

MLE / MAP

Jeonghun Yoon

Terms

Bayes rule

Maximum Likelihood Estimate (MLE)

Maximum A Posteriori Estimate (MAP)

Bayes rule

The diagram shows the Bayes' rule formula $p(\theta|\mathbb{x}) = \frac{p(\mathbb{x}|\theta)p(\theta)}{\sum p(\mathbb{x}|\theta)p(\theta)}$ enclosed in a blue rectangular box. Three labels with arrows point to parts of the formula: 'likelihood (우도 값)' points to the numerator's first term $p(\mathbb{x}|\theta)$; 'prior (사전 확률)' points to the numerator's second term $p(\theta)$; and 'posteriori (사후 확률)' points to the entire left side of the equation $p(\theta|\mathbb{x})$.

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

- 사후 확률 : 관찰 값들이 관찰 된 후에 모수(parameter)의 발생 확률을 구한다.
- 사전 확률 : 관찰 값들이 관찰 되기 전에 모수의 발생 확률을 구한다.
- 우도 값 : 모수의 값이 주어졌을 때 관찰 값들을 관찰 할 수 있는 함수 값

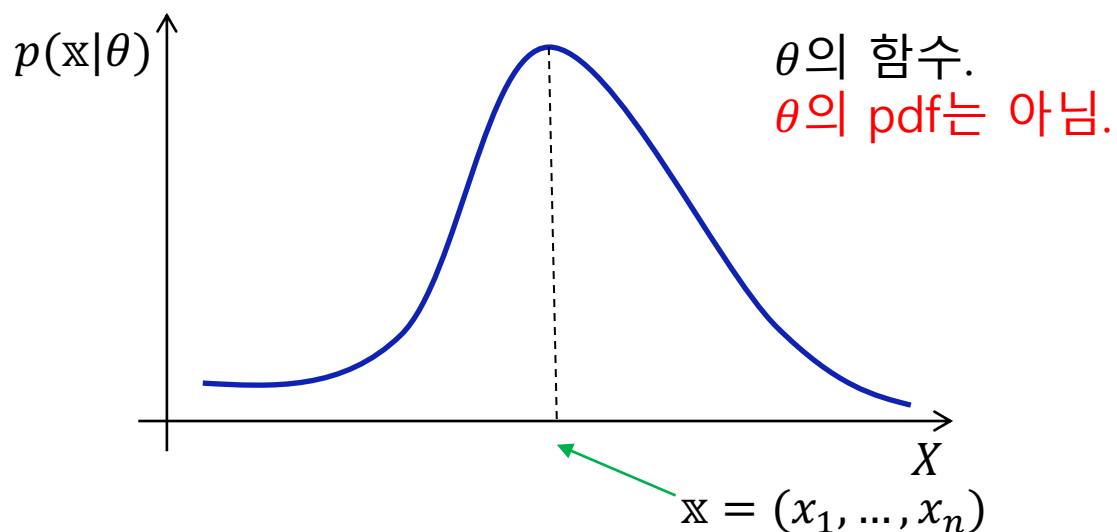
Maximum Likelihood Estimate

$$\mathbb{x} = (x_1, \dots, x_n)$$

우도(likelihood)는 다음과 같이 정의 된다.

$$\mathcal{L}(\theta) = p(\mathbb{x}|\theta)$$

변수(parameter) θ 가 주어졌을 때, data set $\mathbb{x} = (x_1, \dots, x_n)$ (관찰 된, observed) 를 얻을 수 있는(obtaining) 함수 (θ 의 함수)

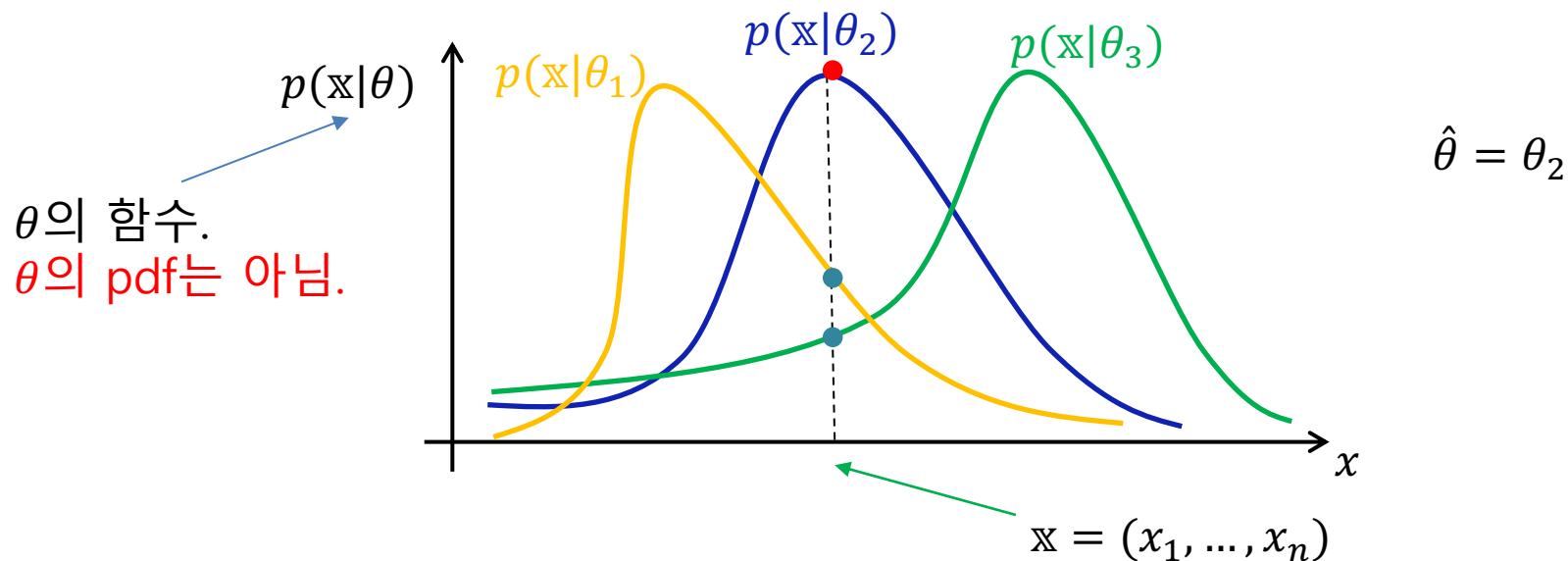


Maximum Likelihood Estimate

Maximum Likelihood Estimate는 다음과 같이 정의 된다.

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} \mathcal{L}(\theta) = \arg \max_{\theta} p(\mathbb{x}|\theta)$$

관찰 된 data set $\mathbb{x} = (x_1, \dots, x_n)$ 을 얻을 수 있는 값(likelihood)이 가장 큰 θ 가 MLE이다.



Maximum A Posteriori Estimate

우리가 likelihood function $p(\mathbf{x}|\theta)$ 와 prior $p(\theta)$ 를 알 때, Bayes rule에 의하여 posteriori function의 값을 구할 수 있다.

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



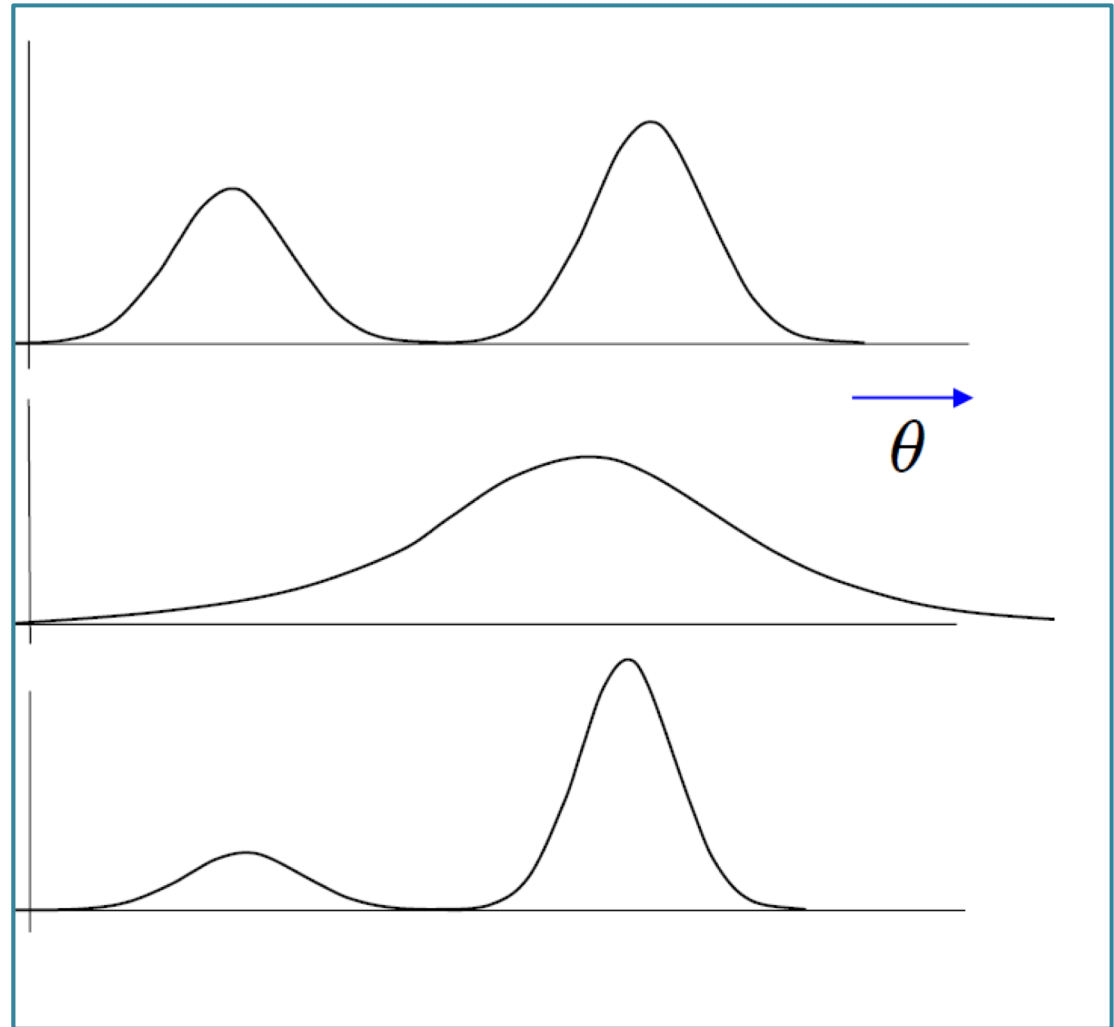
$$p(\theta|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta)$$

MLE vs MAP

Likelihood
 $p(\mathbf{x}|\theta)$

Prior
 $p(\theta)$

Posterior
 $p(\theta|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta)$

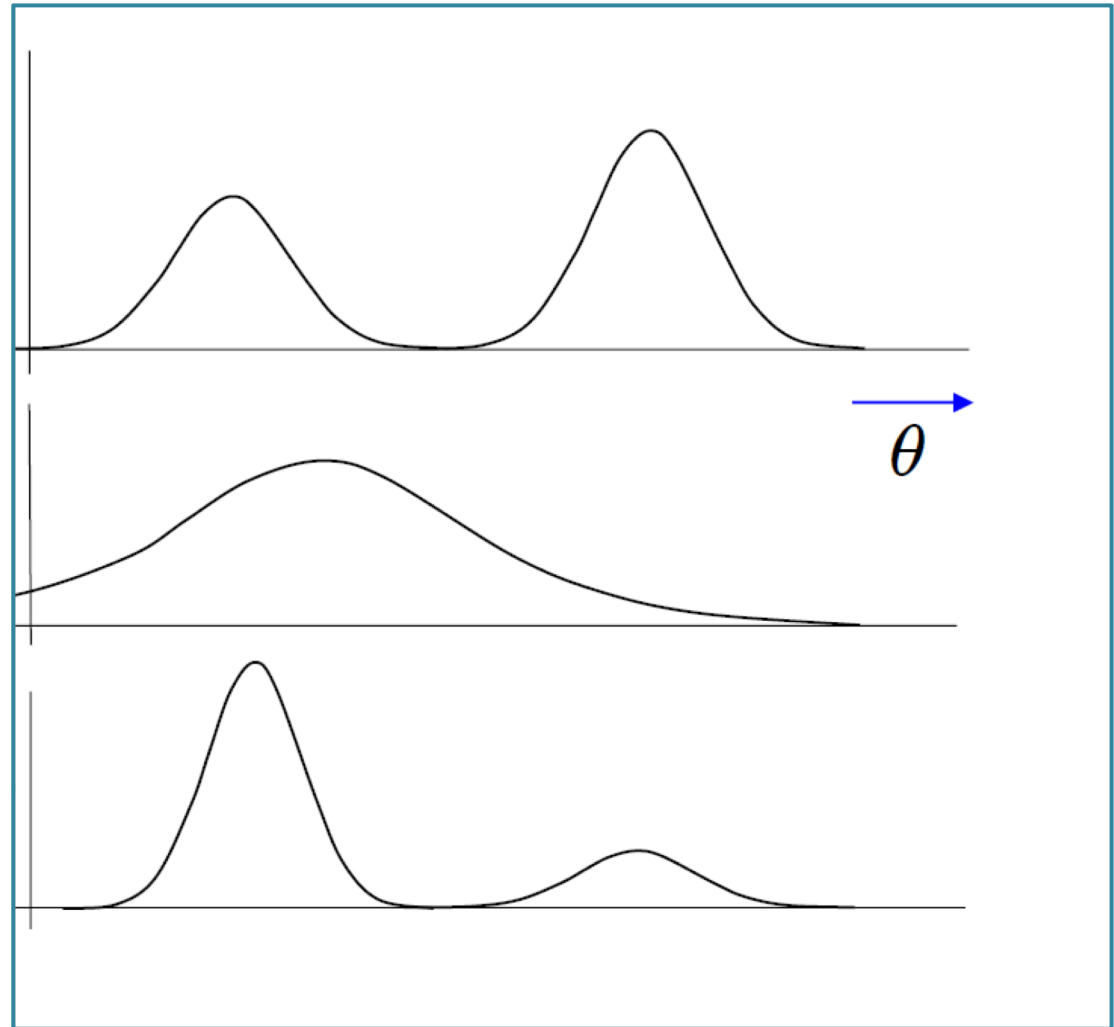


MLE vs MAP

Likelihood
 $p(\mathbf{x}|\theta)$

Prior
 $p(\theta)$

Posterior
 $p(\theta|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta)$

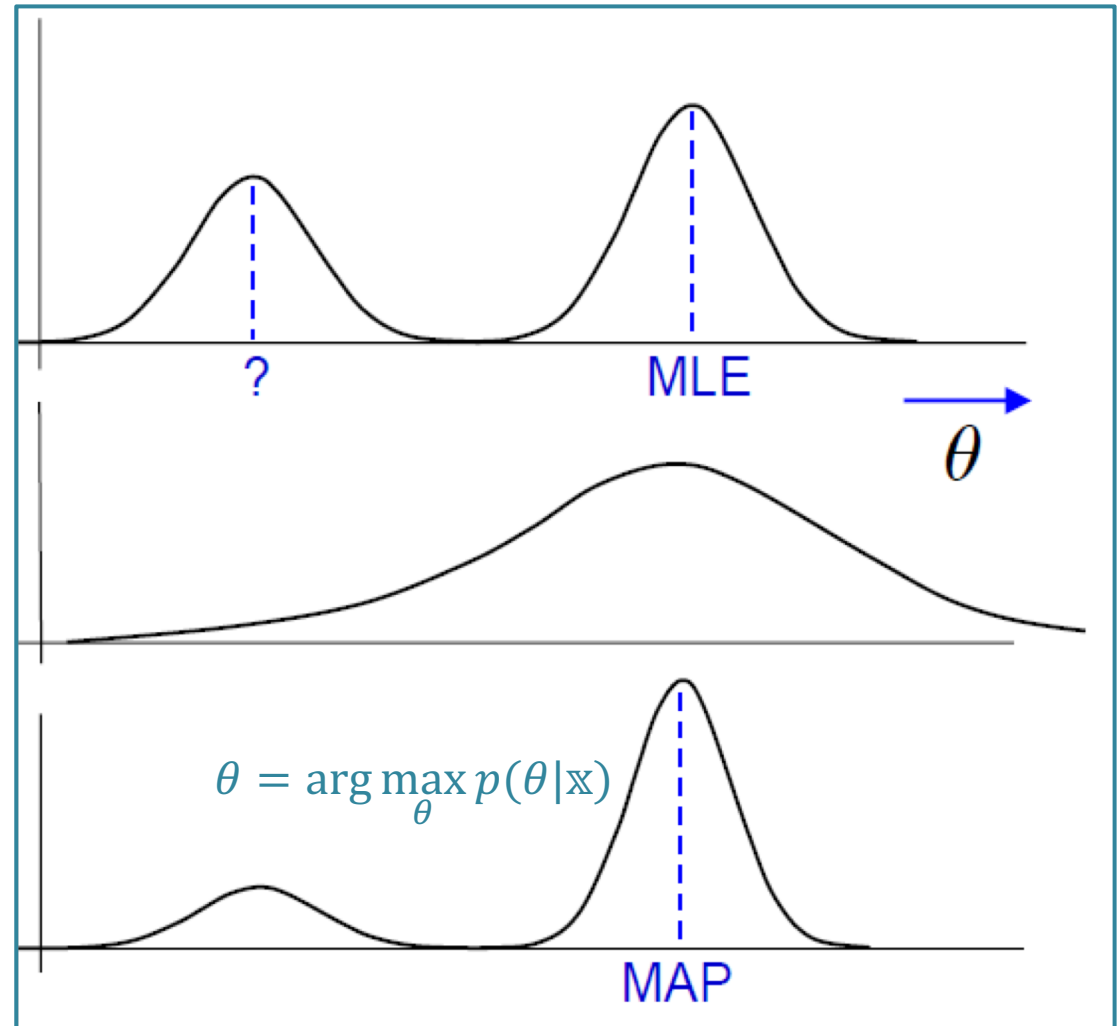


MLE vs MAP

Likelihood
 $p(\mathbf{x}|\theta)$

Prior
 $p(\theta)$

Posterior
 $p(\theta|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta)$



MLE 예제

최대 우도 추정은 관측 값이 주어졌을 때 모델의 매개변수들 중 그 관측 값을 발생시켰을 가능성이 가장 높은 매개변수들의 값을 추정하는 것이다.

이항 분포를 예로 들어보자. 표본 (0, 1, 0, 0, 1, 0)이 이항 분포로부터 추출되었다. $P(X = 1) = \mu$, $P(X = 0) = 1 - \mu$ 이다. 매개변수 μ 에 대한 최대 우도 추정(MLE)은 무엇일까?

MLE 예제

$$\begin{aligned}\mu \text{의 우도} &= L(\mu) \\ &= P(x=0) \times P(x=1) \times P(x=0) \times P(x=0) \times P(x=1) \times P(x=0) \\ &= (1-\mu) \times \mu \times (1-\mu) \times (1-\mu) \times \mu \times (1-\mu) \\ &= (1-\mu)^4 \times \mu^2\end{aligned}$$

우도를 최대화하는 것과 로그 우도를 최대화하는 것은 동일한 과제이므로 수학적 편의를 위해 양변에 로그를 취한다.

$$\log(L(\mu)) = \log((1-\mu)^4 \mu^2) = 4 \times \log(1-\mu) + 2 \times \log(\mu)$$

미분을 하여 0이 되는 지점을 찾는다.

$$\frac{\partial(\log L(\mu))}{\partial \mu} = 0 \Rightarrow 4 \times \frac{1}{1-\mu} \times (-1) + 2 \times \frac{1}{\mu} = 0 \Rightarrow -4 \times \mu + 2(1-\mu) = 0 \Rightarrow \mu = \frac{1}{3}$$

MLE 예제

하지만 미분을 0으로 하는 식에서 찾은 안장값(saddle point)이 최대값인지 최솟값인지 확인하기 위해 한 번 더 미분을 해야 한다. μ 값이 최대값이라면 $\log(L(\mu))$ 를 두 번 미분한 값은 음수여야 한다.

$$\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \log(L(\mu)) = -4 \times \frac{1}{(1-\mu)^2} - \frac{2}{\mu^2}$$

$\frac{1}{3}$ 을 대입하자.

$$\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \log(L(\mu)) = -4 \times \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{3}\right)^2} - \frac{2}{\left(\frac{1}{3}\right)^2} = -9 - 18 = -27$$

따라서 우도를 최대화하는 μ 는 $\frac{1}{3}$ 이라는 것이 증명된다.

MLE 예제

따라서

- Likelihood : $L(\mu) = \left(1 - \frac{1}{3}\right)^4 \left(\frac{1}{3}\right)^2 = 0.021948$

- Log Likelihood : $\ln(L(\mu)) = \ln(0.021948) = -3.819$

정리해보면 관측값이 (0, 1, 0, 0, 1, 0)과 같을 때, 앞면이 나올 확률은 $\frac{1}{3}$ 인 것이다. 표본에서 앞면이 2번, 뒷면이 4번이다. 관측값만 살펴보았을 때 동전의 앞면이 나올 확률은 직관적으로 보아도 $\frac{1}{3}$ 이다. 아주 그럴 듯한, 모수의 예측값이다.