第二章 贝叶斯推断

Wang Shujia

Contents

记号约定 (与教材不同)

X	随机变量
$\boldsymbol{X}$	随即向量 $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_n)^T$
$\boldsymbol{x}$	观察值向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$
θ	未知参数
$\boldsymbol{\theta}$	参数向量 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n)^T$
$\pi(\theta)$	先验分布密度或概率函数
$f(\boldsymbol{x}\|\theta)$	随机样本的联合分布或似然函数（看作 θ 的函数）
$p(\theta\|x)$	后验分布密度或概率函数
$\mathbf{A}$	常数矩阵

贝叶斯推断

贝叶斯的一切推断均基于后验分布：$p(\theta|\boldsymbol{x}) \propto \pi(\theta)L(\theta|\boldsymbol{x})$

贝叶斯推断包括：

- 点估计
- 区间估计
- 预测
- 假设检验

1 点估计

点估计的概念

定义 1. *假设总体分布为 $f(x|\theta)$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 为样本观察值。把后验分布 $p(\theta|\boldsymbol{x})$ 归纳为一个数 $\hat{\theta}$，用以估计未知参数 θ, 则 $\hat{\theta}$ 称为 θ 的一个***点估计*** (Point estimate)*

常用的贝叶斯点估计：

1. 后验均值 $\hat{\theta}_E = \mathrm{E}(\theta|\boldsymbol{x})$
2. 后验中位数 $\hat{\theta}_{Me} = \mathrm{Median}(\theta|\boldsymbol{x})$
3. 后验众数 $\hat{\theta}_M = \mathrm{Mode}(\theta|\boldsymbol{x})$

- 传统的最大似然估计是后验众数估计的特例（无信息先验）

点估计的误差

定义 2 (MSE and SE)**.** *设参数 θ 的后验分布为 $f(\theta|\boldsymbol{x})$，$\hat{\theta}$ 为 θ 的一个点估计值，则 $(\hat{\theta} - \theta)^2$ 的后验均值称为后验**均方误差** (Mean Square Error), 即*

$$\mathrm{MSE}(\hat{\theta}|\boldsymbol{x}) = E_{\theta|x}(\hat{\theta} - \theta)^2$$

$\mathrm{SE} = \sqrt{\mathrm{MSE}}$ *称为后验**标准误差** (Standar Error)*

- 一般公式：$\mathrm{MSE}(\hat{\theta}|\boldsymbol{x}) = \mathrm{Var}(\theta|\boldsymbol{x}) + (\hat{\theta}_E - \hat{\theta})^2$
  - 当 $\hat{\theta} = \hat{\theta}_E$ 时，MSE 最小，等于 $\mathrm{Var}(\theta|\boldsymbol{x})$
- 即当把参数的**后验均值**作为贝叶斯点估计时，其均方误差就是该参数的**后验方差**。

点估计的精度

一个估计量的**精度** (Precision) 定义为该估计量的**方差的倒数**。

- 估计量的方差越大，说明估计的**误差**越大，估计的**精度**越低
- 贝叶斯估计 $\hat{\theta}$ 的**精度**为

$$\tau = \frac{1}{\mathrm{Var}(\theta|\boldsymbol{x})}$$

点估计的含义：贝叶斯收缩

- 假设总体分布为：$X|\theta \sim \mathrm{Binomial}(n, \theta)$，先验分布为：$\theta \sim \mathrm{Beta}(\alpha, \beta)$
  - 称为 Beta-Binomial 模型
- 则后验分布为：$\theta|x \sim \mathrm{Beta}(x+\alpha, n-x+\beta)$，其数学期望为

$$\begin{aligned} E(\theta|x) &= \frac{x+\alpha}{(x+\alpha+n-x+\beta)} \\ &= \left(\frac{\alpha+\beta}{\alpha+\beta+n}\right) \underbrace{\frac{\alpha}{\alpha+\beta}}_{prior\ mean} + \left(\frac{n}{\alpha+\beta+n}\right) \underbrace{\frac{x}{n}}_{sample\ mean} \end{aligned}$$

- 参数 θ 的贝叶斯估计（后验均值）等于**先验均值和样本均值的加权平均**，即

$$\theta \text{ 的贝叶斯估计} = w\times \text{ 先验均值} + (1-w)\times \text{ 样本均值}$$

  - 即参数 θ 的贝叶斯估计由样本均值向先验均值“收缩”，称为**贝叶斯收缩** (Bayes Shrinkage)
  - 收缩多少取决于权重 w

贝叶斯收缩的权重

贝叶斯收缩的权重为

$$w = \frac{\alpha+\beta}{\alpha+\beta+n}$$

与先验分布的参数 (α, β) 和样本量 n 有关。
起到先验分布与观察数据之间的权衡调节作用：

- 如果样本量 n 很小（可忽略），则 $w=1$，此时 $E(\theta|x) = E(\theta)$（即贝叶斯估计近似于先验分布的均值）
- 如果样本量 $n \to \infty$，则权重 w 趋向于 0，此时后验均值 $\approx$MLE（即贝叶斯估计近似于样本均值）

例：Florida 总统选举数据

- 美国 Florida 州在 2000 年 3 月对将于 11 月举行的总统选举进行一项民意调查，结果：$n = 621$, Bush 45% ($n_1 = 279$), Gore 37% (230), Buchanan 3% (19) and undecided 15% (93).
- 简单起见，仅考虑 Bush 和 Gore 两个候选人，结果：
- $n = 509$，Bush(55%,$n_1 = 279$)，Gore(45%,$n_2 = 230$).
- 以 θ 表示 Bush 的支持率，并假设该调查是简单随机抽样。
- 判断**布什**是否能获胜。

Florida 总统选举的贝叶斯推断

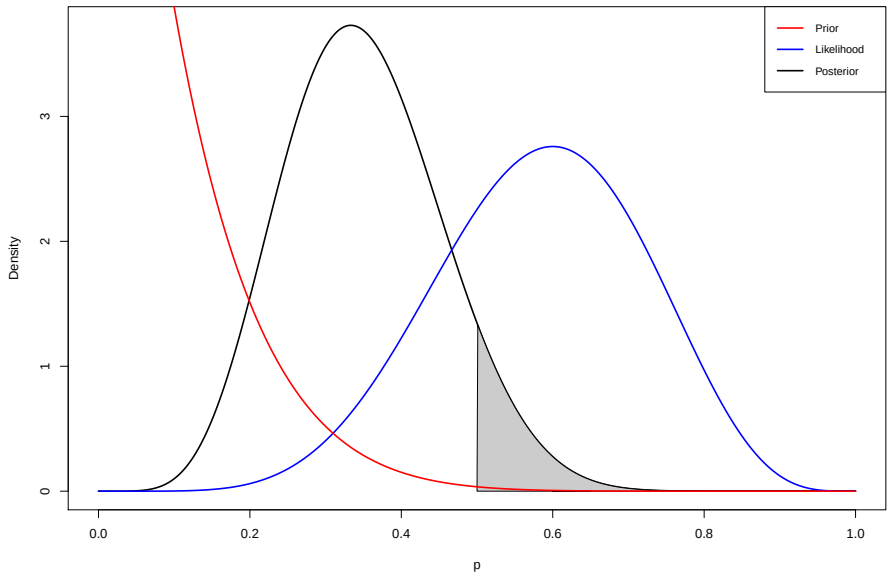
- 最大似然估计：$X =$ 支持布什的人数，观察值 $x = 279$，则二项分布 $X|\theta \sim \text{Bin}(509, \theta)$
  - 似然函数：$L(\theta) = f(x|\theta) \propto \theta^{279}(1-\theta)^{509-279}$
  - 最大似然估计：$\hat{\theta} = 279/509 = 0.548$
- 这个点估计的精度（误差多少）？可能区间？
- 贝叶斯点估计
  - 无信息先验：$\theta \sim \text{Beta}(1,1) = U[0,1]$
    $X|\theta \sim \text{Bin}(509, \theta)$
  - 后验分布：$\theta|X \sim \text{Beta}(280, 231)$
  - $E(\theta|x) = 280/(280+231) = 0.548$
  - 标准差：sd(rbeta(10000,280,231))=0.022
  - 区间估计：> qbeta(c(0.025,0.975),280,231) =[0.5046756, 0.5908593]

女士品茶的贝叶斯估计

假设女士、音乐家和醉汉都随机测试 10 次，结果说对 6 次，即 $X|\theta \sim \text{Bin}(10, \theta)$，$x = 6$。

1. 女士品茶：先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(1,1) = U[0,1]$
   - 后验分布：$\theta|X \sim \text{Beta}(7,5)$
   - 后验概率：$P(\theta > 0.5|x = 6) = 0.73$
   - 后验机会比：odds $= 0.73/0.27 = 2.7$
2. 音乐家识谱：先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(2,1)$
   - 后验分布：$\theta|X \sim \text{Beta}(8,5)$
   - 后验概率：$P(\theta > 0.5|x = 6) = 0.81$
   - 后验机会比：odds $= 0.81/0.19 = 4.3$
3. 醉汉猜硬币：先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(1,9)$
   - 后验分布：$\theta|X \sim \text{Beta}(7,13)$
   - 后验概率：$P(\theta > 0.5|x = 6) = 0.08$
   - 后验机会比：odds $= 0.08/0.992 = 0.087$

醉汉猜硬币的贝叶斯模型图示



醉汉猜硬币模型作图代码

```
p=seq(0,1,length=500)
a=1; b=9
y=6; n=10
prior=dbeta(p,a,b)
like=dbeta(p,y+1,n-y+1)
post=dbeta(p,y+a,n-y+b)
plot(p,post,type='l',ylab="Density",lwd=2,col='black')
x1<-p[p>=0.5]
y1<-dbeta(x1,y+a,n-y+b)
polygon(c(0.5,x1,0.6,0.65),c(0,y1,0,0),col='grey80')
lines(p,like,lwd=2,col='blue')
lines(p,prior,lwd=2,col='red')
legend("topright",c("Prior","Likelihood","Posterior"),
       col=c('red','blue','black'),lwd=c(2,2,2),cex=0.8)
```

2 区间估计

可信区间

定义 3 (Credible region)**.** 对给定样本观察值 $\boldsymbol{x}$, 参数 θ 的后验分布为 $p(\theta|\boldsymbol{x})$。如果一个区间 $C=(L,U)$ 使得

$$P(\theta \in C|\boldsymbol{x}) = 1-\alpha$$

则称区间 C 为参数 θ 的一个 $100(1-\alpha)\%$ **可信区间** *(Credible Interval)*。
一般取**等尾**可信区间 *(Equal Tail)*：

$$P(\theta \le L|x) = \int_{-\infty}^{L} p(\theta|\boldsymbol{x})\mathrm{d}\theta = \frac{\alpha}{2}$$
$$P(\theta \ge U|x) = \int_{U}^{\infty} p(\theta|\boldsymbol{x})\mathrm{d}\theta = \frac{\alpha}{2}$$

频率学派的置信区间

Let $\boldsymbol{X} = (X_1, X_2, \ldots, X_n)^T$ be a random sample from a population $X \sim f(x|\theta)$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$ be the observed values, and θ be an unknown parameter.

Suppose that we can find $L(\boldsymbol{X})$ and $U(\boldsymbol{X})$ such that

$$P(L(\boldsymbol{X}) \le \theta \le U(\boldsymbol{X})) = 1 - \alpha$$

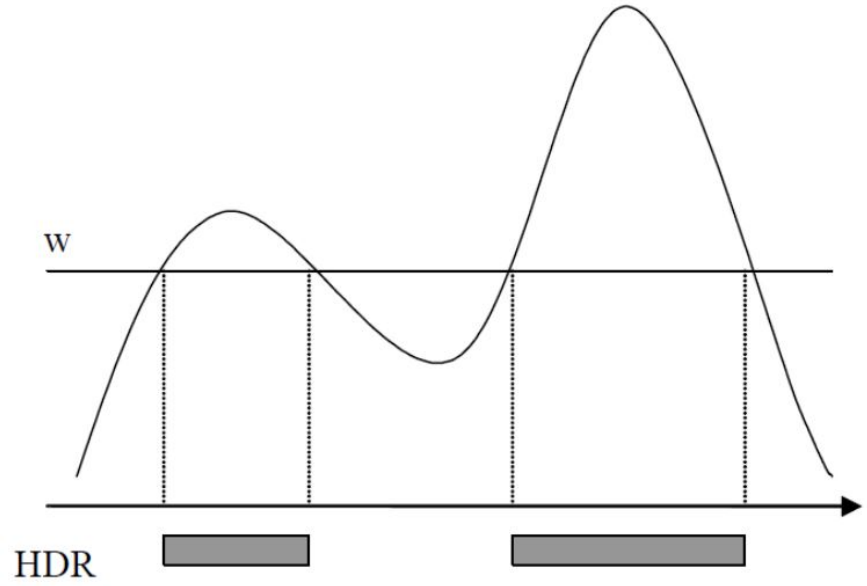
Then $[L(\boldsymbol{x}), U(\boldsymbol{x})]$ is called a ***confidence interval*** for θ, $(1-\alpha)\times 100\%$ is called the ***confidence level***.

- $\alpha = 0.05$ is a standard 95% confidence interval.
- The random variable is $\boldsymbol{X}$, not the θ.
- Interpret: the *random interval* will overlap the parameter θ 95% of the time.
- "The probability that a confidence interval $[L(\boldsymbol{x}), U(\boldsymbol{x})]$ contains the true population parameter is $(1-\alpha)$" (not true).

HPD 区域

一个区域 C 称为 θ 的一个 $100(1-\alpha)\%$ **最高后验密度区域** (Highest Probability Density Region, HPD)，如果 $C = \{\theta : p(\theta|\boldsymbol{x}) > w\}$，其中 w 满足

$$\int_C p(\theta|\boldsymbol{x})\mathrm{d}\theta = 1 - \alpha$$



计算 HPD

1. 调用软件包 TeachingDemos:

```
hpd(posterior.icdf, conf=0.95, tol=1e-8,...)
```

2. 自定义 R 函数：

```
HPD = function(ICDFname,credMass=0.95,tol=1e-8,...){
    incredMass=1.0-credMass
    intervalWidth=function(lowTailPr,ICDFname,credMass,...){
      ICDFname(credMass+lowTailPr,...)-ICDFname(lowTailPr,...)}
    optInfo=optimize(intervalWidth,
                     c(0,incredMass),ICDFname=ICDFname,
                       credMass=credMass,tol=tol,...)
    HDIlowTailPr=optInfo$minimum
return(c(ICDFname(HDIlowTailPr,...),
           ICDFname(credMass+HDIlowTailPr,...)))
#ICDF-分布函数的反函数
```

可信区间和 HPD

醉汉猜硬币：先验分布 $\theta \sim \text{Beta}(1,9)$，后验分布 $\theta|X \sim \text{Beta}(7,13)$

- 可信区间：> qbeta(c(0.025,0.975),7,13)
  $= [0.1628859, 0.5655016]$
- 最高后验密度区间 (HPD)：
  - 用 hpd 函数：

```
>library(TeachingDemos)
>hpd(qbeta, shape1 = 7, shape2= 13, conf=0.95)
[1] 0.1537483 0.5543178
```

– 用 R 自定义函数

（此处省略函数定义部分）

```
>HPD(qbeta,shape1=7,shape2=13)
[1] 0.1537483 0.5543178
```

- 可信区间与 HPD 不一致，HPD 区间长度稍短

3 预测

预测分布

总体分布为：$Y \sim f(y|\theta)$，先验分布为：$\theta \sim \pi(\theta)$，后验分布 $p(\theta|\boldsymbol{y})$。
已有观察值 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^T$，设 $\tilde{Y}$ 是一个未来可能的观察值，则其分布称为**预测分布**。
显然，未来观察值来自相同总体，因此：$\tilde{Y}|\theta \sim f(\tilde{y}|\theta)$
给定观察值 $\boldsymbol{y}$，$\tilde{Y}$ 的**后验预测分布** (Posterior predictive distribution) 为:

$$p(\tilde{y}|\boldsymbol{y}) = \int f(\tilde{y}|\theta)p(\theta|\boldsymbol{y})d\theta$$

应用：

- 预测：点预测，预测区间
- 模型检验：数据分为两部分：训练样本 + 检验样本

预测分布的计算

- 直接计算积分：经常积不出来
- 随机模拟法：用 MCMC 抽样（抽取预测分布的样本 $\tilde{y}^{(1)}, \tilde{y}^{(2)}, ..., \tilde{y}^{(m)}$）
  1. 抽取样本: $\theta^{(k)}|\boldsymbol{y} \sim p(\theta|\boldsymbol{y})$
  2. 抽取预测样本: $\tilde{y}^{(k)}|\theta^{(k)} \sim f(\tilde{y}|\theta^{(k)})$

条件分布的期望和方差 (重要公式)

定理 1 (Double Expectation)**.** *设 u, v 是两个随机变量，如果 $u|v$ 的分布已知，则*

$$\begin{aligned} \mathrm{E}(u) &= \mathrm{E}_v[\mathrm{E}(u|v)] \\ \mathrm{Var}(u) &= \mathrm{Var}_v[\mathrm{E}(u|v)] + \mathrm{E}_v[\mathrm{Var}(u|v)] \end{aligned}$$

例：假设一只母虫能孵化出 X 个下一代小虫，试求 X 的均值和方差（该母虫的产卵数 $U \sim \mathrm{Poisson}(\lambda)$, 每个卵能孵化成小虫子的概率是 p，且相互独立）。

- 应用：计算预测分布的期望、方差和概率。

预测下一个黑天鹅出现的概率

一个人看到 n 只天鹅都是白天鹅，请预测他看到下一只天鹅仍是白天鹅的概率

- 传统方法：假设 Ta 每次观察中看到白天鹅的概率为 θ，$Y_i = 1(i = 1, \ldots, n)$ 表示第 i 次观察到白天鹅，否则为 0。设 Y 为 n 次观察中白天鹅的个数，则
  - $Y \sim \text{Binomial}(n, \theta)$，现在观察到 $y = n$
  - θ 的最大似然估计为：$\hat{\theta} = \bar{y} = n/n = 1$，即预测下一只天鹅仍是白天鹅的概率为 100%。
  - 传统方法无法预测到黑天鹅
- 贝叶斯预测:
  - 无信息先验 $\theta \sim \text{Beta}(1, 1)$，则后验分布为 $\text{Beta}(y + 1, n - y + 1)$
  - 设 $\tilde{Y}$ 为下一只天鹅的颜色（1 表示白，0 表示黑），则 $P(\tilde{Y} = 1|\theta) = \theta$，
  - $\tilde{Y}$ 的预测分布为：

$$\begin{aligned} p(\tilde{Y} = 1|y) &= \int_0^1 P(\tilde{Y} = 1|\theta)p(\theta|y)\mathrm{d}\theta \\ &= \int_0^1 \theta p(\theta|y)\mathrm{d}\theta = \mathrm{E}(\theta|y) = \frac{y+1}{n+2} \end{aligned}$$

  - 观察值 $y = n$，下一只天鹅是白天鹅的预测概率为：$(n + 1)/(n + 2)$

4 Beta-Binomial 和 Gamma-Poisson 模型

4.1 Beta-Binomial 模型

Beta-Binomial Model

在 n 次独立重复试验中，每次试验事件 A 发生的概率为 θ，设 X 为事件 A 发生的次数，则 $X|\theta \sim \text{Bin}(n, \theta)$。现在某实际试验中观察到 $X = x$，试对概率 θ 进行贝叶斯估计。

- 贝叶斯模型：
  - 先验分布：$\theta \sim \text{Beta}(\alpha, \beta)$
  - 总体模型：二项分布 $X|\theta \sim \text{Bin}(n, \theta)$: $f(x|\theta) = \binom{n}{x}\theta^x(1 - \theta)^{n-x}$
  - 后验分布：$\theta|X \sim p(\theta|x) = \pi(\theta)f(x|\theta) \propto \theta^{\alpha+x-1}(1 - \theta)^{\beta+n-x-1}$
  - 即 $\theta|X \sim \text{Beta}(x + \alpha, n - x + \beta)$
- 先验分布与后验分布属于同一个分布族 (Beta 分布)，称为**共轭先验** (Conjugate prior)
- 称为 Beta-Binomial 模型

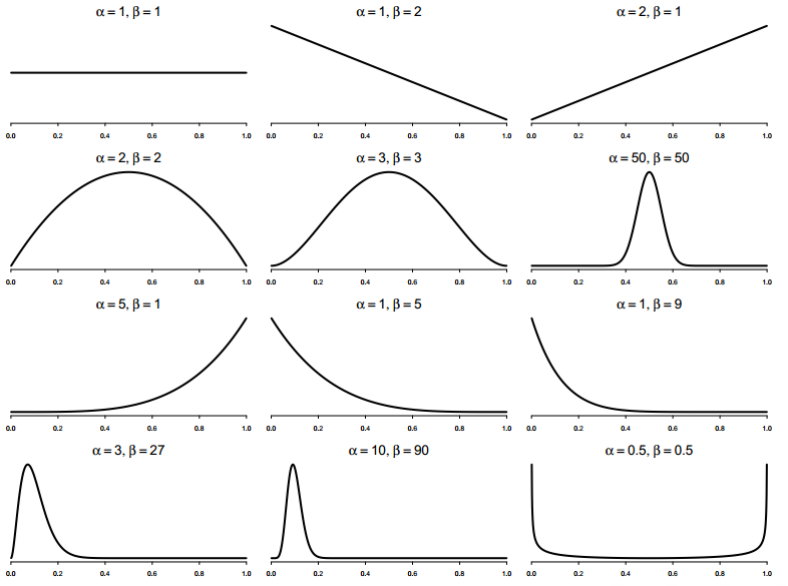
Beta 分布

定义 4. 称随机变量 X 服从 $\text{Beta}(\alpha,\beta)$ 分布，如果其 *pdf* 为

$$f(\theta|\alpha,\beta)=\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}\theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}(0<\theta<1;\ \alpha>0,\beta>0)$$

- 当 $\alpha=1,\beta=1$，$\text{Beta}(1,1)=U[0,1)$，均匀分布
- 均值 $\text{E}(\theta)=\frac{\alpha}{\alpha+\beta}$
- 方差 $\text{D}(\theta)=\frac{\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}$
- 众数 $\text{Mode}=\frac{\alpha-1}{\alpha+\beta-2}$ $(\alpha>1,\beta>1)$

Beta 分布密度函数



4.2 Gamma-Poisson 模型

泊松分布定义

定义 5. $X=$ 计数数据 *(Count data，如单位时间内事件发生次数)*，如果

$$P(X=x|\lambda)=\frac{\lambda^x}{x!}e^{-\lambda},\ x=0,1,\cdots,\lambda>0$$

则称 $X|\lambda\sim\text{Poisson}(\lambda)$

- 某地一年发生恐怖袭击的次数

- 某大学每位教师发表论文数
- $\mathrm{E}(X|\lambda) = \mathrm{D}(X|\lambda) = \lambda$
- 参数 λ 取什么先验分布？

Gamma 分布定义

定义 6. *随机变量 X 的密度函数*

$$f(x|a,b) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} x^{a-1} e^{-bx},\ (x>0,\ a>0, b>0)$$

记为 $X \sim \mathrm{Gamma}(a,b)$

- Shape：a；rate：b 或 scale $= 1/b$
- $\mathrm{E}(X) = ab^{-1}, \mathrm{D}(X) = ab^{-2}$,$\mathrm{Mod}(X) = (a-1)/b$ $(a>1)$
- 如果 $X \sim \mathrm{Gamma}(n/2, 1/2)$，则 $X \sim \chi^2(n)$
- 如果 $X \sim \mathrm{Gamma}(1,b)$，则 $X \sim \exp(b)$（指数分布）

Gamma-Poisson Bayesian Model

假设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 是泊松分布 $\mathrm{Poisson}(\lambda)$ 的独立同分布样本，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$

- 先验分布：$\lambda \sim \mathrm{Gamma}(a,b)$
- 似然函数：$L(\lambda|\boldsymbol{x}) = \prod \frac{\lambda^{x_i}}{x_i!} e^{-\lambda} \propto \lambda^{\sum x_i} e^{-n\lambda}$
- 后验分布为：
$$p(\lambda|\boldsymbol{x}) \propto \lambda^{a-1} e^{-b\lambda} \cdot \lambda^{\sum x_i} e^{-n\lambda} \sim \mathrm{Gamma}(a + \sum x_i, b+n)$$
  - 也是共轭先验
- 后验均值：
$$\mathrm{E}(\lambda|\boldsymbol{x}) = \frac{b}{b+n}\frac{a}{b} + \frac{n}{b+n}\frac{\sum x_i}{n} = w\mathrm{E}(\lambda) + (1-w)\bar{x}$$
  - 当 $n \to \infty$ 和 $n \to 0$ 时，后验分布结果如何？

Gamma-Poisson Model：美国大规模枪击案

2012 年 12 月，美国康涅狄格州发生校园枪击案，造成 28 人死亡。

资料显示，1982 年至 2012 年，美国共发生 62 起（大规模）枪击案。其中，2012 年发生了 7 起，是次数最多的一年。

2012 年有这么多枪击案，正常吗？这是巧合，还是美国治安恶化？

1982-2012 年美国枪击案数据

一年中发生枪击案次数	年数
0	3
1	13
2	5
3	5
4	3
5	1
6	0
7	1

数据来源:http://www.motherjones.com/politics/2012/12/mass-shootings-mother-jones-full-data
参考:Aatish Bhatia,2012:Are mass shootings really random events? A look at the US numbers, http://www.wired.com/2012/12/are-mass-shootings-really-random-events-a-look-at-the-us-numbers/

美国枪击案：MLE

- 目的：利用过去 30 年数据（不包含 2012 年），判断 2012 年是否属于正常的泊松分布
- 总体分布：$X \sim \text{Poisson}(\theta)$,$\theta$ 为平均每年枪击案发生率, 观察值 $X_1, \ldots, X_{30}$
- 最大似然估计：$\hat{\theta} = \bar{x} = 1.83$

美国枪击案：贝叶斯模型

- 先验分布：选共轭先验 $\theta \sim \text{Gamma}(a, b)$，如何确定参数 a,b? 观察过去数据，先验分布均值为 1.83，出现次数最多的年数为 1 年，因此

$$\text{E}(\theta) = a/b = 1.8;\ \text{Mod}(\theta) = (a-1)/b = 1$$

得到超参数估计值:$a = 2.25, b = 1.25$

- 后验分布：$\theta|\boldsymbol{x} \sim \text{Gamma}(57.25, 31.25)$, 其中 $\sum x_i = 55, n = 30$
- 95%CI: > qgamma(c(0.025,0.975), 57.25,31.25)= (1.388, 2.336)
- 95%CI for noninformative prior: (1.410, 2.386)
- 无论那种先验，$X_{31} = 7$ 都远离该可信区间，属于异常。