밀도추정(Density Estimation): N개의 관찰데이터(observations) $\mathbf{x}_1, \ldots \mathbf{x}_N$가 주어졌을 때 분포함수 $p(\mathbf{x})$를 찾는 것

1. $p(\mathbf{x})$를 파라미터화된 분포로 가정한다. 회귀, 분류문제에서는 주로 $p(t|\mathbf{x})$, $p(\mathcal{C}|\mathbf{x})$를 추정한다.

1. 그 다음 분포의 파라미터를 찾는다.
    - 빈도주의 방법(Frequentist's way): 어떤 기준(예를 들어 likelihood)을 최적화시키는 과정을 통해 파라미터 값을 정한다. 파라미터의 하나의 값을 구하게 된다.
    - 베이지언 방법(Bayesian way): 먼저 파라미터의 사전확률(prior distribution)을 가정하고 Bayes' rule을 통해 파라미터의 사후확률(posterior distribution)을 구한다.

1. 파라미터를 찾았다면(한 개의 값이든 분포든) 그것을 사용해 "예측"할 수 있다(t나 $\mathcal{C}$).

켤레사전분포(Conjugate Prior): 사후확률이 사전확률과 동일한 함수형태를 가지도록 해준다.

이항변수(Binary Variables): 빈도주의 방법

이항 확률변수(binary random variable) $x \in \{0, 1\}$ (예를 들어 동전던지기)가 다음을 만족한다고 하자.

$$p(x=1|\mu) = \mu, p(x=0|\mu) = 1-\mu$$

$p(x)$는 베르누이 분포(Bernoulli distribution)로 표현될 수 있다.

$$\mathrm{Bern}(x|\mu) = \mu^x(1-\mu)^{1-x}$$

기댓값, 분산

- $\mathbb{E}[x] = \mu$
- $\mathrm{var}[x] = \mu(1-\mu)$

우도함수 (Likelihood Function)

x값을 N번 관찰한 결과를 $\mathcal{D} = \{x_1, \ldots, x_N\}$라고 하자. 각 x가 독립적으로 $p(x|\mu)$에서 뽑혀진다고 가정하면 다음과 같이 우도함수(μ의 함수인)를 만들 수 있다.

$$p(\mathcal{D}|\mu) = \prod_{n=1}^{N} p(x_n|\mu) = \prod_{n=1}^{N} \mu^{x_n}(1-\mu)^{1-x_n}$$

빈도주의 방법에서는 μ값을 이 우도함수를 최대화시키는 값으로 구할 수 있다. 또는 아래와 같이 로그우도함수를 최대화시킬 수도 있다.

$$\ln p(\mathcal{D}|\mu) = \sum_{n=1}^{N} \ln p(x_n|\mu) = \sum_{n=1}^{N} \{x_n \ln \mu + (1-x_n)\ln(1-\mu)\}$$

μ의 최대우도 추정치(maximum likelihood estimate)는

$$\mu^{\mathrm{ML}} = \frac{m}{N} \text{ with } m = (\#\text{observations of } x = 1)$$

N이 작은 경우에 위 MLE는 과적합(overfitting)된 결과를 낳을 수 있다. $N = m = 3 \rightarrow \mu^{\mathrm{ML}} = 1!$

이항변수(Binary Variables): 베이지언 방법

이항분포 (Binomial Distribution)

$\mathcal{D} = \{x_1, \dots, x_N\}$일 때, 이항변수 x가 1인 경우를 m번 관찰할 확률

$$\mathrm{Bin}(m|N,\mu) = \binom{N}{m}\mu^m(1-\mu)^{N-m}$$
$$\binom{N}{m} = \frac{N!}{(N-m)!m!}$$

- $\mathbb{E}[m] = \sum_{m=0}^{N} m\mathrm{Bin}(m|N,\mu) = N\mu$
- $\mathrm{var}[m] = \sum_{m=0}^{N}(m-\mathbb{E}[m])^2\mathrm{Bin}(m|N,\mu) = N\mu(1-\mu)$

데이터를 보는 관점

- 베르누이 시행의 반복: $x_1, \dots, x_N$ 각각이 확률변수
- x가 1인 경우를 몇 번 관찰했는가?: 하나의 확률변수 m

베이지안 방법을 쓰기 위해서 데이터의 우도를 구해야 하는데 이항분포를 가정하면 우도함수가 하나의 변수 m으로($x_1, \dots, x_N$ 대신) 표현가능하므로 간편해진다.

베타분포 (Beta Distribution)

베이지언 방법으로 문제를 해결하기 위해 베타분포를 켤레사전분포(conjugate prior)로 사용한다.

$$\mathrm{Beta}(\mu|a,b) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}\mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}$$

감마함수 $\Gamma(x)$는 다음과 같이 정의된다.

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty u^{x-1}e^{-u}\,\mathrm{d}u$$

감마함수는 계승(factorial)을 실수로 확장시킨다. $\Gamma(n) = (n-1)!$

$\Gamma(x) = (x-1)\Gamma(x-1)$임을 증명하기

Using integration by parts $\int_0^\infty a\mathrm{d}b = ab\big|_0^\infty - \int_0^\infty b\mathrm{d}a$

$$a = u^{x-1} \qquad \mathrm{d}b = -e^{-u}\mathrm{d}u$$
$$b = e^{-u} \qquad \mathrm{d}a = (x-1)u^{x-2}\mathrm{d}u$$

$$\begin{aligned}\Gamma(x) &= u^{x-1}(-e^{-u})\big|_0^\infty + \int_0^\infty (x-1)u^{x-2}e^{-u}\,\mathrm{d}u \\ &= 0 + (x-1)\Gamma(x-1)\end{aligned}$$

베타분포가 normalized임을 증명하기 ($\int_0^1 \mathrm{Beta}(\mu|a,b)\mathrm{d}\mu = 1$)

$\int_0^1 \mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}\mathrm{d}\mu = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}$임을 증명하면 된다.

$$
\begin{aligned}
\Gamma(a)\Gamma(b) &= \int_0^\infty x^{a-1}e^{-x}\mathrm{d}x \int_0^\infty y^{b-1}e^{-y}\mathrm{d}y \\
&= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-x-y}x^{a-1}y^{b-1}\mathrm{d}y\mathrm{d}x \\
&= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-t}x^{a-1}(t-x)^{b-1}\mathrm{d}t\mathrm{d}x & \text{by } t = y + x, \mathrm{d}t = \mathrm{d}y \\
&= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-t}x^{a-1}(t-x)^{b-1}\mathrm{d}x\mathrm{d}t \\
&= \int_0^\infty e^{-t} \int_0^\infty x^{a-1}(t-x)^{b-1}\mathrm{d}x\mathrm{d}t \\
&= \int_0^\infty e^{-t} \int_0^1 (t\mu)^{a-1}(t-t\mu)^{b-1}t\mathrm{d}\mu\mathrm{d}t & \text{by } x = t\mu, \mathrm{d}x = t\mathrm{d}\mu \\
&= \int_0^\infty e^{-t}t^{a-1}t^{b-1}t\left(\int_0^1 \mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}\mathrm{d}\mu\right)\mathrm{d}t \\
&= \int_0^\infty e^{-t}t^{a+b-1}\mathrm{d}t \int_0^1 \mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}\mathrm{d}\mu \\
&= \Gamma(a+b)\int_0^1 \mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}\mathrm{d}\mu
\end{aligned}
$$

따라서, $\int_0^1 \mu^{a-1}(1-\mu)^{b-1}\mathrm{d}\mu = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}$이 성립한다.

기댓값, 분산

- $\mathbb{E}[\mu] = \frac{a}{a+b}$
- $\mathrm{var}[\mu] = \frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)}$

μ의 사후확률 (posterior)

$$
\begin{aligned}
p(\mu|m,l,a,b) &= \frac{\mathrm{Bin}(m|N,\mu)\mathrm{Beta}(\mu|a,b)}{\int_0^1 \mathrm{Bin}(m|N,\mu)\mathrm{Beta}(\mu|a,b)\mathrm{d}\mu} \\
&= \frac{\mu^{m+a-1}(1-\mu)^{l+b-1}}{\int_0^1 \mu^{m+b-1}(1-\mu)^{l+b-1}\mathrm{d}\mu} \\
&= \frac{\mu^{m+a-1}(1-\mu)^{l+b-1}}{\Gamma(m+a)\Gamma(l+b)/\Gamma(m+a+l+b)} \\
&= \frac{\Gamma(m+a+l+b)}{\Gamma(m+a)\Gamma(l+b)}\mu^{m+a-1}(1-\mu)^{l+b-1}
\end{aligned}
$$

예측분포 (predictive distribution)

$$
p(x=1|\mathcal{D}) = \int_0^1 p(x=1|\mu)p(\mu|\mathcal{D})\mathrm{d}\mu = \int_0^1 \mu p(\mu|\mathcal{D})\mathrm{d}\mu = \mathbb{E}[\mu|\mathcal{D}]
$$

$$
p(x=1|\mathcal{D}) = \frac{m+a}{m+a+l+b}
$$

다항변수(Multinomial Variables): 빈도주의 방법

K개의 상태를 가질 수 있는 확률변수를 K차원의 벡터 $\mathbf{x}$ (하나의 원소만 1이고 나머지는 0)로 나타낼 수 있다. 이런 $\mathbf{x}$를 위해서 베르누이 분포를 다음과 같이 일반화시킬 수 있다.

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}) = \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{x_k}$$

with $\sum_k \mu_k = 1$

$\mathbf{x}$의 기댓값

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}] = \sum_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}) = (\mu_1, \ldots, \mu_M)^T = \boldsymbol{\mu}$$

우도함수

$\mathbf{x}$값을 N번 관찰한 결과 $\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$가 주어졌을 때, 우도함수는 다음과 같다.

$$p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\mu}) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{x_{nk}} = \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{(\sum_n x_{nk})} = \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{m_k}$$
$$m_k = \sum_n x_{nk}$$

μ의 최대우도 추정치(maximum likelihood estimate)를 구하기 위해선 μ_k의 합이 1이 된다는 조건하에서 $\ln p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\mu})$을 최대화시키는 μ_k를 구해야 한다. 라그랑주 승수(Lagrange multiplier) λ를 사용해서 다음을 최대화시키면 된다.

$$\sum_{k=1}^{K} m_k \ln \mu_k + \lambda \left(\sum_{k=1}^{K} \mu_k - 1 \right)$$
$$\mu_k^{ML} = \frac{m_k}{N}$$

다항변수(Multinomial Variables): 베이지언 방법

다항분포 (Multinomial distribution)

파라미터 $\boldsymbol{\mu}$와 전체 관찰개수 N이 주어졌을 때 $m_1, \ldots, m_K$의 분포를 다항분포(multinomial distribution)이라고 하고 다음과 같은 형태를 가진다.

$$\mathrm{Mult}(m_1, \ldots, m_K|\boldsymbol{\mu}, N) = \binom{N}{m_1 m_2 \ldots m_K} \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{m_k}$$
$$\binom{N}{m_1 m_2 \ldots m_K} = \frac{N!}{m_1! m_2! \ldots m_K!}$$
$$\sum_{k=1}^{K} m_k = N$$

디리클레 분포(Dirichlet distribution): 다항분포를 위한 켤레사전분포

$$\mathrm{Dir}(\boldsymbol{\mu}|\alpha) = \frac{\Gamma\alpha_0}{\Gamma(\alpha_1)\ldots\Gamma(\alpha_K)} \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{\alpha_k - 1}$$
$$\alpha_0 = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k$$

디리클레 분포의 normalization 증명 ($K = 3$)

다음 결과를 사용한다.

$$\begin{aligned}
\int_L^U (x-L)^{a-1}(U-x)^{b-1}\mathrm{d}x &= \int_0^1 (U-L)^{a-1}t^{a-1}(U-L)^{b-1}(1-t)^{b-1}(U-L)\mathrm{d}t \qquad \text{by } t = \frac{x-}{U-} \\
&= (U-L)^{a+b-1}\int_0^1 t^{a-1}(1-t)^{b-1}\mathrm{d}t \\
&= (U-L)^{a+b-1}\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{1-\mu_1} \mu_1^{\alpha_1-1}\mu_2^{\alpha_2-1}(1-\mu_1-\mu_2)^{\alpha_3-1}\mathrm{d}\mu_2 &= \mu_1^{\alpha_1-1}\int_0^{1-\mu_1}\mu_2^{\alpha_2-1}(1-\mu_1-\mu_2)^{\alpha_3-1}\mathrm{d}\mu_2 \qquad \text{by } L = 0, U \\
&= \mu_1^{\alpha_1-1}(1-\mu_1)^{\alpha_2+\alpha_3-1}\frac{\Gamma(\alpha_2)\Gamma(\alpha_3)}{\Gamma(\alpha_2+\alpha_3)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^1\int_0^{1-\mu_1} \mu_1^{\alpha_1-1}\mu_2^{\alpha_2-1}(1-\mu_1-\mu_2)^{\alpha_3-1}\mathrm{d}\mu_2\mathrm{d}\mu_1 &= \frac{\Gamma(\alpha_2)\Gamma(\alpha_3)}{\Gamma(\alpha_2+\alpha_3)}\int_0^1 \mu_1^{\alpha_1-1}(1-\mu_1)^{\alpha_2+\alpha_3-1}\mathrm{d}\mu_1 \\
&= \frac{\Gamma(\alpha_2)\Gamma(\alpha_3)}{\Gamma(\alpha_2+\alpha_3)}\frac{\Gamma(\alpha_1)\Gamma(\alpha_2+\alpha_3)}{\Gamma(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)} \\
&= \frac{\Gamma(\alpha_1)\Gamma(\alpha_2)\Gamma(\alpha_3)}{\Gamma(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)}
\end{aligned}$$

μ의 사후확률 (posterior)

$$\begin{aligned}
p(\boldsymbol{\mu}|\mathcal{D}, \alpha) &= \mathrm{Dir}(\boldsymbol{\mu}|\alpha + \mathbf{m}) \\
&= \frac{\Gamma(\alpha_0 + N)}{\Gamma(\alpha_1 + m_1)\ldots\Gamma(\alpha_K + m_K)}\prod_{k=1}^{K}\mu_k^{\alpha_k + m_k - 1}
\end{aligned}$$
$$\mathbf{m} = (m_1, \ldots, m_K)^T$$

α_k를 $x_k = 1$에 대한 사전관찰 개수라고 생각할 수 있다.

In [1]:

```
# for inline plots in jupyter
%matplotlib inline
# import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
# for latex equations
from IPython.display import Math, Latex
# for displaying images
from IPython.core.display import Image
```

In [2]:

```
# import seaborn
import seaborn as sns
# settings for seaborn plotting style
sns.set(color_codes=True)
# settings for seaborn plot sizes
sns.set(rc={'figure.figsize':(5,5)})
import numpy as np
```

Uniform Distribution

In [3]:

```
# import uniform distribution
from scipy.stats import uniform
```

In [4]:

```
# random numbers from uniform distribution
n = 10000
start = 10
width = 20
data_uniform = uniform.rvs(size=n, loc = start, scale=width)
```

In [5]:

```
data_uniform
```

Out[5]:

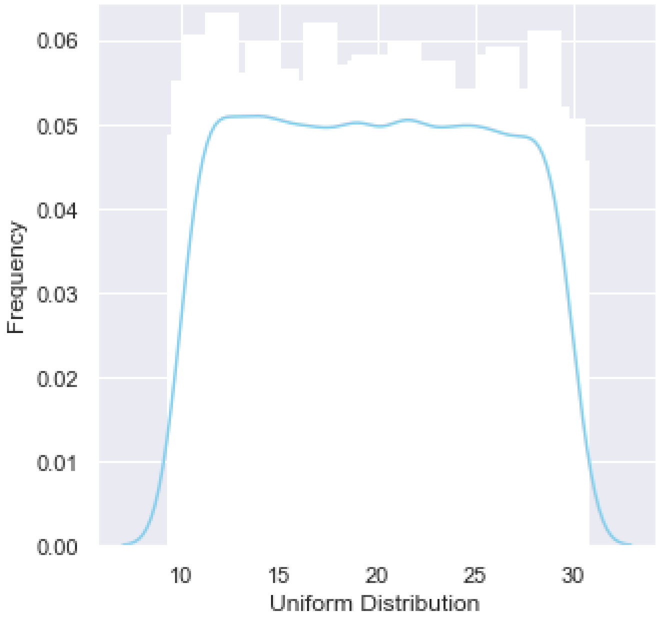
```
array([17.20884826, 24.93936496, 20.16385564, ..., 25.84009642,
       11.38092608, 13.44157615])
```

In [6]:

```
ax = sns.distplot(data_uniform,
                  bins=100,
                  kde=True,
                  color='skyblue',
                  hist_kws={"linewidth": 15,'alpha':1})
ax.set(xlabel='Uniform Distribution ', ylabel='Frequency')
```

Out[6]:

```
[Text(0, 0.5, 'Frequency'), Text(0.5, 0, 'Uniform Distribution ')]
```



Bernoulli Distribution

In [7]:

```
from scipy.stats import bernoulli
data_bern = bernoulli.rvs(size=10000,p=0.8)
```

In [8]:

```
np.unique(data_bern, return_counts=True)
```

Out[8]:

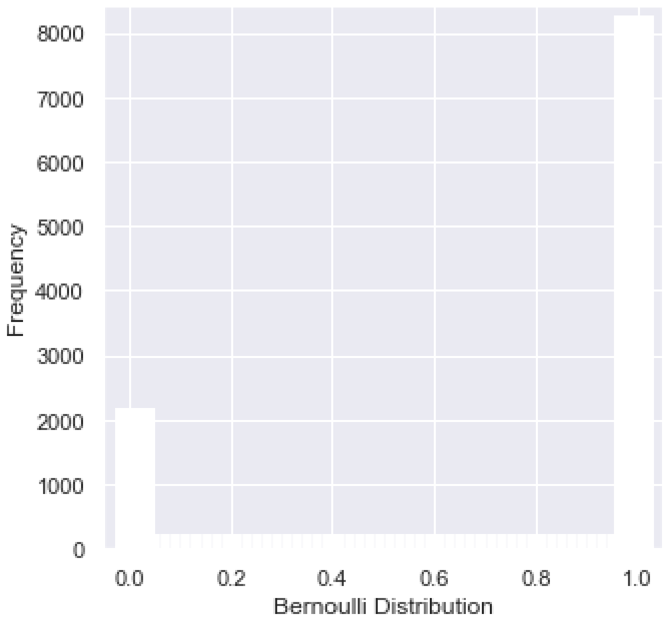
```
(array([0, 1]), array([1963, 8037]))
```

In [9]:

```
ax= sns.distplot(data_bern,
                 kde=False,
                 color="skyblue",
                 hist_kws={"linewidth": 15,'alpha':1})
ax.set(xlabel='Bernoulli Distribution', ylabel='Frequency')
```

Out[9]:

```
[Text(0, 0.5, 'Frequency'), Text(0.5, 0, 'Bernoulli Distribution')]
```



Beta Distribution

In [10]:

```
from scipy.stats import beta
a, b = 0.1, 0.1
data_beta = beta.rvs(a, b, size=10000)
```

In [11]:

```
data_beta
```

Out[11]:

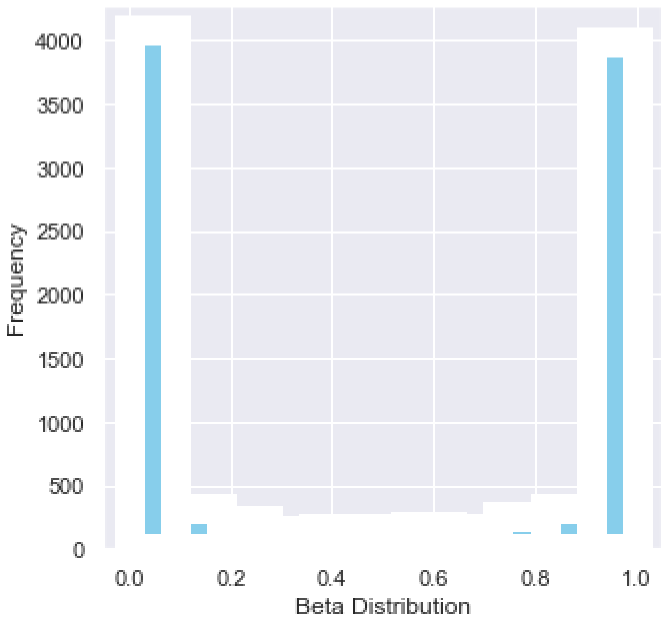
```
array([0.99580421, 0.2699958 , 0.07223109, ..., 0.99998619, 0.296607
9 ,
       0.99999968])
```

In [12]:

```
ax= sns.distplot(data_beta,
                 kde=False,
                 color="skyblue",
                 hist_kws={"linewidth": 15,'alpha':1})
ax.set(xlabel='Beta Distribution', ylabel='Frequency')
```

Out[12]:

```
[Text(0, 0.5, 'Frequency'), Text(0.5, 0, 'Beta Distribution')]
```



Multinomial Distribution

In [13]:

```
from scipy.stats import multinomial
data_multinomial = multinomial.rvs(n=1, p=[0.2, 0.1, 0.3, 0.4], size=10000)
```

In [14]:

```
data_multinomial[:50]
```

Out[14]:

```
array([[0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [1, 0, 0, 0],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1],
       [1, 0, 0, 0],
       [0, 1, 0, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 1, 0],
       [0, 0, 0, 1],
       [0, 0, 0, 1]])
```

In [15]:

```
for i in range(4):
  print(np.unique(data_multinomial[:,i], return_counts=True))
```

```
(array([0, 1]), array([7970, 2030]))
(array([0, 1]), array([8985, 1015]))
(array([0, 1]), array([6975, 3025]))
(array([0, 1]), array([6070, 3930]))
```