贝叶斯数据分析基础
A Tutorial on Bayesian Data Analytics

西安交通大学管理学院
信息管理与电子商务系
智能决策与机器学习研究中心
刘佳鹏

概率论与数理统计回顾

- **随机试验**：如果一个试验具备以下特征：（1）可以在相同条件下重复进行；（2）每次试验的可能结果不止一个，但事先能明确全部可能的结果；（3）进行一次试验之前不能肯定哪一个结果会出现，则称这种试验为随机试验，简称试验
  - E_1 ：抛掷一枚硬币，观察正面、反面的出现情况
  - E_2 ：投掷一颗骰子，观察出现的点数
  - E_3 ：记录车站售票处一天内出售的车票数
  - E_4 ：从一大批元件中任意抽取一个，测试其使用寿命

概率论与数理统计回顾

- **样本空间**：对于一个试验 E ，虽然在一次试验之前不能肯定哪个结果会发生，但试验的一切可能结果是已知的，我们把 E 的所有可能的试验结果组成的集合称为 E 的**样本空间**，样本空间的元素（亦称 E 的每个可能结果）称为样本点
- 用 Ω 表示样本空间。例如，上述 E_1 至 E_4 的样本空间分别是
  - $\Omega_1 = \{\omega_0, \omega_1\}$ ，其中 ω_0 表示"正面朝上"， ω_1 表示"反面朝上"
  - $\Omega_2 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ ，其中数 i 表示"出现 i 点"， $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$
  - $\Omega_3 = \{0, 1, 2, ..., n\}$ ，这里 n 是售票处一天内准备出售的车票数
  - $\Omega_4 = \{\omega | \omega \geqslant 0\}$ 或者 $\Omega_4 = [0, +\infty]$

概率论与数理统计回顾

- **随机事件**：在随机试验中，可能发生、也可能不发生的事情叫做随机事件，简称事件
- 用大写字母 $A, B, C, \ldots$ 表示随机事件
- 在试验 E_2 中，存在如下随机事件
  - A 表示“掷出奇数点数”， $A = \{1, 3, 5\}$
  - B 表示“掷出偶数点数”， $B = \{2, 4, 6\}$
  - C 表示“掷出素数点数”， $C = \{2, 3, 5\}$

样本空间与随机事件的关系

- 对于一个试验 E ，它的样本空间 Ω 是由 E 的全部可能结果组成的集合
- 而 E 的一个随机事件 A 是由一部分可能结果组成的集合
- 因此事件 A 是样本空间 Ω 的子集，记为 $A \subset \Omega$
- 称事件 A 发生，当且仅当属于 A 的某一个样本点在试验中出现

概率论与数理统计回顾

样本空间与随机事件的关系

- 必然事件：每次试验中必然发生的事情，记为 Ω
- 不可能事件：每次试验中都不发生的事情，记为 $\emptyset$
- 例如在试验 E_2 中，事件 $A=$ “掷出的点数不超过6”是必然事件，这个事件包含 E_2 的所有可能结果，$A=\Omega=\{1,2,3,4,5,6\}$，而事件 $B=$ “掷出的点数小于1”是不可能事件，这个事件不包含 E_2 的任何一个可能结果，$B=\emptyset$

概率论与数理统计回顾

概率空间

- 概率空间是三位一体的研究对象 (Ω, F, P)，其中 Ω 是样本空间， F 是事件域（随机事件全体，包含必然事件 Ω 和不可能事件 $\emptyset$ ）， P 是定义在事件域 F 上的概率（测度），满足以下三条公理：
- （1）非负性：对于任意事件 A ，其概率 $P(A) \geqslant 0$
- （2）规范性：必然事件 Ω 的概率等于1，即 $P(\Omega) = 1$
- （3）可列可加性： $A_1, A_2, ..., A_n$ 是一系列事件，满足 $A_i \cap A_j = \emptyset$ （称为两两不相容），则

$$P(A_1 \cup A_2 \cup ... \cup A_n) = \sum_{i=1}^{n} P(A_i)$$

条件概率公式

- 对于任意两个事件 A 和 B，且 $P(A) > 0$，定义在 A 发生的条件下， B 发生的条件概率为

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

  从而 $P(AB) = P(A)P(B|A)$，这就是乘法公式
- 推而广之，设 $A_1, A_2, ..., A_n$ 是任意 n 个随机事件，则有更一般的乘法公式

$$P(A_1A_2\cdots A_n) = P(A_1)P(A_2|A_1)P(A_3|A_1A_2)$$
$$\cdots P(A_n|A_1A_2\cdots A_{n-1})$$

全概率公式

设 $B_1, \ldots, B_n$ 是样本空间 Ω 中的一个完备事件群（又称为 Ω 的一个划分）。换言之，它们满足下列条件：

(a) 两两不相交，即 $B_i \cap B_j = \emptyset \; (i \neq j)$

(b) 它们的并(和)恰好是样本空间，即 $\bigcup_{i=1}^{n} B_i = \Omega$

设 A 为 Ω 中的一个事件，则**全概率公式**为

$$
\begin{aligned}
P(A) = P(A\Omega) &= P\left(\bigcup_{i=1}^{n} AB_i\right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} P(AB_i) = \sum_{i=1}^{n} P(A|B_i)\, P(B_i)
\end{aligned}
$$

这个公式将整个事件 A 分解成一些两两不相交的事件之并(和)。直接计算 $P(A)$ 不容易，但分解后的那些事件的概率容易计算，从而使 $P(A)$ 的计算变得容易了

贝叶斯公式

- 在全概率公式的条件下，即存在样本空间 Ω 中的一个完备事件群 $\{B_1, ..., B_n\}$ ，设 A 为 Ω 中的一个事件，且 $P(B_i) > 0$ $(i = 1, ..., n)$ ， $P(A) > 0$ ，则按照条件概率的计算方法，有

$$P(B_i|A) = \frac{P(A|B_i)P(B_i)}{P(A)} = \frac{P(A|B_i)P(B_i)}{\sum_{j=1}^{n} P(A|B_j)P(B_j)}$$

贝叶斯公式

示例：一种诊断某癌症的试剂，经临床试验有如下记录：癌症病人试验结果是阳性的概率为95%，非癌症病人试验结果是阴性的概率为95%。现用这种试剂在某社区进行癌症筛查，该社区癌症发病率为0.5%，问某人反应为阳性时，该如何判断他是否患有癌症？

贝叶斯公式

解：设 A 表示“反应为阳性”的事件， B 表示“被诊断者患癌症”的事件，则 $B_1 = B$ 和 $B_2 = \bar{B}$ 构成一个完备事件群。由题意知

$$P(A|B_1) = 0.95, \quad P(A|B_2) = 1 - P\left(\overline{A}|B_2\right) = 1 - 0.95 = 0.05,$$
$$P(B_1) = 0.005, \quad P(B_2) = 0.995.$$

现在要算的是 $P(B_1|A)$ 和 $P(B_2|A)$ 。有贝叶斯公式易得

$$P(B_1|A) = \frac{P(A|B_1)P(B_1)}{P(A|B_1)P(B_1) + P(A|B_2)P(B_2)}$$
$$= \frac{0.95 \times 0.005}{0.95 \times 0.005 + 0.05 \times 0.995} \approx 0.087 = 8.7\%$$
$$P(B_2|A) = 1 - P(B_1|A) = 91.3\%$$

贝叶斯公式

- 练习：试用贝叶斯公式解释“幸存者偏差”现象
- 幸存者偏差：二战期间，为了加强对战机的防护，英美军方调查了作战后幸存飞机上弹痕的分布，决定哪里弹痕多就加强哪里。然而统计学家亚伯拉罕·瓦尔德力排众议，指出更应该注意弹痕少的部位，因为这些部位受到重创的战机，很难有机会返航，而这部分数据被忽略了。事实证明，瓦尔德是正确的。

贝叶斯公式

- 用 X 表示飞机被击中的部位，取值集合为 $\{机头, 机翼, 机身, 机尾, \cdots\}$
- 用 $Y=1$ 表示飞机返航，$Y=0$ 表示飞机坠毁
- 我们关心的是那些坠毁飞机的被击中部位的分布（为了方便论述，这里假设失事飞机只有一个被击中部位，该部位即为关键部位）

$$\begin{aligned} P(X \mid Y=0) &= \frac{P(Y=0 \mid X)P(X)}{P(Y=0)} \\ &\propto P(Y=0 \mid X)P(X) \end{aligned}$$

即关心 X 为哪些部位时，$P(X \mid Y=0)$ 比较大，从而应该加强这些部位的防护。由于二战期间的炮弹是不长眼睛的，所以可将 $P(X)$ 视为均匀分布，从而得到

$$\begin{aligned} P(X \mid Y=0) &\propto P(Y=0 \mid X)P(X) \\ &\propto P(Y=0 \mid X) \end{aligned}$$

类似地，可以得到

$$\begin{aligned} P(X \mid Y=1) &\propto P(Y=1 \mid X)P(X) \\ &\propto P(Y=1 \mid X) \end{aligned}$$

同时注意到 $P(Y=0 \mid X) + P(Y=1 \mid X) = 1$

- 我们仅能观察到返航飞机上弹痕的分布 $P(X \mid Y=1)$，所以当某一部位 X （例如机身）的弹痕较多时，说明 $P(X=机身 \mid Y=1)$ 较大，根据上述关系可以得到 $P(Y=1 \mid X=机身)$ 较大，而 $P(Y=0 \mid X=机身)$ 和 $P(X=机身 \mid Y=0)$ 较小，从而说明机身不是关键部位；相反地，如果另一部位 X （例如机翼）的弹痕较少时，该部位往往有可能是关键部位，应该加强防护

贝叶斯公式

- 贝叶斯公式可以纠正一些“成功学谬误”
- 例如 $Y=1$ 表示成功者，往往受媒体关注多，而公众可能缺少 $Y=0$ 的数据。成功学理论常常寻找成功者具有的某些共同特征 X，得出 $P(X \mid Y=1)$ 较大，认为这些共同特征 X 是导致成功的关键因素，比如比尔盖茨辍学后成功，这种结论是错误的！
- 事实上，普通人具有特征 X 的概率 $P(X)$ 可能也不低，而我们真正关心的是具有特征 X 的成功概率

$$
\begin{aligned}
P(Y=1 \mid X) &= \frac{P(X \mid Y=1)P(Y=1)}{P(X)} \\
&= \frac{P(X \mid Y=1)}{P(X)} P(Y=1)
\end{aligned}
$$

其中的比例 $\frac{P(X|Y=1)}{P(X)}$ 表示具有特征 X 后成功的概率能够提升多少倍，只有当 $\frac{P(X|Y=1)}{P(X)} > 1$ 时才说明具有特征 X 能够使得成功的概率增加

三种信息

总体信息

- 数理统计学的任务是要通过样本推断总体
- 样本有两重性，当把样本视为随机变量时，它有概率分布，称为总体分布。如果我们已经知道总体的分布形式，这就给了我们一种信息，称为总体信息
- 例如，若已知样本来自于正态总体，则它可以提供给我们很多信息，如它的密度函数是倒立的“钟”形曲线，它的所有阶矩存在，任何事件的概率都可以通过查表求出

三种信息

样本信息

- 另外一种信息是样本信息，就是从总体中抽取的样本所提供的信息。这是最“鲜活”的信息，样本越多，提供的信息越多，我们希望通过对样本的加工、整理，对总体的分布或某些数字特征作出统计推断
- 没有样本就没有统计推断

三种信息

- 总体信息和样本信息放在一起，称为抽样信息（sampling information）
- 基于总体信息和样本信息进行统计推断的理论和方法称为经典（古典）统计学（classical statistics）
- 它的基本观点是：把样本看成来自有一定概率分布的总体，所研究的对象是这个总体而不局限于数据本身
- 代表方法：极大似然估计、最小二乘法

三种信息

先验信息

- 另外一种信息称为先验信息(prior information)，就是在抽样之前，有关统计推断问题中未知参数的一些信息
- 先验信息一般来自经验和历史资料，例如“某人认为明天下雨的概率是0.6”、“某种疾病在中年男性中的发病率是5.2%”
- 下面两例说明先验信息是存在的且可被人们利用

三种信息

先验信息

- 英国统计学家Savage(1961)提出了一个令人信服的例子，可以说明先验信息有时是很重要的。看下面两个统计试验：
- （1）一个常饮牛奶和茶的女士说，她能辨别先倒进杯子里的是茶还是牛乳。对此做了10次试验，她都说对了
- （2）一位音乐家说，他能够从一页乐谱中辨别是海顿还是莫扎特的作品。在10次试验中，他都说对了

三种信息

- 基于上述三种信息进行统计推断的方法和理论称为贝叶斯统计学(Bayes statistics)
- 它与经典统计学的主要区别在于是否利用先验信息
- 在使用样本上也是存在差别的，贝叶斯方法重视已出现的样本，对尚未发生的样本值不予考虑
- 贝叶斯学派重视先验信息的收集、挖掘和加工，使之形成先验分布而参加到统计推断中来，以提高统计推断的效果
- 忽视先验分布的利用，有时是一种浪费!

古典学派与贝叶斯学派的争论

- 古典学派和贝叶斯学派是当今数理统计学的两大学派
- 凡是坚持概率的频率解释，对数理统计学中的概念、结果和方法性能的评价等都必须在大量重复的意义上去理解的，都属于古典学派，亦称为频率学派
- 20世纪60年代以来贝叶斯学派迅速崛起，达到可以与频率学派分庭抗礼的程度
- 由于其发展较新，因此贝叶斯学派常常把频率学派称为古典学派
- 贝叶斯统计与机器学习

古典学派与贝叶斯学派的争论

两大学派的主要分歧

- （1）对于概率含义的解释
  - 古典学派：一个事件的概率可以用大量重复试验下的频率来解释
  - 贝叶斯学派：将主观概率认为是认识主体对事件发生机会的相信程度，因为有些事件不可重复
- （2）对于参数的理解
  - 古典学派：参数是一个固定值，虽然可能未知，但可以推断
  - 贝叶斯学派：参数是随机变量，具有特定分布

古典学派与贝叶斯学派的争论

- 虽然两个学派有很多不同观点，但也存在不少共同点，如都承认样本有概率分布，概率的计算遵循共同的原则
- 对上述争论有一个至高无上的“裁判者”，即应用的结果如何，统计方法无论在理论上如何精细高明，总要用实践来检验
- 迄今为止，实践显示这两派的得分都不低．也正是因为它们在应用上的表现不错，才能各自聚合了一批追随者而形成学派
- 作为一名研究人员，可以不执著于任何一派的观点，而是各取其长，为我所用

极大似然估计

- 示例：班上共有 n 名男生，其身高分别为 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 。假设男生的身高服从均值为 μ 方差为 σ^2 的正态分布 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 。试求均值 μ 和方差 σ^2 的极大似然估计

$$p(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad i = 1, \cdots, n$$

- 极大似然估计是古典学派的参数推断方法，认为参数是固定值，虽然未知，但可以推断
  - 待估参数可以取很多值，不同的取值对应着观测样本出现的不同概率
  - 我们要从一切可能取值中选取一个使得观测样本出现的概率最大的值作为参数的估计值（最“像”的取值）

$$\begin{aligned}
\mu_{mle}, \sigma^2_{mle} &= \arg\max_{\mu,\sigma^2} L(\mu, \sigma^2) \\
&= \arg\max_{\mu,\sigma^2} p(D \mid \mu, \sigma^2) \\
&= \arg\max_{\mu,\sigma^2} p(x_1, x_2, \cdots, x_n \mid \mu, \sigma^2)
\end{aligned}$$

极大似然估计

- **独立同分布假设**（independent and identically distributed, i.i.d）：假设样本都服从一个未知分布，每个样本都是独立地从这个分布上采样获得

$$p(D \mid \mu, \sigma^2) = p(x_1, x_2, \cdots, x_n \mid \mu, \sigma^2) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i \mid \mu, \sigma^2)$$

极大似然估计

- 基于独立同分布假设(i.i.d)，得到

$$
\begin{aligned}
\mu_{mle}, \sigma^2_{mle} &= \arg\max_{\mu,\sigma^2} p(D \mid \mu, \sigma^2) \\
&= \arg\max_{\mu,\sigma^2} p(x_1, x_2, \cdots, x_n \mid \mu, \sigma^2) \\
&= \arg\max_{\mu,\sigma^2} \prod_{i=1}^{n} p(x_i \mid \mu, \sigma^2) \\
&= \arg\max_{\mu,\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} \log p(x_i \mid \mu, \sigma^2) \qquad \text{(便于计算同时避免连乘造成的下溢)} \\
&= \arg\max_{\mu,\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} \{-\frac{1}{2}\log 2\pi - \log\sigma - \frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\} \\
&= \arg\min_{\mu,\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} \{\log\sigma + \frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\}
\end{aligned}
$$

极大似然估计

- 令 $f=\sum_{i=1}^{n}\{\log\sigma+\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\}$
- 对 f 分别对 μ 和 σ 求偏导并置零，得到

$$\frac{\partial f}{\partial \mu}=-\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\{x_i-\mu\}=0$$

$$\Rightarrow \mu=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i=\bar{x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma}=n\sigma^{-1}-\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2\sigma^{-3}=0$$

$$\Rightarrow \sigma^2=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2$$

- 均值 μ 和方差 σ^2 的极大似然估计结果分别为

$$\widehat{\mu}_{mle}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i=\bar{x}\quad \textbf{(样本均值)}$$

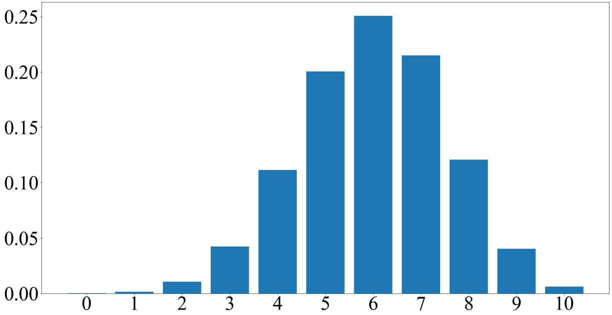
$$\widehat{\sigma}^2_{mle}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2=b_2\quad \textbf{(样本的二阶中心矩，注意不是样本方差)}$$

极大似然估计

- 示例：掷硬币试验，掷出 n 次，设随机变量 X 表示正面向上的次数，因此随机变量 X 服从二项分布 $\mathrm{Bin}(n, \theta)$ ， θ 是硬币正面向上的概率，概率分布如下

$$p(X = x|\theta) = C_n^x \theta^x (1-\theta)^{n-x}, \quad x = 0, 1, ..., n,$$

  其中 x 表示观测到正面向上的次数
- $n = 10$, $\theta = 0.6$ 时二项分布的概率质量函数(pmf)图



极大似然估计

- 示例：掷硬币试验，掷出 n 次，设随机变量 X 表示正面向上的次数，因此随机变量 X 服从二项分布 $\mathrm{Bin}(n,\theta)$ ， θ 是硬币正面向上的概率，概率分布如下

$$p(X = x|\theta) = C_n^x \theta^x (1-\theta)^{n-x}, \quad x = 0, 1, ..., n,$$

  其中 x 表示观测到正面向上的次数
- 使用极大似然估计法估计参数 θ ：
  似然函数

$$L(x|\theta) = C_n^x \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

  对数似然函数

$$LL(x|\theta) = \log(C_n^x) + x\log\theta + (n-x)\log(1-\theta)$$

极大似然估计

- 对数似然函数关于参数 θ 求导并置零

$$\frac{\partial LL(x|\theta)}{\partial\theta} = \frac{x}{\theta} - \frac{n-x}{1-\theta} = 0$$

得到

$$\widehat{\theta}_{MLE} = \frac{x}{n}$$

贝叶斯参数估计

- 示例：掷硬币试验，掷出 n 次，设随机变量 X 表示正面向上的次数，因此随机变量 X 服从二项分布 $\mathrm{Bin}(n, \theta)$ ， θ 是硬币正面向上的概率，概率分布如下

$$p(X = x|\theta) = C_n^x \theta^x (1-\theta)^{n-x}, \quad x = 0, 1, ..., n,$$

其中 x 表示观测到正面向上的次数
- 贝叶斯参数估计是基于贝叶斯公式的参数估计方法

x关于θ的似然函数

参数θ的先验分布

参数θ的后验分布

$$p(\theta \mid x) = \frac{p(x \mid \theta) p(\theta)}{p(x)} = \frac{p(x \mid \theta) p(\theta)}{\int p(x \mid \theta) p(\theta) d\theta}$$

x的边缘分布，亦称归一化因子

贝叶斯参数估计

- x 关于参数 θ 的似然函数

$$p(x|\theta) = C_n^x \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

- 参数 θ 的先验分布：选取[0,1]区间上的均匀分布

$$p(\theta) = 1, \quad 0 \leqslant \theta \leqslant 1$$

- x 的边缘分布（归一化因子）

$$p(x) = \int_0^1 p(x|\theta)p(\theta)d\theta = \int_0^1 \binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x} d\theta = \frac{1}{1+n}$$

- 将上述三项代入贝叶斯公式，得到参数 θ 的后验分布

$$p(\theta|x) = (1+n)\binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x}$$

贝叶斯参数估计

Beta分布

- Beta分布是一组定义在[0,1]区间上的连续概率分布
- Beta分布的概率密度函数

$$\mathrm{Beta}(\theta|a,b)=\begin{cases}\frac{1}{B(a,b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1}, & 0\leqslant\theta\leqslant 1\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

其中 $B(a,b)$ 是Beta函数，定义为

$$B(a,b)=\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}$$

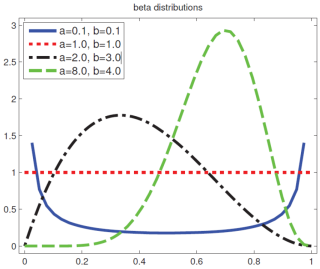
其中 $\Gamma(\cdot)$ 是Gamma函数，定义为

$$\Gamma(s)=\int_0^{\infty}x^{s-1}e^{-x}dx,\quad s>0$$

贝叶斯参数估计

Beta分布

- 参数a和b控制着Beta分布的形式



  - 特别地，当 $a = b = 1$ 时，Beta分布就是[0,1]区间上的均匀分布
  - Beta分布通常作为二项分布(Binomial distribution)的参数的先验分布使用

- Beta分布的期望、众数、方差

$$\text{mean} = \frac{a}{a+b} \quad \text{mode} = \frac{a-1}{a+b-2} \quad \text{var} = \frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)}$$

贝叶斯参数估计

回到掷硬币试验

- 将参数 θ 的先验分布设定为Beta分布

$$\mathrm{Beta}(\theta|a,b)=\frac{1}{B\left(a,b\right)}x^{a-1}(1-x)^{b-1}$$

  - 当 $a=b=1$ 时，Beta分布就是[0,1]区间上的均匀分布

贝叶斯参数估计

- x 的边缘分布（归一化因子）可以写为

$$
\begin{aligned}
p(x) &= \int_0^1 p(x|\theta)\, p(\theta)\, d\theta \\
&= \int_0^1 \underbrace{\binom{n}{x} \theta^x (1-\theta)^{n-x}}_{p(x|\theta)} \underbrace{\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \theta^{a-1} (1-\theta)^{b-1}}_{p(\theta)}\, d\theta \\
&= \binom{n}{x} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \int_0^1 \theta^{a+x-1} (1-\theta)^{b+n-x-1} d\theta \\
&= \binom{n}{x} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \frac{\Gamma(a+x)\Gamma(b+n-x)}{\Gamma(a+b+n)} \\
&\quad \int_0^1 \underbrace{\frac{\Gamma(a+b+n)}{\Gamma(a+x)\Gamma(b+n-x)} \theta^{a+x-1} (1-\theta)^{b+n-x-1}}_{\mathrm{Beta}(x|a+x,b+n-x)}\, d\theta \\
&= \binom{n}{x} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \frac{\Gamma(a+x)\Gamma(b+n-x)}{\Gamma(a+b+n)} = \binom{n}{x} \frac{B(a+x, b+n-x)}{B(a,b)}
\end{aligned}
$$

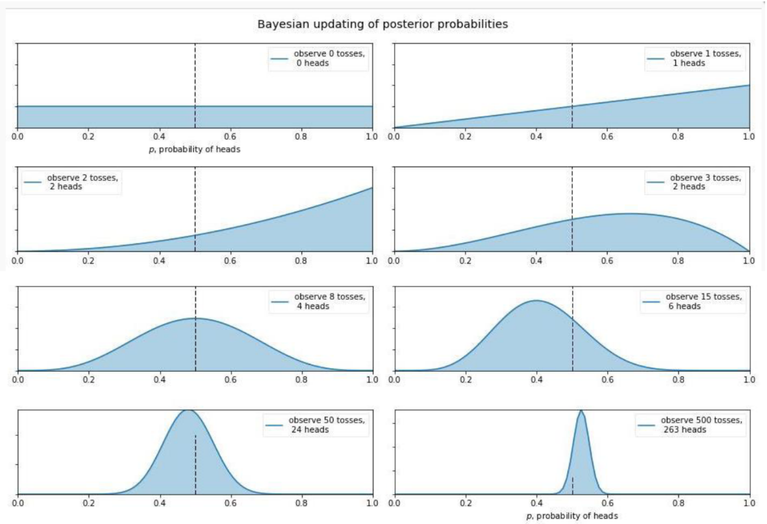
贝叶斯参数估计

- 将 x 的边缘分布 $p(x)$ 代入贝叶斯公式

$$
\begin{aligned}
p(\theta|x) &= \frac{p(x|\theta)\,p(\theta)}{p(x)} \\
&= \frac{\underbrace{\binom{n}{x}\theta^{x}(1-\theta)^{n-x}}_{p(x|\theta)}\underbrace{\frac{1}{B(a,b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1}}_{p(\theta)}}{\underbrace{\binom{n}{x}\frac{B(a+x,b+n-x)}{B(a,b)}}_{p(x)}} \\
&= \frac{\theta^{a+x-1}(1-\theta)^{b+n-x-1}}{B(a+x,b+n-x)} \\
&= \mathrm{Beta}(\theta|a+x,b+n-x)
\end{aligned}
$$

- θ 的后验分布是参数为 $a+x$ 和 $b+n-x$ 的Beta分布

贝叶斯参数估计



- 贝叶斯原理符合人们认知事物的模式：先验+数据=后验

贝叶斯参数估计

- θ 的后验分布是参数为 $a+x$ 和 $b+n-x$ 的Beta分布
- 后验概率密度最大的点(众数mode)是

$$\widehat{\theta}_{MAP} = \frac{a+x-1}{a+b+n-2}$$

  称之为极大后验估计(maximum a posterior probability estimation, MAP)
- 回忆：极大似然估计(maximum likelihood estimation, MLE)的结果为

$$\widehat{\theta}_{MLE} = \frac{x}{n}$$

- 后验众数可以看成极大似然估计结果和先验众数的加权组合

$$\frac{a+x-1}{a+b+n-2} = w \times \frac{x}{n} + (1-w) \times \frac{a-1}{a+b-2}$$

  其中 $w = \frac{n}{a+b+n-2}$

贝叶斯参数估计

$$\frac{a+x-1}{a+b+n-2} = w \times \frac{x}{n} + (1-w) \times \frac{a-1}{a+b-2}$$

其中 $w = \frac{n}{a+b+n-2}$

- 当 n 变大， w 趋向于1，后验众数趋向于极大似然估计结果
- 当 $a = b = 1$ 时， $w = 1$ ，后验众数等于极大似然估计结果，贝叶斯参数估计结果与极大似然估计结果相同

贝叶斯参数估计

- 若取后验均值作为贝叶斯参数估计的结果

$$\widehat{\theta}_{Mean} = \frac{a+x}{a+b+n}$$

- 若先验取为[0,1]区间上的均匀分布(a=b=1的Beta分布)，有

$$\widehat{\theta}_{Mean} = \frac{1+x}{2+n}$$

- 对比极大似然估计的结果

$$\widehat{\theta}_{MLE} = \frac{x}{n}$$

- $\widehat{\theta}_{Mean}$ 在小样本情形下比 $\widehat{\theta}_{MLE}$ 更合理
- 当试验次数 n 增加时， $\widehat{\theta}_{Mean}$ 趋向于 $\widehat{\theta}_{MLE}$
- 为什么要用先验？因为有些试验不能大量重复进行!

贝叶斯参数估计

后验预测分布

- 在已经掷出 n 次硬币并观测到 x 次正面向上的试验结果上，预测重新掷出 n_f 次硬币正面向上的次数 y
- 后验预测分布（posterior predictive distribution）

$$
\begin{aligned}
p(y \mid n_f, x, n) &= \int p(y, \theta \mid n_f, x, n) \mathrm{d}\theta \\
&= \int p(y \mid n_f, x, n, \theta) p(\theta \mid x, n) \mathrm{d}\theta \\
&= \int p(y \mid n_f, \theta) p(\theta \mid x, n) \mathrm{d}\theta
\end{aligned}
$$

贝叶斯参数估计

后验预测分布

$$
\begin{aligned}
p(y \mid n_f, x, n) &= \int p(y \mid n_f, \theta) p(\theta \mid x, n) \mathrm{d}\theta \\
&= \int \mathrm{Bin}(y \mid n_f, \theta) \mathrm{Beta}(\theta \mid a + x, b + n - x) \mathrm{d}\theta \\
&= \int C_{n_f}^{y} \theta^{y} (1-\theta)^{n_f - y} \frac{\theta^{a+x-1}(1-\theta)^{b+n-x-1}}{B(a+x, b+n-x)} \mathrm{d}\theta \\
&= \frac{C_{n_f}^{y}}{B(a+x, b+n-x)} \int \theta^{a+x+y-1}(1-\theta)^{b+n-x+n_f-y-1} \mathrm{d}\theta \\
&= C_{n_f}^{y} \frac{B(a+x+y, b+n-x+n_f-y)}{B(a+x, b+n-x)}
\end{aligned}
$$

- 期望 & 方差

$$
\mathrm{mean} = n_f \frac{a+x}{a+b+n} \quad \mathrm{var} = \frac{n_f(a+x)(b+n-x)(a+b+n+n_f)}{(a+b+n)^2(a+b+n+1)}
$$

- 实例：商家投放数量为 n_f 的优惠券，预测转化量 y

贝叶斯参数估计

共轭先验

- 在硬币试验中，参数 θ 的先验分布 $p(\theta)$ 和后验分布 $p(\theta|x)$ 都是Beta分布
- 称Beta分布是二项分布(Binomial distribution)的共轭先验分布
- 当先验分布和后验分布是同一种分布，称先验分布是似然函数的共轭先验分布(conjugate prior)
- When the prior and the posterior have the same form, we say that the prior is a conjugate prior for the corresponding likelihood.
- 共轭先验可以简化计算，且易于解释

贝叶斯参数估计

共轭先验

- 只有给定似然函数，才能确定其共轭先验分布
- 也就是说，必须根据问题的性质选取其共轭先验分布
- 常见的共轭先验分布如下

似然函数	参数	共轭先验分布
二项分布(Binomial)	成功概率	贝塔分布(Beta)
多项分布(Multinomial)	成功概率	狄利克雷分布(Dirichlet)
泊松分布(Poisson)	参数λ	伽马分布(Gamma)
指数分布(Exponential)	参数λ	伽马分布(Gamma)
正态分布(Normal, Gaussian) – 方差已知	均值	正态分布(Normal, Gaussian)
正态分布(Normal, Gaussian) – 均值已知	方差	逆伽马分布(Inverse Gamma)

贝叶斯参数估计

共轭先验

- 对于一般形式的似然函数，共轭先验分布可能不存在
- 若选取某种分布作为参数 θ 的先验分布， x 的边缘分布（归一化因子）很有可能没有解析表达式

$$p(x) = \int_0^1 p(x|\theta)\, p(\theta)\, d\theta$$

- 这将导致参数 θ 的后验分布没有解析表达式

$$p(\theta|x) = \frac{p(x|\theta)\, p(\theta)}{p(x)}$$

- 解决方法：（1）Markov Chain Monte Carlo (MCMC)（2）Variational Inference (VI)

贝叶斯方法的应用

潜在狄利克雷分配模型（LDA）

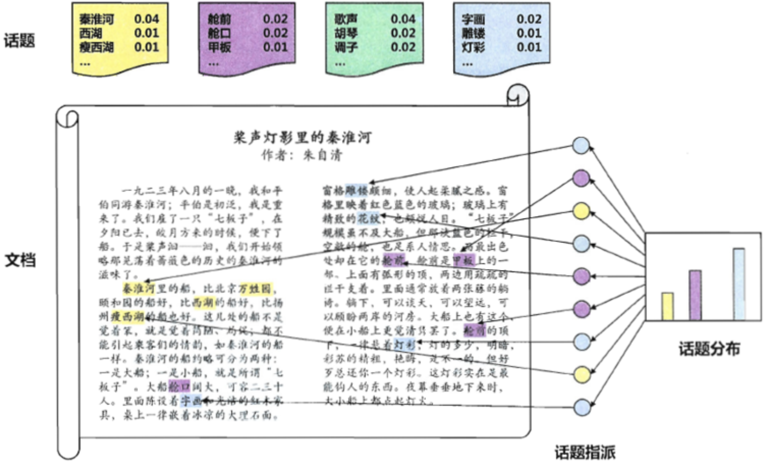
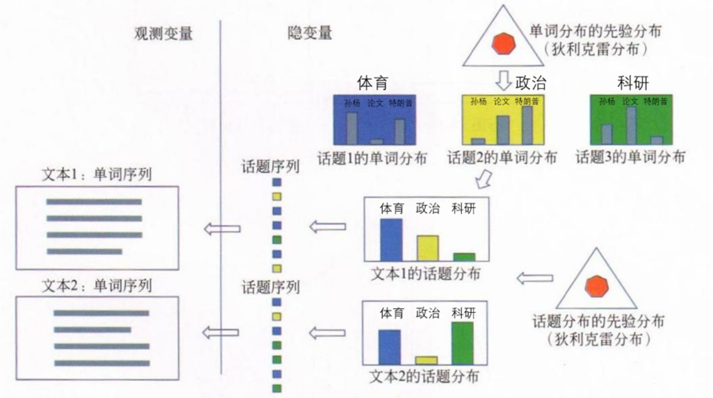


图 14.11 LDA 的文档生成过程示意图

贝叶斯方法的应用

潜在狄利克雷分配模型（LDA）



彩图 20.3 LDA 的文本生成过程

贝叶斯方法的应用

潜在狄利克雷分配模型（LDA）

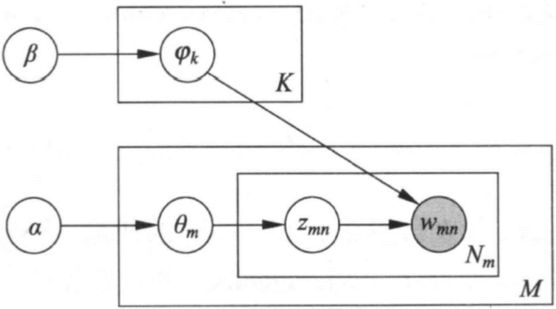


图 20.4　LDA 的板块表示

贝叶斯方法的应用

实例：定价决策

- 某厂商生产一种产品并在市场上以价格 ρ 销售，该厂商的最大生产能力为 M，市场的需求 q 与价格 ρ 之间满足如下函数关系（需求函数）[1]

$$q = M - \lambda\rho + \epsilon, \qquad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

其中 $\lambda > 0$ 是价格系数。假设观测到过去 T 个时期内的价格和需求数据 $D = \{(\rho_t, q_t)\}_{t=1}^{T}$，试用贝叶斯参数估计方法制定最优价格决策

[1] 这是一个很强的假设，实际上影响需求的因素很多，该假设可能会导致内生性问题

贝叶斯方法的应用

实例：定价决策

- 厂商的目标是收益最大化，即最大化以下收益函数

$$
\begin{aligned}
\psi =& \rho q \\
=& \rho (M - \lambda\rho + \epsilon)
\end{aligned}
$$

收益函数 ψ 是价格 ρ 的函数

贝叶斯方法的应用

实例：定价决策

- 将参数 λ 和 σ^2 视为随机变量，使用贝叶斯参数估计推断 λ 和 σ^2 的后验分布 $p\left(\lambda, \sigma^2 \mid D\right)$，从而得到收益函数的后验预测分布

$$
\begin{aligned}
p(\psi \mid D) &= \int\int p\left(\psi, \lambda, \sigma^2 \mid D\right) \mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\sigma^2 \\
&= \int\int p\left(\psi \mid \lambda, \sigma^2, D\right) p\left(\lambda, \sigma^2 \mid D\right) \mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\sigma^2 \\
&= \int\int p\left(\psi \mid \lambda, \sigma^2\right) p\left(\lambda, \sigma^2 \mid D\right) \mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\sigma^2
\end{aligned}
$$

贝叶斯方法的应用

实例：定价决策

- 对于分布 $p\left(\psi \mid \lambda, \sigma^2\right)$，由于

$$
\begin{aligned}
\psi =& \rho q \\
=& \rho\left(M - \lambda\rho + \epsilon\right) \\
=& \rho \cdot \epsilon - \lambda\rho^2 + M\rho
\end{aligned}
$$

且

$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

所以有

$$\psi \sim \mathcal{N}(-\lambda\rho^2 + M\rho, \rho^2\sigma^2)$$

即[2]

$$p\left(\psi \mid \lambda, \sigma^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\rho\sigma} \exp\left(-\frac{\left(\psi + \lambda\rho^2 - M\rho\right)^2}{2\rho^2\sigma^2}\right)$$

---

[2] 此处利用性质：如果 $X \sim \mathcal{N}\left(\mu, \Sigma\right)$，$Y = AX + B$，那么 $Y \sim \mathcal{N}\left(A\mu + B, A\Sigma A^{\mathsf{T}}\right)$，这里 $X \in \mathbb{R}^p, Y \in \mathbb{R}^q, A \in \mathbb{R}^{q \times p}, B \in \mathbb{R}^q$

贝叶斯方法的应用

实例：定价决策

- 对于后验分布 $p\left(\lambda, \sigma^2 \mid D\right)$
- 在后面的学习中，我们将介绍通过随机采样的方法（MCMC）利用一系列样本 $\left\{\lambda^{(s)}, \sigma^{2(s)}\right\}_{s=1}^{N}$ (e.g., $N = 10000$) 近似后验分布 $p\left(\lambda, \sigma^2 \mid D\right)$
- 从而得到收益函数的后验预测分布

$$
\begin{aligned}
p(\psi \mid D) &= \int\int p\left(\psi \mid \lambda, \sigma^2\right) p\left(\lambda, \sigma^2 \mid D\right) \mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\sigma^2 \\
&= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^{N} p\left(\psi \mid \lambda^{(s)}, \sigma^{2(s)}\right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{s=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\rho\sigma^{(s)}} \exp\left(-\frac{\left(\psi + \lambda^{(s)}\rho^2 - M\rho\right)^2}{2\rho^2\sigma^{2(s)}}\right)
\end{aligned}
$$

- 注：对于给定的价格 ρ，厂商的收益 ψ 服从上述后验预测分布 $p(\psi \mid D)$，这表明厂商的收益具有不确定性。因此需要比较不同价格 ρ 下厂商收益分布 $p(\psi \mid D)$ 的特征，选择与高期望低方差的分布对应的价格作为最优价格决策
- 能够量化不确定性是贝叶斯方法的一大优势！