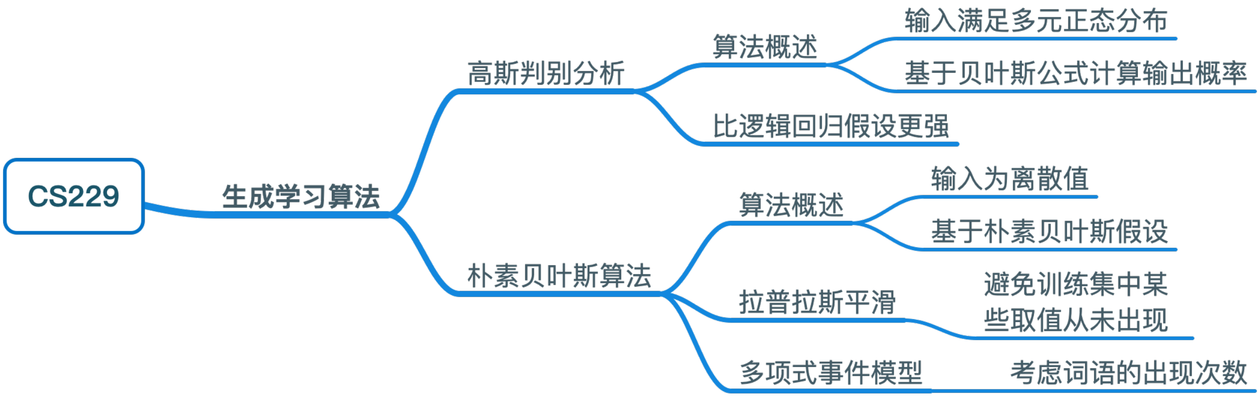
第四章 生成学习算法



算法概述

- 到目前为止，我们讨论的学习算法都是直接对 $p(y|x;\theta)$ 建模，即对于给定的 x，y 的条件分布
    - 这里我们将讨论一种不同类型的学习算法
- 学习算法可以分为两种：
    - **判别学习算法**：对 $p(y|x)$ 建模
        - 或者学习直接将输入映射到 0 或 1 的方法
    - **生成学习算法**：对 $p(x|y)$（以及 $p(y)$ ）建模
- 当我们为 $p(y)$ (被称为 **class priors**) 和 $p(x|y)$ 建模后，可以使用**贝叶斯定理**来计算给定 x 后 y 的后验概率：

$$p(y|x) = \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)}$$

    - 分母可以通过 $p(x) = p(x|y=1)p(y=1) + p(x|y=0)p(y=0)$ 得到（针对二分类）
- 对于分类问题，我们需要对每种 y 的情况分别进行建模
    - 当有一个新的 x 时，计算每个 y 的后验概率，并取概率最大的那个 y
    - 而由于只需要比较大小，$p(x)$ 对于大家都是一样的，所以可以忽略分母，得到下式：

$$\begin{aligned}\arg\max_y p(y|x) &= \arg\max_y \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)} \\ &= \arg\max_y p(x|y)p(y)\end{aligned}$$

高斯判别分析

- 我们学习的第一个生成学习算法叫**高斯判别分析**
    - 在这个模型中，我们会假设 $p(x|y)$ 属于多元正态分布
- 在介绍 GDA 之前，首先简单介绍一下多元正态分布的属性

多元正态分布

- 多元正态分布是在 n 维空间中的，其参数有：

- **均值向量**：$\mu \in \mathbb{R}^n$
- **协方差矩阵**：$\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$，$\Sigma \geq 0$ 对称且为半正定（所有特征值均不小于零）

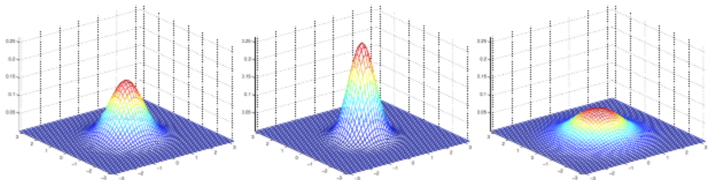
- 分布记作 $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$，概率密度公式为：

$$p(x; \mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)\right)$$

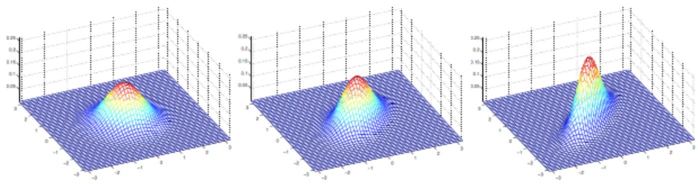
  - $|\Sigma|$ 表示 Σ 的行列式
- 对于一个属于多元正态分布 $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ 的随机变量 X，根据期望与方差的计算公式可以得到：

$$\begin{aligned} E[X] &= \int_x xp(x; \mu, \Sigma)dx \\ &= \mu \\ Cov(X) &= E[(X - E[X])(X - E[X])^T] \\ &= \Sigma \end{aligned}$$

- 下面给出一些二元高斯分布的概率密度图像：



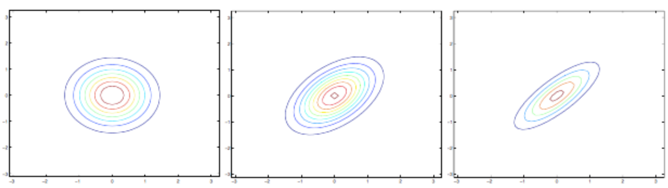
  - 左边的图显示的分布均值为 0（2×1的向量），协方差矩阵为 I（2×2的单位矩阵）
    - 这样的正态分布又被称为**标准正态分布**
  - 中间的图显示的分布均值为 0 且 $\Sigma = 0.6I$
  - 右边的图显示的分布 $\Sigma = 2I$
    - 可以看到随着 Σ 的变大，分布变得越来越“展开”，看起来就像变得越来越“扁”
- 让我们来看看更多的例子：



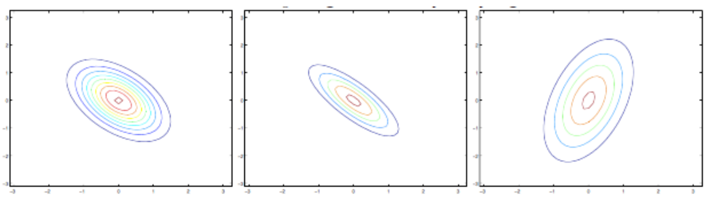
  - 上图表示的分布均值均为 0，对应的协方差矩阵为：

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; \Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0.5 & 1 \end{bmatrix}; \Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0.8 \\ 0.8 & 1 \end{bmatrix}$$

  - 左边的图就是标准正态分布，而可以看到随着非对角线上数值的增大，分布在45度方向上压缩的幅度越大
    - 通过下面的轮廓图可以更清楚地展现这个特点：



- 下面是另一组例子：

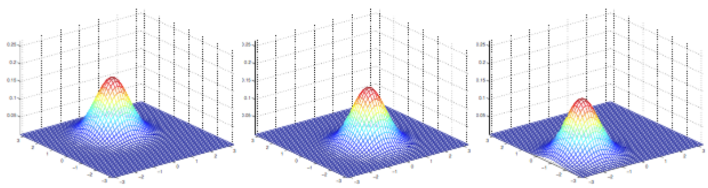


- 上图对应的协方差为：

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & -0.5 \\ -0.5 & 1 \end{bmatrix}; \Sigma = \begin{bmatrix} 1 & -0.8 \\ -0.8 & 1 \end{bmatrix}; \Sigma = \begin{bmatrix} 3 & 0.8 \\ 0.8 & 1 \end{bmatrix}$$

- 从左图和中图可以看到，随着元素值的减小（绝对值变大），分布在相反的方向上“压缩”得越明显
- 在右图中我们改变了对角线上的元素值，分布变得更趋近于椭圆

* 在最后一组例子中，令 $\Sigma = I$，通过改变 μ，我们可以移动分布的中心：



* 总而言之，多元正态分布与正态分布一样是钟型的曲线
  - μ 会影响分布的位置（平移）
  - Σ 会影响分布的形状

高斯判别分析模型

* 对于一个分类问题，输入变量 x 是连续随机变量，我们可以使用高斯判别分析（GDA）模型，对 $p(x|y)$ 使用多元正态分布建模，模型如下：

$$\begin{aligned} y &\sim \text{Bernoulli}(\phi) \\ x|y=0 &\sim \mathcal{N}(\mu_0, \Sigma) \\ x|y=1 &\sim \mathcal{N}(\mu_1, \Sigma) \end{aligned}$$

* 其分布如下：

$$\begin{aligned} p(y) &= \phi^y (1-\phi)^{1-y} \\ p(x|y=0) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_0)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_0)\right) \\ p(x|y=1) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_1)^T \Sigma^{-1}(x-\mu_1)\right) \end{aligned}$$

  - 这里模型的参数包括 $\phi, \Sigma, \mu_0, \mu_1$，注意两个分布共享同一个协方差矩阵

* 数据的对数似然函数如下：

$$\begin{aligned} \ell(\phi, \mu_0, \mu_1, \Sigma) &= \log \prod_{i=1}^{m} p(x^{(i)}, y^{(i)}; \phi, \mu_0 \mu_1, \Sigma) \\ &= \log \prod_{i=1}^{m} p(x^{(i)} | y^{(i)}; \mu_0, \mu_1, \Sigma) p(y^{(i)}; \phi) \end{aligned}$$

  - 通过最大化 ℓ，得到参数的极大似然估计为：

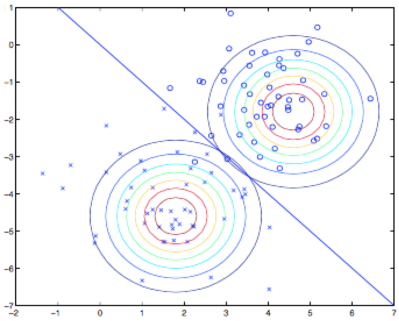
$$\phi = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\}$$

$$\mu_0 = \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 0\}x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 0\}}$$

$$\mu_1 = \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\}x^{(i)}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\}}$$

$$\Sigma = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)} - \mu_{y^{(i)}})(x^{(i)} - \mu_{y^{(i)}})^T$$

- 用图形来表示，该算法可以表示为下图：



  - 图中展示的是训练集，求得的高斯分布拟合至数据中，将数据分为了两类
    - 注意两个高斯分布的形状与方向相同，因为它们共享同一个协方差矩阵，但是它们的均值不同
  - 图中的直线表示决策边界：$p(y=1|x)=0.5$，在该边界的一侧，我们预测 $y=1$ 是最可能的输出，在另一侧，则预测 $y=0$

高斯判别分析与逻辑回归

- 高斯判别分析与逻辑回归之间有着有趣的关系
  - 如果我们将 $p(y=1|x;\phi,\mu_0,\mu_1,\Sigma)$表示为 x 的函数，可以得到：

$$p(y=1|x;\phi,\Sigma,\mu_0,\mu_1) = \frac{1}{1+\exp(-\theta^T x)}$$

    - 这与逻辑回归的形式完全相同
      - 但一般来说，对于相同的数据集两种算法会给出不同的边界，究竟哪一个更好呢？
- **如果 $p(x|y)$ 属于多元高斯分布（共享 Σ），那么 $p(y|x)$ 一定是逻辑函数**
  - **但是反之则不成立**
- 上述结论表明高斯判别分析相较于逻辑回归提出了**更强**的假设
  - 如果这些假设都是正确的，那么高斯判别分析得到的结果会更好，是更好的模型
- 特别地，当 $p(x|y)$ 属于多元高斯分布（共享 Σ），GDA 是**渐近有效**的
  - 这说明在数据量比较有限的情况下，没有算法能比 GDA 的表现更好
  - 因此，在这种情况下，GDA 相比逻辑回归是一个更好的算法
    - 即使对于较少的训练集，也可以取得更好的效果
- 相反，因为进行了更弱的假设，所以逻辑回归有更好的**鲁棒性**

    - 对于错误的模型假设不那么敏感
    - 有很多不同的假设会导致 $p(y|x)$ 是逻辑函数的形式，比如泊松分布
        - 但是如果我们对于这样的数据使用 GDA，那么结果会变得不可预测
- **总结**：
    - GDA 进行了更强的模型假设并且数据有效性更高（需要更少的数据来学习）
        - 但其前提条件是模型假设正确或近似正确
    - 逻辑回归进行较弱的假设，对于模型假设偏离的鲁棒性更好
        - 如果数据集实际上不是高斯分布，那么在数据有限的情况下，逻辑回归一般会表现得比 GDA 更好
        - 因此，实际中使用逻辑回归的情况比 GDA 多得多

朴素贝叶斯算法

- 在高斯判别分析中，特征向量是连续的、实数值向量
    - 现在我们要谈谈一个不同的生成学习算法，其中 x 是离散的向量
- 让我们以识别垃圾邮件为例，这类问题被称为**文本分类**问题
    - 假设我们有一个训练集（已经标记好了是否为垃圾邮件的邮件集合），我们首先需要构建表示一封邮件的特征向量
    - 我们通过如下方式表示特征向量：
        - 其长度为词表的长度（词表为所有可能出现的词的集合，一般通过训练集生成）
            - 如果这封邮件包含了第 i 个词，$x_i = 1$，否则 $x_i = 0$
        - 下图为一个简单的例子：

$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{a} \\ \text{aardvark} \\ \text{aardwolf} \\ \vdots \\ \text{buy} \\ \vdots \\ \text{zygmurgy} \end{array}$$

- 选择好特征向量后，我们需要来构建生成模型
    - 但考虑到 x 是一个高维向量，因此如果直接对 $p(x|y)$ 建模，那么会得到一个参数向量的维数极高的多项分布，使计算过于复杂
- 因此，我们需要做一个强力的假设，假设给定 y 时， 每一个 x_i 是条件独立的
    - 这个假设被称为**朴素贝叶斯假设**，其引出的算法被称为**朴素贝叶斯分类器**
        - 注意是条件独立而不是独立，即仅在给定 y 的情况下独立
- 现在我们有（以50000维度为例）：

$$\begin{aligned} p(x_1, \ldots, x_{50000} \mid y) &= p(x_1|y)p(x_2|y, x_1)p(x_3|y, x_1, x_2) \cdots p(x_{50000}|y, x_1, \ldots, x_{49999}) \\ &= p(x_1|y)p(x_2|y)p(x_3|y) \cdot p(x_{50000}|y) \\ &= \prod_{j=1}^{n} p(x_j|y) \end{aligned}$$

    - 第一个等式来自于概率的基本性质

    - 第二个等式则使用了朴素贝叶斯假设
        - 即使这个假设在现实中不一定成立，但其实际的效果还是不错的
- 模型包含了以下三个参数：

$$
\begin{aligned}
\phi_{i|y=1} &= p(x_i = 1|y = 1) \\
\phi_{i|y=0} &= p(x_i = 1|y = 0) \\
\phi_y &= p(y = 1)
\end{aligned}
$$

- 和之前一样，给定一个训练集 $\{(x^{(i)}, y^{(i)}); i = 1, \ldots, m\}$，我们可以写出如下的联合似然函数

$$
\mathcal{L}(\phi_y, \phi_{i|y=0}, \phi_{i|y=1}) = \prod_{i=1}^{m} p(x^{(i)}, y^{(i)})
$$

    - 对这个联合似然函数进行最大似然分析，得到的参数值如下：

$$
\begin{aligned}
\phi_{j|y=1} &= \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{x_j^{(i)} = 1 \wedge y^{(i)} = 1\}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\}} \\
\phi_{j|y=0} &= \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{x_j^{(i)} = 1 \wedge y^{(i)} = 0\}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 0\}} \\
\phi_y &= \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\}}{m}
\end{aligned}
$$

        - 这些结果的得出是很自然的，从概率的角度也可以很好地解释
- 得到了这些参数之后，为了对一个新的输入 x 进行预测，我们可以计算：

$$
\begin{aligned}
p(y = 1|x) &= \frac{p(x|y = 1)p(y = 1)}{p(x)} \\
&= \frac{\left(\prod_{i=1}^{n} p(x_i|y = 1)\right)p(y = 1)}{\left(\prod_{i=1}^{n} p(x_i|y = 1)\right)p(y = 1) + \left(\prod_{i=1}^{n} p(x_i \mid y = 0)\right)p(y = 0)}
\end{aligned}
$$

    - 然后选择具有更高后验概率的类作为输出
    - 这里的 n 指字典的维数，需要先把 x 转换为统一长度的向量
- 在之前的例子中，输入的每一维特征都是是二元的，其对应的分布是伯努利分布
    - 而当特征是多元时，其对应的分布应该用多项式分布建模
    - 实际上，即便一些原始的输入数据是连续值，我们可以通过一个映射表将连续值映射为离散值，然后运用朴素贝叶斯方法进行建模

Living area (sq. feet)	< 400	400-800	800-1200	1200-1600	>1600
x_i	1	2	3	4	5

        - 当原始，连续值的数据不能很好的用多元正态分布进行建模时，将其离散化再使用朴素贝叶斯建模往往会取得更好的效果

拉普拉斯平滑

- 朴素贝叶斯算法有很多的应用，但是其当前的形式仍存在一个问题
- 在垃圾邮件分类问题中，如果词典中存在一个词，而这个词在训练集中从未出现过时，其最大似然分析得出的参数 $\phi_{35000|y}$ 将会是：

$$\phi_{35000|y=1}=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{x_{35000}^{(i)}=1\wedge y^{(i)}=1\}}{\sum_{i=1}^{m}1\{y^{(i)}=1\}}=0$$
$$\phi_{35000|y=0}=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{x_{35000}^{(i)}=1\wedge y^{(i)}=0\}}{\sum_{i=1}^{m}1\{y^{(i)}=0\}}=0$$

- 因此，当我们尝试去预测含有该词的邮件是否为垃圾邮件时，后验概率的计算结果将变为：

$$\begin{aligned}p(y=1|x)&=\frac{(\prod_{i=1}^{n}p(x_i|y=1))p(y=1)}{(\prod_{i=1}^{n}p(x_i\mid y=1))p(y=1)+(\prod_{i=1}^{n}p(x_i|y=0))p(y=0)}\\&=\frac{0}{0}\end{aligned}$$

  - 这会导致我们无法进行预测
  - 更一般的来看，如果你在有限的训练集上没有看到过某个事件，就认为其发生的概率为0，这在统计学上是不合理的

- 现在假设我们要分析一个多项式随机变量 z 的均值，取值为 $\{1,\ldots,k\}$，我们可以分析 $\phi_i=p(z=i)$
  - 给定一个独立的观察集 $\{z^{(1)},\ldots,z^{(m)}\}$，最大似然估计的结果为：

$$\phi_j=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}}{m}$$

    - 如果我们用这个公式来进行最大似然估计，那么有一些 ϕ_j 的值可能为0（如果未在观察集中出现）
    - 为了避免这个问题，我们可以使用**拉普拉斯平滑**，其形式为：

$$\phi_j=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{z^{(i)}=j\}+1}{m+k}$$

      - 分子加 1，分母加 k，这样可以保证 $\sum_{j=1}^{m}\phi_j=1$（概率之和为1）
        - 同时保证了对所有的取值， $\phi_j\neq 0$，从而解决了之前的问题
      - 实验证明，在大部分情况下，拉普拉斯平滑可以给出一个最优的估计

- 对于朴素贝叶斯分类器，使用拉普拉斯平滑，可以得到如下公式：

$$\phi_{j|y=1}=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{x_j^{(i)}=1\wedge y^{(i)}=1\}+1}{\sum_{i=1}^{m}1\{y^{(i)}=1\}+2}$$
$$\phi_{j|y=0}=\frac{\sum_{i=1}^{m}1\{x_j^{(i)}=1\wedge y^{(i)}=0\}+1}{\sum_{i=1}^{m}1\{y^{(i)}=0\}+2}$$

  - 因为x的取值有两种，所以分子加 1，分母加 2
  - 在实际中，一般不需要对 ϕ_y 进行拉普拉斯平滑

文本分类的事件模型

- 让我们再探讨一个专门用于文本分类的模型来结束生成学习算法
  - 虽然朴素贝叶斯对许多分类问题有很好的效果，但是对于文本分类，还有存在着一个效果更棒的相关模型
- 在文本分类领域，之前我们使用的朴素贝叶斯模型被称为**多元伯努利事件模型**

- 现在我们将使用一个不同的模型，叫作**多项式事件模型**

- 我们将使用与之前不同的方式来表示一封邮件
  - 令 x_i 表示邮件中的第 i 个词语，则其取值范围为 $\{1, \ldots, |V|\}$
    - $|V|$ 是词表（词典）的大小
  - 一封含有 n 个词语的邮件现在将被表示为一个长度为 n 的向量 $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$
    - 注意 n 会随邮件的不同而变化
- 该模型的参数为：

$$
\begin{aligned}
\phi_{i|y=1} &= p(x_j = i|y = 1) \\
\phi_{i|y=0} &= p(x_j = i|y = 0) \\
\phi_y &= p(y)
\end{aligned}
$$

  - 我们假设 $p(x_j|y)$ 对所有的 j（邮件中词语的位置）都是一样的
- 如果给定一个训练集 $\{(x^{(i)}, y^{(i)}); i = 1, \ldots, m\}$，其中 $x^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \ldots, x_{n_i}^{(i)})$
  - 这里 n_i 表示第 i 个训练样本的词数，那么数据的似然函数可以表示为：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}(\phi_y, \phi_{i|y=0}, \phi_{i|y=1}) &= \prod_{i=1}^{m} p(x^{(i)}, y^{(i)}) \\
&= \prod_{i=1}^{m} \left(\prod_{j=1}^{n_i} p(x_j^{(i)} \mid y; \phi_{i|y=0}, \phi_{i|y=1}) \right) p(y^{(i)}; \phi_y)
\end{aligned}
$$

  - 最大似然估计得出的结果如下：

$$
\begin{aligned}
\phi_{k|y=1} &= \frac{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} 1\{x_j^{(i)} = k \wedge y^{(i)} = 1\}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\} n_i} \\
\phi_{k|y=0} &= \frac{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} 1\{x_j^{(i)} = k \wedge y^{(i)} = 0\}}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 0\} n_i} \\
\phi_y &= \frac{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\}}{m}
\end{aligned}
$$

    - 可以看到，这里在考虑字典中索引为 k 的词时，会把在每个文本中出现的次数相加
      - 所以该模型相比于之前的模型，不仅仅考虑是否出现，还考虑了出现的次数
- 如果有要应用拉普拉斯平滑，可以在分子加 1，分母加 $|V|$，得到：

$$
\begin{aligned}
\phi_{k|y=1} &= \frac{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} 1\{x_j^{(i)} = k \wedge y^{(i)} = 1\} + 1}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 1\} n_i + |V|} \\
\phi_{k|y=0} &= \frac{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_i} 1\{x_j^{(i)} = k \wedge y^{(i)} = 0\} + 1}{\sum_{i=1}^{m} 1\{y^{(i)} = 0\} n_i + |V|}
\end{aligned}
$$

- 虽然朴素贝叶斯不是最好的分类算法，但因为其易于实现，所以非常适合作为你的第一个尝试