模式识别

推理和决策(Inference and Decision)
密度估计(Density Estimation)

吴建鑫
南京大学计算机系，2018

目标

- ✓ 理解并掌握各名词的含义，最低要求是使用这些名词的时候不能混淆
- ✓ 掌握基本的点估计方法，能在不查表（简单情况）或查表（复杂情况）下自主推导估计结果
- ✓ 掌握Bayesian相关方法的概念
- ✓ 理解、掌握非参数估计的方法
- ✓ 提高目标
  - 进一步能通过独立阅读、了解Bayesian方法
  - 进一步能通过独立阅读、了解非参数估计（如解决计算效率、核的选择等）

推理和决策

Inference and Decision

从统计学statistics的观点看

- 目的是得到映射：$\mathcal{X} \mapsto \mathcal{Y}$
  - 数据分布$p(\mathcal{X})$
  - 先验分布 prior distribution $p(\mathcal{Y})$
    - *a priori*: Knowable without appeal to particular experience
    - a priori distribution: special meaning, do not misuse
  - 联合joint分布$p(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$
  - 类条件分布$p(\mathcal{X} | y = i)$
  - 后验分布posterior distribution $p(y = i | \boldsymbol{x})$

如何表示/估计概率密度

✓ Parametric: 假设PDF服从某种函数形式 functional form

- 如高斯分布的函数形式，其包含若干参数
- 当指定其所有参数值之后，PDF就完全确定
- 不同的概率分布由不同的参数值决定
- 估计PDF就是估计参数parameter estimation!

- 所以叫参数估计

非参数估计

- ✓ Non-parametric：不假设PDF是任何已知形式的函数
  - 从直观上更合理
  - 那么，如何估计？
    - 使用训练数据直接估计空间中任意点的密度
    - $p(\boldsymbol{x}|D)$ – 后面具体讲
- ✓ 非参数不代表无参数！
  - 实际上是可以允许无穷多的参数
  - 而参数估计的参数个数是有限的
- ✓ 参数估计与非参数估计
  - Parametric and non-parametric estimate
  - 可能参数化估计与非参数化估计更切合其含义

推理与决策inference & decision

- ✓ 生成模型和判别模型
  - Generative (probabilistic) models: 估计 $p(\boldsymbol{x}|y=i)$和$p(\boldsymbol{x})$
    - 然后用贝叶斯定理求$p(y=i|\boldsymbol{x})$
  - Discriminative (probabilistic) models:直接估计 $p(y=i|\boldsymbol{x})$

- ✓ 这些模型分为两个步骤:
  - 推理inference：估计各种密度函数
  - 决策decision：根据估计得到的PDF对任意的$\boldsymbol{x}$给出输出

参数估计

点估计point estimation

贝叶斯估计Bayesian estimation

KDE

以高斯分布为例

- ✓ 假设$x \sim N(\mu, \sigma^2)$，从数据$D = \{x_1, \dots, x_n\}$估计
  - 数据独立同分布i. i. d. (independently identically distributed)
- ✓ 参数记为$\boldsymbol{\theta}$，这里$\boldsymbol{\theta} = (\mu, \sigma)$，如何估计？形式化？
- ✓ 一种直觉：　如果有两个不同的参数$\boldsymbol{\theta}_1$和$\boldsymbol{\theta}_2$
  - 假设$\boldsymbol{\theta}$是参数的真实值，似然（likelihood）是 $p(D|\boldsymbol{\theta}) = \prod_i p(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$
  - 若$p(D|\boldsymbol{\theta}_1) > p(D|\boldsymbol{\theta}_2)$，该选择哪个？

易混淆的表示法notation

- ✓ 目前$\boldsymbol{\theta}$不是随机变量，所以$p(D|\boldsymbol{\theta})$不是条件分布
  - D固定，　$\boldsymbol{\theta}$是变量，$p(D|\boldsymbol{\theta})$是$\boldsymbol{\theta}$的函数，不是一个PDF!
  - $p(x_i|\boldsymbol{\theta})$是一个PDF，因为$\boldsymbol{\theta}$不是随机变量，这不是一个条件分布，只是习惯上这么写，表明这个分布依赖于参数$\boldsymbol{\theta}$的值，x_i是PDF的变量
- ✓ 较好的表示法：定义似然函数likelihood function
  - $\hat{l}(\boldsymbol{\theta}) = p(D|\boldsymbol{\theta}) = \prod_i p(x_i|\boldsymbol{\theta})$　（或者$\boldsymbol{x}_i$）
- ✓ 为了方便，定义对数似然函数log-likelihood function
  - $l(\boldsymbol{\theta}) = \ln p(D|\boldsymbol{\theta}) = \sum_i \ln p(x_i|\boldsymbol{\theta})$

最大似然估计

- ✓ Maximum likelihood estimation, MLE

$$\boldsymbol{\theta}^* = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{argmax}}\, l(\boldsymbol{\theta})$$

- ✓ 高斯分布的最大似然估计
  - 参数为$(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$，数据为$D = \{\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n\}$
  - 练习：通过对$l(\boldsymbol{\theta})$求导发现最佳的参数值，可以查表，（猜一猜？）

$$\boldsymbol{\mu}^* = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i$$

$$\Sigma^* = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}^*)(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}^*)^T$$

最大后验估计及其他

- ✓ Maximium a posteriori estimation, MAP
  - $\boldsymbol{\theta}^* = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{argmax}}\, \hat{l}(\boldsymbol{\theta})\, p(\boldsymbol{\theta})$
  - 即假设参数$\boldsymbol{\theta}$也是随机变量，存在着先验分布
- ✓ 与MLE的关系
  - 假设我们对$\boldsymbol{\theta}$一无所知，那么应该怎样设定$p(\boldsymbol{\theta})$？
  - noninformative prior时，MLE等价于MAP
    - 若$\boldsymbol{\theta}$是离散的随机变量，离散的均匀分布， $p(\theta) = \frac{1}{N}$
    - 若$\boldsymbol{\theta}$是有限区间$[a, b]$的连续随机变量，$p(\theta) = \frac{1}{b-a}$
    - 若$\boldsymbol{\theta}$是$(-\infty, +\infty)$上的连续随机变量，？
    - 假设$p(\theta) = \text{const}$，称为improper prior

参数估计的一些性质

- 如果只有一个样例，参数估计会怎么样？
- 样例越多，估计越准！
- 渐进性质asymptotic property：研究$n \to \infty$时的性质，如
  - 一致性consistency：随样本容量增大收敛到参数真值的估计量
- 其他性质如
  - 无偏估计unbiased estimate：指估计量的期望和被估计量的真值相等
- 进一步阅读：关于一致和无偏

贝叶斯参数估计

- ✓ Bayesian parameter estimation
  - MLE：视$\boldsymbol{\theta}$为固定的参数，假设存在一个最佳的参数（或参数的真实值是存在的），目的是找到这个值
  - MAP：视$\boldsymbol{\theta}$为一个随机变量，存在分布$p(\boldsymbol{\theta})$，将其影响（先验分布）代入，但仍然假设存在最优的参数
  - 以上均称为点估计point estimation
- ✓ 在贝叶斯观点中，$\boldsymbol{\theta}$是一个分布/随机变量，所以估计应该是估计一个分布，而不是一个值（点）！
  - $p(\boldsymbol{\theta}|D)$：这是贝叶斯参数估计的输出，是一个完整的分布，而不是一个点

高斯分布参数的贝叶斯估计

- ✓ 参数$\boldsymbol{\theta}$的先验分布$p(\boldsymbol{\theta})$，数据$D=\{x_1,\dots,x_n\}$，估计$p(\boldsymbol{\theta}|D)$。这里假设单变量，只估计μ，方差σ已知
  - 第一步：设定$p(\mu)$的参数形式：$p(\mu)=N(\mu_0,\sigma_0^2)$，目前假设参数$\mu_0,\sigma_0^2$已知
  - 第二步：贝叶斯定理和独立性得到$p(\mu|D)=\frac{p(D|\mu)p(\mu)}{\int p(D|\mu)p(\mu)d\mu}=\alpha p(D|\mu)p(\mu)=\alpha\prod_{i=1}^{n}p(x_i|\mu)p(\mu)$
  - 第三步，应用高斯的性质，进一步得到其解析形式
    - 讲义第13章
    - 注意这里所有$p(\cdot)$都是合法的密度函数

解的形式

$$p(\mu|D) = N(\mu_n, \sigma_n^2)$$

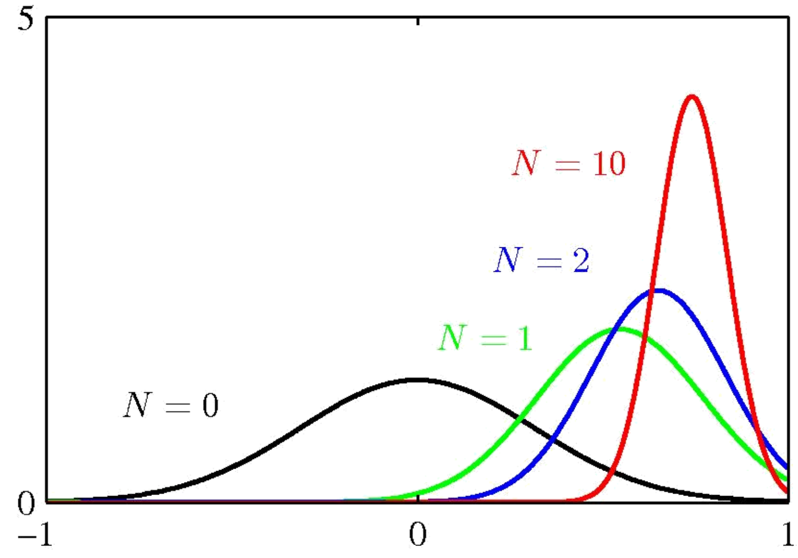
✓ 均值为$\mu_n = \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2+\sigma^2}\mu_0 + \frac{n\sigma_0^2}{n\sigma_0^2+\sigma^2}\mu_{\mathrm{ML}}$

- 其中μ_{ML}为MLE的估计值，即$\mu_{\mathrm{ML}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$

✓ 方差为σ_n^2，其值由如下公式确定：$\frac{1}{\sigma_n^2} = \frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2}$，或者为了便于记忆

$$(\sigma_n^2)^{-1} = (\sigma_0^2)^{-1} + \left(\frac{\sigma^2}{n}\right)^{-1}$$

✓ 先验和数据的综合！



图片来自PRML第2章

贝叶斯的进一步讨论

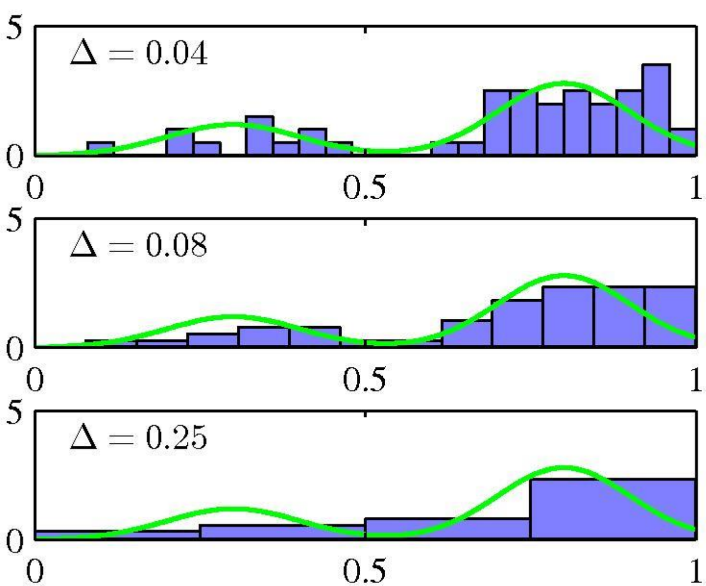
- 共轭先验conjugate prior
  - 若$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$，存在先验$p(\boldsymbol{\theta})$，使得$p(\boldsymbol{\theta}|D)$和$p(\boldsymbol{\theta})$有相同的函数形式，从而简化推导和计算
  - 如高斯分布的共轭先验分布仍然是高斯分布
- 优缺点：
  - 理论上非常完备，数学上很优美
  - 推导困难（怎样求任意分布的共轭？怎样用于决策？μ_0的prior）、计算量极大（需要很多积分）
  - 在数据较多时，学习效果常不如直接用discriminant function

非参数估计：介绍

Non-parametric estimation: an introduction

非参数估计

- ✓ 常用的参数形式基本都是单模single modal的，不足以描述复杂的数据分布：即应该直接以训练数据自身来估计分布
  - 例如直方图histogram，基于计数counting



有很多问题：
- 多维怎么办？
- 怎么确定bin的个数？
- 连续？
- 需要保存数据吗？

图片来自PRML第2章

维数灾难

- ✓ Curse of dimensionality
  - 以直方图为例，需要保存的参数是什么？
  - 如果每维n个参数，那么d维应该保存多少个参数？
  - 如果$n = 4$，$d = 100$，那么应该保存多少个参数？

  - $4^{100} = 2^{200} \approx 10^{60}$！ 那么，需要多少样例来学习？
    - $1G = 10^9$
- ✓ 不仅局限于直方图、非参数估计，在参数估计、以及很多其他统计学习方法中都是如此

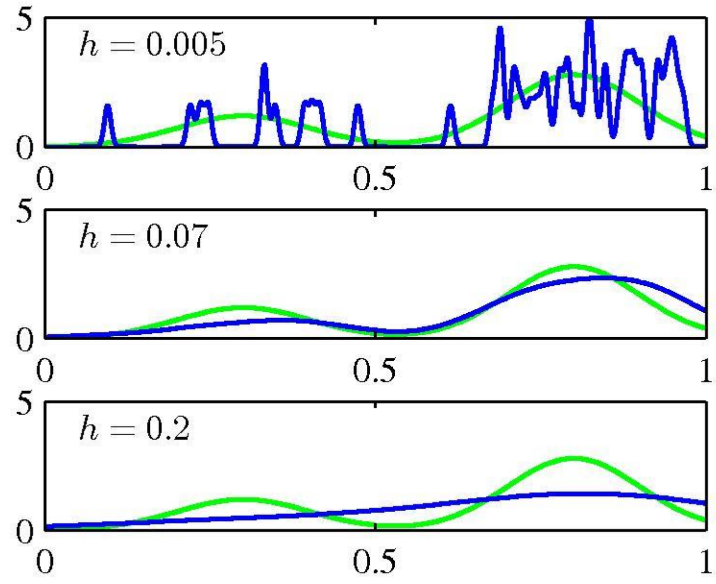
Kernel density estimation

- ✓ KDE，注意这里的kernel与上一章中SVM中的核含义不完全一致，其要求的条件也不完全一致
- ✓ 举例：Parzen window（一维，使用高斯核）

$$p(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{(2\pi h^2)^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{|x-x_i|^2}{2h^2}\right)$$

问题：

- 连续吗？
- 多维：多个维度乘积
- 需要保存数据吗？
  - 存储和计算实际代价大
  - 无穷多的参数
- 怎么确定h？



图片来自PRML第2章

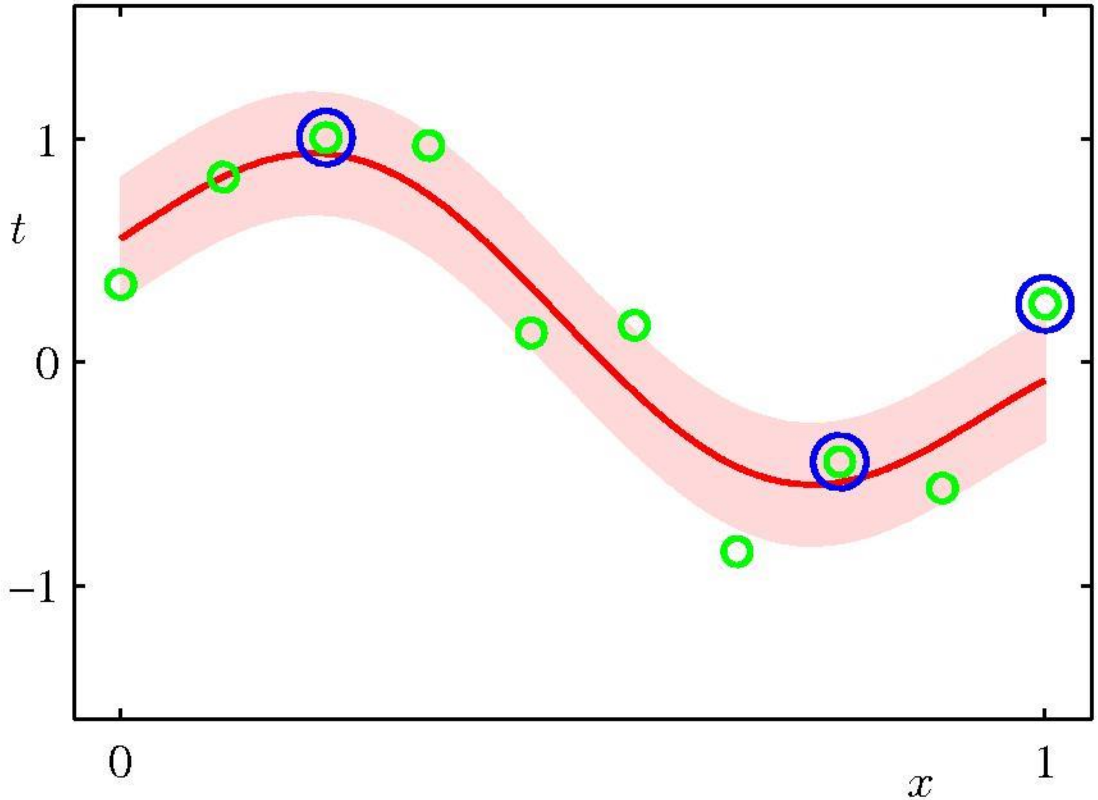
决策

Decision，或预测prediction

决策、预测

- 当inference完成之后，如果给定输入$\boldsymbol{x}$
  - 应当给出什么样的输出？
  - 怎么给出？
- 点估计：
  - 根据参数得到后验概率$p(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$
  - 根据其给出结果（如分类，如何输出？）
- Bayesian decision
  - 输出，也是一个随机变量，称为预测分布predictive distribution
  - 结果通常根据其期望决定，同时还可以给出方差

Bayesian prediction例子



图片来自PRML第7章

点估计下的例子

- 在0-1风险时，选择后验概率最大的那个类别 $\mathrm{argmax}_i p(y=i|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$
- 在discriminant function观点下，可以定义函数

$$g_i(\boldsymbol{x}) = p(y=i|\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}) = \frac{p(\boldsymbol{x}|y=i;\boldsymbol{\theta})p(y=i)}{p(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})}$$

- 或者定义为$g_i(\boldsymbol{x}) = p(\boldsymbol{x}|y=i;\boldsymbol{\theta})p(y=i)$，为什么？
- 或者定义为

$$g_i(\boldsymbol{x}) = \ln\big(p(\boldsymbol{x}|y=i;\boldsymbol{\theta})\big) + \ln(p(y=i))$$

高斯分布条件下的判别函数

- ✓ 作业：假设$p(\boldsymbol{x}|y=i)=N(\boldsymbol{\mu}_i,\Sigma)$，即在一个2分类问题中，各类条件分布都是高斯分布，虽期望不同，但协方差矩阵是一样的。若同时假设两类的先验概率均为0.5，那么
  - g_1和g_2的最简化的表达式是什么？
  - 在两类分类问题中，可以使用单个判别函数而不是两个来进行分类。对此问题，其单个判别函数是？
  - 和FLD的关系？

进一步的阅读

- ✓ 如果对本章的内容感兴趣，可以参考如下文献
  - All of statistics, All of Nonparametric Statistics：两本书
  - PRML—这本书非常Bayesian!
  - ESL
  - EM算法和GMM
    - 参数估计的常用优化算法
    - 讲义第十四章
  - 共轭分布见第十三章讲义的习题