大化后验概率的时候，w 的绝对值越小，后验概率将会越大。

$$p(w \mid a) = N(w \mid 0, a^{-1} I)$$

我们可以得到新的后验概率：

$$p(w \mid x, t, \alpha, \beta) \propto p(t \mid x, w, \beta) p(w \mid \alpha)$$

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

这个式子看起来是不是有点眼熟啊？我们令 λ=α/β，可以得到类似于之前损失函数的一个结果了。我们不仅还是可以根据这个函数来计算最优的拟合函数，而且可以得到相应的一个概率分布函数。可以为机器学习的很多其他的任务打下基础。

其实很多机器学习里面的内容都与本处所说的曲线拟合算法类似，如果我们不用什么概率统计的知识，可以得到一个解决的方案，就像我们的第一个曲线拟合方案一样，而且还可以拟合得很好，不过唯一缺少的就是概率分布，有了概率分布可以做很多的事情。包括分类、回归等等都需要这些东西。从本质上来说，Beta 分布和二项式分布，Dirichlet 分布和多项式分布，曲线拟合中直接计算 w 和通过高斯分布估计 w，都是类似的关系：Beta 分布和 Dirichlet 分布提供的是 μ 的先验分布。有了这个先验分布，我们可以去更好的做贝叶斯相关的事情。