● 单变量正态密度函数的均值学习

设一个模式样本集，其类概率密度函数是单变量正态分布 $N(\theta,\sigma^2)$，均值 θ 待求，即

$$p(x\mid\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\theta}{\sigma}\right)^2\right]$$

给出 N 个训练样本 $\{x^1, x^2, \dots, x^N\}$，用贝叶斯学习计算其均值估计量。

设最初的先验概率密度 $p(\theta)$ 为 $N(\theta_0,\sigma_0^2)$，这里 θ_0 是凭先验知识对未知量 θ 的“最好”推测，σ_0^2 表示上述推测的不确定性度量。这里可以假定 $p(\theta)$ 是正态的，因为均值的估计量是样本的线性函数，因样本 x 是正态分布的，因此 $p(\theta)$ 取为正态分布是合理的，这样计算起来可比较简单。

初始条件已知，即 $p(\theta)$ 为 $N(\theta_0,\sigma_0^2)$，$p(x^1|\theta)$ 为 $N(\theta,\sigma^2)$，由贝叶斯公式 $p(\theta| x^1)=a\, p(x^1|\theta)\, p(\theta)$，可得：

$$p(\theta\mid x^1)=a\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x^1-\theta}{\sigma}\right)^2\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta-\theta_0}{\sigma_0}\right)^2\right]$$

其中 a 是一定值。由贝叶斯法则有：

$$p(\theta\mid x^1,\cdots,x^N)=\frac{p(x^1,\cdots,x^N\mid\theta)p(\theta)}{\int_\phi p(x^1,\cdots,x^N\mid\theta)p(\theta)d\theta}$$

这里 Φ 表示整个模式空间。由于每一次迭代是从样本子集中逐个抽取一个变量，所以 N 次运算是独立地抽取 N 个变量，因此上式可写成：

$$p(\theta\mid x^1,\cdots,x^N)=a\left\{\prod_{k=1}^{N}p(x^k\mid\theta)\right\}p(\theta)$$

代入 $p(x^k|\theta)$ 和 $p(\theta)$ 的值，得：

$$p(\theta \mid x^1,\cdots,x^N)=a\left\{\prod_{k=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x^k-\theta}{\sigma}\right)^2\right]\right\}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta-\theta_0}{\sigma_0}\right)^2\right]$$

$$=a'\exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{x^k-\theta}{\sigma}\right)^2\right\}+\left(\frac{\theta-\theta_0}{\sigma_0}\right)^2\right]$$

$$=a''\exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\left(\frac{N}{\sigma^2}+\frac{1}{\sigma_0^2}\right)\theta^2-2\left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{k=1}^{N}x^k+\frac{\theta_0}{\sigma_0^2}\right)\theta\right\}\right]$$

上式每一步中与θ无关的项都并入常数项a'和a''，这样$p(\theta| x^1, \ldots, x^N)$是$\theta$平方函数的指数集合，仍是一正态密度函数。将它写成$N(\theta_N,\sigma_N^2)$的形式，即：

$$p(\theta \mid x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_N}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta-\theta_N}{\sigma_N}\right)^2\right]$$

$$=a'''\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta^2}{\sigma_N^2}-2\frac{\theta_N\theta}{\sigma_N^2}\right)\right]$$

将上述两式相比较，得：

$$\frac{1}{\sigma_N^2}=\frac{N}{\sigma^2}+\frac{1}{\sigma_0^2}$$

$$\frac{\theta_N}{\sigma_N^2}=\frac{1}{\sigma^2}\sum_{k=1}^{N}x^k+\frac{\theta_0}{\sigma_0^2}=\frac{N}{\sigma^2}\hat{m}_N+\frac{\theta_0}{\sigma_0^2}$$

解出 θ_N和 σ_N，得：

$$\theta_N=\frac{N\sigma_0^2}{N\sigma_0^2+\sigma^2}\hat{m}_N+\frac{\sigma^2}{N\sigma_0^2+\sigma^2}\theta_0$$

$$\sigma_N^2=\frac{\sigma_0^2\sigma^2}{N\sigma_0^2+\sigma^2}$$

即根据对训练样本集$\{x^i\}_{i=1,2,\ldots,N}$的观察，求得均值θ的后验概率密度$p(\theta| x^i)$为$N(\theta_N,\sigma_N^2)$，其中 θ_N是经过N个样本观察之后对均值的最好估计，它是先验信息（即 θ_0，σ_0^2和 σ^2）与训练样本所给信息（即 N和$\hat{m}_N$）

适当结合的结果，是用 N 个训练样本对均值的先验估计 θ_0 的补充；σ_N^2 是对这个估计的不确定性的度量，因 σ_N^2 随 N 的增加而减小，因此当 $N\to\infty$ 时，σ_N^2 趋于零。由于 θ_N 是 $\hat{m}_N$ 和 θ_0 的线性组合，两者的系数都非负且其和为 1，因此只要 $\sigma_0\neq 0$，当 $N\to\infty$ 时，θ_N 趋于样本均值的估计量 $\hat{m}_N$。

图中所示为一正态密度的均值学习过程，每增加一次对样本的预测，都可减小对 θ 估计的不确定性，所以 $p(\theta|x^1, ..., x^N)$ 变得越来越峰形突起，且其均值与估计量 $\hat{m}_N$ 之间的偏差的绝对值亦越来越小。