机器学习

3. MLE&MAP

Machine Learning



what society thinks I



what my friends think I do

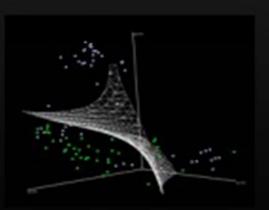


what my parents think I do

$$\begin{split} & \mathcal{L}_{\sigma} = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{l} \alpha_i x_i (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{w} \circ b) \circ \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \\ & \alpha_i \geqslant 0, \forall i \\ & \mathbf{w} = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i x_i \mathbf{x}_i \cdot \sum_{i=1}^{l} \alpha_i x_i = 0 \\ & \nabla \hat{\mathbf{y}}(\theta_T) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla \ell(x_i, y_i; \theta_t) + \nabla r(\theta_t). \\ & \theta_{t+1} = \theta_t - \eta_t \nabla \ell(x_{i(t)}, y_{i(t)}; \theta_t) - \eta_t \cdot \nabla r(\theta_t). \end{split}$$

 $\mathbb{E}_{i(t)}[\ell(x_{i(t)}, y_{i(t)}; \theta_t)] = \frac{1}{n} \sum_i \ell(x_i, y_i; \theta_t).$

what other programmers think I do



what I think I do

>>> from scipy import SVM



3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- > 高斯分布情形

3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- > 高斯分布情形

- ➤概率
 - ▶采样空间,事件, ♥代数
 - >概率公理, 概率度量
 - ▶随机变量
 - ▶期望与方差
 - ▶联合分布
 - >条件分布
 - >独立,条件独立

> 采样空间

定义: 一个采样空间 Ω 对应一个(抽象概念或具有物理实体的)随机实验所有可能的输出. Ω 可包含有限或无限元素.

■ 举例:

- > 一个骰子的所有可能输出
- >一本书随机打开的页数
- ▶温度,坐标,时间等



> 事件

定义: 事件 A 是采样空间Ω的一个子集。

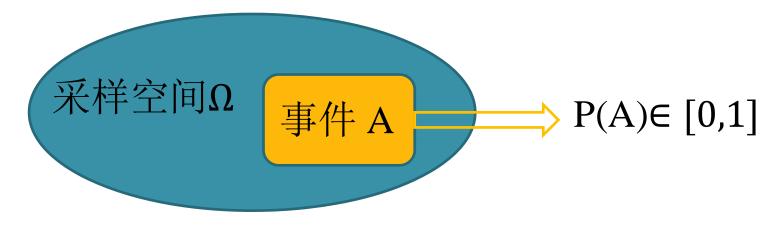
- 举例:
 - ▶骰子6点
 - ▶一本书在整10页打开
 - ▶ 中国人身高超过1米8

> 事件概率

定义: 概率 P(A),又称事件 A 发生的概率,是一个将事件 A 映射到区间[0,1]的映射函数。P(A)又成为 A 的概率度量。

■ 举例:

▶骰子摇到2-4点的概率



▶ 可行事件集 = 0 代数

定义:Ω的一系列子集的集合,记为 M,可称为σ代数,若 其满足以下三个条件:

- (i) $\phi \in M$,即空集为M元素
- (ii) 若 $A \in M$,则 $A^c \in M$,即补集运算在 M 中为封闭运算
- (iii) 若 $A_1, A_2, \dots \in M$,则 $U_{i=1}^{\infty} A_i \in M$,即 M 在可列并运算下封闭

➤ 概率公理 (Kolmogorov公理)

- (i) 非负性:对任意事件 A, P(A) ≥ 0
- (ii) $P(\Omega) = 1$
- (iii) σ 可加:对任意不相交事件 A_i ,我们有

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$$



>一些推论

$$P(\varphi)=0$$

$$P(A^c) = 1 - P(A)$$

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$$

> 随机变量

定义:随机变量对应于一个由采样空间产生的事件映射到实数(或整数)空间的函数,即

$$X: \Omega \to R$$

P(a < X < b) = P(w: a < X(w) < b)P(X = a) = P(w: X(w) = a)

▶ 例如:

- ightarrowX(w) = 1,我们班(Ω)上课第一个睡着的同学(w)是男生
- $\Sigma X(w) < 60$,在可能获得的成绩(Ω)里,最后不及格的分数(w)



▶离散分布

➤伯努利分布: Ber(p)

$$\Omega = \{ \overline{\text{Em}}, \overline{\text{反}} \text{面} \}, X(\overline{\text{Em}}) = 1, X(\overline{\text{反}} \text{面}) = 0$$

$$P(X = a) = P(w: X(w) = a) =$$

$$\begin{cases} p, & \text{若 } a = 1 \\ 1 - p, & \text{若 } a = 0 \end{cases}$$

▶二项分布: Bin(n,p)

假设一个硬币正面朝上的概率为p,抛此硬币n次,得到k次正面(或n-k次反面)的概率多大?

$$\begin{split} \Omega = & \big\{ \text{所有可能 } n \text{ 长度的正面/反面序列} \big\}, \ |\Omega| = 2^n \\ & w = (w_1, w_2, \cdots, w_n) \in \{\text{正面, 反面}\}^n, K(2) = w \text{ 中出现正面的次数} \\ & P(K = k) = P(w: K(w) = k) = \sum_{w: K(w) = k} p^k (1-p)^{n-k} = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \end{split}$$

> 连续分布

定义:累积分布函数:

$$F_X(z) = P(X \le z)$$
 or $F_X(z) = P(X < z)$

Cummulative distribution function (CDf)

定义:连续分布: 累积分布函数为绝对连续的随机变量概率

$$F(-\infty) = 0, F(+\infty) = 1$$

当存在某个函数p使得 $F(x) = \int_{-\infty}^{x} p(t)dt, 则F: (-\infty, \infty) \to R$ 为绝对连续。

定义:上述 p(x)成为分布 F 的概率密度函数

性质:
$$\frac{d}{dx}F(x) = p(x)$$
.

Probability

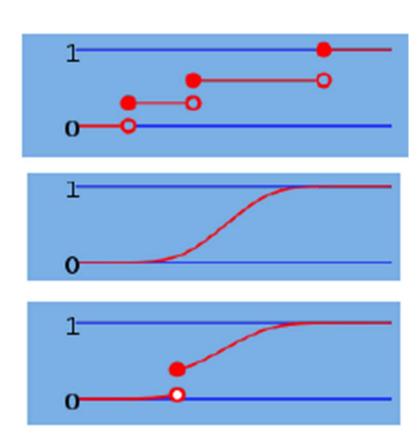
Density function
(PDf)

> 累积分布图

?

?

9

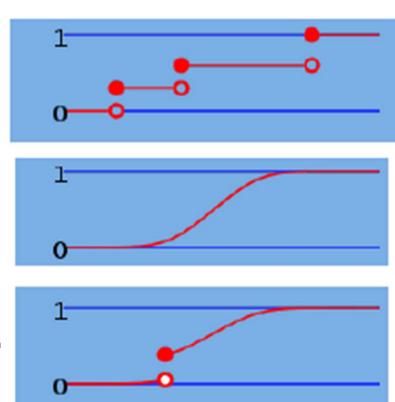


> 累积分布图

离散概率分布的CDF

连续概率分布的CDF

连续+离散概率分布的CDF



> 概率密度分布

PDF 性质:

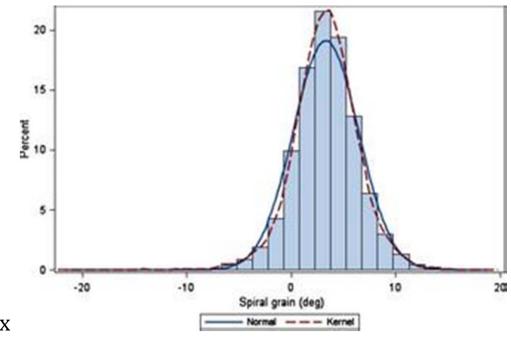
$$p(x) \ge 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1$$

$$p(x) = \frac{d}{dx} dF(x)$$

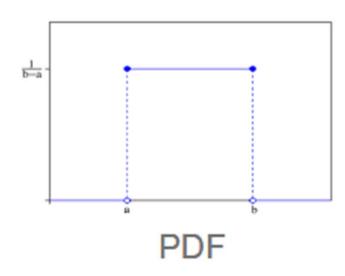
$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} p(t)dt$$

$$P(a \le X \le b) = \int_a^b p(x) dx$$



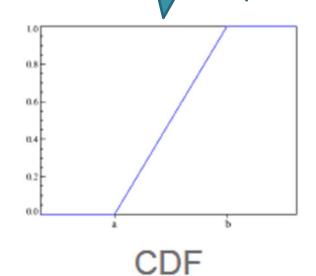
▶ 直观上,可认为p(x)dx为随机变量 X 落于无穷小区间[x,x+dx]的概率

> 均匀分布



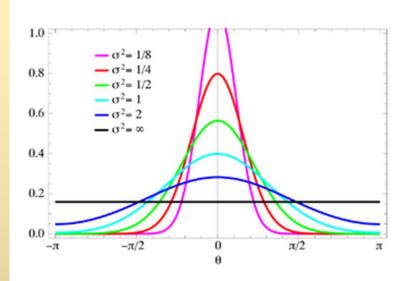
$$p(X) = \begin{cases} 1/(b-a), & a \le x \le b \\ 0, & 其它 \end{cases}$$

Uniform Dirtribution



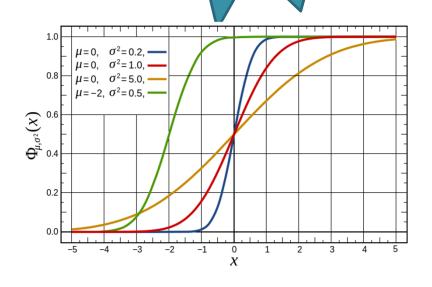
$$F(X) = \begin{cases} 0, x \le a \\ (x-a)/(b-a), a \le x \le b \\ 1, x > b \end{cases}$$

▶ 正态/高斯分布



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

Normal/Gaussian Distribution



$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad F(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2\sigma^2}}\right)\right)$$

- > 矩
 - ▶期望: 平均值,1阶矩 Expectation

$$E(X) = \begin{cases} \sum_{x_i \in \Omega} x_i p(x_i) , 离散概率分布 \\ \int_{-\infty}^{\infty} x p(x) dx, 连续概率分布 \end{cases}$$

▶方差:平均值,2阶矩

$$V(X) = \begin{cases} \sum_{x_i \in \Omega} (x_i - E(X))^2 p(x_i) , 离散概率分布 \\ \int_{-\infty}^{\infty} (x - E(X))^2 p(x) dx, 连续概率分布 \end{cases}$$

> 多变量(联合)分布

$$P(a \le X \le b, c \le Y \le d) = ?$$

 $P(a_1 \le X_1 \le b_1, \dots, a_d \le X_d \le b_d) = ?$

> 多变量(联合)分布

$$P(a \le X \le b, c \le Y \le d) = ?$$

$$P(a_1 \le X_1 \le b_1, \dots, a_d \le X_d \le b_d) = ?$$

> 离散多变量分布

P(A1,B1) = 5/20

边际分布: P(A1) = 16/20, P(B1) = 8/20

BI坐前五排 B2不坐前五排

Marginal

distribution

AI男生	5/20	11/20
A2女生	3/20	1/20

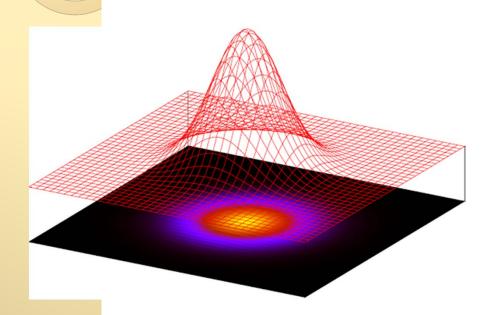
> 连续多变量分布

多变量累积分布函数

对于
$$A \subset R^d, P([X_1, \dots, X_d] \in A) = \int_A p(t_1, \dots, t_d) dt_1 \dots dt_d$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_d) = \int_{-\infty}^{\mathbf{x}_1} \dots \int_{-\infty}^{\mathbf{x}_d} \mathbf{p}(\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_d) d\mathbf{t}_1 \dots d\mathbf{t}_d$$

> 多变量高斯分布



 $\mu \in \mathbb{R}^d$: 均值

 $\Sigma \in \mathbb{R}^{d \times d}$:协方差矩阵

$$p(x_1, \dots, x_d) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)^T \Sigma^{-1}(x - \mu)\right)$$

Conditional

>条件概率

P(X|Y): 在给定Y事件为真的前提下X事件为真的概率

$$P(X|Y) = \frac{P(X,Y)}{P(Y)}$$

P(B1|A1)

P(B1|A2)

DIT 11, 136 DE /IT T. 11, 136	BI	坐前五排	B2不坐前五排
---	----	------	---------

AI男生	5/20	11/20
A2女生	3/20	1/20

Conditional

>条件概率

P(X|Y): 在给定Y事件为真的前提下X事件为真的概率

$$P(X|Y) = \frac{P(X,Y)}{P(Y)}$$

$$P(B1|A1) = (5/20) / (16/20) = 5/16$$

$$P(B1|A2) = (3/20) / (4/20) = 3/4$$

BI坐前五排 B2不坐前五排

AI男生	5/20	11/20
A2女生	3/20	1/20



> 独立性

独立随机变量:

P(X,Y) = P(X)P(Y); P(X|Y) = P(X)

含义:

- ✓Y与X不包含互相的信息
- ✓观察到事件Y不能帮助预测X事件信息
- ✓观察到事件X不能帮助预测Y事件信息

例子:

- ✓ 学校举办的报告
- ✓ 一门课程的某一节课

> 条件独立

Z使得X与Y独立:

$$P(X,Y|Z) = P(X|Z)P(Y|Z)$$
$$P(X|Y,Z) = P(X|Z)$$

例子:

✓ 相关: 鞋码大小与读书能力

> 条件独立

Z使得X与Y独立:

$$P(X,Y|Z) = P(X|Z)P(Y|Z)$$
$$P(X|Y,Z) = P(X|Z)$$

例子:

- ✓ 相关: 鞋码大小与读书能力
- ✔ 条件独立: 在给定年龄下的鞋码大小与读书能力
- ✔伦敦出租车司机:
 - ✓ 调查指出交通事故的发生概率与出租车司机 是否穿外衣有强正相关关系。

3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- > 高斯分布情形

> 链式法则

$$P(X,Y) = P(X|Y)P(Y) = P(Y|X)P(X)$$

> 贝叶斯规则

$$P(X|Y) = \frac{P(Y|X)P(X)}{P(Y)}$$

□ 贝叶斯规则构成了整个机器学习的重要统计理论基础!

观测到飞碟| 观测到飞碟| 有外星人 无外星人

0.6	0.1
0.4	0.9

未观测到飞 未观测到飞 碟|有外星人 碟|无外星人

有外星人 0.001 无外星人 0.999 当观测到飞碟有外星 人的概率:

A=1: 观测到飞碟

B=1: 有外星人

$$P(B = 1|A = 1) = \frac{P(A = 1|B = 1)P(B = 1)}{P(A = 1)}$$

$$P(A = 1|B = 1)P(B = 1)$$

$$= \frac{1}{P(A = 1|B = 1)P(B = 1) + P(A = 1|B = 0)P(B = 0)}$$

$$= \frac{0.6 * 0.001}{0.6 * 0.001 + 0.1 * 0.999} = 0.057$$

当观测到飞碟无外星 人的概率:

$$P(B = 0|A = 1) = 1 - 0.057 = 0.943$$

观测到飞碟| 观测到飞碟| 有外星人 无外星人

0.6	0.1
0.4	0.9

未观测到飞 未观测到飞 碟|有外星人 碟|无外星人

有外星人 0.001 无外星人 0.999

- > 观察1
 - 》 即使观测到飞碟, 有外星人的概率 仍然很小
 - ▶ 原因?
- > 观察2
 - 观测到飞碟使有 外星人的先验概 率显著增大
 - > 原因?

先验 vs. 后验

3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- > 高斯分布情形

最大似然估计

- > 硬币实验
 - ▶ 抛一个硬币,正面 朝上的概率?
 - > 以下的抛投结果:













- > 正面朝上的概率是
- > 3/5
- ▶ 为什么?



最大似然估计

▶ 伯努利分布

$$D = \{X_i\}_{i=1}^n, X_i \in \{\text{正面,背面}\}$$

 $P(\text{正面}) = \theta, P(背面) = 1 - \theta$

- ➤ 所有抛掷为i.i.d.事件
 - ➤ 独立(independent)事件
 - > 同分布(identically distributed)事件
- ▶ 最大似然估计目标:选择 θ 使得观察数据的发生概率最大!

▶ 最大似然函数估计 (MLE):

$$D = \{X_i\}_{i=1}^n, X_i \in \{ \mathbb{E} \mathbb{m}, \mathfrak{P}(\mathbb{D}) \}$$

 $\theta_{MLE} = \arg \max_{\theta} P(\mathbb{D}|\theta)$

▶ 计算使得观察数据的发生概率最大的 θ

$$\theta_{MLE} = \arg \max_{\theta} P(D|\theta)$$

$$= \arg \max_{\theta} \prod_{i=1}^{n} P(X_i|\theta) = ?$$

▶ 计算使得观察数据的发生概率最大的 θ

$$\theta_{\text{MLE}} = \arg \max_{\theta} P(D|\theta)$$

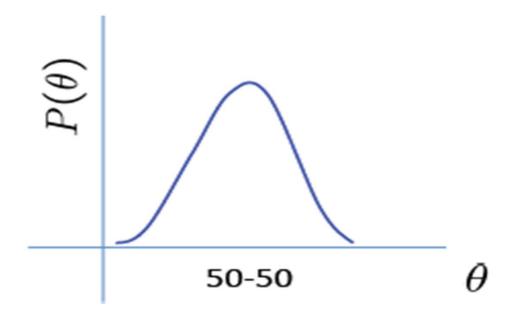
$$= \arg \max_{\theta} \prod_{i=1}^{n} P(X_i | \theta)$$

$$\theta_{MLE} = \frac{n_{\underline{\mathbb{I}}\underline{\mathbb{I}}}}{n_{\underline{\mathbb{I}}\underline{\mathbb{I}}} + n_{\underline{\mathbb{I}}\underline{\mathbb{I}}}}$$

▶一个问题:如果抛投五次硬币,全部为正面,MLE结果是?

- ▶一个问题:如果抛投五次硬币,全部为正面,MLE结果是?
- ➤ P(正面) = 1 对吗?

- ▶一个问题:如果抛投五次硬币,全部为正面,MLE结果是?
- ➤ P(正面) = 1 对吗?
- > 我们默认有一个先验在脑中



3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- > 高斯分布情形

> 贝叶斯规则

Maximum A Porteriori Ertimation

$$P(\theta|D) = \frac{P(D|\theta)P(\theta)}{P(D)}$$

▶或者。。。

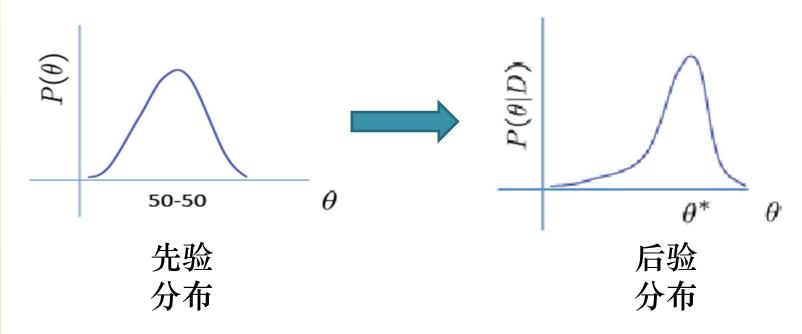
 $P(\theta|D) \sim P(D|\theta)P(\theta)$

 后验
 似然
 先验

 分布
 函数
 分布

> 硬币实验

 $P(\theta|D) \sim P(D|\theta)P(\theta)$



先验从哪里来???

- > 关于先验
 - > 通过专家知识而来 (哲学系方法)
 - ▶ 简单易算形式 (工程系方法)
- > 无信息先验
 - > 均匀分布
 - > 近似均匀分布
- > 共轭先验
 - > 后验能够闭合形式表达
 - > 先验与后验具有同样形式

- > 共轭先验
 - > 先验与后验具有相同的参数化形式

例 1: 抛掷硬币

似然函数: 二项分布

$$P(D|\theta) = C_n^{n_Z} \theta^{n_Z} (1 - \theta)^{n - n_Z}$$

Beta 分布(先验):

$$P(\theta) = \frac{\theta^{\beta_Z - 1} (1 - \theta)^{\beta_B - 1}}{B(\beta_Z, \beta_B)} \sim Beta(\beta_Z, \beta_B)$$

后验形式:

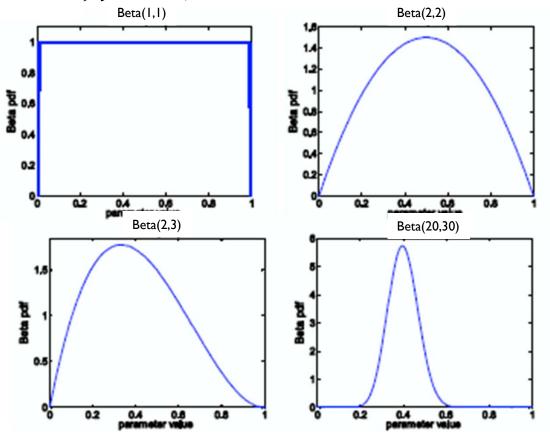
$$P(\theta|D) \sim Beta(\beta_Z + n_Z, \beta_B + n_B)$$

> 二项分布的共轭先验分布为Beta分布





> 典型Beta分布图

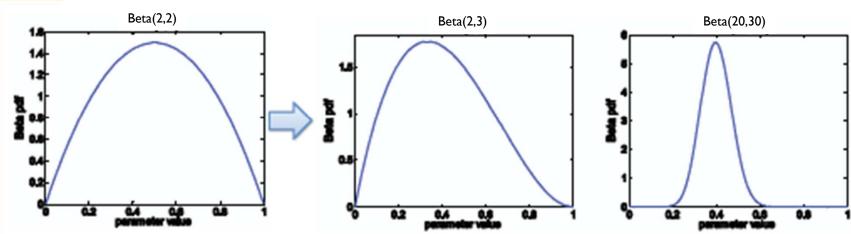


> β_Z, β_B越大,分布越集中

➤ Beta先验计算效果



$$P(\theta|D) \sim Beta(\beta_Z + n_Z, \beta_B + n_B)$$



- ▶直观意义?
- ▶ 当越来越多的样本加入时,先验的作用会?

> 最大后验原理

$$\theta_{MAP} = \arg \max_{\theta} P(\theta|D)$$

$$= \arg \max_{\theta} P(D|\theta)P(\theta)$$

> 对二项分布的MAP估计:

$$P(\theta|D) \sim Beta(\beta_Z + n_Z, \beta_B + n_B)$$

$$\theta_{MAP} = \frac{\beta_Z + n_Z - 1}{\beta_Z + n_Z + \beta_B + n_B - 2}$$

➤ 与其MLE相比有什么样的不同?

3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- > 高斯分布情形

MLE vs. MAP

➤ MLE: 选择最大化观察数据概率的参数值

 $\theta_{\text{MLE}} = \arg \max_{\theta} P(D|\theta)$

> MAP:

在给定观察数据与先验前提下,选择后验最大的参数值

 $\theta_{MAP} = \arg \max_{\theta} P(\theta|D)$

= $\arg \max_{\theta} P(D|\theta)P(\theta)$

MLE vs. MAP

$$\theta_{\text{MLE}} = \frac{n_{\text{Z}}}{n_{\text{Z}} + n_{\text{B}}}$$







- ▶ 三次正面,结果为?
- ▶ MLE估计:正面概率为1

$$\theta_{MAP} = \frac{\beta_{Z} + n_{Z} - 1}{\beta_{Z} + n_{Z} + \beta_{B} + n_{B} - 2}$$

➤ MAP估计:

$$\frac{(\beta_{\rm Z} - 1) + 3}{(\beta_{\rm Z} + \beta_{\rm B} - 2) + 3}$$

- ➤ 总投掷次数n趋于无穷时,会发生什么情况?
- > 何时先验更能体现出重要性?

MLE vs. MAP

贝叶斯学派: 在小数据时 你做的都是 错的!



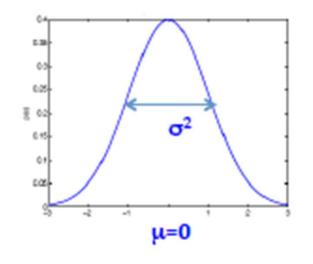
频域学派: 你太依赖先验, 而且先验不同, 结果也不同!

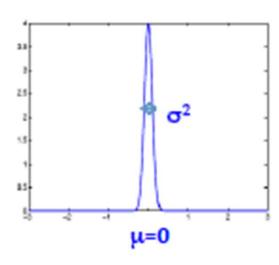
3. MLE & MAP

- > 统计/概率 基本概念与知识
- > 贝叶斯准则
- ➤ 最大似然估计 (MLE)
- ➤ 最大后验估计 (MAP)
- > MLE VS. MAP
- ▶高斯分布情形

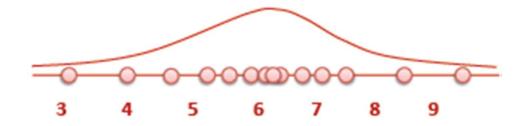
➤ 高斯分布的MLE与MAP估计如何求?

$$P(x|\mu,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} = N(\mu,\sigma)$$





▶数据:



- ▶ 参数: μ 均值, σ² 方差
- ➤ 数据为i.i.d.:
 - ➤ 独立事件 independent
 - ► 根据同一个高斯分布产生 identically distributed

- > 高斯分布的性质
 - > 仿射变换的闭合性

$$x \sim N(\mu, \sigma^2)$$

 $y = ax + b \sim N(a\mu + b, a^2\sigma^2)$

> 高斯分布的加和

$$x \sim N(\mu_x, \sigma_x^2)$$

$$y \sim N(\mu_y, \sigma_y^2)$$

$$z = x + y \sim N(\mu_x + \mu_y, \sigma_x^2 + \sigma_y^2)$$

▶ 高斯分布参数的MLE估计

$$\theta_{\text{MLE}} = \arg \max_{\theta} P(D|\theta)$$

$$= \arg \max_{\theta} \prod_{i=1}^{n} P(x_i | \theta)$$

$$= arg \max_{\theta} \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{\frac{-(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$$= \arg \max_{\theta = (\mu, \sigma^2)} \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{\frac{-(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

▶ 高斯分布参数的MLE估计

$$\mu_{\text{MLE}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\sigma_{\text{MLE}}^{2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_{\text{MLE}})^2$$

> 高斯分布的共轭先验

>均值变量: 高斯分布

▶ 方差变量: Wishart分布

> 高斯先验形式

$$P(\mu|\eta,\lambda) = \frac{1}{\lambda\sqrt{2\pi}}e^{\frac{-(\mu-\eta)^2}{2\lambda^2}} = N(\eta,\lambda^2)$$

▶ 高斯分布均值变量的MLE与MAP估计

$$\mu_{MLE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\mu_{MAP} = \frac{\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i + \frac{\eta}{\lambda^2}}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\lambda^2}}$$

要求

- 1. 搞清楚机器学习涉及的统计基础
- 2. 搞清楚贝叶斯定理的含义
- 3. 搞清楚MLE与MAP各自的特点与本质

阅读:

[1] Pattern Recognition and Machine Learning, Christopher, M. Bishop, Springer, 2006. II. Probabilistic Distribution