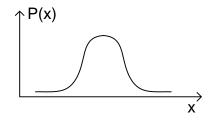
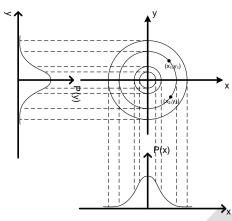
Multivariate Gaussian distribution

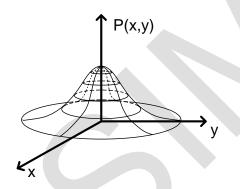
Univariate Gaussian(一維高斯)



Multivariate Gaussian(多維高斯)

以二維為例:





lesson6 筆記中有詳細說明

若變數彼此不獨立,就不會有P(x)P(y) = P(r)的關係,那麼就不會是長短軸為x,y軸的橢圓的圖形

先定義一下等下用的變數

一樣假設為二維,X,Y為一個二維分布Z映射到一維的分布X,Y

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mu_x \\ \mu_y \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \sigma_x^2 & \cos_{xy} \\ \cos_{xy} & \sigma_y^2 \end{bmatrix}$$

則分布會變成
$$P(\mu, \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^k} |\Sigma|^{0.5}} e^{\frac{-1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)}$$

note: $(x-\mu)^T \Sigma (x-\mu)$ 在直角坐標(變數彼此獨立)中,可視為歐式距離(Euclidean distance),而若變數彼此不獨立, $(x-\mu)^T \Sigma (x-\mu)$ 稱為 Mahalanobis distance(馬氏距離)

簡介馬氏距離:

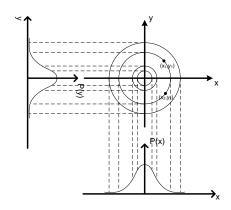
當變數彼此間不獨立時,變數彼此間會存在某種關係,這時用歐式距離就會顯得比較不精確,因為歐式距離僅考量每個變數的差,馬氏距離會將其相關性考量進去,舉個比較極端的例子來說,如果我們想要判斷兩個成年人像不像,我們用三個標準來評量,一個是性別,一個是有沒有喉結,一個是身高,你應該會覺得這個標準很奇怪,因為其實這兩個標準是近乎完全相關的,如果我們看到一個男生和一個女生,用歐式空間來判斷的話,同樣的因素(男 or 女)會被我們考慮兩次,如此會顯得身高的差距比較沒有那麼重要,但是馬氏距離會將這兩個標準視為同一種標準,就不會有上面講的情況。以此類推,再舉個比較沒有那麼極端的例子,應該就比較能了解了,一樣是判斷兩個人像不像,三個標準分別是身高、體重、髮量,雖然身高和體重並不是完全相關,但是還是有一定的正相關,身高較高的人通常會較身高較矮的人重,這時將身高體重視為兩個標準(互相獨立,歐式距離)來看就有失公允,雖然這身高體重也沒辦法視為一個標準來看,但是可想成可視為 1~2 之間個標準來看。

如果用直角坐標想這件事情,兩個完全相關的維度就好像是我們將y軸定義為x軸,我們重複算了兩次x軸

假設 x 軸和 y 軸完全相關,我們想知道 ab 兩點的距離,如果我們將兩個維度都視為獨立,計算出來的距離為 $\sqrt{(5-3)^2+(5-3)^2}=2\sqrt{2}$,但是其實這是兩個一樣的維度,距離應該是 2,只看其中一個軸就好

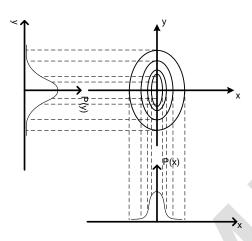
case1: 若兩變數分布一樣,就好像是兩個高斯函數一樣, $\Sigma = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

兩變數合成的分布為



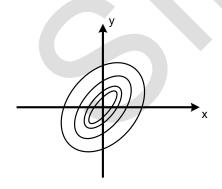
case2: 若兩變數還是獨立,但是 variance 不同,
$$\Sigma = D = \begin{bmatrix} \sigma_x^2 & 0 \\ 0 & \sigma_y^2 \end{bmatrix}$$

兩變數合成之分布為



case3: 若兩變數不獨立,
$$\Sigma = symmetric = \begin{bmatrix} \sigma_x^2 & cov_{xy} \\ cov_{xy} & \sigma_y^2 \end{bmatrix}$$

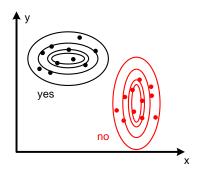
兩變數合成之分布就不會是方正的,可能會有旋轉,平移...



note: 還記得 naïve Bayes classifier 吧!如果是使用 naïve Bayes classifier 計算各事件機率,因為我們會針對不同的 outcome 去分析,會將各變數視為獨立,計算其 posterior,所以各個 outcome 我們都會得到一群 contour(可想成等高線或是山丘,也就是上面那張圖),這也是 naïve Bayes classifier 缺陷所

在

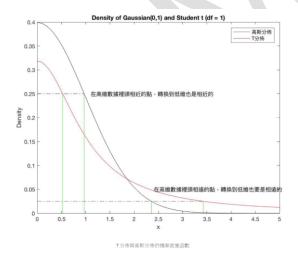
e.g. 以打網球那個例子為例,得出來的分布可能會是這樣,稍微注意的是因為我們將所有變數視為獨立,故 contour 只會是方正的,不會有上面那張圖一樣是斜的(各變數有相關)



student-t distribution

講之前就要先提一下 z test,z test 是在已經知道總體的 mean 及 variance 時,我們假設總體的分布為常態分布,再看先在發生的 outcome 在此分布下發生更極端事件的機率,但是通常我們在取樣時無法知道總體的分布為何,也不知道總體的 mean 及 variance,所以沒辦法假設其分布,student-t distribution 就是適用在這樣的情形,尤其適用在小樣本取樣時,student-t distribution 簡單來說就是較不確定、能容許更多例外版的 Gaussian distribution,會用小樣本中的 mean, variance 得到其分布,其分布外觀較 Gaussian distribution"寬",詳細的分布公式這裡就不給,有概念就好。

如果直接用 z test 做小樣本分析,誤差會很大,可以想成我們想要知道全台灣人的身高分布,但我們只取 10 個人來做為我們的總體分布,這樣做出來的分布離實際上的分布一定有很大的差距,但若是 student-t distribution,若只取 10 個人,我不會太輕易以這 10 個人的數據做為絕對依據,會給予一定的"不確定"空間,所以這也是為何 student-t distribution 為何適用於小樣本的原因。



圖片來源:https://medium.com/d-d-mag/淺談兩種降維方法-pca-與-t-sne-d4254916925b

黑線是 Gaussian distribution,越寬的分布是自由度越低(這裡先不用管自由度是啥,只要知道 student-t distribution 比 Gaussian distribution 還寬就好)的 student-t distribution

T-SNE(補充)

T-SNE 是一種降維的方法,將一筆資料由較高的維度降到較低的維度,怎麼降維的就省略不談,T-SNE 用較精準的 Gaussian distribution 表示,但是在降維之後必定會遺失某些資訊,故使用 student-t distribution 來表示。詳細的內容可參考

https://medium.com/d-d-mag/淺談兩種降維方法-pca-與-t-sne-d4254916925b

Affine transformation(仿射轉換)

若將一空間線性轉換為另一空間,稱為線性轉換(linear transformation),旋轉、放大縮小是線性轉換,而仿射轉換增加"平移"這一個功能,原本線性轉換可表示為T(x) = Ax,而仿射轉換可表示為

$$T(\vec{x}) = A\vec{x} + \vec{b}$$

而在這裡我們想看看 Multivariate Gaussian 是不是也擁有 Affine 的性質,也就是

$$x \sim N(\mu, \sigma^2) \implies f(x) = Ax + b \sim N(A\mu + b, ACA^T)$$

在這裡我們先看 mean 和 variance 會有怎樣的轉變,詳細證明見下方提供的網址

mean

$$E(x) = \mu = \int xP(x)dx$$

$$E(Ax+b) = \int (Ax+b)P(x)dx = \int AxP(x)dx + \int bP(x)dx = A\int xP(x)dx + b\int P(x)dx$$

$$= AE(x) + b \cdot 1 = A\mu + b$$

variance

$$cov(x) = \Sigma = E\{(x - \mu)(x - \mu)^{T}\}\$$

$$cov(Ax + b) = E\{(Ax - b - \mu)(Ax - b - \mu)^{T}\}\$$

$$= E\{(Ax - b - (A\mu - b))(Ax - b - (A\mu - b))^{T}\}\$$

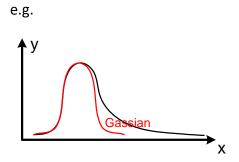
$$= E\{(A(x - \mu)(A(x - \mu))^{T})\$$

$$= E\{(A(x - \mu)(x - \mu)^{T}A^{T}\}\$$

$$= AE\{(x - \mu)(x - \mu)^{T}A^{T}\}\$$

Moment generating function(MGF) (補充)

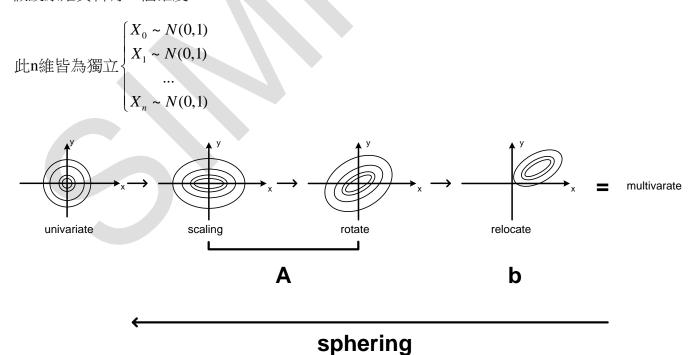
其實在 lesson3 中已經有提到此概念,是不知道為何上課上到這還要再拿出來講一遍 我們使用 mean 及 variance 其實還沒辦法完整的描述一個分布,我們在此之前大都是用最普遍 的 Gaussian distribution 做為假設但是常常分布會有偏斜或是 peak 較尖...,這時候我們通常都要使用 第三、第四階動差函數才能描述。



以 univariate Gaussian 經由 Affine transformation 來

轉為 Multivariate Gaussian

假設原始資料有 n 個維度



故所有的 multivariate Gaussian distribution 都可藉由 univariate Gaussian distribution 經由仿射轉換得

Linear transformation of Gaussian distribution

要證明有線性轉換須證明兩件事

1.
$$\forall x \in X, \forall y \in Y$$
$$T(x+y) = T(x) + T(y)$$

2.
$$\forall x \in X, \forall y \in Y, a \in R$$

$$T(ax) = aT(x) \Rightarrow T(ax_1 + bx_2 + ...) = aT(x_1) + bT(x_2) + ...$$

第一個條件

另一Y分布為兩分布 X_1, X_2 的合,即

$$Y = X_1 + X_2$$
 $X_1 \sim N(\mu_1, \sigma_1^2), X_2 \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$

$$E(X) = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{bmatrix}$$

則取
$$A = [1 \ 1], b = [0]$$

則根據 affine property

$$AX + b = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} + 0 = X_1 + X_2 \sim N(\mu_1 + \mu_2, A\Sigma A^T)$$

$$A\mu + b = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix} + 0 = \mu_1 + \mu_2$$

$$A\Sigma A^{T} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{1}^{2} & 0 \\ 0 & \sigma_{2}^{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \sigma_{1}^{2} + \sigma_{2}^{2}$$

$$\Rightarrow Y \sim N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$

衍伸:

$$Y = X_1 + X_2 + ... + X_k = \sum_{i=1}^{k} X_i$$

$$\Rightarrow Y \sim N(\sum_{i=1}^{k} \mu_i, \sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2)$$

第二個條件

$$Y = aX_1 + bX_2 + cX_3 + \dots$$

則
$$Y \sim N(a\mu_1 + b\mu_2 + c\mu_3 + ..., a\sigma_1^2 + b\sigma_2^2 + c\sigma_3^2 + ...)$$

推廣到矩陣仍適用

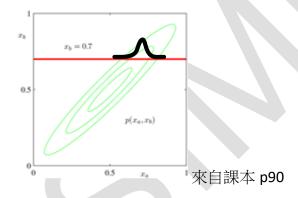
 X_i : multivariate Gaussian distribution(前面的推論的 X 都是 univariate)

$$E(Y) = \sum_{i=1}^{k} B_i \mu_i, Var(Y) = \sum_{i=1}^{k} B_i \Sigma_i B_i^T$$
$$Y \sim N(\sum_{i=1}^{k} B_i \mu_i, \sum_{i=1}^{k} B_i \Sigma_i B_i^T)$$

Conditional Gaussian distribution

當一分布有許多變量時(multivariate Gaussian distribution),當我們已確定某變量時,其餘變量所形成的分布仍為高斯分布

用圖來表示就像這樣

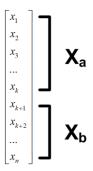


此圖有 x_a, x_b 兩個變量,左圖是兩個變量形成的分布。當我們確定 $x_b = 0.7$ 時, $P(x_a \mid x_b = 0.7)$ 的分布如右圖,仍為一個高斯分布。

這裡在課本的 p85-87 之間,推導部分我看不懂為何經過條件機率後仍為高斯分布,但是我可以 解釋 mean 和 variance 為何是那些值,會有些複雜。

Derivation

假設 X 中有 X_a , X_b 兩個變量集合



假設 Xb 為定值的向量

原始 multivariate Gaussian distribution 的式子為 $P(\mu,\Sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^k |\Sigma|^{0.5}} e^{\frac{-1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)}$,我們只專注

於 exponential 的指數,因為前面的係數只是為了讓機率加總為 1 而已,假設 X 為我們假設的那樣,指數變為

$$\begin{split} &\frac{-1}{2}(X-\mu)^{T}\Sigma^{-1}(X-\mu) = \frac{-1}{2}(\begin{bmatrix} X_{a} \\ X_{b} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mu_{a} \\ \mu_{b} \end{bmatrix})^{T}\Sigma^{-1}(\begin{bmatrix} X_{a} \\ X_{b} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mu_{a} \\ \mu_{b} \end{bmatrix}) = \frac{-1}{2}\begin{bmatrix} X_{a} - \mu_{a} \\ X_{b} - \mu_{b} \end{bmatrix}^{T}\begin{bmatrix} \Lambda_{aa} & \Lambda_{ab} \\ \Lambda_{ba} & \Lambda_{bb} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} X_{a} - \mu_{a} \\ X_{b} - \mu_{b} \end{bmatrix} \\ &= \frac{-1}{2}\begin{bmatrix} X_{a} - \mu_{a} & X_{b} - \mu_{b} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Lambda_{aa} & \Lambda_{ab} \\ \Lambda_{ba} & \Lambda_{bb} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} X_{a} - \mu_{a} \\ X_{b} - \mu_{b} \end{bmatrix} = \frac{-1}{2}\begin{bmatrix} X_{a} - \mu_{a} & X_{b} - \mu_{b} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Lambda_{aa}(X_{a} - \mu_{a}) + \Lambda_{ab}(X_{b} - \mu_{b}) \\ \Lambda_{ba}(X_{a} - \mu_{a}) + \Lambda_{bb}(X_{b} - \mu_{b}) \end{bmatrix} \\ &= \frac{-1}{2}\Lambda_{aa}(X_{a} - \mu_{a})^{2} + \frac{-1}{2}\Lambda_{ab}(X_{a} - \mu_{a})(X_{b} - \mu_{b}) + \frac{-1}{2}\Lambda_{ba}(X_{b} - \mu_{b})(X_{b} - \mu_{b}) + \frac{-1}{2}\Lambda_{bb}(X_{b} - \mu_{b})(X_{b} - \mu_{b}) \end{split}$$

而由於 X_b 是一個定值的向量,現在我們的變量只有 X_a 一個,假設我們現在已經知道經由條件機率後的分布仍為 multivariate Gaussian distribution,我們就要試著將

$$\frac{-1}{2}(X_a - \mu_a)^T \Lambda_{aa}(X_a - \mu_a) + \frac{-1}{2}(X_a - \mu_a)^T \Lambda_{ab}(X_b - \mu_b) + \frac{-1}{2}(X_b - \mu_b)^T \Lambda_{ba}(X_a - \mu_a) + \frac{-1}{2}(X_b - \mu_b)^T \Lambda_{bb}(X_b - \mu_b)$$

化為 $\frac{-1}{2}(X-\mu)^T\Sigma_{X_a|X_b}^{-1}(X-\mu)$ 形式,而在這個式子展開後會有 quadratic 項、linear 項,展開後的形式為

$$\frac{-1}{2}X^{T}\Sigma_{X_{a}|X_{b}}^{-1}X + \frac{1}{2}X^{T}\Sigma_{X_{a}|X_{b}}^{-1}\mu + \frac{1}{2}\mu^{T}\Sigma_{X_{a}|X_{b}}^{-1}X + \frac{-1}{2}\mu^{T}\Sigma_{X_{a}|X_{b}}^{-1}\mu = \frac{-1}{2}X^{T}\Sigma_{X_{a}|X_{b}}^{-1}X + X^{T}\Sigma_{X_{a}|X_{b}}^{-1}\mu + const.$$

中間的兩項 $(\frac{1}{2}X^{T}\Sigma_{12}^{-1}\mu \cdot \frac{1}{2}\mu^{T}\Sigma_{21}^{-1}X)$ 為何可以合併,請見 lesson1,證明方式是一樣的。

$$\frac{-1}{2}(X_a - \mu_a)^T \Lambda_{aa}(X_a - \mu_a) + \frac{-1}{2}(X_a - \mu_a)^T \Lambda_{ab}(X_b - \mu_b) + \frac{-1}{2}(X_b - \mu_b)^T \Lambda_{ba}(X_a - \mu_a) + \frac{-1}{2}(X_b - \mu_b)^T \Lambda_{bb}(X_b - \mu_b)$$

中,第一項中會有 quadratic 項,第二項和第三項可以合併,合併後和第一項的某幾項中會有 linear 項,第四項為常數,故

quadratic 項:

$$\Sigma_{X_a|X_b} = \Lambda_{aa}^{-1}$$

linear 項:

$$\frac{-1}{2}(X_a - \mu_a)^T \Lambda_{aa}(X_a - \mu_a) + \frac{-1}{2}(X_a - \mu_a)^T \Lambda_{ab}(X_b - \mu_b) + \frac{-1}{2}(X_b - \mu_b)^T \Lambda_{ba}(X_a - \mu_a)$$

其中的 linear 項為

$$X_a^T \Lambda_{aa} \mu_a + X_a^T \Lambda_{ab} (X_b - \mu_b) = X_a^T (\Lambda_{aa} \mu_a + \Lambda_{ab} (X_b - \mu_b))$$

故

$$\begin{split} & \Sigma_{X_a|X_b}^{-1} \mu = \Lambda_{aa} \mu_a + \Lambda_{ab} (X_b - \mu_b) \\ \Rightarrow & \mu = \Sigma_{X_a|X_b} (\Lambda_{aa} \mu_a + \Lambda_{ab} (X_b - \mu_b)) = \mu_a + \Lambda_{aa}^{-1} \Lambda_{ab} (X_b - \mu_b) \end{split}$$

解出 mean 和 covariance matrix 了!剩下的,就只有要解出 Λ 矩陣了,我們要用 Σ 來表示,所需要的技巧是方塊矩陣的反矩陣,可以只要記結論就好

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} M & -MBD^{-1} \\ -D^{-1}CM & D^{-1} + D^{-1}CMBD^{-1} \end{bmatrix}$$

其中

$$M = (A - BD^{-1}C)^{-1}$$

$$\begin{split} & \begin{bmatrix} \Sigma_{aa} & \Sigma_{ab} \\ \Sigma_{ba} & \Sigma_{bb} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \Lambda_{aa} & \Lambda_{ab} \\ \Lambda_{ba} & \Lambda_{bb} \end{bmatrix} \\ \Rightarrow & \Sigma_{a|b} = \Lambda_{aa}^{-1} = \Sigma_{aa} - \Sigma_{ab} \Sigma_{bb}^{-1} \Sigma_{ba} \\ & \mu = \mu_a + \Lambda_{aa}^{-1} \Lambda_{ab} (X_b - \mu_b) = \mu_a - (\Sigma_{aa} - \Sigma_{ab} \Sigma_{bb}^{-1} \Sigma_{ba})^{-1} (\Sigma_{aa} - \Sigma_{ab} \Sigma_{bb}^{-1} \Sigma_{ba})^{-1} \Sigma_{ab} \Sigma_{bb}^{-1} (X_b - \mu_b) \\ & = \mu_a + \Sigma_{ab} \Sigma_{bb}^{-1} (X_b - \mu_b) \end{split}$$

方塊矩陣反矩陣證明(補充)

詳細見 https://ccjou.wordpress.com/2010/08/02/分塊矩陣的解題案例/

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & O \\ CD^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & O \\ O & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & BD^{-1} \\ O & I \end{bmatrix} \quad (將 \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix})$$

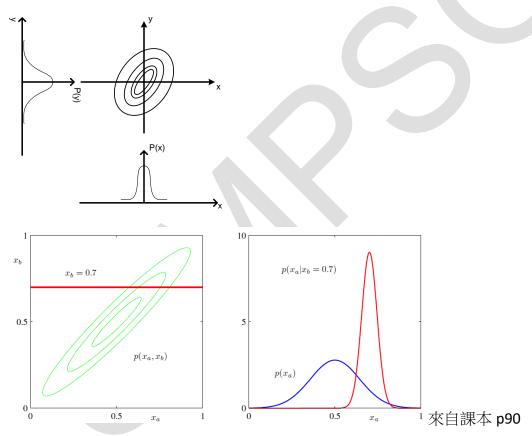
$$\Rightarrow \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I & BD^{-1} \\ O & I \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & O \\ O & D \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} I & O \\ CD^{-1} & I \end{bmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{bmatrix} I & -BD^{-1} \\ O & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & O \\ O & D^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & O \\ -CD^{-1} & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M & -MBD^{-1} \\ -D^{-1}CM & D^{-1} + D^{-1}CMBD^{-1} \end{bmatrix}$$

$$M = (A - BD^{-1}C)^{-1}$$

Marginal Gaussian distribution

還記的 marginal 的意義嗎?是只看我們有興趣的維度,每個維度的值的機率為該維度值的前提下,將其餘維度的機率做加總,看不懂的話回去翻一下 lesson3,而實際上做完 marginal 後,分布仍然為 Gaussian distribution,詳細證明在課本 p88-89,但我看不太懂,用圖來表現的話就像下圖



上圖可看到綠色的線是原始的二維 multivariate Gaussian distribution,藍色線為 marginal Gaussian distribution(紅色是 conditional Gaussian,檢驗一下自己是不是看的懂這張圖),藍色線會在 $x_a=0.5$ 的 地方有最大值是因為我們將 $x_a=0.5$ 書一條鉛直線,這條線上的機率加總是最大的

那麼這些被拆開來的維度的 mean 和 variance 如何表示? 和前面的假設一樣

$$X = \begin{bmatrix} X_a \\ X_b \end{bmatrix}, \mu = \begin{bmatrix} \mu_a \\ \mu_b \end{bmatrix}, \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_a^2 & B \\ B & \sigma_b^2 \end{bmatrix}$$

 $\mathfrak{R} A = \begin{bmatrix} I & O \end{bmatrix}, b = 0$

 $AX+b=egin{bmatrix} I & O\end{bmatrix}egin{bmatrix} X_a \ X_b \end{bmatrix}=X_a$,故 marginal Gaussian distribution 仍為一種 affine property

$$\mu = A\mu + b = \begin{bmatrix} I & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_a \\ \mu_b \end{bmatrix} + 0 = \mu_a$$

$$\Sigma_a = A\Sigma A^T = \begin{bmatrix} I & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_a^2 & B \\ B & \sigma_b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ O \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_a^2 \\ B \end{bmatrix} = \sigma_a^2$$

故

$$X_a \sim N(\mu_a, \sigma_a^2)$$

$$X_b \sim N(\mu_b, \sigma_b^2)$$

中央極限定理(central limit theorem)

無論原始的分布為何,只要我們一次取樣點越多,將取樣點取平均或加總,最終得到的分布會越趨近於高斯分布。

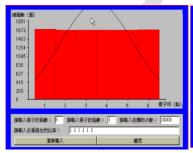
參考網站: http://www.math.nsysu.edu.tw/StatDemo/CentralLimitTheorem/CentralLimit.html

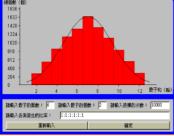
假設我們用骰子做實驗,如果我們一次骰一次骰子,做 10000 次取樣,得到的會趨近於 uniform distribution,而若我們一次骰的骰子越多,將一次採到的點數做加總,做 10000 次取樣後,所得到的分布會越趨近於高斯分布

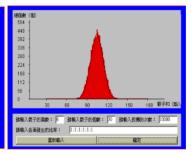
骰一顆骰子

骰兩顆骰子

骰 30 顆骰子



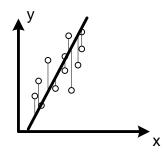




圖片來源:http://www.math.nsysu.edu.tw/StatDemo/CentralLimitTheorem/CentralLimit.html

Bayesian linear regression

回到 lesson1 的最後面,我們在計算 LSE 的地方,我們使用 LSE 是希望找出一個方程式,這個方程式的直線離我們現在的 data 的所有點有最短的距離。



就是希望得到有最小黑色細線長度平方的直線

但是,若我們是用 Bayesian 來想這件事情,我們的確知道這條線是最佳的,但是只有這種可能嗎?是不是也有可能發生其他條線的時候,但只是機率沒有最佳的那條直線高呢?LSE 可以知道實際的最佳直線為何,我們會希望離直線越近,機率應該是越大,離直線越遠機率越小,假設我們可以知道每個 X 值發生時 Y 值的 mean 及 covariance matrix,那麼 entropy 最大時的分布為 Gaussian distribution,所以如果我們直線中每點都取一個 Gaussian distribution,data 每點都可以得到一個機率,將每個點的機率做相乘,得到的就是這 data 能得到這條直線的機率。

如此我們就可以將問題轉換成另外一個問題,有哪條直線在我們手中的 data 中可以得到最大的機率,這條直線就是最佳的直線,這個是 MLE。更甚者,我們可以決定一個區間,是 outcome 可能會發生的地方(藉由已知的 variance),也就是所謂的 predictive distribution

