Machine Learning

Generative models for discrete data

华中科技大学计算机学院
王天江

第2章：离散数据的产生式模型

目录

产生式分类器

- 产生式分类器是估计联合分布p(x,y)，然后利用贝叶斯公式:

$$p(y=c \mid x,\theta) \propto p(x \mid y=c,\theta)\,p(y=c \mid \theta)$$

- “产生式”名称的由来:
  - 由于有类条件密度分布 $p(x|y=c,\theta)$, *可以产生数据x（通过在分布上采样）*
- 使用该类模型的关键：
  - 如何推导出这类模型的未知参数 θ.

贝叶斯概念学习

小孩学习词汇

- 例如，孩子学习理解“狗”一词的含义
  - 孩子的父母可能会给出正面的例子，说：
    - ⑩“看那只可爱的狗！”
    - ⑩ 或“小心狗狗”等

概念学习

- 学习一个词汇的意义等价于概念学习
- 它相当于二值分类：
  - I(x) =1， 如果x是概念C的实例
  - I(x) =0，否则
- 目标是学习指示函数I
  - I定义了元素是否在集合C中

数字游戏

- 这个游戏是这样的
  - 一个简单的数学概念C，如“素数”
  - 给定一系列随机选择的正面样例
    - ⑩ $D = \{x_1, \ldots, x_N\}$，*从 C 中抽样出来*
  - *问新的测试样例x是否属于C*

仅用一个样本玩数字游戏

- 假设所有数字都是1到100之间的整数。
- 概念的一个正样本：16，问
  - 哪些是正的？17？6？32？99？
- 仅凭一个样本很难判断，你的预测可能会很模糊
  - 17是相似的，因为它是“近在咫尺”
  - 6是相似的，因为它与16有一位数是相同的
  - 32是相似的，因为它也是偶数和2的幂
  - 99似乎并不相似。

用多个样本玩数字游戏

- 正样本 D={16, 8, 2 , 64}
  - 你认为哪些属于正样本? 17? 6? 32? 99?
  - *你可能会猜到隐藏的概念是“二的幂”*
  - *这是归纳法的一个例子*
- 你为什么不说概念是“偶数”，这两个概念都与证据一致?

归纳法：一种经典方法

- 概念的假设空间H：
  - 例如：奇数、偶数、二的幂等。
- 版本空间：
  - 与数据D一致的所有假设H的子集
- 版本空间缩小，我们对这个概念越来越确定
- 针对例子，正样本 D={16, 8, 2 , 64}，判定它是哪个概念
  - 设：H1=“偶数” 、H2=“二的幂” ，H3=“奇数”
  - 如果判定D属概念H1，则意味着，版本空间={H1,H2}
  - 如果判定D属概念H2，则意味着，版本空间={H2}

利用贝叶斯定理实现归纳法

- 贝叶斯理论:

$$p(h \mid D) = \frac{p(D \mid h)\, p(h)}{p(D)}$$

  - **根据:** p(h|D)　(后验概率)
    - 后验估计
  - **根据:** p(D|h)　(似然函数)
    - 似然*估计.*
  - p(h) 为 先验概率

数字游戏模型的似然函数

- 似然*函数:*

$$p(D \mid h) = \left[\frac{1}{size(h)}\right]^N = \left[\frac{1}{\|h\|}\right]^N$$

其中，假设*h* = 属于该假设的所有数字的集合

- 它表示在**假设**h为真的条件下，观测到的数据集多大可能属于这个h

最大似然估计(MLE)

- 如果数据空间总共有100个数，给定假设：
  - h_{two} = “2的幂” = {2, 4, 8, 16, 32, 64};
  - h_{even} = “偶数” = {2, 4, 6, . . . , 98, 100};
- 样本集 D = {16, 8, 2, 64}
- 计算似然

$$p(D \mid h_{two}) = \left[\frac{1}{6}\right]^4 = 7.7 \times 10^{-4} \qquad p(D \mid h_{even}) = \left[\frac{1}{50}\right]^4 = 1.6 \times 10^{-7}$$

- *似然比* 几乎是 5000:1
  - 所以，预测 h 为 h_{two}
- 这意味着仅用单个最好的假设做预测

先验

- 给定样本 *D = {16, 8, 2, 64}*,
  - “2的幂但不含32”这个概念与“2的幂”相比，可能性更大，为什么不选它？
- 经验告诉我们
  - h1＝“2的幂但不含32”似乎“在概念上不自然”
- 我们把这种经验叫做**先验(prior)**
  - 先验 ： p(h1)
  - 通过将小先验概率p(h1)分配给不自然的概念，我们可以来捕捉这种直觉。

最大后验估计

- 后验概率:

$$p(h \mid D) = \frac{p(D \mid h)p(h)}{\sum_{h' \in H} p(D, h')} = \frac{p(h)\mathbf{I}(D \in h) / |h|^N}{\sum_{h' \in H} p(h')\mathbf{I}(D \in h') / |h'|^N}$$

  - 其中，当$D \in h$，函数I()=1

- 在多数概念学习情况下，先验服从均匀分布，$p(h)$是个常数
  - 因此，后验与似然成比例
- “不自然的”概念，如“2的幂加37”和“2的幂但不含32”等，给于小先验概率
  - 尽管似然性很高，但由于先验概率小，所以后验还是小
  - 这种利用最大后验概率p(h|D)进行估计的方法，叫最大后验估计（MAP）

贝叶斯预测模型

- 后验预测分布是用后验去预测数据本身： $p(\hat{x} \in C|D)$
- 贝叶斯平均模型 $p(\hat{x} \in C|D) = \sum_i p(y = 1|\hat{x}, h_i)p(h_i|D)$
- 这意味着不只是用“最佳”假设做预测
- 每个假设的概率，可以通过贝叶斯规则得到:
  - $P(h_i \mid D) = \alpha P(D \mid h_i)P(h_i)$.
  - 这样，学习就简化为概率推理.

贝叶斯平均模型推导

- 贝叶斯平均模型推导:
  - 对后验预测分布运用边缘概率规则

$$p(\hat{x} \in C|D) = p(y = 1|\hat{x}, D) = \int p(y = 1, h|\hat{x}, D)dh = \int p(y = 1|h, \hat{x}, D)p(h|\hat{x}, D)dh$$

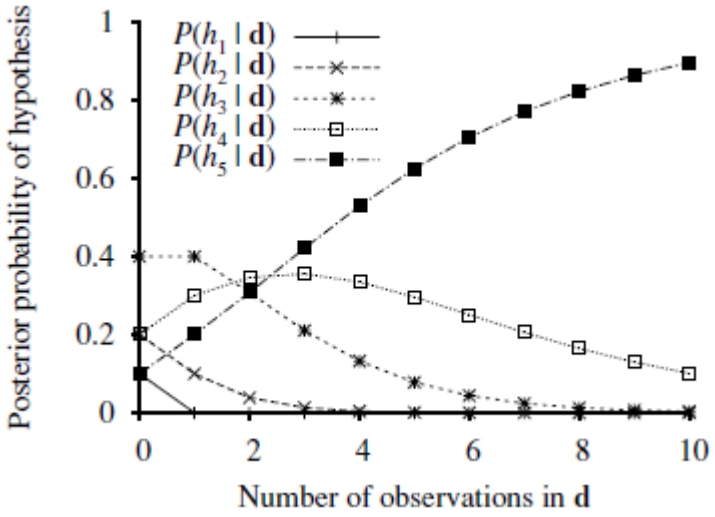
- 在贝叶斯框架下，通常假设给定参数h，新数据点$\hat{x}$和数据集D条件独立：
  - $p(y = 1|h, \hat{x}, D) = p(y = 1|h, \hat{x})$
- 同样，假设给定数据集D，参数h，新数据点$\hat{x}$条件独立：
  - $p(h|\hat{x}, D) = p(h|D)$
- 所以，有：$p(\hat{x} \in C|D) = \int p(y = 1|h, \hat{x})p(h|\hat{x}, D)dh = \sum_i p(y = 1|\hat{x}, h_i)p(h_i|D)$

一个“买糖果”的例子

- 我们最喜欢的糖果
  - 两种口味：樱桃和酸橙。
- 每一块糖果，不管味道如何，都用相同的不透明纸包装
- 糖果装在大袋子里出售，有五种装法，但从外部无法区分
- 假设：装法
  - h1：100% 樱桃，
  - h2：75% 樱桃 + 25%酸橙，
  - h3：50% 樱桃+ 50%酸橙，
  - h4：25% 樱桃+ 75%酸橙，
  - h5：100%酸橙.

准备预测糖果的口味

- 给定每个假设的先验分布
  - $P(h_1) = 0.1, P(h_2)=0.2, P(h_3)=0.4, P(h_4) = 0.2, P(h_5)=0.1$
- 从袋中拿出10个糖果都是酸橙味的
  - $P(\mathbf{d} \mid h_1) = ; P(\mathbf{d} \mid h_2) = ; P(\mathbf{d} \mid h_3) = 0.5*0.5*\ldots*0.5 = 0.5^{10}, P(\mathbf{d} \mid h_4) = ; P(\mathbf{d} \mid h_5) = ;$
- 每个假设的后验概率 ($P(h_i \mid \mathbf{d}) = \alpha P(\mathbf{d} \mid h_i)P(h_i)$)
  - $P(h_1 \mid \mathbf{d}) = 0$
  - $P(h_2 \mid \mathbf{d}) = 0.25^{10} * 0.2$
  - $P(h_3 \mid \mathbf{d}) = 0.5^{10} * 0.4$
  - $P(h_4 \mid \mathbf{d}) = 0.75^{10} * 0.2$
  - $P(h_5 \mid \mathbf{d}) = 0.1$



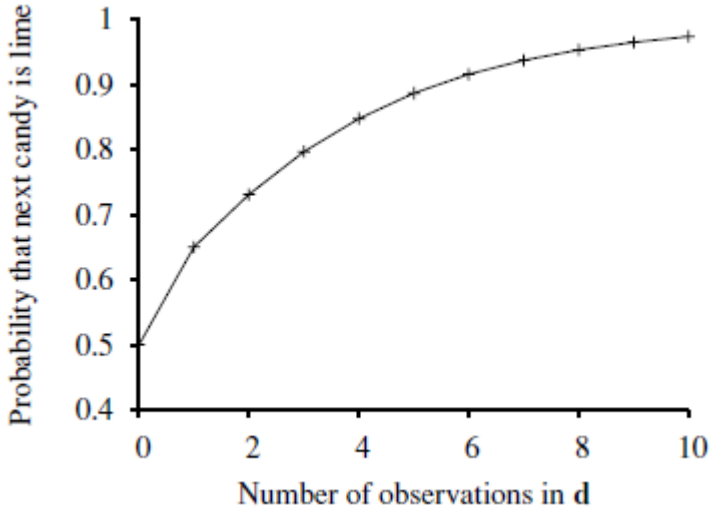
预测再拿出的一颗糖果是哪种口味

- 用贝叶斯平均模型进行预测

公式：

$$p(\hat{x} \in C|D) = \sum_i p(y = 1|\hat{x}, h_i)p(h_i|D)$$

计算：$p(x \in h_5|D)=0+0.25*0.25^{10}*0.2+0.5*0.5^{10}*0.4+0.75*0.75^{10}*0.2+1*0.1$



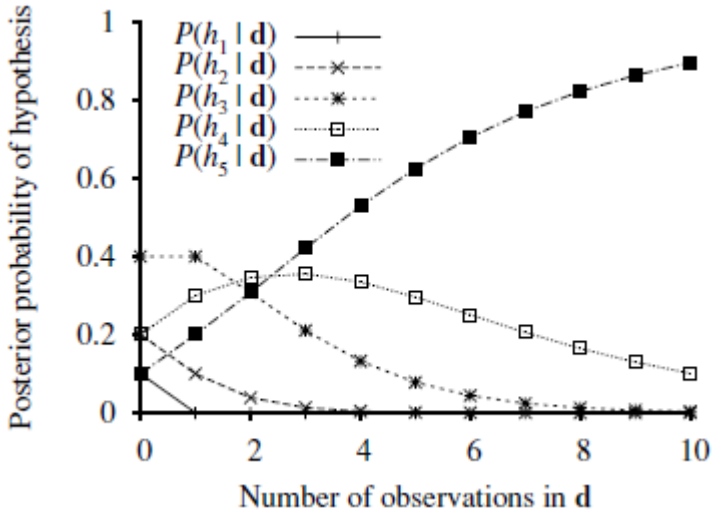
贝叶斯预测模型的特点

- 无论数据集大小，贝叶斯预测都是最优的。
- 贝叶斯学习的最优性是有代价的，
  - 对于实际学习问题，假设空间通常非常大或无限大。
- 在大多数情况下，我们必须采用近似或简化的方法。
  - 常见的近似算法：

⑩ **最大后验**(MAP) **假设** — h_{MAP} = 最大化 P(hi | **d**).

✓ 在糖果例子中，如果连续拿到三个酸橙味糖果，则有： $h_{MAP} = h_5$

⑩ **最大似然(**ML**) 假设 —** h_{ML} = 最大化 P(**d** | h_i)P(h_i) = P(**d** | h_i)



β二项分布模型

回顾一下数字游戏

- 数字游戏：
  - 假设空间 h∈ H 是有限的
  - 给定一系列离散观测值，计算特别简单：
    - ⑩ 只需要加、乘和除运算
- 在许多应用中，未知参数是连续的
  - 假设空间是R^K的（某个子集）
  - 计算变得复杂：须用积分代替求和

另一种游戏：抛硬币

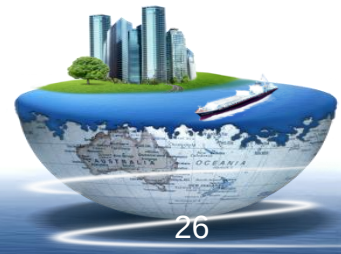
- 观察一系列抛硬币，推断正面朝上的概率。
- 该模型是许多方法的基础
- 该模型具有历史重要性
  - 它最早是1763年贝叶斯的论文中提出的

抛硬币模型的似然

- 设 X_i *表示第i次抛硬币，服从* Ber(θ)分布,
  - $X_i = 1$ 表示 “正面”, $X_i = 0$ 表示 “反面”,
  - $\theta \in [0, 1]$ 为正面朝上的概率
- 抛N次硬币实验，结果：$D=\{x_1,x_2,\ldots,x_N\}$
  - 如果数据是独立同分布, 则 似然:

$$p(D \mid \theta) = \theta^{N1}(1-\theta)^{N0} \qquad \text{(基于伯努利分布)}$$

  - $N_1 = \sum_{i=1}^{N} I(x_i = 1)$ 正面朝上的个数， $N_0 = \sum_{i=1}^{N} I(x_i = 0)$ 反面朝上的个数



二项分布

- 设抛*N*次硬币，*X*∈{0,1,…,n}*表示*“正面”朝上的次数,则*X服从 二项*分布,
  - 即： *X*~bin(n, *θ*) ， *θ* 表示 “正面”朝上的概率

$$bin(k|n,\theta) = \binom{n}{k}\theta^k(1-\theta)^{n-k} \qquad \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!\,(n-k)!}$$

  - *可以看出，二项分布与似然函数只差一个系数*
  - *这个系数与θ* 无关，看成是常数
- 所以，在研究最大似然时，为了简化计算，可以：
  - *将抛硬币模型的似然函数，看成是二项分布的似然函数*

抛硬币模型的先验

- 如果先验具有与似然相同的形式
  - 计算起来更容易、更方便
- 如果先验看起来像：

$$p(\theta) \propto \theta^{\gamma_1}(1-\theta)^{\gamma_0}$$

- 通过简单地将指数相加，就轻松评估后验值：

$$p(\theta \mid D) \propto p(D \mid \theta)p(\theta) = \theta^{N_1}(1-\theta)^{N_0}\theta^{\gamma_1}(1-\theta)^{\gamma_2} = \theta^{N_1+\gamma_1}(1-\theta)^{N_0+\gamma_0}$$

共轭先验

- 当先验与后验具有相同的形式
  - 先验称为对应似然的共轭先验
- 对于二项分布，共轭先验是β分布：

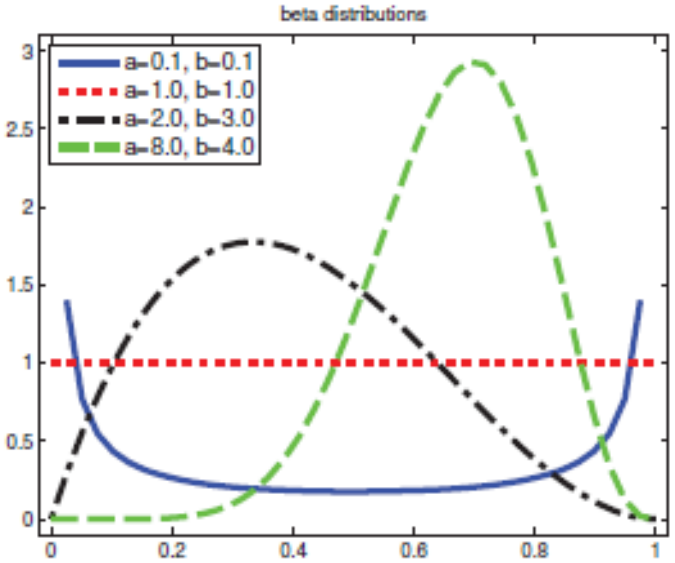
$$p(\theta \mid D) \propto \theta^{N_1}(1-\theta)^{N_0} \times \frac{1}{B(a,b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1} = \frac{1}{B(a,b)}\theta^{N_1+a-1}(1-\theta)^{N_0+b-1}$$

β分布

- β分布密度函数:

$$Beta(x \mid a,b) = \frac{1}{B(a,b)} x^{a-1}(1-x)^{b-1} \qquad 0 \le x \le 1$$

  - *a = b = 1*, 则成为了***均匀分布***
  - *a ,b < 1*, 则成为了***双峰分布***，*分别在0和1处有“尖峰”*
  - a ,b > 1, 则成为了***单峰分布***



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

  - *B*(*a*, *b*)： β 函数
  - Γ(*x*)： γ 函数

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

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

抛硬币模型的后验

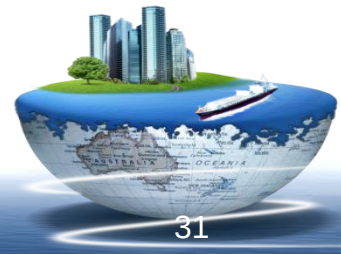
- 参数的后验估计：

$$p(\theta \mid D) \propto Bin(N_1 \mid \theta, N_0 + N_1)Beta(\theta \mid a, b) = Beta(\theta \mid N_1 + a, N_0 + b)$$

- 后验预测分布
  - 考虑预测单个未来试验中出现头部朝上的概率：

$$p(\tilde{x} = 1 \mid D) = \int_0^1 p(x = 1, \theta \mid D)d\theta = \int_0^1 p(x = 1 \mid \theta)p(\theta \mid D)d\theta$$

$$= \int_0^1 \theta Beta(\theta \mid a, b)d\theta = E[\theta \mid D] = \frac{a}{a + b}$$



贝叶斯推理适合于在线学习

- 设：数据集 D=D_a + D_b
  - 首先用数据D_a进行训练，有：

$$p(\theta|D_a) \propto p(D_a|\theta)p(\theta)$$

  - 然后用数据 D_b进行训练，将前次训练的后验结果，作为本次训练的先验，则有：

$$p(\theta|D_a,\ D_b) \propto p(D_b|\theta)p(\theta|D_a)$$

$$\begin{aligned} p(\theta \mid D_a, D_b) &\propto p(\theta, D_a, D_b) = p(D_a)p(\theta \mid D_a)p(D_b \mid \theta, D_a) \\ &\propto p(D_b \mid \theta)p(\theta \mid D_a) \\ &\propto Bin(N_1^b \mid \theta, N_1^b + N_0^b)Beta(\theta \mid N_1^a + a, N_0^a b) \\ &\propto Beta(\theta \mid N_1^a + N_1^b + a, N_0^a + N_0^b + b) \end{aligned}$$

- 这可以看出，贝叶斯推理特别适合在线学习

狄利克雷—*多项式模型*

掷骰子模型

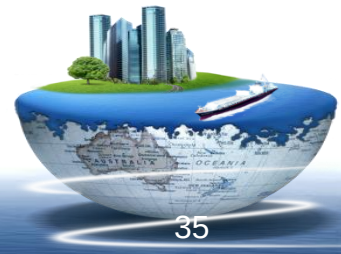
- 我们想估计掷骰子（有K个面）游戏，出现第i个面的概率。
- 这种模型还被广泛用于
  - 文本数据分析、生物序列数据分析等。

- 这种模型又被称为**多努利**实验

独热编码（one-hot encoding）

- **0-1向量** (每1项只能是0或1，且只能一项为1)
  - (1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 0), (0, 0, 1, 0), 和 (0, 0, 0, 1).
- 独热编码
  - 单变量 $x \in \{1,2,\ldots,k\}$
  - 用独热编码表示 x

$$x = [I(x = 1), \ldots, I(x = K)]$$

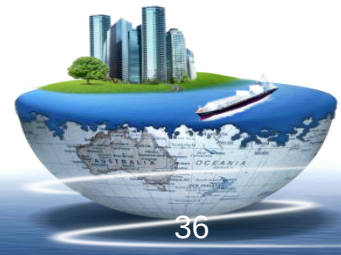


掷一次骰子(K面)的概率分布

- 用独热编码表示骰子每个面出现的概率：
  - $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_K)$
- 概率分布可表示为

$$Cat(x|\theta) = Mu(x|1,\theta) = \prod_{j=1}^{K} \theta_j^{I(x_j=1)}$$

  - *这个分布称为* ***分类分布（categorical distribution）***
  - *这个分布也称为* ***多努利分布（multinoulli distribution）***
- 如果 $x \sim Cat(\theta)$, 则 $p(x=j|\theta) = \theta_j$.



多项分布

- 设 $\boldsymbol{n} = (n_1, \ldots, n_K)$ 为随机向量，表示每个面出现的次数
  - $n_j \geq 0, n_1 + \ldots + n_K = n.$
- 掷n次骰子服从多项分布

$$Mu(\mathbf{n} \mid n, \theta) = \binom{n}{n_1 \cdots n_k} \prod_{j=1}^{K} \theta_j^{x_j} \qquad \text{where} \quad \binom{n}{n_1 \cdots n_k} = \frac{n!}{n_1!\, n_2! \cdots n_K!}$$

掷n次骰子(K面)模型的似然

- 设：掷n次骰子(K面), $D = \{x_1, \ldots, x_N\}$,
  - $x_i \in \{1, \ldots, K\}$ 出现的概率为 θ_i
- 如果数据是独立同分布的, 则似然为：

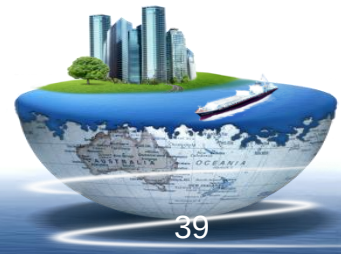
$$p(D \mid \theta) = \prod_{k=1}^{K} \theta_k^{N_k}$$

  - $N_k = \sum_{i=1}^{N} \mathrm{I}(y_i = k)$ 为第k面朝上的次数
- **多项分布的似然与该似然，只相差一个常量系数**

掷n次骰子(K面)模型的先验

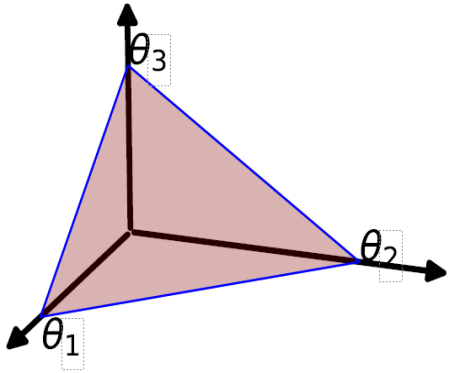
- 我们希望找到一个共轭先验
- **狄利克雷分布**正好符合条件
- 因此，我们采用**狄利克雷分布**作为先验:

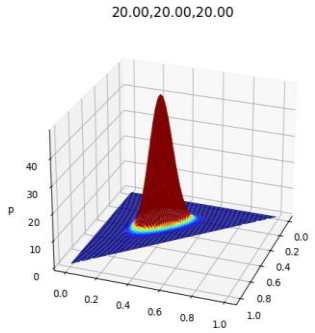
$$Dir(\theta \mid \alpha) = \frac{1}{B(\alpha)} \prod_{k=1}^{K} \theta_k^{\alpha_k - 1} I(x \in S_k)$$

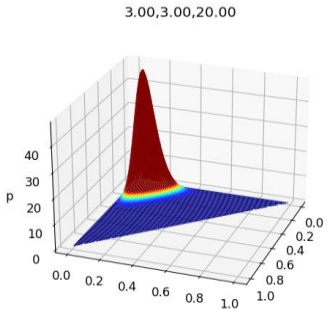


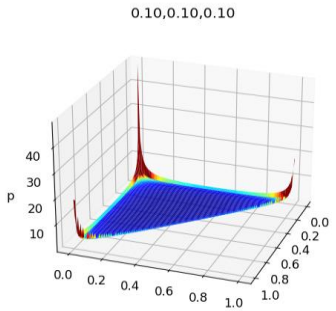
狄利克雷分布(Dirichlet distribution)

- **Dirichlet distribution**: $$Dir(x \mid \alpha) = \frac{1}{B(\alpha)} \prod_{k=1}^{K} x_k^{\alpha_k - 1} I(x \in S_k) \quad S_k = \left\{ \mathbf{x} : 0 \le x_k \le 1, \quad \sum_{k=1}^{K} x_k = 1 \right.$$









定义域：等边三角面　　$\boldsymbol{\alpha}$ = (20, 20, 20).　　$\boldsymbol{\alpha}$ = (3,3,20).　　$\boldsymbol{\alpha}$ = (0.1,0.1,0.1).

- $B(\alpha_1,.., \alpha_K)$ 为贝塔函数的自然泛化:

$$B(\alpha) = \frac{\prod_{k=1}^{K} \Gamma(\alpha_k)}{\Gamma(\alpha_0)} \quad \text{where} \quad \alpha_0 = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k$$

掷n次骰子(K面)模型的后验概率

- 如果，似然为多项分布，先验为狄利克雷分布
  - 后验也是狄利克雷分布：

$$p(\theta \mid D) \propto p(D \mid \theta)p(\theta) = Dir(\theta \mid \alpha_1 + N_1, \cdots, \alpha_K + N_K)$$

$$p(\theta|D) \propto \prod_{j=1}^{K} \theta_j^{N_j} \prod_{j=1}^{K} \theta_j^{\alpha_j - 1} I(x \in S_K) = \prod_{j=1}^{K} \theta_j^{N_j + \alpha_j - 1} I(x \in S_K)$$

$$p(\theta|D) = Dir(\theta|\alpha_1 + N_1, \cdots, \alpha_K + N_K)$$

掷n次骰子模型参数的后验估计

- 求后验的极大值（MAP），估计参数

$$p(\theta \mid D) \propto p(D \mid \theta)\, p(\theta) = Dir(\theta \mid \alpha_1 + N_1, \cdots, \alpha_K + N_K)$$

  - *求解这个最优问题，可以采用拉格朗日乘数法（**Lagrange** multiplier）*

$$l(\theta, \lambda) = \sum_k N_k \log \theta_k + \sum_k (\alpha_k - 1) \log \theta_k + \lambda (1 - \sum_k \theta_k)$$

- 求出最终估计值：

$$\hat{\theta}_k = \frac{N_k + \alpha_k - 1}{N + \alpha_0 - K}$$

掷n次骰子(K面)模型的预测分布

- 后验预测分布
  - n次掷骰子后，再掷1次骰子第j面朝上的概率:

$$p(X = j \mid D) = \int p(X = j, \theta \mid D)d\theta$$

$$= \int p(X = j \mid \theta)p(\theta \mid D)d\theta = \frac{\alpha_j + N_j}{\alpha_0 + N}$$

基于词袋模型表示语言序列

- 这是掷骰子模型的应用例子
- 观察下面序列（儿童童谣的一部分）：
  - Mary had a little lamb, little lamb, little lamb,
  - Mary had a little lamb, its fleece as white as snow
- 预测一下，序列后接下来可能出现的单词
- 基于词袋模型，我们将文本序列表示为向量

词袋模型

- 构造一个词汇表，包括我们观测文本中的所有单词
- 构造一个向量，其每个属性为词汇表中的一个单词，不考虑词的顺序
- 假设第i个单词是独立于其他单词进行采样
- 向量各属性的值 = 该单词出现次数

Token	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Word	mary	lamb	little	big	fleece	white	black	snow	rain	unk
Count	2	4	4	0	1	1	0	1	0	4

- **向量中，做如下处理：**
  - **unk（未知）：文本中其他地方未出现的所有其他单词**
  - **删除任何小词，如“a”、“as”、“the”等**

预测文本序列后可能出现的词汇

- *预测文本序列问题，等价于掷骰子模型*
- *假设，* ***θ*** *的先验分布为* ***Dir(θ \|α)****，* N_j *是第* j个单词出现的次数
  - ***后验预测分布:*** $p(\tilde{x} = j|D) = E[\theta_j|D] = \frac{\alpha_j + N_j}{\sum_i \alpha_i + N}$
- 设 $\alpha_j = 1$, *有:*

mary lamb little big fleece white black snow rain unk

$$p(\tilde{X} = j \mid D) = (\frac{3}{27}, \frac{5}{27}, \frac{5}{27}, \frac{1}{27}, \frac{2}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{27}, \frac{5}{27})$$

- 根据预测分布，得到的预测结果：
  - 可能是：X = 2 (“*lamb*”) , X = 3 (“*little*”) and X = 10 (“*unk*”).

特别注意

- 注意：*单词 “big”, “black” 和 “rain”*在观测的文本中没有出现过
  - 但是，它们的*预测概率不为零，这是因为:*

$$p(\tilde{x} = j|D) = E[\theta_j|D] = \frac{\alpha_j + N_j}{\sum_i \alpha_i + N}$$

Token	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Word	mary	lamb	little	big	fleece	white	black	snow	rain	unk
Count	2	4	4	0	1	1	0	1	0	4

$$p(\tilde{X} = j \mid D) = (\frac{3}{27}, \frac{5}{27}, \frac{5}{27}, \frac{1}{27}, \frac{2}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{27}, \frac{5}{27})$$

朴素贝叶斯分类器

朴素贝叶斯分类器(NBC)

- 朴素贝叶斯分类器是一种基于贝叶斯定理的分类算法
  - “朴素”：假定输入的各个特征，在给定输出类别的条件下是相互独立
  - 大多数情况下这个假设并不成立，但仍然能够在很多实际问题中取得好效果。

$$p(y = c \mid , \mathbf{x}, \theta) = p(\mathbf{x} \mid y = c, \theta)p(y = c) = \prod_{j=1}^{D} p(x_j \mid y = c, \theta_{jc})p(y = c)$$

朴素贝叶斯分类器的常用条件密度分布

- 特征为实数时，可采用高斯分布：

$$p(\boldsymbol{x}|y = c, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{j=1}^{D} N(x_j | \mu_{jc}, \sigma^2_{jc})$$

- 特征为二值时$x_j \in \{0, 1\}$,，可采用伯努利分布：

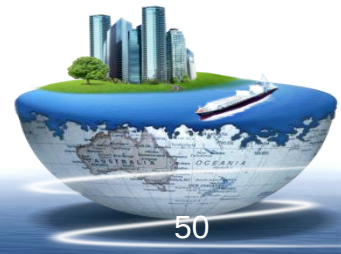
$$p(\boldsymbol{x}|y = c, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{j=1}^{D} Ber(x_j | \mu_{jc})$$

  - *这个模型又称为多变量伯努利朴素贝叶斯模型*

- 特征为离散值时$x_j \in \{1, \ldots, K\}$，可采用多努利分布（分类分布）：

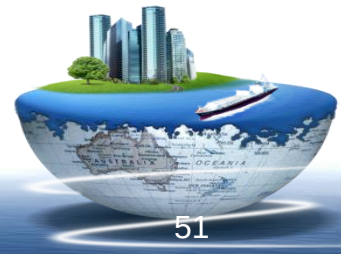
$$p(\boldsymbol{x}|y = c, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{j=1}^{D} Cat(x_j | \mu_{jc})$$

  - μ_{jc}*是c类中*x_j*的K个可能值的直方图*



训练朴素贝叶斯分类器

- 通常训练朴素贝叶斯分类器的方法.
  - 最大似然估计法（MLE），估计模型参数
  - 最大后验估计法（MAP），估计模型参数



基于最大似然估计的朴素贝叶斯分类器训练

- 单个数据的概率

$$p(\mathbf{x}_i, y_i \mid \boldsymbol{\theta}) = p(y_j \mid \pi) \prod_i p(x_{ij} \mid \theta_j) = \prod_c \pi_c^{I(y_i=c)} \prod_j \prod_c p(x_{ij} \mid \theta_{jc})^{I(y_i=c)}$$

  - 这里假设，概率分布形式为狄利克雷分布

- log似然函数：

$$\log p(D \mid \theta) = \sum_{c=1}^{C} N_c \log \pi_c + \sum_{j=1}^{D} \sum_{c=1}^{C} \sum_{i:y_i=c} \log p(x_{ij} \mid \theta_{jc})$$

- 最大似然求得参数结果：

$$\hat{\pi}_c = \frac{N_c}{N} \qquad \hat{\theta}_{jc} = \frac{N_{jc}}{N_c}$$

案例：垃圾邮件检测

训练数据:

- 垃圾邮件（共9个词）
  - Offer is secret
  - Click secret link
  - Secret sports link
- 正常邮件（共15个词）
  - Play sports today
  - Went play sports
  - Secret sports event
  - Sport is today
  - Sport costs money

测试数据:

- 给定邮件
  - M =“Secret is secret”
- 请问是垃圾邮件还是正常邮件?

模型参数估计：最大似然估计

- D : x=SSSHHHHH, y=11100000
- 设 : P(S|θ)=θ, P(H|θ)=1-θ

$$p(y_i) = \begin{cases} \theta\ , & if\ y_i = 1 \\ 1-\theta & if\ y_i = 0 \end{cases} = \theta^{y_i} \cdot (1-\theta)^{1-y_i}$$

- 似然函数 :

$$p(D|\theta) = \theta^{count(y_i=1)} \cdot (1-\theta)^{count(1-y_i)}$$

- 本问题使用log似然 :

$$\log\big(p(D|\theta)\big) = 3log\theta + 5\log(1-\theta)$$

- 计算最大似然 :

$$\frac{\partial logP(D|\theta)}{\partial\theta} = \frac{3}{\theta} + \frac{5}{1-\theta} = 0$$

$$\frac{\partial logP(D|\theta)}{\partial\theta} = \frac{3}{\theta} - \frac{5}{1-\theta} = 0$$

$$\theta = \frac{3}{8}$$

预测给定邮件是否是垃圾邮件

- 给定邮件: M =“Secret is secret”

已知: $P(spam) = \frac{3}{8}\cdot$ $P(ham) = \frac{5}{8}\cdot$

计算: $P(M|spam) = P("secret"|spam)\cdot P("is"|spam)\cdot P("secret"|spam) = \frac{3}{9}\cdot\frac{1}{9}\cdot\frac{3}{9} = \frac{1}{81}$

$$P(M|ham) = \frac{1}{15}\cdot\frac{1}{15}\cdot\frac{1}{15} = \frac{1}{3375}$$

根据贝叶斯公式: $$P(spam|M) = \frac{P(spam,M)}{P(M)} = \frac{P(spam)\cdot P(M|spam)}{P(M|spam)P(spam)+P(M|ham)P(ham)} = \frac{25}{26}$$

- 所以，预测该邮件是垃圾邮件

MLE vs. MAP

- **MLE:** $\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}}\, p(D|\theta)$

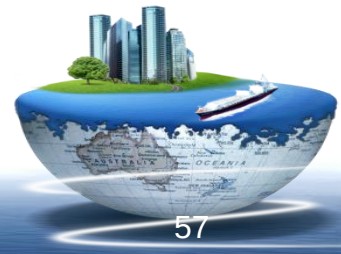
- **MAP:** $\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{p(D)} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}}\, p(D|\theta)p(\theta)$

最大似然估计存在过拟合问题

- 对于文本分类，如果采用最大似然估计，我们得到:

$$\hat{\theta}_{jc} = \frac{N_{jc}}{N_c}$$

  - N_{jc}：属于c类的样本中，第j个词出现的次数
  - N_c：属于c类的样本个数
  - 可以看出，这里只考虑词汇在样本中出现的次数
- 如果属于c类的样本中，没有第j个词，则会有：$\hat{\theta}_{jc} = 0$
  - 这就出现了过拟合
- 可以用拉普拉斯平滑法，解决这个问题



拉普拉斯平滑

- 似然函数：　　P(x)= count(x)/N
- 为了克服过拟合问题，对似然做拉普拉斯平滑
  - P(x)= (count(x) + 1) / (N+2)
  - 基本思路：假设实际采样前，已有两个样本，一个正样本，一个负样本，因此，分子加1和分母加2
- 判定邮件是否垃圾邮件：M =“Today is secret”
  - 若采用似然估计： P(“Today is Secret” |Spam) =0 ， 表明过拟合了
  - 用拉普拉斯平滑：

$$P(M|spam) = \frac{1}{11} \cdot \frac{2}{11} \cdot \frac{3}{11} = 0.0045 \qquad P(M|ham) = \frac{3}{17} \cdot \frac{2}{17} \cdot \frac{2}{17} = 0.0024$$

- 所以，预测该邮件是垃圾邮件

特征选择

- 朴素贝叶斯分类器是拟合多个特征的联合分布
  - 它可能受到过拟合的影响
  - 运行时间复杂度为O(D)，对于某些应用程序来说可能太高。
- 一种常用的方法是做特征选择，删除“不相关”特征
- 最简单的方法是分别度量每个特征的相关性
  - 估计相关性的一种方法是计算特征X_j和类标签Y之间的**互信息**
  - 取前K个最相关的特征，K的选择要基于平衡精确性与复杂性
  - 这种方法被称为变量排序、过滤或筛选。

熵（*Entropy*）

- 熵是一种随机变量的不确定性度量

$$Entropy(X)=\int P(X)uncertainty(X)dX$$

- 定义不确定性

$$uncertainty(X)=\log_2\frac{1}{P(X)}$$

- 设离散随机变量***X***有K个状态，其***熵***表示为：

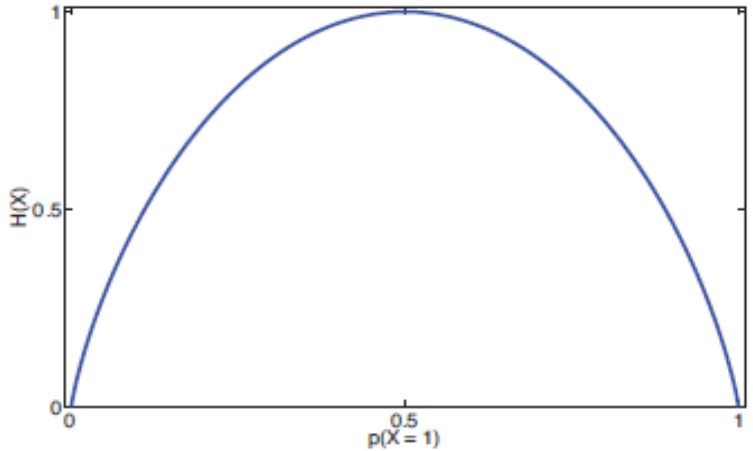
$$H(X)=\sum_{k=1}^{K}P(X=k)\log_2\frac{1}{P(X=k)}=-\sum_{k=1}^{K}P(X=k)\log_2 P(X=k)$$

熵计算的例子

- 对于二值随机变量 $X \in \{0, 1\}$, 其概率：
  - $p(X = 1) = \theta$ and $p(X = 0) = 1 - \theta$.
- 熵计算如下

$$H(X) = -[P(X=1)\log_2 P(X=1) + P(X=0)\log_2 P(X=0)]$$
$$= -[\theta \log_2 \theta + (1-\theta)\log_2(1-\theta)]$$

- 熵随概率值变化曲线：



KL 散度(divergence)

- 一种度量两个随机变量*p*和*q*的分布的不相似性方法
  - *the* **Kullback-Leibler divergence**
  - 也称为**相对熵 (relative entropy)**

$$KL(p\|q)=\sum_k p_k \log\frac{p_k}{q_k} \qquad KL(p\ ||\ q)\ \geq\ 0$$

- 交叉熵(***cross entropy***) :

$$H(p,q)\ =\ -\sum_k p_k\ \log\ q_k$$

- KL散度与熵和交叉熵的关系 :

$$KL(p\|q)=\sum_k p_k \log p_k - \sum_k p_k \log q_k = -H(p)+H(p,q)$$

KL 距离

- 希望利用KL散度定义两个分布之间的距离
  - 但 **KL 散度本身不是距离度量**
    - ❿KL散度不具有对称性： KL(p||q) ≠ KL(q||p)
    - ❿KL散度不是恒大于等于0
- 我们可以定义KL距离如下:
  - 0.5KL(p||q) + 0.5KL(q||p)

互信息(Mutual information)

- 如何判定联合分布$p(X, Y)$与因子化分布$p(X)p(Y)$的相似性
  - 可以运用互信息:

$$I(X,Y) = KL(p(X,Y) \| p(X)p(Y)) = \sum_{x_j}\sum_{y} p(x_j, y)\log\frac{p(x_j, y)}{p(x_j)p(y)}$$

- $I(X; Y) \geq 0$ （iff $p(X, Y) = p(X)p(Y)$，式子取等号）

朴素贝叶斯分类器中度量相关性的一种方法

- 计算特征X_j和类标签Y之间的互信息：

$$I(X,Y)=\sum_{x_j}\sum_{y}p(x_j,y)\log\frac{p(x_j,y)}{p(x_j)p(y)}$$

  - 如果特征是二值的，则互信息可写成:

$$I_j=\sum_{c}\left[\theta_{jc}\pi_c\log\frac{\theta_{jc}}{\theta_j}+(1-\theta_{jc})\pi_c\log\frac{1-\theta_{jc}}{1-\theta_j}\right]$$

  - 其中，$\pi_c=p(y=c)$, $\theta_{jc}=p(x_j=1|y=c)$, $\theta_j=p(x_j=1)=\Sigma_c\,\pi_c\theta_{jc}$

分类文本

- 采用词袋模型
- 从不同的角度去看这个问题，可以得到不同的分类器
- 总结前面方法，我们知道至少3个不同的文本分类器
  - 简单分类器
  - 更精确些的分类器
  - 更好的分类器

简单文本分类器

- 基于词袋模型，用二值向量表示文档，记录每个单词是否存在于文档中
  - 如果单词j出现在文档i中，则$x_{ij} = 1$，*否则*$x_{ij} = 0$
- 可以用类条件概率来分类：
  - 文档i的词向量：$x_i = \{x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{in}\}$

$$p(x_i \mid y_i = c, \theta) = \prod_{j=1}^{D} Ber(x_{ij} \mid \theta_{jc}) = \prod_{j=1}^{D} \theta_{jc}^{I(x_{ij})} (1-\theta_{jc})^{I(1-x_{ij})}$$

- 这种方法的问题
  - 忽略了每个单词出现的次数
  - 丢失了一些信息

更精确些的文本分类器

- 考虑了每个单词出现在文档中的次数
- 设 $\mathbf{x}_i$ 为文档 i的词向量，表示每个单词出现在文档 i 中的次数, $x_{ij} \in \{0, 1, \ldots, N_i\}$,
  - N_i 为文档i中总单词数 ($\Sigma^D_{j=1} x_{ij} = N_i$)
- 可以使用多项分布来分类.

$$p(x_i \mid y_i = c, \theta) = Mu(x_i \mid N_i, \theta_c) = \frac{N_i!}{\prod_{j=1}^{D} x_{ij}!} \prod_{j=1}^{D} \theta_{jc}^{x_{ij}}$$

  - 假设
    - 文档大小N_i 不依赖于类别.
    - 单词j存在于C类文档的概率为：θ_{jc}
    - 对于每个文档类别，参数满足约束： ($\Sigma^D_{j=1} \theta_{jc}=1$)

更好的文本分类器

- 基于多项分布的分类器对于文档分类不是特别好。
  - 单词出现具有突发性。
  - 大多数单词从未出现在任何给定文档中
  - 如果它们出现一次，则可能出现多次
- 我们可以使用**Dirichlet平均多项分布**的方法进行分类

$$p(x_i \mid y_i = c, \alpha) = \int Mu(x_i \mid N_i, \theta_c) Dir(\theta_c \mid \alpha_c) d\theta_c = \frac{N_i!}{\prod_{j=1}^{D} x_{ij}!} \frac{B(x_i + \alpha_c)}{B(\alpha_c)}$$

Thank You !


AUSTRALIA
OCEANIA
Northern Territory
Queensland
Western
Desert
Great Sandy Desert
Gibson Desert
Alice Springs
Mount Isa
Townsville
Cairns
Coral Sea
Chesterfield
Port-Vila
VANUATU
FIJI
TONGA
New Caledonia
Brisbane
Grafton
Sydney
Canberra ACT
Victoria
Tasman Sea
NEW ZEALAND
North Island
South Island