第一个要讲的概念是生成模型和判别模型,概率学统计学在构建模型的过程中,一般有两种思路,一种是生成模型,一种是判别模型,假设观测值 o 和模型 q,如果对 P(o|q)建模,就是 Generative 模型,首先建立样本的概率密度模型,再利用模型推理预测,就如在 rbm 中,先建立了 Energy-Based model,(p27),然后训练参数使之接近输入数据真实分布,代码里面直接将 input 代入,作为 training distribution 真实分布,探讨的是样本如何产生,估计的是联合概率分布,反映同类数据本身的相似度。如果对 P(q|o)建模,就是 Discrminative 模型,建立的是预测模型,是条件概率密度,找到不同数据的最优分类面(斯坦福课上讲的),能够清晰的分辨多类之间区别,但是不能够把数据本身的特性找出来,像之前的 mlp 就是这样的。就如当给出一张手写体图片,生成模型关注的是各个像素点之间的相对关系,给出最后是哪个数字,而判别模型就是通过训练的参数,当给出 test 输入,它会根据分类成哪个数字。

第二个概念是 pca,主成分分析,主要的目的是将输入的高维数据映射到低维上面来,但是包含同样多的信息,针对一个手写体图片而言,图片大小为 28*28,那么它的维度就是 784,但是这 784 个维度不是每一个都有用,我们输出手写体的 input 数据时会发现有很多个 0,或者说很多空白地方都是无用的维度,例如四个角上的像素值,因此希望能够把数据变换到一个新的坐标系统中,这个坐标系统就是由主成分构成的。(画出图 1,2)首先有两种方式来解释 pca 的意义,我们采用第一种,最大化它们投影的方差,也就是找到一个方向使点在这个方向上投影最分散,那么就是说明数据在这个方向上变化最大。而这些方向,这些主成分我们可以看成特征值,就是一系列的这些特征值的线性组合构成了一张图片(例如人脸),因此得到了公式 1.5,I(x,y)都只是一个 patch,一个 patch 里面的像素点有 784 个,si 相当于 I(x,y) 在 Wi 上的投影,作为输出。xy 是具体像素点的位置。特征数是我们直接假定就等于 pixel 个数。

$$I(x, y) = \sum_{i=1}^{n} A_i(x, y) s_i \quad 1.4$$

$$s_i = \sum_{(x, y)} W_i(x, y) I(x, y) \quad 1.5$$

1.4 则是这些特征值 W 的线性组合构成了 I (x,y),一般来说,主成分特征值的个数应该与输入的维数一致,因为相当于只是进行了坐标变换,但是我们只取前四分之一的主成分,因为这些成分就大概包括了所有需要改变的地方,所以只取了前 n 个,因此,我们求出了前 n 个 W,以及能够求出对应的 zi,而不能够求出所有的 s i。故求 pca 的方式如下。

$$var(s) = E\{s^{2}\} - (E\{s\})^{2} \quad 5.3$$

$$||W|| = \sqrt{\sum_{x,y} W(x,y)^{2}} = 1 \quad 5.4$$

$$\frac{1}{T} \sum_{i=1}^{T} \left(\sum_{x,y} W(x,y) I_{t}(x,y)\right)^{2} \quad 5.5$$

公式 5.3 求的是主成分特征值,然后再计算得到主成分 si,求最大的方差,也就是公式 5.5,从公式 1.5 可以得出,假如不加限制,那么最大方差会在 W 趋近于无穷大时才达到,因为我们确定的只有 w 的方向,大小未定,因此加上限定条件为公式 5.4 等于 1,求第二个主成分,公式未变,限定条件会加上与之前的所有 w 都正交,这就是求主成分的方法。接下来就是白化过程(白化的理由暂时没弄懂,过程如此),让得到的主成分 si 方差为 1,因此用公式 5.16。以上就是关于 pca 的部分内容,由于我们在 ica 中只关注到了以上几点,即在 ica 中需要利用 pca 进行规范预处理。

$$z_i = \frac{y_i}{\sqrt{var(y_i)}} \quad 5.16$$

关于 ica,它也是一种生成模型。主要目的是将独立分布的量分离出来,较为典型的例子是假设有两个声音源波形是不一样的,ica 的功能是将两个声音源波形分离出来(自己画一下),在我们的例子中,手写体识别或者说图像识别,变量 si 就是分布独立,因此我们要分离的便是这些 si。回到模型,模型将映射得到的 si 当成了隐藏的独立变量,其中的 I(x,y)只是一个 patch,因此 A 这个特征值对于每一个 patch 而言都是相同的,但是 si 却在 patch 之间不相同,因为每个 patch 最后的表现形式是不同的。同时 ica 基于三个假设:1.si 是统计独立的随机变量 2.si 的分布是非高斯的,因为数据是稀疏分布的,而稀疏分布不是高斯分布的形式 3.Ai 决定的线性系统是可逆的,我们需要计算得到的部分是 Ai,等价于需要求得的部分是 Wi,Wi 是 Ai 的逆矩阵。可以看到,si 的个数是 m,wi 个数也为 m,当 m 与输入 pixels 个数也就是 784 相等时,系统是可逆的。

对输入数据进行规范预处理。1,移除 dc component,类似于直流分量,在图片中意味着各个像素点的灰度均值,灰度值在手写体里面的表现就是 $0\sim255$,导致了 si 是零均值的,公式 5.1,原本数据是零均值,映射到另一个坐标系中也大概是零均值的。2,计算 principal components。3,只取前 n 个 principal components,n 一般等于原始数据维度的四分之一。4,主成分通过公式来分类,得到 whittened 的 si。结果得到了一个 n 维的向量用 z 表示。规范预处理后的 zi 是 si 的线性变换,为公式 7.5。公式 7.5 两边乘以 b 矩阵的逆矩阵,这个地方需要注意的是虽然 bij 不是方阵,但是它仍然存在逆矩阵成为广义逆矩阵。那么就变成了公式 7.6,vi 就是每一个行向量。也就是说 zi 与 si 是两个东西,si 是独立组件,但是 zi 不是,不然我们就可

以直接用 zi 了, 只是 zi 可以用来表示 si。

$$z_{i} = \sum_{j=1}^{m} b_{ij} s_{j}$$
 7.5
 $s_{i} = \sum_{j=1}^{n} v_{ij} z_{j}$ 7.6

关于 ica 的具体内容,首先假设我们已知 si 的概率密度函数,来求 zi 的概率密度函数,求出 V 的行列式的绝对值,给出 z 向量的概率密度函数,公式 7.13,其中参数变量是 vij,同时各个 patch 选取是随机的,可以视为相互独立,每个 zt 都是第 t 个 patch 经过预处理获得的,T 是观测到的 patch 数量,因此得到似然函数 7.14,然后取对数得到似然函数的对数,然后我们需要求出最大化的 7.15,

7.5 - 1

$$p(\mathbf{z}) = |\det(\mathbf{V})| \prod_{i=1}^{n} p_{i}(\mathbf{v}_{i}^{T}\mathbf{z}) = |\det(\mathbf{V})| \prod_{i=1}^{n} p_{i}(\sum_{j=1}^{n} v_{ij}z_{j}) \quad 7.13$$

$$L(\boldsymbol{v_{1,}}, \boldsymbol{v_{n}}) = \prod_{t=1}^{T} p(\boldsymbol{z_{t}}) = \prod_{t=1}^{T} \left[|det(\boldsymbol{V})| \prod_{i=1}^{n} p_{i}(\boldsymbol{v_{i}^{T} z}) \right]$$
 7.14

$$\log L(\boldsymbol{v_{1,}}, \dots, \boldsymbol{v_{n}}) = T\log|\det(\boldsymbol{V})| + \sum_{i=1}^{n} \sum_{t=1}^{T} \log p_{i}(\boldsymbol{v_{i}^{T}z})$$
 7.15

第一项可以视为常数然后舍去,要求 vij,那么就对每一个求偏导令式子等于 0,就像常规求解的过程一样。pi 在 ica 的论文中选取的是 cosh ()。

关于我们需要实现的论文,它提到了 ica 的两个缺陷,一是很难学习到超完备(overcomplete)的特征值,即特征值的维度不能大于输入数据的维度(784)这点我们可以从定义式 1.4 中看到,这种方式假设了特征 Ai 与输入 pixels 个数一致,第二是预处理过程降低了输入数据的相关性,这都是因为在 pca 处理过程中需要特征值 w 之间正交。因为正交所以不完备。ica 对白化很敏感体现在白化高维数据不太可行,白化公式是 5. 16,假如 784,分解协方差矩阵次数会达到 784*784。

因此论文中提出了用 reconstruction cost (重建损失)来替换掉正交限制。传统的标准 ica 如下 1,论文中提出的修正算法为 2,m 是 pixels 个数.

$$\begin{aligned} & \underset{w}{minimize} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} g(W_{j} x^{(i)}) & \text{subject to WW^T = I} & 1 \\ & \underset{w}{minimize} \frac{\lambda}{m} \sum_{i=1}^{m} \|W^{T} W x^{(i)} - x^{(i)}\|_{2}^{2} + \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} g(W_{j} x^{(i)}) & 2 \end{aligned}$$