机器学习（本科生公选课）GEC6531

第12节 机器学习调试 Diagnosing a Learning Algorithm

计算机科学与技术学院

张瑞 教授

邮箱：ruizhang6@hust.edu.cn

签到 & 思考

■ 微助教签到（学校要求）

1. 加入课堂：微信扫码或者通过微助教公众号

2. 微信扫码签到

回顾线性回归的损失函数、神经网络

今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

调试机器学习算法

- 假设你实现了一个线性回归算法

$$J(\theta) = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda\sum_{j=1}^{m}\theta_j^2\right]$$

- 但是发现做预测时误差大 --- 测试误差大，该怎么办
- 常见的办法如下
  - 收集更多的训练数据
  - 尝试用更少的特征
  - 尝试用更多的特征
  - 尝试增加多项式特征 $(x_1^2, x_2^2, x_1x_2, \text{etc.})$
  - 减小 λ 值
  - 增大 λ 值

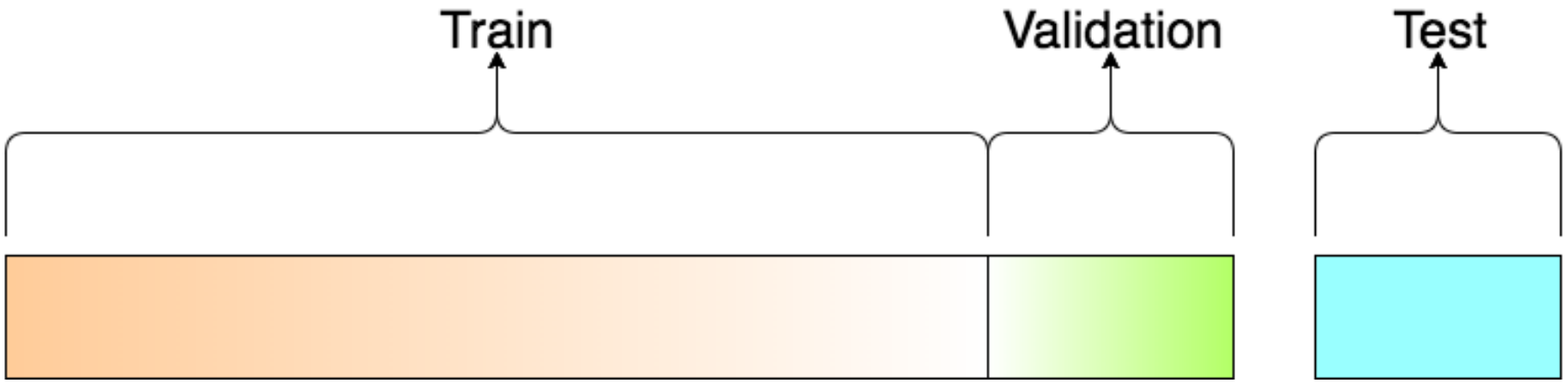
机器学习算法的诊断

- 机器学习算法的诊断： 你可以运行的一项测试，从而了解你的算法哪些方面有效或者无效，并获取如何最好地提高其性能的指导。

- 诊断可能需要一些时间来实现，但可能非常值得。

判断算法的好坏：将数据分为训练、验证、测试

- 诊断的第一步我们需要判断算法的好坏
  - 通常将所有的数据 D 分成三个子集: D_{TR} 为训练数据，D_{VA} 为验证数据，D_{TE} 为测试数据
  - 然后用交叉验证法等来获得训练误差和测试误差（也叫泛化误差）



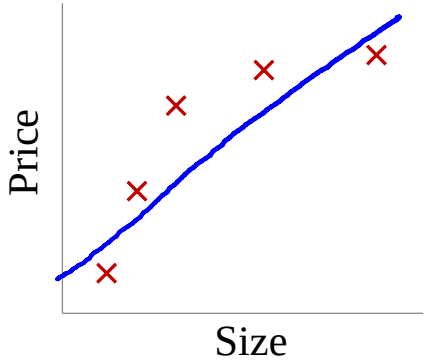
今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）

- **估计量的偏置 bias：** $\mathrm{B}_\theta(\hat{\theta}) = \mathrm{E}_\theta\left[\hat{\theta}(X_1, \ldots, X_n)\right] - \theta$
  - 数据真的来自于 p_θ
  - 从p_θ 采样出多个数据集，从每个数据集可以按照模型估算出一个 $\hat{\theta}$，所以 $\hat{\theta}$ 也服从某个随机分布、是一个随机变量
  - 在多个数据集 S_i 上估算出 $\hat{\theta}_i$，这些 $\hat{\theta}_i$ 的均值，也就是 $\hat{\theta}$ 的期望 $\mathrm{E}_\theta\left[\hat{\theta}(X_1, \ldots, X_n)\right]$
  - 估计量的偏置定义为 $\mathrm{E}_\theta\left[\hat{\theta}(X_1, \ldots, X_n)\right]$ 与 θ 的差，一般希望偏置越小越好，当这个差为0时，我们说这个估计量是无偏的，简称为**无偏估计**
- **估计量的方差 variance:** $\mathrm{Var}_\theta(\hat{\theta}) = \mathrm{E}_\theta\left[(\hat{\theta} - \mathrm{E}_\theta[\hat{\theta}])^2\right]$
  - 多个 $\hat{\theta}_i$ 的方差的期望，简单理解为 $\hat{\theta}_i$ 的均方差
  - 一般希望方差越小越好，一般不为0，有一个大于0的下界

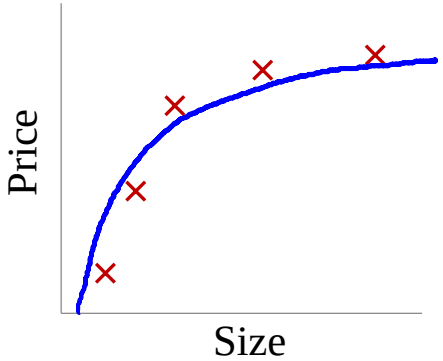
偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系



$\theta_0 + \theta_1 x$

High bias
(underfit)

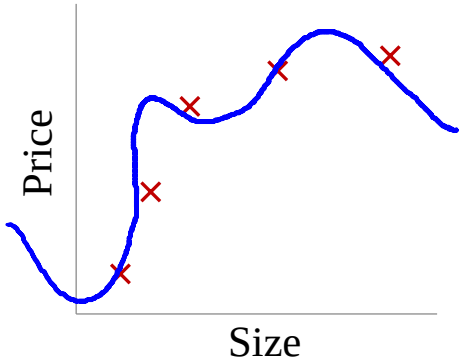
$d=1$



$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$

"Just right"

$d=2$



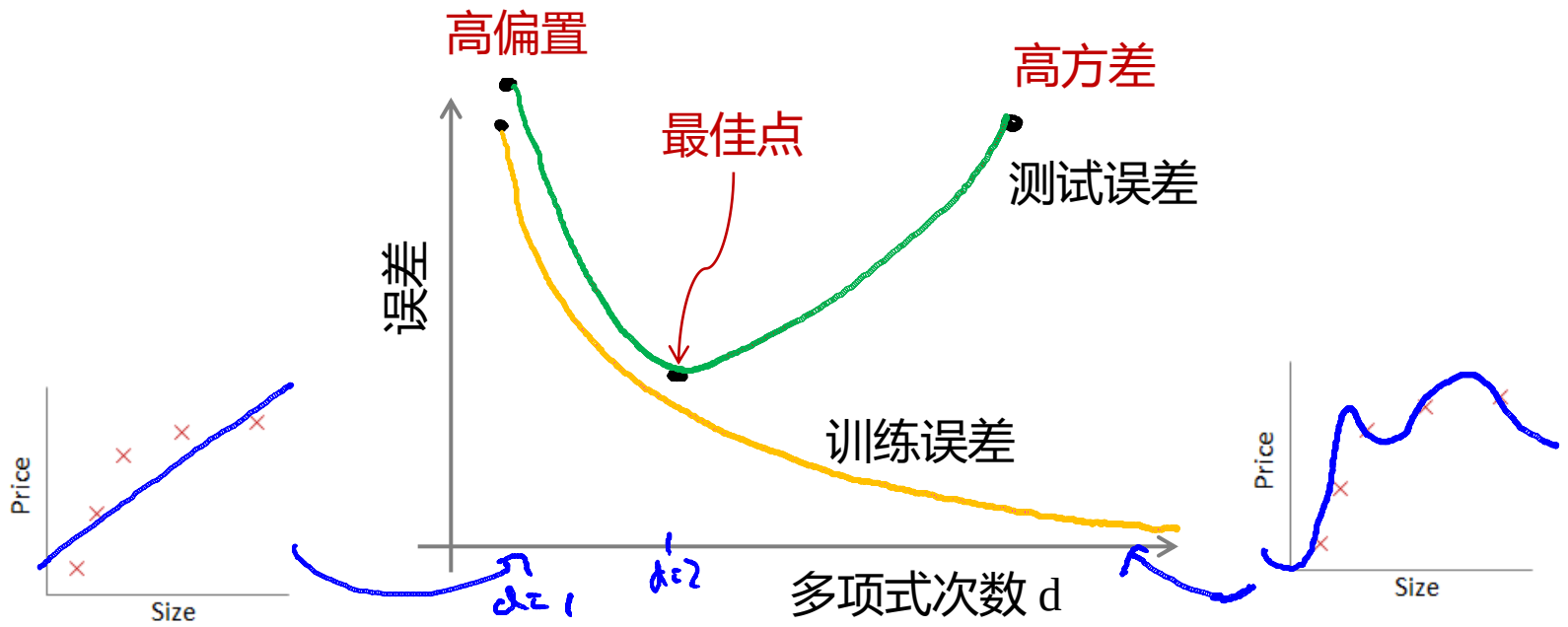
$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$

High variance
(overfit)

$d=4$

- 简单的模型：欠拟合，高偏置
- 复杂的模型：过拟合，高方差

误差 vs 回归函数的多项式次数



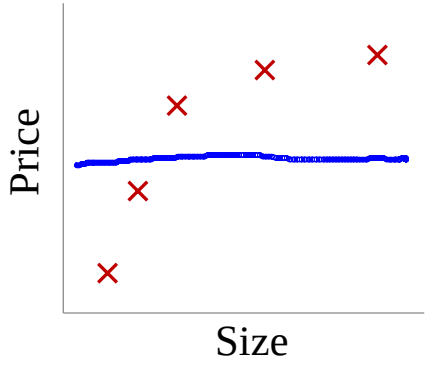
- 简单的模型：欠拟合，高偏置
- 复杂的模型：过拟合，高方差

模型测试误差大，是偏置问题还是方差问题？

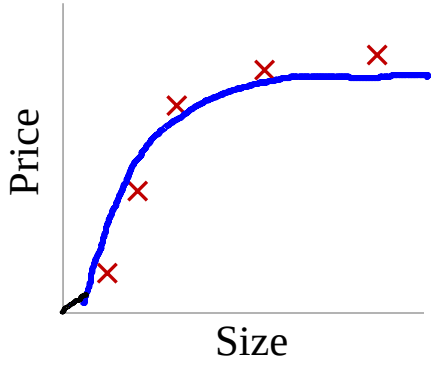
如果偏置过高，说明模型欠拟合，需要提高模型复杂度

如果方差过高，说明模型过拟合，需要降低模型复杂度

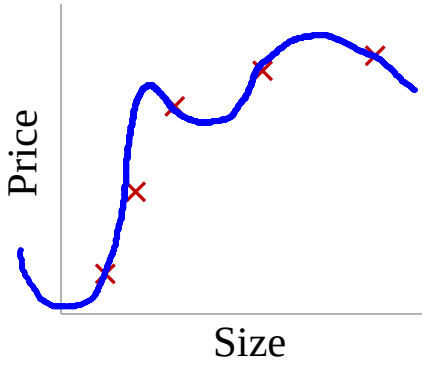
偏置和方差与正则化的关系



Large λ
High bias (underfit)
$\lambda = 10000.\ \theta_1 \approx 0, \theta_2 \approx 0, \ldots$
$h_\theta(x) \approx \theta_0$



Intermediate λ
"Just right"

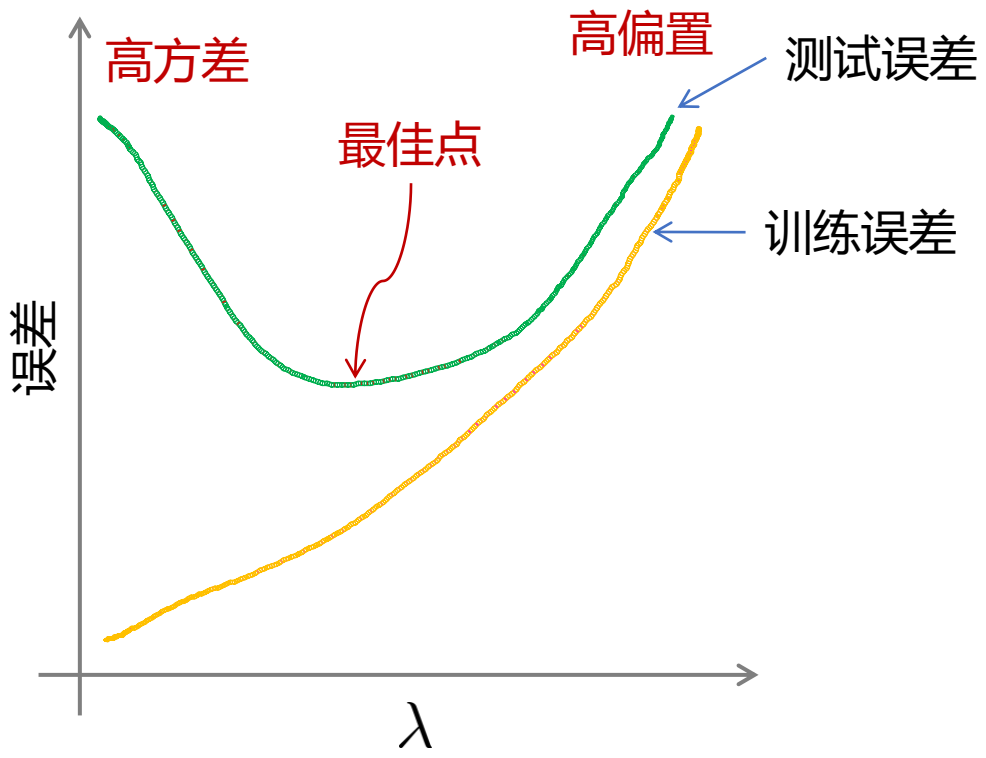


Small λ
High variance (overfit)

$$J(\theta) = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda\sum_{j=1}^{m}\theta_j^2\right]$$

- 小的 λ：过拟合，高方差
- 大的 λ：欠拟合，高偏置

误差 vs 正则化参数 λ



- 小的 λ：过拟合，高方差
- 大的 λ：欠拟合，高偏置

模型测试误差大，是偏置问题还是方差问题？

如果偏置过高，说明模型欠拟合，需要减小 λ

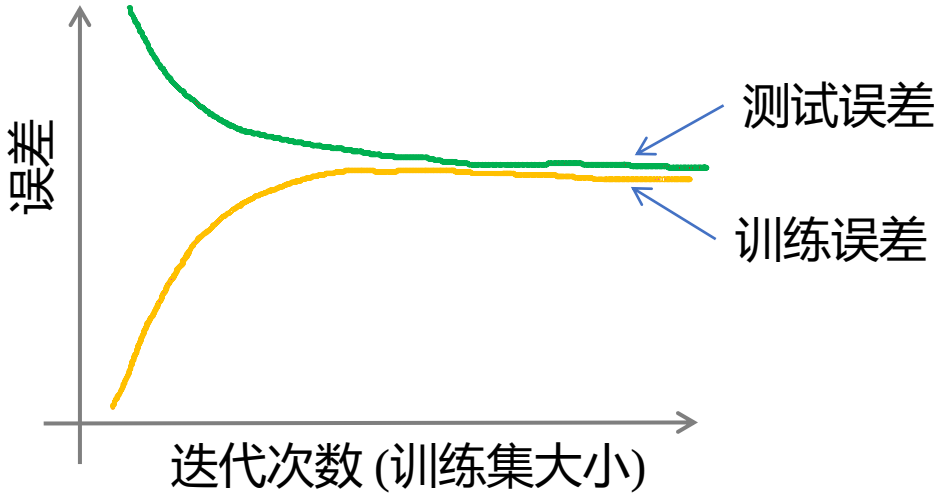
如果方差过高，说明模型过拟合，需要增大 λ

今天的目录

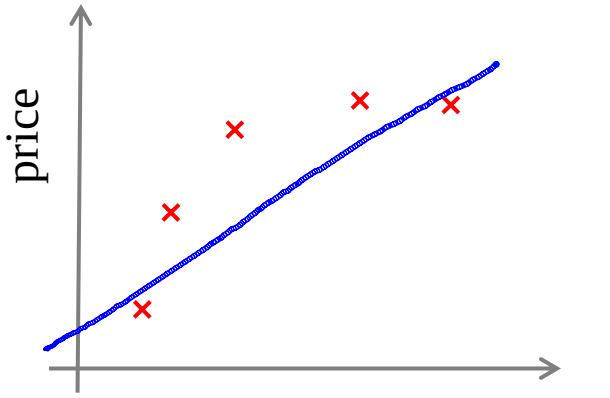
- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

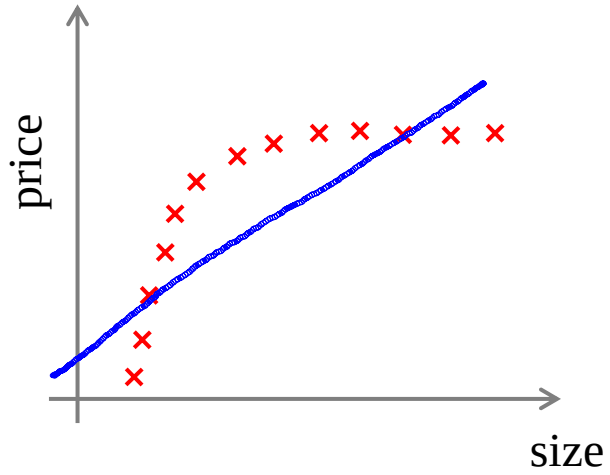
学习曲线：高偏置

高偏置



$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$



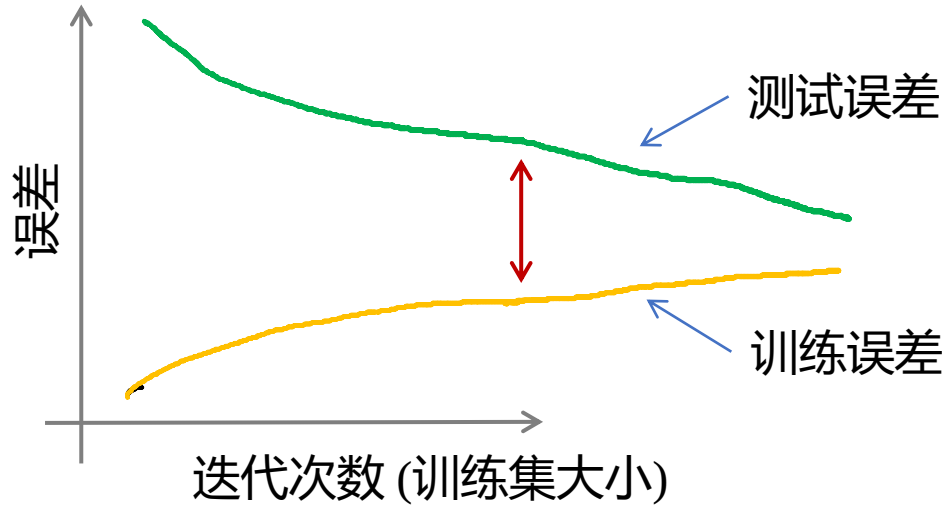


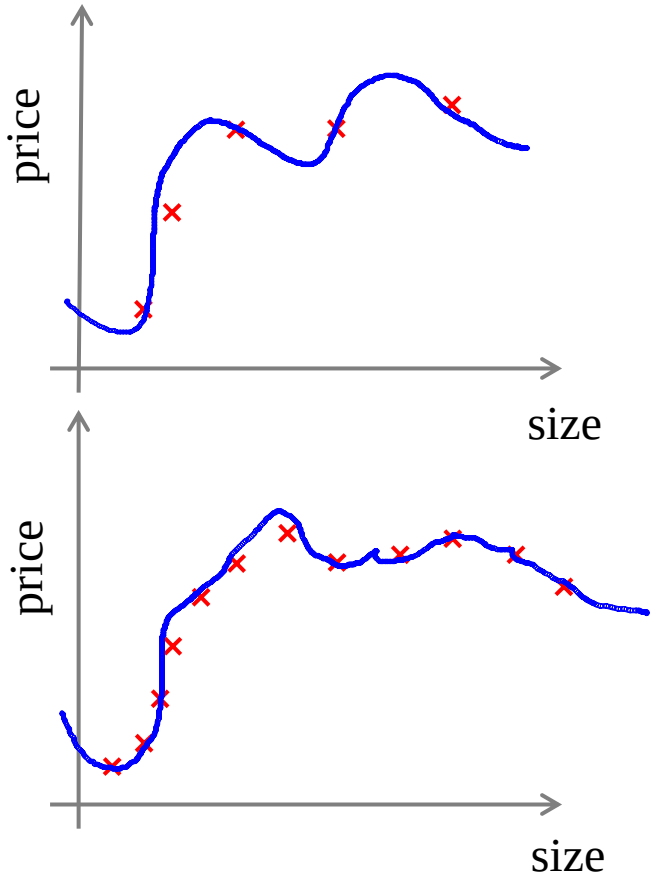
如果是高偏置问题，那么获取更多数据不会带来多少提高

学习曲线：高方差

High variance

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x + \cdots + \theta_{100} x^{100}$$





如果是高方差问题，那么获取更多数据可能带来提高

今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

总结：调试机器学习算法

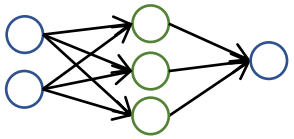
- 假设你实现了一个线性回顾算法

$$J(\theta) = \frac{1}{2m}\left[\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda\sum_{j=1}^{m}\theta_j^2\right]$$

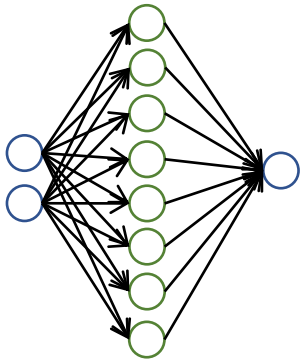
- 但是发现做预测时误差大 --- 测试误差大，该怎么办
- 常见的办法如下
  - 收集更多的训练数据 --- 解决高方差
  - 尝试用更少的特征 --- 解决高方差
  - 尝试用更多的特征 --- 解决高偏置
  - 尝试增加多项式特征 $(x_1^2, x_2^2, x_1x_2, \text{etc.})$ --- 解决高偏置
  - 减小 λ 值 --- 解决高偏置
  - 增大 λ 值 --- 解决高方差

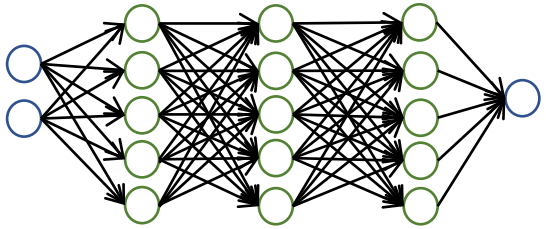
神经网络和过拟合

小的神经网络：
- 参数少，容易欠拟合
- 计算更便宜



大的神经网络：
- 参数多，容易过拟合
- 计算更昂贵
- 用**正则化**，**dropout** 等来解决过拟合





今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

期末考核：结课报告（60分）

- 《结课报告》撰写说明，见华中科技大学课程平台，资料
- 网页版：

https://hustiibd.feishu.cn/wiki/MRs4wEt9kiVRzfksOdPc2CJZnhc/

今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

机器学习/人工智能科研

- 深度学习 (Deep Learning, DL)
- 计算机视觉 (Computer Vision, CV)
- 自然语言处理 (Natural Language Processing, NLP)
- 图学习 (Graph Learning)
- 推荐模型 (Recommender Systems)
- 强化学习 (Reinforcement Learning, RL)
- 具身智能 (Embodied AI)
- AI for Science

多模态生成 (Multimodal Generation)

midjourney

https://www.midjourney.com/

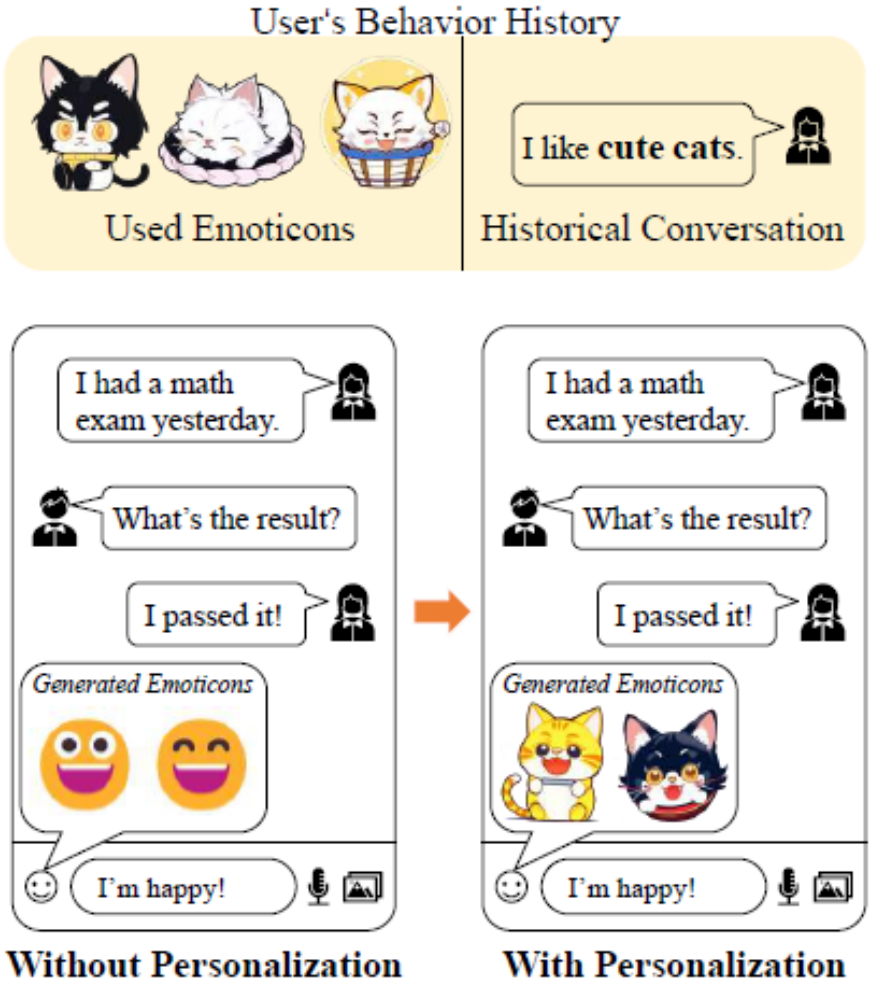
Sora

https://openai.com/index/sora/

是否能让生成的内容个性化？

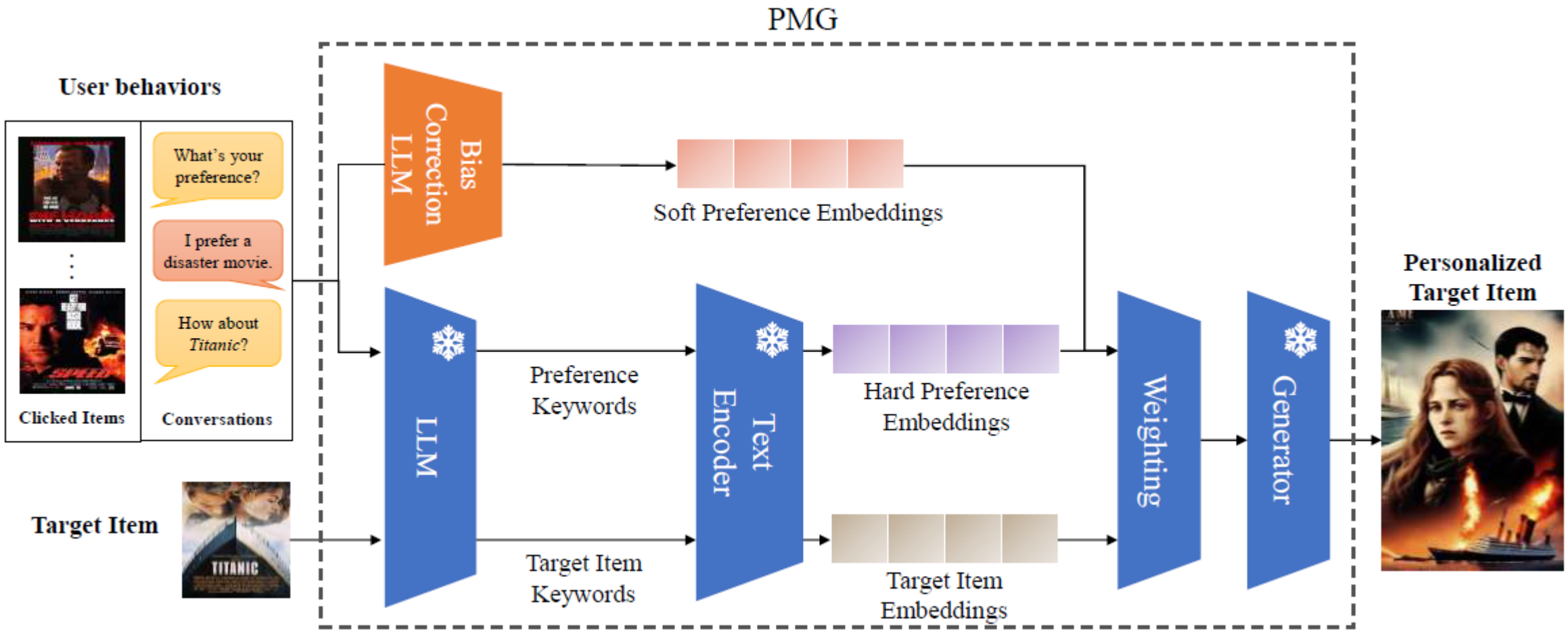
个性化多模态生成 (Personalized Multimodal Generation)

- **个性化多模态生成技术 PMG**
  - 将用户行为（对话、点击等）转换为自然语言
  - 提取用户偏好描述，包括硬偏好和软偏好嵌入
  - 用偏好作为条件控制大模型进行多模态生成
  - 在个性化度量方面提高了8%



PMG : Personalized Multimodal Generation with Large Language Models, The Web Conference 2024
https://mp.weixin.qq.com/s/Ysqa_XSXL7nb11q-ZOF6jA 量子位报道

个性化多模态生成 (Personalized Multimodal Generation)



个性化多模态生成 (Personalized Multimodal Generation)

User Behaviors / Candidate Target Item	Without Personalization	With Personalization			
	N/A	 *Business Style*	 *Girl's Style*	 *Boy's Style*	 *Cartoon Style*
shoes					
shirt					

$$d_p = \frac{e_M \cdot e_p}{\|e_M\|_2 \|e_p\|_2},$$

$$d_t = \frac{e_M \cdot e_t}{\|e_M\|_2 \|e_t\|_2}.$$

Finally, our objective is to optimize the weighted sum of d_p and d_t.

$$z = \alpha \cdot \log d_p + (1 - \alpha) \cdot \log d_t.$$

(a) $w_p : w_t = 0 : 4$

(b) $w_p : w_t = 1 : 3$

(c) $w_p : w_t = 2 : 2$

(d) $w_p : w_t = 3 : 1$

(e) $w_p : w_t = 4 : 0$

Figure 7: Generated poster of movie *Titanic* with different weights of conditions. w_p is the weight of preference conditions, which prefer disaster movie. w_t is the weight of target item conditions, which consider it as a romantic movie. When $w_p : w_t = 1 : 3$ it achieves the highest z score and the generated poster is a combination of romance and disaster.

知识库/知识图谱 (Knowledge Base/Graph)

- **一些信息的集合，通常包含大量的非结构化数据，以图结构的形式存储。**
  - 与传统关系数据库对比
  - 广泛应用于搜索引擎（如谷歌的知识图谱）、问答系统、以及信息提取等一般数据挖掘任务中
  - 开源的知识库: YAGO, freebase, Wikidata

Bill Gates

American business magnate

gatesnotes.com

William Henry Gates III is an American business magnate, software developer, investor, and philanthropist. He is best known as the co-founder of Microsoft Corporation. Wikipedia

Born: 28 October 1955 (age 64 years), Seattle, Washington, United States

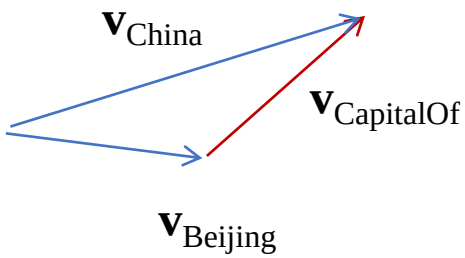
Net worth: 107.4 billion USD (2019)

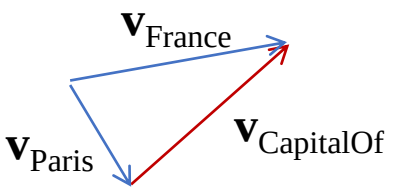
Spouse: Melinda Gates (m. 1994)

Children: Phoebe Adele Gates, Rory John Gates, Jennifer Katharine Gates

知识图谱的表征（Representation）

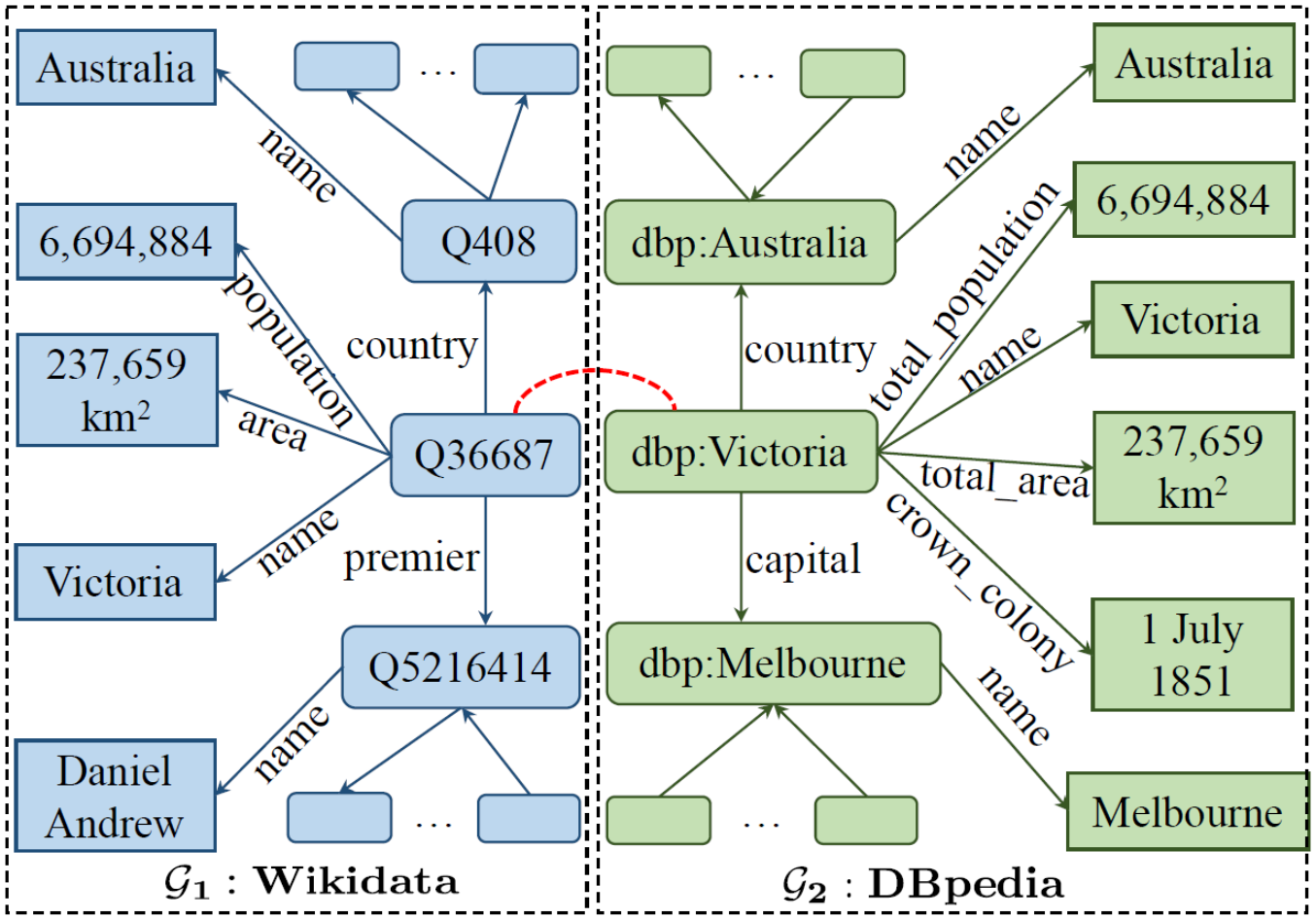
- 知识图谱由三元组组成
  - <头实体，关系，尾实体>
  - < Beijing, CapitalOf, China>
- 每个实体和关系都用一个向量 ***v*** 来表征
- 三元组<**h**, **r**, **t**> 的实体满足 $\mathbf{h} + \mathbf{r} \approx \mathbf{t}$
  也就是 $\mathbf{r} \approx \mathbf{t} - \mathbf{h}$
- 所以，$\mathbf{v}_{China} - \mathbf{v}_{Beijing} \approx \mathbf{v}_{France} - \mathbf{v}_{Paris} \approx \mathbf{v}_{Germany} - \mathbf{v}_{Berlin} \approx \cdots$
- 随机初始化每个实体和关系，然后利用上述等式来反复训练



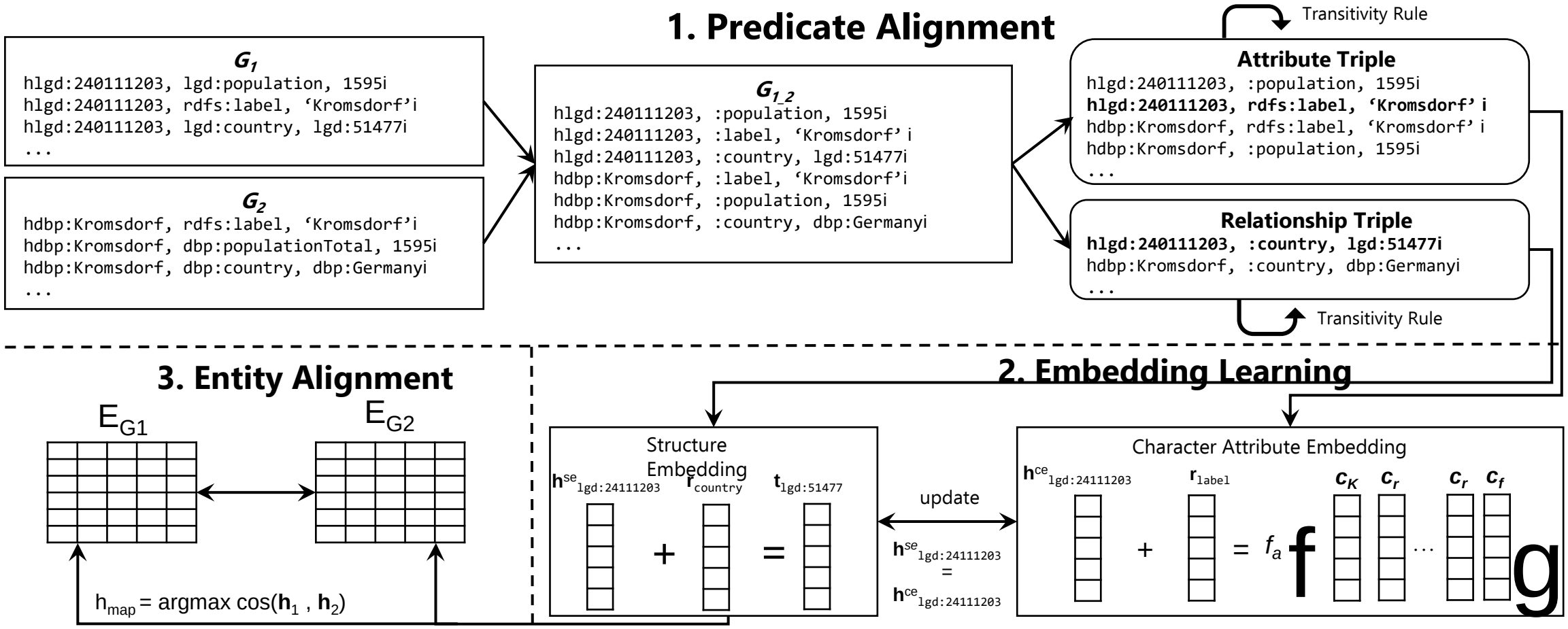


知识图谱的对齐（Knowledge Graph Alignment)

知识图谱的对齐：找出在不同知识图谱里代表现实中相同实体的对应项



知识图谱的自动对齐算法（Automatic Knowledge Graph Alignment)



准确率提高50%

AutoAlign: Fully Automatic and Effective Knowledge Graph Alignment enabled by Large Language Models, IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering (TKDE), 2024.

今天的目录

- **调试机器学习算法**
  - 常见办法
  - 机器学习算法的诊断
- **估计量的偏置（Bias）和方差（Variance）**
  - 偏置和方差与欠拟合/过拟合的关系
  - 偏置和方差与正则化的关系
- **学习曲线**
- **调试机器学习算法总结**
  - 神经网络和过拟合
- **期末考核：结课报告**
- **机器学习/人工智能科研**
- **下一步?**

想进一步学习研究AI的同学

- **低年级同学：**
  - 进一步学习机器学习/AI相关课程
- **较高年级同学**
  - 参与实验室的一些研究
  - 毕业设计项目
  - 继续读硕士/博士
  - 欢迎与我联系 <ruizhang6@hust.edu.cn>，附上简单的简历&成绩单

如果你们从这门课中收益，想了解更多

- http://faculty.hust.edu.cn/zr/zh_CN/index.htm

- 教学调查问卷

祝大家考试好运，获得好成绩！