

概 率 论 与 数 理 统 计

Probability and Statistics

南京大学 张绍群 & 徐科

更新: December 17, 2025

Part X – Ch10: 参数估计

Ch10: 参数估计

Parameter Estimation

December 17, 2025

引言

假设我们已知南京大学男性学生的身高服从正态分布 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, 但不知道参数 μ 和 σ 具体的取值. 一种估计参数的方法

- 抽样多个个体, 作为样本
- 通过样本计算样本均值
- 利用样本均值来推断总体的均值 μ

这类已知总体分布形式, 但不知其具体参数, 用样本统计量来估计总体的参数的问题称为 **参数估计问题**. 参数估计是统计推断的核心问题之一, 方法大体上有两类:

- 点估计
- 区间估计

提纲：点估计

- 矩估计
- 最大似然估计
- 估计量的评价标准
 - 无偏性
 - 有效性：Rao-Crammer 不等式
 - 一致性
- 点估计与机器学习

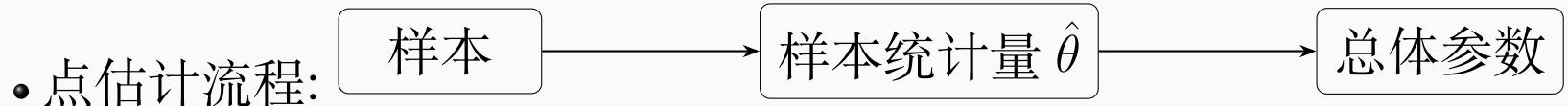
点估计

定义 0.1 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的一个样本, 用于估计未知参数 θ 的统计量 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 称为 θ 的估计量, 或称为 θ 的 **点估计**.

Remarks: 点估计的本质就是用样本统计量直接作为总体参数的估计值

- 这里的参数是总体的属性, 而统计量是针对样本的计算.

- 样本通常来自于观测(数据)或者采样.



- 在这里如何构造 $\hat{\theta}$ 没有明确的规定,

- 1900 年 K. 皮尔逊提出一个替换原理, 即 **矩估计法**.

- 1922 年费希尔提出的最大似然法, 即 **最大似然估计**.

矩估计法

替换原理具体为:

- 用样本矩去替换总体矩 (这里的矩可以是原点矩也可以是中心距).
 - 使用原点矩
 - 总体 X 的 k 阶原点矩: $a_k = \mathbb{E}[X^k]$
 - 样本的 k 阶原点矩: $A_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^k$
 - 使用中心矩
 - 总体 X 的 k 阶中心矩: $b_k = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}(X))^k]$
 - 样本的 k 阶中心矩: $B_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^k$
- 用样本矩的函数去替换相应的总体矩的函数.

矩估计法 -- 适用场景

根据这个替换原理, 在总体分布形式未知的情况下也可以对参数做出估计, 譬如:

- 用样本均值 \bar{X} 估计总体均值 $\mathbb{E}(X)$
- 用样本方差 S^2 估计总体方差 $\text{VAR}(X)$
 - 注意: 若没有特殊说明, 样本方差采用无偏方差
- 用事件 A 出现的频率估计事件 A 发生的概率.

矩估计法 -- 计算步骤

总体 X 的分布函数 F 包含 m 个未知参数 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$

- 计算总体 X 的 k 阶矩: $a_k = a_k(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m) = \mathbb{E}[X^k], k \in [m]$
 - a_k 一般为 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$ 的函数
- 计算样本的 k 阶矩: $A_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^k$
- 令样本矩等于总体矩:

$$A_k = a_k = a_k(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m), \quad k = [m]$$

得到 m 个关于 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$ 的方程组

- 求解方程组得到估计量 $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_m$

矩估计：例 0.1

例 0.1 设总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} (\alpha + 1)X^\alpha, & X \in (0, 1) \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本，求参数 α 的矩估计.

解答：例 0.1

题目：设总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} (\alpha + 1)X^\alpha, & X \in (0, 1) \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本，求参数 α 的矩估计。

解答：

- 首先计算总体 X 的 1 阶矩：

$$\mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} X f(X) dX = \int_0^1 X(\alpha + 1)X^\alpha dX = \frac{\alpha + 1}{\alpha + 2}.$$

以及样本的 1 阶矩： $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$.

- 根据矩估计方法有

$$\mathbb{E}[X] = \frac{\alpha + 1}{\alpha + 2} = \bar{X}$$

求解可得 $\alpha = (2\bar{X} - 1)/(1 - \bar{X})$.

矩估计：例 0.2

例 0.2 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本, 且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{X-\mu}{\theta}}, & X \geq \mu; \\ 0, & \text{其它}, \end{cases}$$

其中 $\theta > 0$, 求参数 μ 和 θ 的矩估计.

解答：例 0.2

题目：如上所述.

解答：

- 设随机变量 $Y = X - \mu$, 则 Y 服从参数为 $1/\theta$ 的指数分布, 有

$$\mathbb{E}[Y] = \theta \quad \text{和} \quad \text{VAR}[Y] = \theta^2.$$

由此可得 $\mathbb{E}[X] = \mu + \theta$ 和 $\sigma(X) = \theta^2$.

- 计算对应的样本矩

$$A_1 = \bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i, \quad B_2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$$

求解方程组

$$\mu + \theta = A_1 \quad \text{和} \quad \theta^2 = B_2.$$

可得 $\mu = \bar{X} - \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 / n}$ 和 $\theta = \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 / (n-1)}$.

最大似然估计法 -- 引子

为了叙述最大似然估计的直观想法, 先看下面这个例子:

例 0.3 设有两个外形相同的箱子中各有 100 只球, 其中甲箱中有 99 个白球、1 个黑球, 乙箱中有 1 个白球、99 个黑球. 今随机抽取一箱并从中抽取一球, 结果取得白球, 问这个白球是从哪个箱子中取出?

最大似然估计法 -- 引子

为了叙述最大似然估计的直观想法, 先看下面这个例子:

例 0.4 设有两个外形相同的箱子中各有 100 只球, 其中甲箱中有 99 个白球、1 个黑球, 乙箱中有 1 个白球、99 个黑球. 今随机抽取一箱并从中抽取一球, 结果取得白球, 问这个白球是从哪个箱子中取出?

解答: A 表示事件 “从甲箱中取出白球”, B 表示事件 “从乙箱中取出白球”, 又有

$$P(A) = 0.99 > P(B) = 0.01$$

因此, 按照可以推断白球 “最可能” 是从甲箱中取出的.

这个推断符合人们的经验事实, 这里的 “最可能” 就是 “极大似然” 之意, 这种想法常称为 “极大似然原理”. 即, 已经得到了样本, 然后通过样本倒推, 找到能够使的该样本出现的最大概率的条件.

最大似然估计法

定义 0.2 设总体的概率函数为 $p(X; \theta)$, $\theta \in \Theta$, 其中 θ 是一个未知参数或几个未知参数组成的参数向量, Θ 是参数空间. X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本 (默认 i.i.d), 将样本的联合概率函数看成 θ 的函数, 用 $L(\theta, X_1, X_2, \dots, X_n)$ 表示, 简记 $L(\theta)$,

$$L(\theta) = L(\theta, X_1, X_2, \dots, X_n) = p(X_1; \theta)p(X_2; \theta) \dots p(X_n; \theta) ,$$

$L(\theta)$ 称为样本的似然函数. 若某个统计量 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 满足,

$$L(\hat{\theta}) = \max_{\theta \in \Theta} L(\theta) ,$$

则称 $\hat{\theta}$ 是 θ 的最大似然估计, 简记为 MLE (Maximum Likelihood Estimation).

最大似然估计法 -- 计算步骤

求 $L(\theta) = p(X_1; \theta)p(X_2; \theta) \dots p(X_n; \theta)$ 的最大值可以通过下列步骤:

① 列出 $L(\theta) = p(X_1; \theta)p(X_2; \theta) \dots p(X_n; \theta)$



② 对等式两边取对数 $\log L(\theta) = \sum_{i=1}^n \log p(X_i; \theta)$



③ 求关于 θ 一阶偏导并令其为零 $\frac{\partial}{\partial \theta} \log L(\theta) = 0$



④ 求解方程组得到最大似然估计 $\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} L(\theta)$

如何构造似然函数? 核心: 条件概率公式!

最大似然估计：例 0.5

例 0.5 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是取自总体 $X \sim Ber(1, p)$ 的样本, 求参数 p 的最大似然估计.

解答：例 0.5

题目：设 X_1, X_2, \dots, X_n 是取自总体 $X \sim Ber(1, p)$ 的样本，求参数 p 的最大似然估计。

解答：

- 首先计算似然函数

$$L(p) = \prod_{i=1}^n p^{X_i} (1-p)^{1-X_i} = p^{\sum_{i=1}^n X_i} (1-p)^{n-\sum_{i=1}^n X_i},$$

由而可得对数似然函数

$$\ln L(p) = \sum_{i=1}^n X_i \ln p + \left(n - \sum_{i=1}^n X_i \right) \ln(1-p),$$

求一阶偏导并令其为零，可得

$$\frac{\partial \ln L(p)}{\partial p} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^n X_i - \frac{1}{1-p} \left(n - \sum_{i=1}^n X_i \right) = 0.$$

由此求解 $p = \sum_{i=1}^n X_i / n = \bar{X}$.

最大似然估计：例 0.6

例 0.6 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是取自总体 $X \sim U(0, \theta)$ 的样本，求参数 θ 的最大似然估计。

解答：例 0.6

题目：设 X_1, X_2, \dots, X_n 是取自总体 $X \sim U(0, \theta)$ 的样本，求参数 θ 的最大似然估计。

解答：

- 首先计算似然函数

$$L(\theta) = \frac{1}{\theta^n} \prod_{i=1}^n \mathbb{I}_{\{0 < X_i \leq \theta\}} = \frac{1}{\theta^n} \mathbb{I}_{\{0 < X_{(n)} \leq \theta\}},$$

要使 $L(\theta)$ 最大，首先是示性函数取值应该为 1，其次是 $1/\theta^n$ 尽可能大，由于 $1/\theta^n$ 是 θ 的单调递减函数，所以 θ 的取值应尽可能小，但示性函数为 1 决定了 θ 不能小于 $X_{(n)}$ ，由此给出 θ 的最大似然估计为 $X_{(n)}$ 。

- 这个例子说明虽然求导函数是求最大似然估计最常用的方法，但并不是所有场合求导都是有效的。
- 如果是 $X \sim U(\alpha, \theta)$ 呢？

最大似然估计 -- 不可变性

最大似然估计有一个简单而有效的性质:

定理 0.1 如果 $\hat{\theta}$ 是参数 θ 的最大似然估计, 那么对于任一的函数 $g(\cdot)$, $g(\hat{\theta})$ 也是 $g(\theta)$ 的最大似然估计.

该性质称为最大似然估计的不变性, 从而使得一些复杂结构的参数的最大似然估计的计算变得容易了.

最大似然估计：例 0.7

例 0.7 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是取自总体 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 的样本, 求参数 μ 和 $\sigma > 0$ 的最大似然估计.

解答：例 0.7

解答：

- 根据正态分布的密度函数，可知似然函数

$$L(\mu, \sigma) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^n} \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{(X_i - \mu)^2}{2\sigma^2}\right).$$

其对数似然函数为 $\ln L(\mu, \sigma) = -n \ln(2\pi)^{1/2} - n \ln \sigma - \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2 / 2\sigma^2$.

- 对参数 μ 求导计算可得

$$\frac{\partial \ln L(\mu, \sigma)}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^n (X_i - \mu) = 0 \Rightarrow \mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = \bar{X},$$

对参数 σ 求导计算，可得

$$\frac{\partial \ln L(\mu, \sigma)}{\partial \sigma} = -\frac{n}{\sigma} + \frac{1}{\sigma^3} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2 = 0 \Rightarrow \sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}.$$

根据最大似然估计的不变性，可知方差 σ^2 的最大似然估计为 $\sigma^2 = \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 / n$.

最大似然估计：例 0.8

例 0.8 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本，且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \theta e^{-(X-\mu)\theta}, & X \geq \mu; \\ 0, & \text{其它.} \end{cases}$$

求参数 μ 和 θ 的最大似然估计.

解答：例 0.8

题目：设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本，且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \theta e^{-(X-\mu)\theta}, & X \geq \mu; \\ 0, & \text{其它.} \end{cases}$$

求参数 μ 和 θ 的最大似然估计.

解答：

- 列出似然函数

$$L(\theta, \mu) = \begin{cases} \theta^n e^{-\theta \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)}, & X_i \geq \mu \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

其对数似然函数为

$$\ln L(\theta, \mu) = n \ln \theta - \theta \sum_{i=1}^n (X_i - \mu).$$

- 对参数 θ 求导计算可得

$$\frac{\partial \ln L(\theta, \mu)}{\partial \theta} = \frac{n}{\theta} - \sum_{i=1}^n (X_i - \mu) = 0 \Rightarrow \theta = \frac{1}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)},$$

对参数 μ 求导计算可得

$$\frac{\partial \ln L(\theta, \mu)}{\partial \mu} = n\theta = 0 \Rightarrow \theta = 0.$$

此时无法求解 μ 和 θ 的最大似然估计.

- 回顾似然函数

$$L(\theta, \mu) = \begin{cases} \theta^n e^{-\theta \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)}, & X_i \geq \mu \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

可以发现 μ 越大似然函数 $L(\theta, \mu)$ 越大, 但须满足 $X_i \geq \mu (i \in [n])$. 由此可得最大似然估计为

$$\hat{\mu} = X_{(1)} \quad \text{and} \quad \hat{\theta} = \frac{1}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - X_{(1)})}.$$

最大似然估计：例 0.9

例 0.9 设总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} (\alpha + 1)X^\alpha, & X \in (0, 1) \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体的样本，求参数 α 的矩估计.

解答：例 0.9

题目：如上所述.

解答：

- 列出似然函数

$$L(\alpha) = (\alpha + 1)^n \prod_{i=1}^n X_i^\alpha = (\alpha + 1)^n (X_1 X_2 \dots X_n)^\alpha,$$

以及其对数似然函数为 $\ln L(\alpha) = n \ln(\alpha + 1) + \alpha \ln(X_1 X_2 \dots X_n)$. 求导并令导数为零有

$$\frac{\partial \ln L(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{n}{\alpha + 1} + \ln(X_1 X_2 \dots X_n) = 0,$$

求解可得

$$\alpha = \frac{-n}{\sum_{i=1}^n \ln(X_i)} - 1$$

对比例 0.1, 可以看到同一密度函数的矩估计和最大似然估计结果可能不同.

估计量的评价标准

不同的估计方法可能得到不同的估计值.

自然地, 我们希望知道采用哪一种估计量更好, 或更好的标准是什么呢?
统计学上, 给出了无偏性、有效性、一致性等评价标准.

- 无偏性: $\hat{\theta}$ 与参数真值 θ 之间的偏差的平均值为 0
- 有效性: $\hat{\theta}$ 围绕参数真值 θ 的方差越小越好
- 一致性: 随着样本量的不断增大, $\hat{\theta}$ 能够有效逼近参数真值 θ

无偏性

定义 0.3 设 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 是 θ 的一个估计, θ 的参数空间为 Θ , 若对任意的 $\theta \in \Theta$, 有

$$\mathbb{E}_\theta(\hat{\theta}) = \theta,$$

则称 $\hat{\theta}$ 是 θ 的 无偏估计, 否则称为 有偏估计.

Remarks:

- (原点矩) 样本 k 阶原点矩为总体 k 阶原点矩的无偏估计
- (中心矩) 设 X_1, X_2, \dots, X_n 来自总体 X 的样本, 期望 μ , 方差 σ^2 , 则:
 - $S_0^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ 是 σ^2 的有偏估计
 - $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ 是 σ^2 的无偏估计
- 若 $\hat{\theta}$ 是 θ 的一个无偏估计, $g(\hat{\theta})$ 不一定也是 $g(\theta)$ 的无偏估计.

无偏估计：例 0.10

例 0.10 设 X_1, X_2, \dots, X_n 来自总体 X 的样本，且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{X}{\theta}}, & X \geq 0; \\ 0, & X < 0. \end{cases}$$

证明：统计量

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^n X_i/n \quad \text{和} \quad n \cdot \min\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$$

均是 θ 的无偏估计。

解答：例 0.10

解答：

- 根据期望和指数分布的性质，有

$$\mathbb{E}[\bar{X}] = \mathbb{E}[X] = \theta,$$

由此可知， \bar{X} 是 θ 的无偏估计（原点矩）。

- 设随机变量 $Z = \min\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ ，则有

$$\begin{aligned} F_Z(z) &= P(Z \leq z) = 1 - P(Z > z) \\ &= 1 - P(X_1 > z)P(X_2 > z) \dots P(X_n > z) \\ &= 1 - \prod_{i=1}^n (1 - P(X_i \leq z)) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ 1 - e^{-nz/\theta}, & z \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

于是当 $z \geq 0$ 时，有

$$P(Z > z) = 1 - F_Z(z) = e^{-nz/\theta}.$$

根据指数分布期望的性质, 有

$$\mathbb{E}[Z] = \int_0^\infty P(Z > z) dz = \int_0^{+\infty} e^{-nz/\theta} dz = \frac{\theta}{n},$$

于是有 $\theta = \mathbb{E}[nZ]$.

有效性

例子 0.10 说明: 参数可能存在多个无偏估计.

- 若 $\hat{\theta}_1$ 和 $\hat{\theta}_2$ 都是 θ 的无偏估计, 如何在多个无偏估计中进行选择?
- 直观的想法是, $\hat{\theta}$ 围绕参数真值 θ 的方差越小越好, 即有效性.

定义 0.4 设 $\hat{\theta}_1$ 和 $\hat{\theta}_2$ 分别是 θ 的两个无偏估计, 如果对任意的 $\theta \in \Theta$ 都有

$$\text{VAR}(\hat{\theta}_1) \leq \text{VAR}(\hat{\theta}_2),$$

且至少有一个 $\theta \in \Theta$ 使得上述不等式严格成立, 则称 $\hat{\theta}_1$ 比 $\hat{\theta}_2$ 有效.

Remarks: 有效性是针对无偏估计而言的, 因此判断有效性之前必须先确认估计量的无偏性.

有效性：例 0.11

例 0.11 设 X_1, X_2, \dots, X_n 来自总体 X 的样本，且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{X}{\theta}}, & X \geq 0; \\ 0, & X < 0. \end{cases}$$

令 $Z = \min\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$. 证明：当 $n > 1$ 时， $\bar{X} = \sum_{i=1}^n X_i/n$ 比 nZ 更有效.

解答：例 0.11

题目：如上所述.

解答：

- 根据样本的独立性有

$$\sigma(\bar{X}) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sigma(X_i) = \frac{\theta^2}{n}.$$

又根据例0.10可知随机变量 Z 的密度函数为

$$f(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ \frac{n}{\theta} e^{-\frac{nz}{\theta}}, & z \geq 0 \end{cases}$$

从而得到

$$\sigma(nZ) = n^2 \sigma(Z) = n^2 \frac{\theta^2}{n^2} = \theta^2,$$

因此当 $n \geq 1$ 时有 $\sigma(\bar{X}) \leq \sigma(nZ)$ 成立, 故估计量 \bar{X} 比 nZ 更有效.

有效性：例 0.12

例 0.12 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的样本，且

$$\mathbb{E}(X) = \mu \quad \text{及} \quad \text{VAR}(X) = \sigma^2.$$

设常数 $c_1, c_2, \dots, c_n \geq 0$, 满足 $\sum_{i=1}^n c_i = 1, c_i \neq \frac{1}{n}$. 求证: \bar{X} 比 $\sum_{i=1}^n c_i X_i$ 有效.

解答：例 0.12

题目：设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的样本，且 $\mathbb{E}(X) = \mu$ 及 $\text{VAR}(X) = \sigma^2$. 设常数 $c_1, c_2, \dots, c_n \geq 0$, 满足 $\sum_{i=1}^n c_i = 1, c_i \neq \frac{1}{n}$. 求证: \bar{X} 比 $\sum_{i=1}^n c_i X_i$ 有效.

解答:

- 根据样本的独立同分布的性质, 有

$$\mathbb{E}(\bar{X}) = \mu \quad \text{和} \quad \text{VAR}(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n}.$$

根据期望的性质, 有 $\mathbb{E}[\sum_{i=1}^n c_i X_i] = \mu$, 进一步有

$$\text{VAR}\left(\sum_{i=1}^n c_i X_i\right) = \sum_{i=1}^n c_i^2 \text{VAR}(X_i) = \sigma^2 \sum_{i=1}^n c_i^2 \geq \frac{\sigma^2}{n}.$$

这里利用不等式 $\sum_{i=1}^n c_i^2/n \geq (\sum_{i=1}^n c_i/n)^2$, 所以有 $\text{VAR}(\sum_{i=1}^n c_i X_i) \geq \text{VAR}(\bar{X})$.

Cramér-Rao 不等式

有效性希望 $\hat{\theta}$ 围绕参数真值 θ 的方差越小越好, 那么这个方差能小到什么程度? 有无下界? 若有的话, 如何去求? Cramér-Rao 不等式回答了这些问题.

定理 0.2 随机变量 X 的概率密度为 $f(X; \theta)$ 或概率质量函数为 $p(X; \theta)$, 令

$$\text{VAR}_0(\theta) = \frac{1}{n\mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial \ln f(X; \theta)}{\partial \theta}\right)^2\right]} \quad \text{或} \quad \text{VAR}_0(\theta) = \frac{1}{n\mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial \ln p(X; \theta)}{\partial \theta}\right)^2\right]}$$

对任意的无偏估计量 $\hat{\theta}$, 有

$$\text{VAR}(\hat{\theta}) \geq \text{VAR}_0(\theta),$$

称 $\text{VAR}_0(\theta)$ 为估计量 $\hat{\theta}$ 方差的下界. 当 $\text{VAR}(\hat{\theta}) = \text{VAR}_0(\theta)$ 时, 称 $\hat{\theta}$ 为达到方差下界的无偏估计量, 此时 $\hat{\theta}$ 为最有效估计量, 简称 **有效估计量**.

有效性：例 0.13

例 0.13 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的样本, 且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{X}{\theta}}, & X > 0; \\ 0, & X \leq 0. \end{cases}$$

证明: θ 的最大似然估计为有效估计量.

解答：例 0.13

题目：如上所述.

解答：

- 根据定理 0.2, 首先计算 $\sigma_0(\theta)$. 又

$$\ln f(X; \theta) = -\ln \theta - \frac{X}{\theta}, \quad \frac{\partial \ln f(X; \theta)}{\partial \theta} = -\frac{1}{\theta} + \frac{X}{\theta^2}$$

所以

$$\text{VAR}_0(\theta) = \frac{1}{n \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial \ln f(X; \theta)}{\partial \theta} \right)^2 \right]} = \frac{1}{n \mathbb{E} \left[\left(-\frac{1}{\theta} + \frac{X}{\theta^2} \right)^2 \right]} = \frac{1}{\frac{n}{\theta^4} \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2]} = \frac{\theta^2}{n}$$

- 计算对数似然函数, 有

$$\ln L(\theta) = -n \ln \theta - \frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^n X_i \Rightarrow \hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i,$$

进一步得到最大似然估计 $\hat{\theta}$ 的方差 $\text{VAR}(\hat{\theta}) = \frac{\theta^2}{n}$, 因此 θ 的最大似然估计为有效估计量.

一致性

定义 0.5 设 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 是 θ 一个估计量. 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 有 $\hat{\theta} \xrightarrow{P} \theta$ 成立, 即对任意 $\epsilon > 0$, 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left[|\hat{\theta} - \theta| > \epsilon \right] = 0,$$

则称 $\hat{\theta}$ 为 θ 的一致估计量.

Remarks: 一致性被认为是对估计的一个最基本要求.

- 如果一个估计量, 在样本不断增多时都不能有效的靠近被估参数的真实值, 那么这个估计是很值得怀疑的.
- 通常, 不满足一致性的估计都不予考虑.

一致性

在判断或计算参数的一致估计量时, 下述两个定理是很有用的.

定理 0.3 (一致性的充分条件) 设 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 是 θ 的一个估计量, 若满足以下两个条件:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[\hat{\theta}_n] = \theta, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \text{VAR}[\hat{\theta}_n] = 0$$

则 $\hat{\theta}$ 为 θ 的一致估计量.

定理 0.4 (一致性的函数不变性) 设 $\hat{\theta}_{n1}, \hat{\theta}_{n2}, \dots, \hat{\theta}_{nk}$ 分别是 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$ 的一致性估计, $G = g(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$ 是 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$ 的连续函数, 则

$$\hat{G} = g\left(\hat{\theta}_{n1}, \hat{\theta}_{n2}, \dots, \hat{\theta}_{nk}\right)$$

是 G 的一致性估计.

一致性：例 0.14

例 0.14 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的样本, 且总体 X 的概率密度函数为

$$f(X) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{X}{\theta}}, & X > 0; \\ 0, & X \leq 0. \end{cases}$$

证明: 样本均值 $\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 是 θ 的一致估计量.

解答：例 0.14

题目：设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的样本，且总体 X 的概率密度函数为

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{x}{\theta}}, & x > 0; \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

证明：样本均值 $\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 是 θ 的一致估计量。

解答：

- 根据定理 0.3，有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[\hat{\theta}] = \theta \quad \text{和} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \text{VAR}[\hat{\theta}] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\theta^2}{n} = 0.$$

证毕。

一致性：例 0.15

例 0.15 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是取自总体 $X \sim U(0, \theta)$ 的样本. 证明: 参数 θ 的最大似然估计是一致估计量.

解答：例 0.15

- 根据前面的例题，可知 θ 的最大似然估计是 $\hat{\theta} = x_{(n)}$. 设随机变量 $Z = x_{(n)}$, 则 Z 的分布函数为

$$F_Z(z) = P(Z \leq z) = P(x_{(n)} \leq z) = \prod_{i=1}^n P(x_i \leq z) = \begin{cases} 1, & z > \theta \\ (\frac{z}{\theta})^n, & z \in [0, \theta] \\ 0, & z < 0 \end{cases}$$

由此可得当 $z \in [0, \theta]$ 时随机变量 Z 的密度函数为 $f_Z(z) = nz^{n-1}/\theta^n$.

- 进一步有

$$\mathbb{E}[\hat{\theta}] = \int_0^\theta \frac{nz^n}{\theta^n} dz = \frac{n}{n+1}\theta \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[\hat{\theta}] = \theta$$

又 $\mathbb{E}[Z^2] = \int_0^\theta \frac{nz^{n+1}}{\theta^n} dz = \frac{n}{n+2}\theta^2$, 因此有

$$\text{VARI}[\hat{\theta}] = \mathbb{E}[Z^2] - (\mathbb{E}[Z])^2 = \frac{n}{n+2}\theta^2 - \left(\frac{n\theta}{n+1}\right)^2 = \frac{n}{(n+1)^2(n+2)}\theta^2 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \text{VARI}[\hat{\theta}] = 0$$

由此, $\hat{\theta}$ 是 θ 的有偏、但一致估计量.

补充习题：例 0.16

例 0.16 设 (X_1, X_2, \dots, X_n) 是取自总体 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 的一个样本，选适当的值 c ，使得

$$\hat{\sigma}^2 = c \sum_{i=1}^{n-1} (X_{i+1} - X_i)^2$$

是 σ^2 的无偏估计。

解答：例 0.16

题目：如上所述.

解答：

- 由于

$$E[\hat{\sigma}^2] = c E \left[\sum_{i=1}^{n-1} (X_{i+1} - X_i)^2 \right] = c \sum_{i=1}^{n-1} E[(X_{i+1} - X_i)^2].$$

下式逐项展开为

$$E[(X_{i+1} - X_i)^2] = E[(X_{i+1} - \mu) - (X_i - \mu)]^2$$

$$= E[(X_{i+1} - \mu)^2] + E[(X_i - \mu)^2] - 2 E[(X_{i+1} - \mu)(X_i - \mu)].$$

因为 X_i 独立同分布，故

$$E[(X_i - \mu)^2] = \sigma^2, \quad \text{cov}(X_{i+1}, X_i) = 0.$$

因此

$$E[(X_{i+1} - X_i)^2] = \sigma^2 + \sigma^2 - 0 = 2\sigma^2.$$

代回原式得

$$E[\hat{\sigma}^2] = c \sum_{i=1}^{n-1} 2\sigma^2 = c(n-1) 2\sigma^2.$$

题意要求 $\hat{\sigma}^2$ 为 σ^2 的无偏估计量，因此

$$E[\hat{\sigma}^2] = c(n-1) 2\sigma^2 = \sigma^2.$$

由此解得

$$c = \frac{1}{2(n-1)}.$$

• 也可通过如下方法求解：

其中 $X_{i+1} - X_i \sim N(0, 2\sigma^2)$ ，因此易得 $E[(X_{i+1} - X_i)^2] = \text{VAR}(X_{i+1} - X_i) = 2\sigma^2$.

由题意可知 $\hat{\sigma}^2 = c \sum_{i=1}^{n-1} (X_{i+1} - X_i)^2$ 是 σ^2 的无偏估计，即

$$E[\hat{\sigma}^2] = c(n-1) \cdot 2\sigma^2 = \sigma^2,$$

计算可得 $c = \frac{1}{2(n-1)}$.

补充习题：例 0.17

例 0.17 设总体 X 的分布函数为

$$F(x, \theta) = \begin{cases} 1 - e^{-x^2/\theta}, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

其中 θ 为未知的大于零的参数， (X_1, X_2, \dots, X_n) 是来自总体的简单随机样本。

(1) 求 $E[X]$, $E[X^2]$ 。

(2) 求 θ 的极大似然估计量。

(3) 是否存在常数 a , 使得对任意的 $\varepsilon > 0$, 都有

$$\lim P\{|\hat{\theta}_n - a| \geq \varepsilon\} = 0.$$

解答：例 0.17

题目：如上所述.

解答：

- (1) 先求出总体 X 的密度函数

$$f(x, \theta) = \begin{cases} \frac{2x}{\theta} e^{-x^2/\theta}, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

$$E[X] = \int_0^\infty \frac{2x^2}{\theta} e^{-x^2/\theta} dx = -xe^{-x^2/\theta} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-x^2/\theta} dx = \sqrt{\pi\theta},$$

$$E[X^2] = \int_0^\infty \frac{2x^3}{\theta} e^{-x^2/\theta} dx = -\frac{1}{\theta}x^2 e^{-x^2/\theta} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty te^{-t/\theta} dt = \theta.$$

- (2) 似然函数为 $L(\theta) = \prod_{i=1}^n f(x_i, \theta) = \begin{cases} \frac{2^n}{\theta^n} \prod_{i=1}^n x_i e^{-\frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^n x_i^2}, & x_i > 0, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases}$

当所有的观测值都大于零时，对数似然函数

$$\ln L(\theta) = n \ln 2 + \sum_{i=1}^n \ln x_i - n \ln \theta - \frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^n x_i^2,$$

对数似然方程

$$\frac{d \ln L(\theta)}{d\theta} = -\frac{n}{\theta} + \frac{1}{\theta^2} \sum_{i=1}^n x_i^2 = 0,$$

得 θ 的极大似然估计量为

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2.$$

- (3) 因为 X_1, X_2, \dots, X_n 独立同分布，显然对应的 $X_1^2, X_2^2, \dots, X_n^2$ 也独立同分布，又由 (1) 可知 $E[X_i^2] = \theta$ ，由辛钦大数定律，可得

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2 - E[X_i^2] \right| \geq \varepsilon\right) = 0,$$

由前两问可知， $\hat{\theta}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2$, $E[X_i^2] = \theta$ ，所以存在常数 $a = \theta$ 使得对任意的 $\varepsilon > 0$ ，都有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|\hat{\theta}_n - a| \geq \varepsilon) = 0.$$

补充习题：例 0.18

例 0.18 设 (X_1, X_2, \dots, X_n) 是来自正态总体 $N(\mu_0, \sigma^2)$ 的简单随机样本，其中 μ_0 已知， $\sigma^2 > 0$ 未知。 \bar{X} , S^2 为样本均值和样本方差。求(1)参数 σ^2 的极大似然估计 $\hat{\sigma}^2$; (2) 计算 $E[\hat{\sigma}^2]$ 和 $\text{VAR}(\hat{\sigma}^2)$ 。

解答：例 0.18

题目：如上所述.

解答：

• (1) 似然函数

$$\begin{aligned} L(\sigma^2) &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x_i - \mu_0)^2}{2\sigma^2}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}\sigma^n} \exp\left(\sum_{i=1}^n -\frac{(x_i - \mu_0)^2}{2\sigma^2}\right), \end{aligned}$$

对数似然函数为

$$\begin{aligned} \ln L &= -\frac{n}{2} \ln 2\pi - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu_0)^2}{2\sigma^2} \\ &= -\frac{n}{2} \ln 2\pi - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu_0)^2}{2}, \end{aligned}$$

直接对参数 σ^2 求导为

$$\frac{d \ln L}{d\sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu_0)^2}{2} = 0,$$

得 σ^2 的极大似然估计值

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu_0)^2}{n}, \quad \text{极大似然估计量 } \hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu_0)^2}{n}.$$

- Remarks: 和例 0.7 中对 σ 求导再平方的结果是一致的，同时也说明了最大似然估计的性质“不可变性”，即定理 0.1
- (2) 由随机变量数字特征的计算公式可得

$$E[\hat{\sigma}^2] = E\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu_0)^2\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E[(X_i - \mu_0)^2] = E[(X_1 - \mu_0)^2] = \text{VAR}(X_1) = \sigma^2,$$

(无偏估计)

$$\text{VAR}(\hat{\sigma}^2) = \text{VAR}\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu_0)^2\right] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \text{VAR}[(X_i - \mu_0)^2] = \frac{1}{n} \text{VAR}[(X_1 - \mu_0)^2].$$

由于 $X_1 - \mu_0 \sim N(0, \sigma^2)$, 由正态分布的性质可知

$$\frac{X_1 - \mu_0}{\sigma} \sim N(0, 1).$$

因此

$$\left(\frac{X_1 - \mu_0}{\sigma} \right)^2 \sim \chi^2(1),$$

由 χ^2 的性质可知

$$\text{VAR} \left[\left(\frac{X_1 - \mu_0}{\sigma} \right)^2 \right] = 2,$$

因此

$$\text{VAR}[(X_1 - \mu_0)^2] = \text{VAR} \left[\sigma^2 \left(\frac{X_1 - \mu_0}{\sigma} \right)^2 \right] = 2\sigma^4,$$

故

$$\text{VAR}(\hat{\sigma}^2) = \frac{2\sigma^4}{n}.$$

补充习题：例 0.19

例 0.19 设 x_1, x_2, x_3 服从均匀分布 $U(0, \theta)$ ，试证 $\frac{4}{3}x_{(3)}$ 及 $4x_{(1)}$ 都是 θ 的无偏估计，哪个更有效？

解答：例 0.19

题目：设 x_1, x_2, x_3 服从均匀分布 $U(0, \theta)$ ，试证 $\frac{4}{3}x_{(3)}$ 及 $4x_{(1)}$ 都是 θ 的无偏估计，哪个更有效？

解答：

- 由 $X \sim U(0, \theta)$ 可知 $x_{(1)}, x_{(3)}$ 的密度函数分别为

$$f_1(x) = 3 \cdot \left(\frac{\theta - x}{\theta}\right)^2 \cdot \frac{1}{\theta} = \frac{3}{\theta^3}(\theta - x)^2, \quad 0 < x < \theta,$$

$$f_3(x) = 3 \cdot \left(\frac{x}{\theta}\right)^2 \cdot \frac{1}{\theta} = \frac{3}{\theta^3}x^2, \quad 0 < x < \theta.$$

从而

$$E[x_{(1)}] = \frac{3}{\theta^3} \int_0^\theta x(\theta - x)^2 dx = \frac{\theta}{4}, \quad E[x_{(3)}] = \frac{3}{\theta^3} \int_0^\theta x^3 dx = \frac{3}{4}\theta.$$

故，由 $E[4x_{(1)}] = \theta$, $E[\frac{4}{3}x_{(3)}] = \theta$ 知两者均为 θ 的无偏估计。

- 又可算得

$$E[x_{(1)}^2] = \frac{1}{10}\theta^2, \quad E[x_{(3)}^2] = \frac{3}{5}\theta^2,$$

从而

$$\text{VAR}(4x_{(1)}) = \frac{3}{5}\theta^2, \quad \text{VAR}\left(\frac{4}{3}x_{(3)}\right) = \frac{\theta^2}{15}.$$

故 $\text{VAR}\left(\frac{4}{3}x_{(3)}\right) < \text{VAR}(4x_{(1)})$, 即 $\frac{4}{3}x_{(3)}$ 更有效。

补充习题：例 0.20

例 0.20 设总体 X 服从二项分布 $b(m, p)$, 其中 m, p 为未知参数, x_1, x_2, \dots, x_n 为 X 的一个样本, 求 m 与 p 的矩估计。

解答：例 0.20

题目：设总体 X 服从二项分布 $b(m, p)$ ，其中 m, p 为未知参数， x_1, x_2, \dots, x_n 为 X 的一个样本，求 m 与 p 的矩估计。

解答：

- 因为有两个未知参数，所以要用 1, 2 阶矩。由二项分布可知

$$E[X] = mp, \quad \text{VAR}(X) = mp(1 - p),$$

列矩方程组

$$\begin{cases} mp = \bar{x}, \\ mp(1 - p) = s^2, \end{cases}$$

两式相除，可轻松解出

$$\hat{p} = 1 - \frac{s^2}{\bar{x}}.$$

代入第一式，得

$$\hat{m} = \frac{\bar{x}}{\hat{p}},$$

因为 m 为正整数，故

$$\hat{m} = \left[\frac{\bar{x}^2}{\bar{x} - s^2} \right],$$

其中 [] 表示取整数。

补充习题：例 0.21

例 0.21 设总体概率函数如下， x_1, x_2, \dots, x_n 是样本，试求未知参数的最大似然估计：

$$(1) \quad p(x; \theta) = \frac{1}{2\theta} e^{-|x|/\theta}, \quad \theta > 0;$$

$$(2) \quad p(x; \theta) = 1, \quad \theta - \frac{1}{2} < x < \theta + \frac{1}{2};$$

$$(3) \quad p(x; \theta_1, \theta_2) = \frac{1}{\theta_2 - \theta_1}, \quad \theta_1 < x < \theta_2.$$

解答：例 0.21

题目：如上所述.

解答：

- (1) 似然函数为：

$$L(\theta) = \left(\frac{1}{2\theta} \right)^n e^{-\frac{\sum_{i=1}^n |x_i|}{\theta}},$$

对数似然函数为

$$\ln L(\theta) = -n \ln 2\theta - \frac{\sum_{i=1}^n |x_i|}{\theta}.$$

将之关于 θ 求导并令其为 0 得到似然方程

$$\frac{\partial \ln L(\theta)}{\partial \theta} = -\frac{n}{\theta} + \frac{\sum_{i=1}^n |x_i|}{\theta^2} = 0,$$

解之可得

$$\hat{\theta} = \frac{\sum_{i=1}^n |x_i|}{n}.$$

而

$$\left. \frac{\partial^2 \ln L(\theta)}{\partial \theta^2} \right|_{\hat{\theta}} = \left(\frac{n}{\theta^2} - \frac{2 \sum |x_i|}{\theta^3} \right)_{\hat{\theta}} = -\frac{n^3}{(\sum |x_i|)^2} < 0,$$

故 $\hat{\theta}$ 是 θ 的最大似然估计。

- (2) 此处的似然函数为

$$L(\theta) = I_{\{\theta - \frac{1}{2} < x_{(1)} < x_{(n)} < \theta + \frac{1}{2}\}}.$$

它只有两个取值 0 和 1, 为使得似然函数取 1, θ 的取值范围应是

$$x_{(n)} - \frac{1}{2} < \theta < x_{(1)} + \frac{1}{2},$$

因而 θ 的最大似然估计 $\hat{\theta}$ 可取

$$\left(x_{(n)} - \frac{1}{2}, x_{(1)} + \frac{1}{2} \right)$$

中的任意值。这说明 MLE 可能不止一个。

- (3) 由条件, 似然函数为

$$L(\theta) = \frac{1}{\theta_2 - \theta_1} I_{\{\theta_1 < x_{(1)} \leq x_{(n)} < \theta_2\}}.$$

要使 $L(\theta)$ 尽量大，首先应使指数函数为 1，这说明 $\theta_1 < x_{(1)} \leq x_{(n)} < \theta_2$ ；其次 $\theta_2 - \theta_1$ 要尽量小，综上可知 θ_1 的最大似然估计应为 $x_{(1)}$, θ_2 的最大似然估计应为 $x_{(n)}$ 。

点估计与机器学习

- 在统计学中, 点估计是用样本估计未知总体参数的一个具体数值.
- 在机器学习中, 训练模型其实就是在用数据估计模型参数的过程. 因此, 模型参数的训练结果, 就是参数的点估计值.
 - 线性回归 → 用最小二乘法估计参数 (最大似然估计的特例)
 - 逻辑回归 → 用最大似然估计参数 (点估计)
 - 神经网络 → 通过梯度下降最小化损失 (等价于某种似然下的点估计)

点估计与机器学习：线性回归的最大似然点估计

假设我们有一个二分类问题，样本数据如下表

样本编号	特征 x_i	标签 y_i
1	2.0	1
2	1.0	0
3	3.0	1
4	0.5	0

考虑简单线性回归模型

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i , \quad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) , \quad i = 1, 2, \dots, n$$

其中, β_0 和 β_1 是待估参数, ε_i 为独立同分布的正态误差.

Step 1: 构造似然函数

根据正态分布的概率密度函数，样本的联合似然函数为

$$L(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2}{2\sigma^2}\right)$$

对数似然函数为

$$\ell(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2$$

Step 2: 最大似然估计

最大化对数似然函数关于 β_0, β_1 的部分，可以得到

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \arg \min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 \quad (1)$$

这正是 **最小二乘法** 求解的目标函数.

Step 3: 解的闭式表达

令样本均值为

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$

则最大似然估计（点估计）为

$$\begin{cases} \hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \\ \hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} \end{cases}$$

因此， $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ 就是线性回归模型参数的最大似然点估计.

点估计与机器学习：逻辑回归的最大似然点估计

假设我们有一个二分类问题，样本数据如下表

样本编号	特征 x_i	标签 y_i
1	2.0	1
2	1.0	0
3	3.0	1
4	0.5	0

采用如下逻辑回归模型进行二分类

$$P(y = 1 \mid x; w, b) = \sigma(wx + b) = \frac{1}{1 + e^{-(wx+b)}}$$

Step 1: 构造似然函数

假设样本独立同分布，则联合似然函数为

$$L(w, b) = \prod_{i=1}^n [\sigma(wx_i + b)]^{y_i} [1 - \sigma(wx_i + b)]^{1-y_i}$$

对数似然函数为：

$$\ell(w, b) = \sum_{i=1}^n \left[y_i \ln \sigma(wx_i + b) + (1 - y_i) \ln(1 - \sigma(wx_i + b)) \right]$$

Step 2: 最大似然估计

最大化对数似然函数得到参数的点估计

$$(\hat{w}, \hat{b}) = \arg \max_{w,b} \ell(w, b)$$

其偏导数为

$$\begin{cases} \frac{\partial \ell}{\partial w} = \sum_{i=1}^n (y_i - \sigma(wx_i + b))x_i \\ \frac{\partial \ell}{\partial b} = \sum_{i=1}^n (y_i - \sigma(wx_i + b)) \end{cases}$$

通过梯度上升法（或等价的最小化负对数似然）可以求得最优参数，例如

$$\hat{w} = 1.52, \quad \hat{b} = -2.01$$

该 (\hat{w}, \hat{b}) 即为逻辑回归模型参数的最大似然点估计.

点估计与机器学习：神经网络中的点估计示例

考虑一个单隐藏层神经网络的回归问题

$$\hat{y}_i = f(x_i; \Theta), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

其中，

- $x_i \in \mathbb{R}^d$ 为输入特征
- $\hat{y}_i \in \mathbb{R}$ 为预测输出
- $\Theta = \{W_1, b_1, W_2, b_2\}$ 为网络参数，包括输入层到隐藏层的权重 W_1 和偏置 b_1 ，以及隐藏层到输出层的权重 W_2 和偏置 b_2
- 激活函数为 $\sigma(\cdot)$ ，隐藏层输出为 $h_i = \sigma(W_1 x_i + b_1)$ ，输出层为 $\hat{y}_i = W_2 h_i + b_2$

Step 1: 构造似然函数

假设输出服从独立同分布的正态分布

$$y_i \sim \mathcal{N}(\hat{y}_i, \sigma^2)$$

则样本的联合似然函数为

$$L(\Theta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{2\sigma^2}\right)$$

对数似然函数为

$$\ell(\Theta, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Step 2: 最大似然估计 (点估计)

最大化对数似然函数关于 Θ 的部分, 相当于最小化平方误差损失

$$\hat{\Theta} = \arg \min_{\Theta} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \Theta))^2$$

通过梯度下降法或其变种 (如 Adam) 进行迭代优化, 即可得到参数的最大似然点估计 $\hat{\Theta}$.

例如, 在训练一个单隐藏层 5 个神经元的网络后, 得到

$$\hat{W}_1 = \begin{bmatrix} 0.12 & -0.34 \\ 0.45 & 0.27 \\ \vdots & \vdots \end{bmatrix}, \quad \hat{b}_1 = \begin{bmatrix} 0.01 \\ -0.05 \\ \vdots \end{bmatrix}, \quad \hat{W}_2, \hat{b}_2, \dots$$

这些 $\hat{\Theta}$ 就是神经网络参数的点估计.