第19章 贝叶斯线性回归 (Bayesian Linear Regression)

1. 背景 (Background)

在之前的章节中，我们已经学习了**线性回归 (Linear Regression)**。给定数据集 $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$，线性回归的模型假设为：

$$f(x) = w^T x \tag{1}$$

$$y = f(x) + \epsilon = w^T x + \epsilon \tag{2}$$

其中 ϵ 是噪声。

对于参数 w 的估计，主要有两个流派的观点：**频率派 (Frequentist)** 和 **贝叶斯派 (Bayesian)**。

1.1 频率派视角 (Frequentist Perspective)

频率派认为参数 w 是一个**未知的常量 (Unknown Constant)**。我们的目标是根据数据构建一个优化问题，求出 w 的**点估计 (Point Estimation)**。

- **MLE (Maximum Likelihood Estimation)**:
  如果假设噪声 ϵ 服从高斯分布 (Gaussian Distribution)，即 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$，那么最大似然估计 (MLE) 等价于最小二乘估计 (LSE)。

$$w_{MLE} = \arg\max_w P(Data|w) \tag{3}$$

- **Regularized LSE**:
  为了防止过拟合，我们要加上正则项 (Regularization)。
  - **Lasso**: L1 正则化
  - **Ridge**: L2 正则化

1.2 贝叶斯视角 (Bayesian Perspective)

贝叶斯派认为参数 w 是一个**随机变量 (Random Variable)**。我们不直接求某一个具体的值，而是求 w 的**概率分布**，即后验概率 $P(w|Data)$。

根据贝叶斯定理 (Bayes' Theorem)：

$$P(w|Data) = \frac{P(Data|w)P(w)}{P(Data)} \propto P(Data|w) \cdot P(w) \tag{4}$$

- **Posterior (后验)**: $P(w|Data)$
- **Likelihood (似然)**: $P(Data|w)$
- **Prior (先验)**: $P(w)$

1.3 两个流派的联系 (Connection)

贝叶斯派中的 **MAP (Maximum A Posteriori)** 估计旨在找到后验概率最大的 w：

$$w_{MAP} = \arg\max_w P(w|Data) = \arg\max_w P(Data|w) \cdot P(w) \tag{5}$$

这就建立了与频率派正则化方法的联系：

1. **Ridge Regression (岭回归)**:
   如果先验 $P(w)$ 服从**高斯分布 (Gaussian Distribution)** $w \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_0)$，并且噪声也是高斯的，那么 w_{MAP} 等价于 Ridge Regression。
2. **Lasso Regression**:
   如果先验 $P(w)$ 服从**拉普拉斯分布 (Laplace Distribution)**，那么 w_{MAP} 等价于 Lasso Regression。

总结来说，**Regularized LSE** 可以看作是 **MAP** 在特定先验假设下的特例。而贝叶斯线性回归不仅关注点估计 (MAP)，更关注完整的后验分布 $P(w|Data)$ 以及基于此的预测分布。

2. 数学推导 (Mathematical Formulation & Inference)

我们将问题具体化为数据、模型和推断目标，并推导后验分布。

2.1 数据与模型 (Data & Model)

数据 (Data):
假设我们有 N 个观测样本 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$，其中 $x_i \in \mathbb{R}^p$，$y_i \in \mathbb{R}$。
我们可以将其表示为矩阵形式：

- **输入矩阵** X: $N \times p$ 维，每一行是一个样本。

$$X = (x_1, x_2, \ldots, x_N)^T = \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & \cdots & x_{Np} \end{pmatrix}_{N \times p} \tag{6}$$

- **输出向量** Y: $N \times 1$ 维。

$$Y = (y_1, y_2, \ldots, y_N)^T_{N \times 1} \tag{7}$$

模型 (Model):
假设数据生成过程为：

$$\begin{cases} f(x) = w^T x \\ y = f(x) + \epsilon = w^T x + \epsilon \\ \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \end{cases} \tag{8}$$

其中 x, y, ϵ 都是随机变量 (Random Variables)，噪声 ϵ 服从均值为 0、方差为 σ^2 的高斯分布。

2.2 贝叶斯推断框架 (Bayesian Inference Framework)

在贝叶斯方法中，我们的核心任务有两个：

1. **Inference (推断)**: 求参数 w 的后验分布 $P(w|Data)$。
2. **Prediction (预测)**: 给定新样本 x^*，求预测值 y^* 的分布 $P(y^*|x^*, Data)$。

根据贝叶斯定理：

$$P(w|Data) = P(w|X, Y) = \frac{P(Y|X, w) \cdot P(w)}{P(Y|X)} \tag{9}$$

其中分母 $P(Y|X) = \int P(Y|X, w) \cdot P(w) dw$ 是与 w 无关的归一化常数，因此我们通常写成：

$$P(w|Data) \propto P(Y|X, w) \cdot P(w) \tag{10}$$

2.3 似然与先验 (Likelihood & Prior)

似然函数 (Likelihood):
$P(Y|X, w)$ 表示在参数 w 固定的情况下，观测到数据 Y 的概率。由于样本独立同分布 (i.i.d.):

$$P(Y|X, w) = \prod_{i=1}^{N} P(y_i|w, x_i) = \prod_{i=1}^{N} \mathcal{N}(y_i|w^T x_i, \sigma^2) \tag{11}$$

这就构成了一个多维高斯分布 $\mathcal{N}(Y|Xw, \sigma^2 I)$。

先验分布 (Prior):
我们要为 w 选择一个先验分布 $P(w)$。为了计算方便，我们选择**共轭先验 (Conjugate Prior)**。
对于高斯似然函数，其共轭先验也是**高斯分布**。

假设 w 服从零均值高斯分布：

$$P(w) = \mathcal{N}(w|0, \Sigma_p) \tag{12}$$

(注：板书中使用 Σ_p 表示先验协方差矩阵，通常可以设为 $\tau^2 I$)。

共轭性 (Conjugacy):
由于 **Gaussian** $\times$ **Gaussian = Gaussian**，所以后验分布 $P(w|Data)$ 必然也是一个高斯分布：

$$\underbrace{P(w|Data)}_{\mathcal{N}(\mu_w, \Sigma_w)} \propto \underbrace{\mathcal{N}(Y|Xw, \sigma^2 I)}_{Likelihood} \cdot \underbrace{\mathcal{N}(w|0, \Sigma_p)}_{Prior} \tag{13}$$

2.4 后验分布推导 (Posterior Derivation)

我们的目标是计算 $p(w|Y, X)$。
由于 Likelihood 和 Prior 都是高斯分布，根据高斯分布的共轭性质，Posterior 也必然是一个**高斯分布**。我们的任务就是求出这个后验高斯分布的**均值** μ_N 和 **协方差矩阵** Σ_N。

2.4.1 展开指数项

首先写出 Likelihood 和 Prior 的表达式（忽略常数项，只保留与 w 有关的指数部分）：

2.4 后验分布推导 (Posterior Derivation)

我们的目标是计算 $P(w|Data)$：

$$P(w|Data) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(Y - Xw)^T(Y - Xw)\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2}w^T\Sigma_p^{-1}w\right\} \tag{14}$$

第一步：展开 Likelihood 的指数项

$$\begin{aligned}(Y - Xw)^T(Y - Xw) &= (Y^T - w^T X^T)(Y - Xw) \\ &= Y^T Y - Y^T Xw - w^T X^T Y + w^T X^T Xw \\ &= Y^T Y - 2Y^T Xw + w^T X^T Xw\end{aligned} \tag{15}$$

(注意：$Y^T Xw$ 是标量，所以等于其转置 $w^T X^T Y$)

第二步：合并 Likelihood 和 Prior
忽略与 w 无关的常数项（如 $Y^T Y$），我们将所有含 w 的项合并：

$$
\begin{aligned}
\ln P(w|Data) &\propto -\frac{1}{2\sigma^2}(w^T X^T X w - 2Y^T X w) - \frac{1}{2} w^T \Sigma_p^{-1} w \\
&= -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sigma^2} w^T X^T X w - \frac{2}{\sigma^2} Y^T X w + w^T \Sigma_p^{-1} w\right] \\
&= -\frac{1}{2}\left[w^T \left(\sigma^{-2} X^T X + \Sigma_p^{-1}\right) w - 2\sigma^{-2} Y^T X w\right]
\end{aligned}
\tag{16}
$$

第三步：配方 (Completing the Square)
我们要凑成标准高斯分布的形式 $\mathcal{N}(\mu_w, \Sigma_w)$：

$$
-\frac{1}{2}(w-\mu_w)^T \Sigma_w^{-1} (w-\mu_w) = -\frac{1}{2}(w^T \Sigma_w^{-1} w - 2\mu_w^T \Sigma_w^{-1} w + \dots) \tag{17}
$$

对比二次项系数：
令 $A = \Sigma_w^{-1}$ (精度矩阵 Precision Matrix)，则有：

$$
A = \Sigma_w^{-1} = \sigma^{-2} X^T X + \Sigma_p^{-1} \tag{18}
$$

对比一次项系数：

$$
\mu_w^T \Sigma_w^{-1} = \sigma^{-2} Y^T X \implies A\mu_w = \sigma^{-2} X^T Y \tag{19}
$$

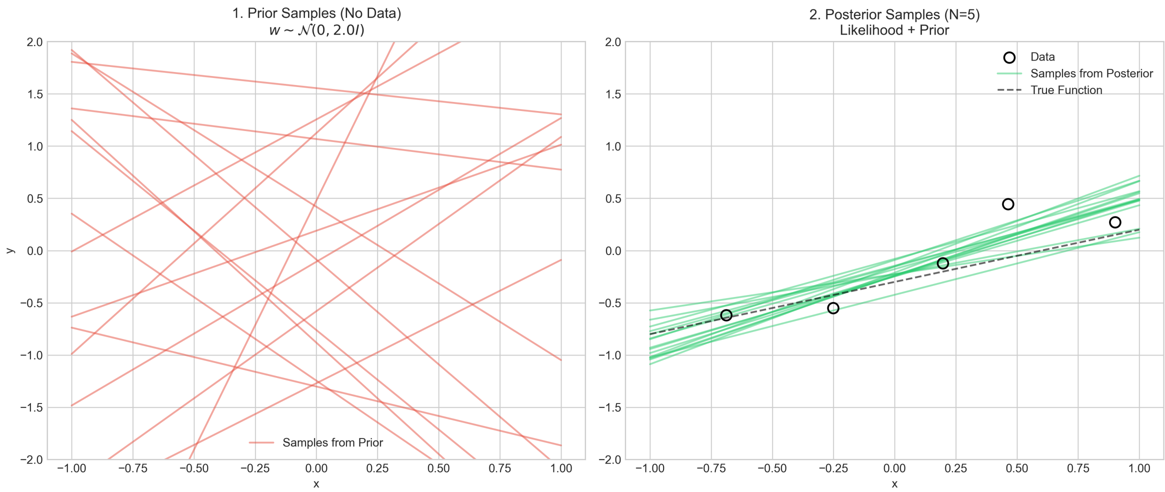
由此解得均值 μ_w：

$$
\mu_w = \sigma^{-2} A^{-1} X^T Y \tag{20}
$$

第四步：最终结果
后验分布 $P(w|Data) = \mathcal{N}(\mu_w, \Sigma_w)$，其中：

$$
\begin{cases}
\Sigma_w = A^{-1} = (\sigma^{-2} X^T X + \Sigma_p^{-1})^{-1} \\
\mu_w = \sigma^{-2} A^{-1} X^T Y
\end{cases}
\tag{21}
$$

> **直观理解：**
>
> - A (精度矩阵) 代表了我们对参数估计的信心。它由两部分组成：数据提供的精度 $\sigma^{-2} X^T X$ 和先验提供的精度 Σ_p^{-1}。
> - $A\mu_w$ 可以看作是加权和。



3. 预测分布 (Predictive Distribution)

根据板书内容，我们的目标是：给定新输入 x^*，求对应输出 y^* 的概率分布 $P(y^*|Data, x^*)$。

这就涉及两个步骤：

1. 求无噪声函数值 $f(x^*)$ 的分布。
2. 加上观测噪声 ϵ 得到 y^* 的分布。

3.1 步骤一：无噪声预测 (Noise-free Prediction)

首先考虑潜在函数值：

$$f(x^*) = (x^*)^T w \tag{22}$$

由于 w 服从后验高斯分布 $w \sim \mathcal{N}(\mu_w, \Sigma_w)$，且 $f(x^*)$ 是 w 的线性变换，因此 $f(x^*)$ 也服从高斯分布：

- **均值**: $\mathbb{E}[f(x^*)] = \mathbb{E}[(x^*)^T w] = (x^*)^T \mathbb{E}[w] = (x^*)^T \mu_w$
- **方差**: $\mathrm{Var}[f(x^*)] = \mathrm{Var}[(x^*)^T w] = (x^*)^T \mathrm{Var}[w] x^* = (x^*)^T \Sigma_w x^*$

所以：

$$P(f(x^*)|Data, x^*) = \mathcal{N}((x^*)^T \mu_w, \quad (x^*)^T \Sigma_w x^*) \tag{23}$$

3.2 步骤二：有噪声预测 (Noisy Observation)

真实的观测值 y^* 包含噪声 ϵ：

$$y^* = f(x^*) + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \tag{24}$$

由于 $f(x^*)$ 和 ϵ 是独立的两个高斯随机变量，它们的和也是高斯分布。
最终的预测分布 $P(y^*|Data, x^*)$ 也就是在 $f(x^*)$ 的基础上增加了噪声的方差：

- **均值**: $(x^*)^T \mu_w + 0 = (x^*)^T \mu_w$
- **方差**: $(x^*)^T \Sigma_w x^* + \sigma^2$

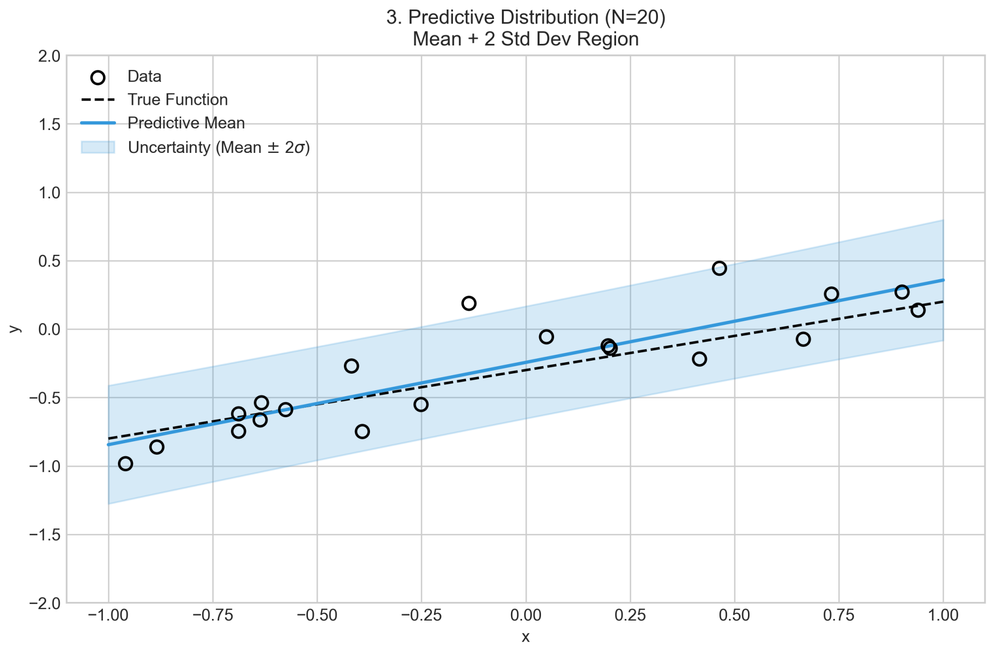
3.3 结果总结

$$P(y^*|Data, x^*) = \mathcal{N}(y^* \mid (x^*)^T \mu_w, \quad \underbrace{(x^*)^T \Sigma_w x^*}_{\text{Epistemic}} + \underbrace{\sigma^2}_{\text{Aleatoric}}) \tag{25}$$

这个方差项由两部分组成（如之前所述）：

1. σ^2 **(Aleatoric Uncertainty)**:
   数据本身的噪声。这是由于即使我们确切知道真实的 w，数据本身也带有噪声 ϵ。这部分不确定性是**无法通过增加数据消除的**。
2. $(x^*)^T \Sigma_w x^*$ **(Epistemic Uncertainty)**:
   模型参数的不确定性。这反映了我们在多大程度上不确定 w 的值。
   - 随着数据量 N 的增加，Σ_w 会减小（协方差矩阵变"窄"），这一项也会减小。
   - 在训练数据密集的区域，x^* 附近的这一项会比较小（置信度高）。
   - 在远离训练数据的区域，x^* 会导致这一项变大（预测的不确定性增加）。

> **可视化直觉**：
> 如果我们画出贝叶斯线性回归的预测图，你会看到一条均值曲线，以及周围的置信区间（Confidence Interval）。这个置信区间在数据点附近会收窄，而在没有数据的区域会变宽（像喇叭口一样）。这正是 $(x^*)^T \Sigma_w x^*$ 这一项在起作用。


3. Predictive Distribution (N=20)
Mean + 2 Std Dev Region
Data
True Function
Predictive Mean
Uncertainty (Mean ± 2σ)
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
y
−1.00
−0.75
−0.50
−0.25
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00
x