

人工智能

第8讲:机器学习-无监督学习I

张晶

2023年春季

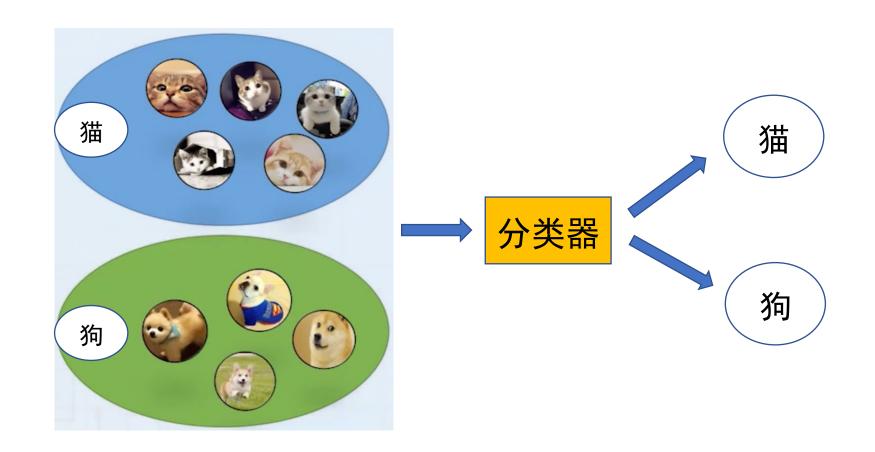
● 参考教材: 吴飞,《人工智能导论:模型与算法》,高等教育出版社

● 在线课程: https://www.icourse163.org/course/ZJU-1003377027?from=searchPage



机器学习的分类(按数据标注情况分类)

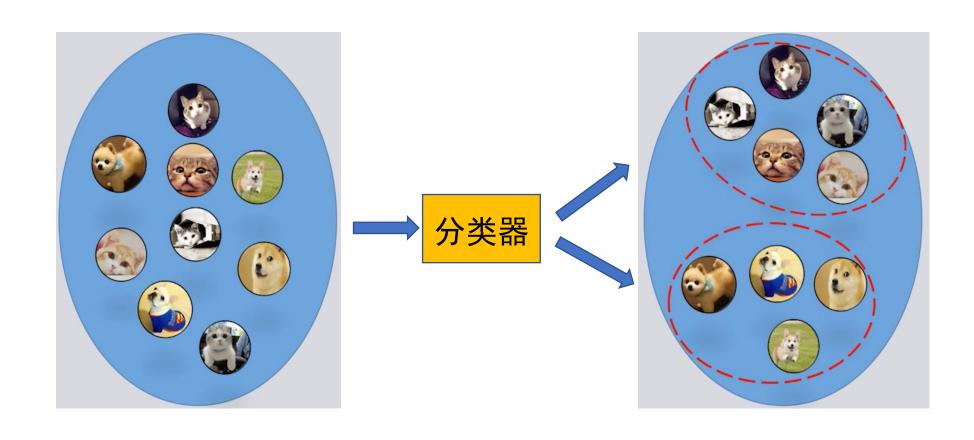
• 有监督学习(supervised learning)





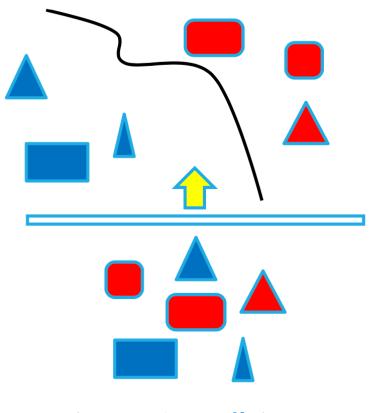
机器学习的分类(按数据标注情况分类)

• 无监督学习(unsupervised learning)



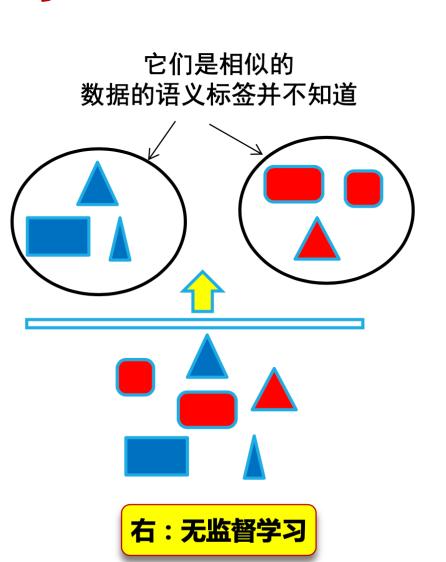


监督学习 versus 无监督学习



红色: 汽车 蓝色: 飞机

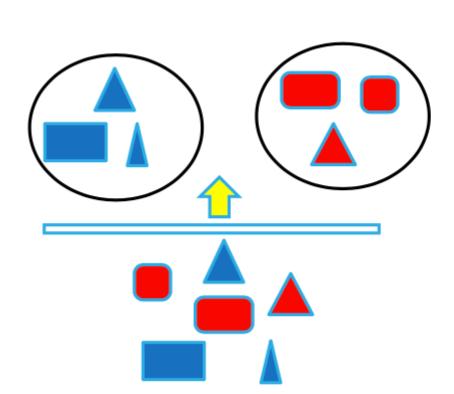
左:监督学习



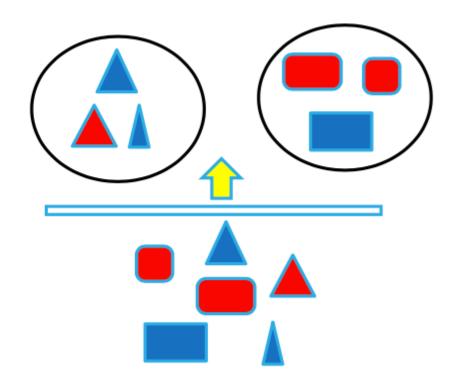


无监督学习:数据特征和相似度函数都很重要

相似度函数: 颜色相似



相似度函数:形状相似



无监督学习



- 一、K均值聚类
- 二、主成分分析
- 三、特征人脸方法
- 四、潜在语义分析
- 五、期望最大化算法



K均值聚类 (K-means 聚类)

· 物以类聚, 人以群分(《战国策·齐策三》)

• 输入: n个数据(无任何标注信息)

输出: k个聚类结果

•目的:将n个数据聚类到k个集合(也称为类簇)



K均值聚类 (K-means 聚类)





K均值聚类算法描述

• 若干定义:

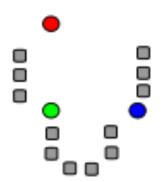
- $n \uparrow m$ -维数据 $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$, $x_i \in R^m (1 \le i \le n)$
- 两个m维数据之间的欧氏距离为

$$d(x_i, x_j) = \sqrt{(x_{i1} - x_{j1})^2 + (x_{i2} - x_{j2})^2 + \dots + (x_{im} - x_{jm})^2}$$

- $d(x_i, x_j)$ 值越小,表示 x_i 和 x_j 越相似;反之越不相似
- 聚类集合数目*k*
- 问题:如何将n个数据依据其相似度大小将它们分别聚类到k个集合,使得每个数据仅属于一个聚类集合。



K均值聚类算法:初始化



■ 第一步:初始化聚类质心

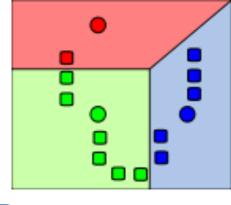
• 初始化 k 个聚类质心

$$C = \{c_1, c_2, ..., c_k\}, c_j \in R^m (1 \le j \le k)$$

- 聚类质心可以从数据 $\{x_1, x_2, ..., x_n\}$, $x_i \in R^m (1 \le i \le n)$ 中采样得到。
- 每个聚类质心 c_j 所在集合记为 G_j 。



K均值聚类算法: 对数据进行聚类

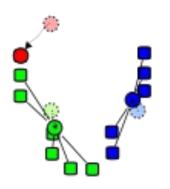


■ 第二步:将每个待聚类数据放入唯一一个聚类集合中

- 计算待聚类数据 x_i 和质心 c_j 之间的欧氏距离 $d(x_i,c_j) (1 \le i \le n, 1 \le j \le k)$
- 将每个 x_i 放入与之距离最近聚类质心所在聚类集合中,即 $argmin\ d(x_i, c_j)$ $c_{j \in C}$



K均值聚类算法: 更新聚类质心



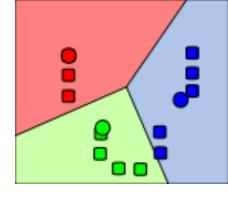
■ 第三步: 根据聚类结果、更新聚类质心

• 根据每个聚类集合中所包含的数据,更新该聚类集合质心值,即:

$$c_j = \frac{1}{|G_j|} \sum_{x_i \in G_j} x_i$$



K均值聚类算法: 继续迭代



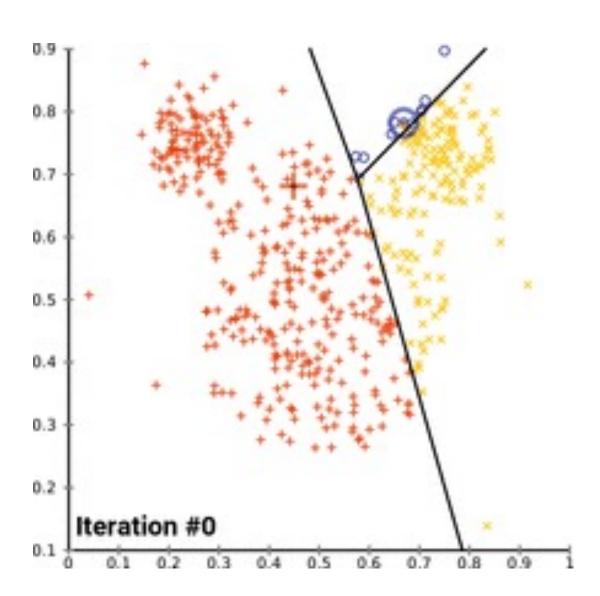
- 第四步: 算法循环迭代, 直到满足条件
- 在新聚类质心基础上、根据欧氏距离大小、将每个待聚类数据放入唯一一个聚类集合中
- 根据新的聚类结果、更新聚类质心

聚类迭代满足如下任意一个条件,则聚类停止:

- 已经达到了迭代次数上限
- 前后两次迭代中,聚类质心基本保持不变



K均值聚类算: 收敛过程





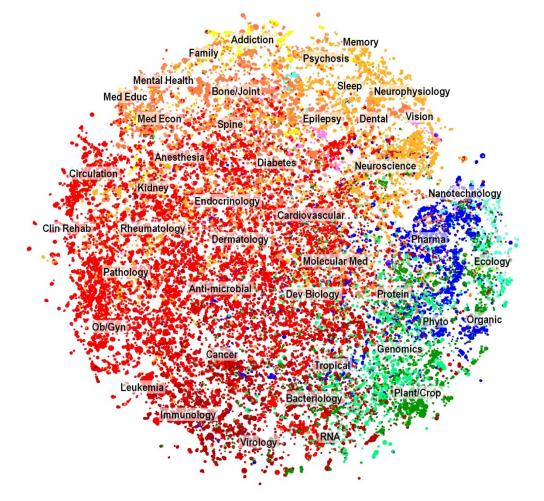
K均值聚类算法的不足

- 需要事先确定聚类数目,很多时候我们并不知道数据应被聚类的数目
- 需要初始化聚类质心,初始化聚类中心对聚类结果有较大的影响
- 算法是迭代执行,时间开销非常大
- 欧氏距离假设数据每个维度之间的重要性是一样的



K均值聚类算法的应用





图像分割

文本分类:将200多万篇论文聚类到29,000个类别,包括化学、工程、生物、传染疾病、生物信息、脑科学、社会科学、计算机科学等及给出了每个类别中的代表单词

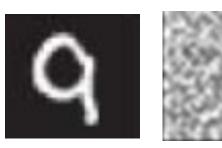


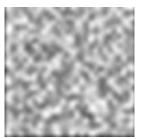
- 一、K均值聚类
- 二、主成分分析
- 三、特征人脸方法
- 四、潜在语义分析
- 五、期望最大化算法

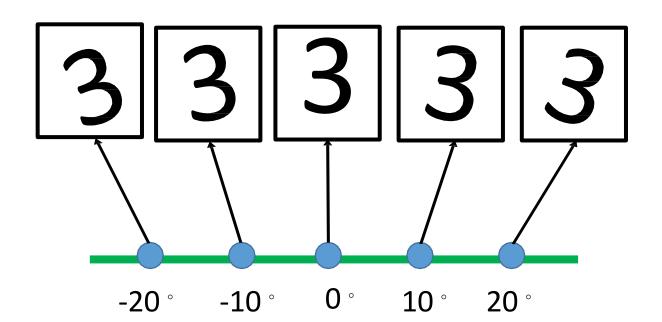


主成分分析: Principle Component Analysis (PCA)

- 主成分分析是一种特征降维方法。人类在认知过程中会主动"化繁为简"
- 奥卡姆剃刀定律(Occam's Razor):"如无必要,勿增实体",即 "简单有效原理"



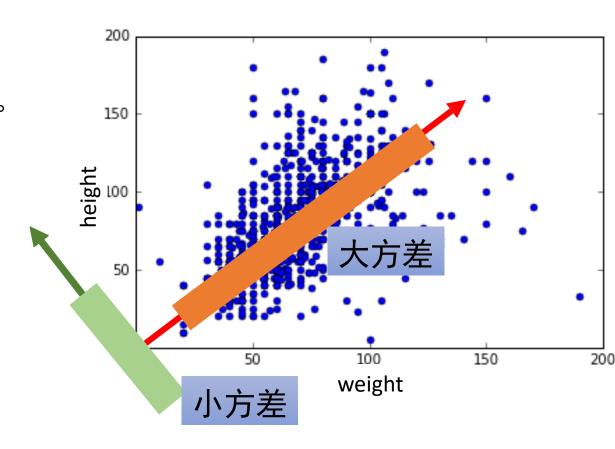






主成分分析: 算法动机

- 在数理统计中,方差被经常用来度量数据和其数学期望(即均值)之间偏离程度,这个偏离程度反映了数据分布结构。
- 在许多实际问题中,研究数据和其均值之间的偏离程度有着很重要的意义。
- 在降维之中,需要尽可能将数据向方差 最大方向进行投影,使得数据所蕴含信息没有丢失,彰显个性。
- 如右图所示,向红色方向比绿色方向投 影结果在降维这个意义上好。





主成分分析: 算法动机

- 主成分分析思想是将n维特征数据映射到l维空间($n \gg l$),去除原始数据之间的冗余性(通过去除相关性手段达到这一目的)。
- 将原始数据向这些数据方差最大的方向进行投影。一旦发现了方 差最大的投影方向,则继续寻找保持方差第二的方向且进行投影。
- 将每个数据从n维高维空间映射到l维低维空间,每个数据所得到最好的k维特征就是使得每一维上样本方差都尽可能大。



主成分分析: 若干概念-方差与协方差

数据样本的方差 variance

- 假设有n个数据,记为 $X = \{x_i\}$ (i = 1, ..., n)
 - 方差等于各个数据与样本均值之差的平方和之平均数
 - 方差描述了样本数据的波动程度

$$Var(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - E(X))^2$$

■ 其中E(X)是样本均值, $E(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$



主成分分析: 若干概念-方差与协方差

数据样本的协方差 covariance

- 假设有n个两维变量数据,记为 $(X,Y) = \{(x_i,y_i)\}\ (i = 1,...,n)$
 - 衡量两个变量之间的相关度

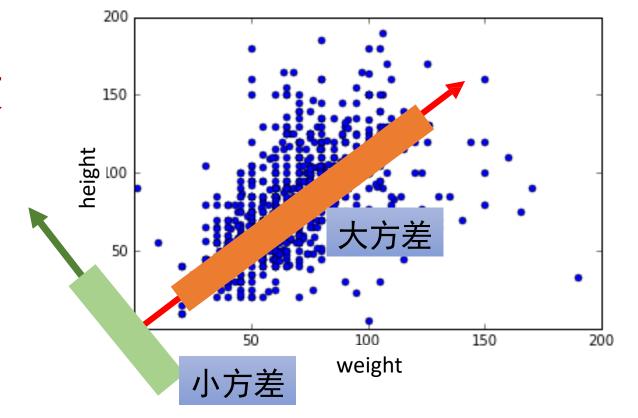
$$cov(X,Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{x}_i - E(X))(\boldsymbol{y}_i - E(Y))$$

■ 其中E(X)和E(Y)分别是X和Y的样本均值,分别定义如下

$$E(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_{i},$$
 $E(Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{y}_{i}$



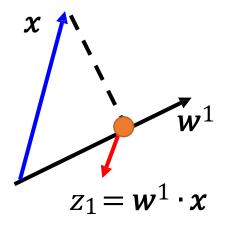
主成分分析: 目标函数



z = Wx

降维到1维:

$$z_1 = (\mathbf{w}^1)^T \cdot \mathbf{x}$$



- 将所有数据x 映射到 w^1 , 得到一组新的特征 z_1
- 希望映射后的数据21的方差尽可能大

$$Var(z_1) = \frac{1}{N} \sum_{z_1} (z_1 - \overline{z_1})^2 \qquad ||\mathbf{w}^1||_2 = 1$$



主成分分析: 目标函数

$$z = Wx$$

降维到多维:

$$z_1 = (\boldsymbol{w}^1)^T \cdot \boldsymbol{x}$$

$$z_2 = (\mathbf{w}^2)^T \cdot \mathbf{x}$$

$$W = \begin{bmatrix} (w^1)^T \\ (w^2)^T \\ \vdots \end{bmatrix}$$

正交矩阵

将所有数据x 映射到 w^1 , 得到一组 新的特征 z_1

希望映射后的数据21的方差尽可能大

$$Var(z_1) = \frac{1}{N} \sum_{z_1} (z_1 - \overline{z_1})^2 \quad ||w^1||_2 = 1$$

希望映射后的数据22的方差尽可能大

$$Var(z_2) = \frac{1}{N} \sum_{z_2} (z_2 - \bar{z_2})^2 ||w^2||_2 = 1$$

$$(w^1)^T w^2 = 0$$



主成分分析: 推导

- 根据 $z_1 = (w^1)^T x$ 以及 $\bar{z}_1 = \frac{1}{N} \sum z_1 = \frac{1}{N} \sum (w^1)^T x = (w^1)^T \frac{1}{N} \sum x = (w^1)^T \overline{x}$ • 得到 $Var(z_1) = \frac{1}{N} \sum (z_1 - \bar{z}_1)^2 = \frac{1}{N} \sum ((w^1)^T x - (w^1)^T \overline{x})^2$ $= \frac{1}{N} \sum ((w^1)^T (x - \overline{x}))^2 = (w^1)^T \frac{1}{N} \sum (x - \overline{x})(x - \overline{x})^T w^1$ $= (w^1)^T Cov(x) w^1 = (w^1)^T Sw^1$
- 因此, 主成分分析的目标函数为

$$\max(\mathbf{w}^{1})^{T} S \mathbf{w}^{1}$$
s. t. $\|\mathbf{w}^{1}\|_{2} = (\mathbf{w}^{1})^{T} \mathbf{w}^{1} = 1$



主成分分析: 推导

$$\max(\mathbf{w}^1)^T S \mathbf{w}^1$$
 s.t. $\|\mathbf{w}^1\|_2 = (\mathbf{w}^1)^T \mathbf{w}^1 = 1$

•根据拉格朗日乘子法[Bishop, Appendix E]

$$g(\mathbf{w}^1) = (\mathbf{w}^1)^T S \mathbf{w}^1 - \alpha ((\mathbf{w}^1)^T \mathbf{w}^1 - 1)$$

= α 选择最大的特征值

w¹ 是协方差矩阵S的一个特征向量



主成分分析: 推导

$$\max(\mathbf{w}^{2})^{T}S\mathbf{w}^{2} \quad s. t. (\mathbf{w}^{2})^{T}\mathbf{w}^{2} = 1 \quad (\mathbf{w}^{2})^{T}\mathbf{w}^{1} = 0$$

$$g(\mathbf{w}^{2}) = (\mathbf{w}^{2})^{T}S\mathbf{w}^{2} - \alpha((\mathbf{w}^{2})^{T}\mathbf{w}^{2} - 1) - \beta((\mathbf{w}^{2})^{T}\mathbf{w}^{1} - 0)$$

$$\frac{\partial g(\mathbf{w}^{2})}{\partial \mathbf{w}_{1}^{2}} = 0$$

$$\frac{\partial g(\mathbf{w}^{2})}{\partial \mathbf{w}_{2}^{2}} = 0$$

$$\vdots$$

$$S\mathbf{w}^{2} - \alpha\mathbf{w}^{2} - \beta\mathbf{w}^{1} = 0$$

$$= ((\mathbf{w}^{1})^{T}S\mathbf{w}^{2})^{T} = (\mathbf{w}^{2})^{T}S^{T}\mathbf{w}^{1}$$

$$= (\mathbf{w}^{2})^{T}S\mathbf{w}^{1} = \lambda_{1}(\mathbf{w}^{2})^{T}\mathbf{w}^{1} = 0$$

$$S\mathbf{w}^{1} = \lambda_{1}\mathbf{w}^{1}$$

$$\beta = 0: \quad S\mathbf{w}^{2} - \alpha\mathbf{w}^{2} = 0 \quad S\mathbf{w}^{2} = \alpha\mathbf{w}^{2}$$

w²是协方差矩阵s的一个特征向量

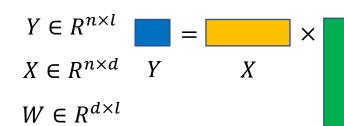
对应于第二大特征值1/2



主成分分析: 算法描述

- 假设有 $n \cap d$ 维样本数据所构成的集合 $X^{org} = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$,其中 $x_i (1 \le i \le n) \in R^d$
- 主成分分析的主要步骤:
 - 数据预处理: $X = \frac{X^{org} \mu}{\sigma}$
 - 计算协方差矩阵: $\Sigma = \frac{1}{n-1}X^TX$
 - 求得协方差矩阵∑的特征向量和特征根
 - 取前*l*个最大特征根所对应的特征向量组成映射矩阵W
 - 给定一个样本 x_i ,可将 x_i 从d维空间如下映射到l 维空间: $(x_i)_{1\times d}(W)_{d\times l}$
 - 将所有降维后数据用Y表示,有 $\underline{Y} = \underline{XW}$

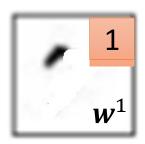
降维 原始映射结果 数据矩阵



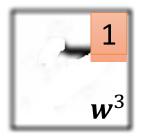


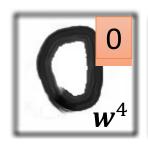
主成分分析: 另一个角度

主成分:



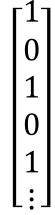




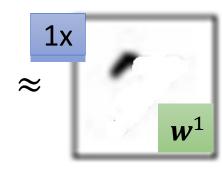


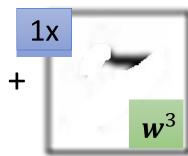


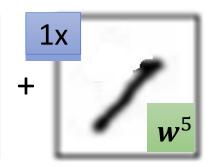
•••••











$$x \approx y_1 w^1 + y_2 w^2 + \dots + y_K w^K + \overline{x}$$

手写数字
图像的像
素值表达



主成分分析: 另一个角度

$$x - \overline{x} \approx y_1 w^1 + y_2 w^2 + \dots + y_K w^K = \widehat{x}$$

重构误差: $\|(x-\overline{x})-\hat{x}\|_2$

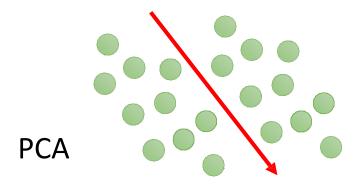
优化问题:通过最小化L得到w,

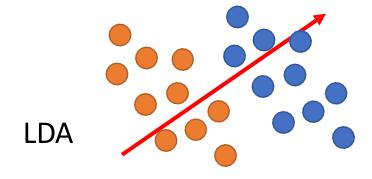
$$L = \min_{\{w^1, ..., w^K\}} \sum_{k=1}^{K} \left\| (x - \overline{x}) - (\sum_{k=1}^{K} y_k w^k) \right\|_{2}$$



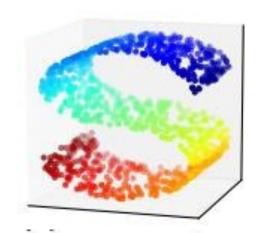
PCA的缺点

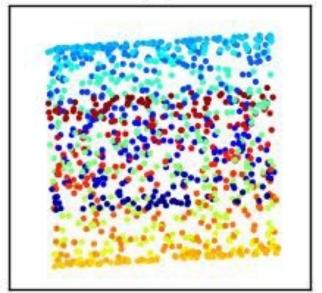
• 无监督





• 线性

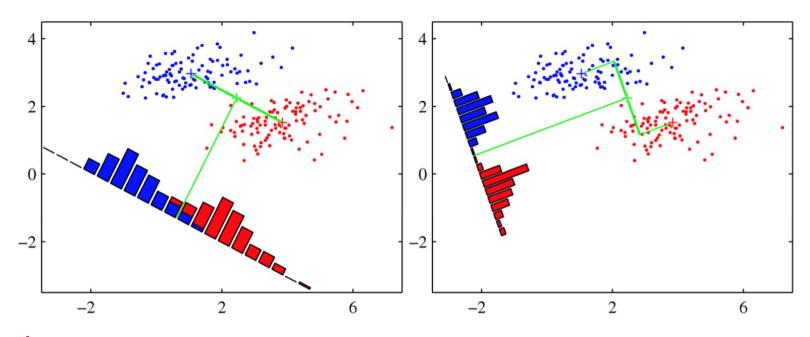




http://www.astroml.org/book_figures/c hapter7/fig_S_manifold_PCA.html



回顾:线性判别分析



• Fisher准则

■ 在要求类间差异尽量大的同时,要求类内数据在投影以后尽量集中。

$$J(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^T S_b \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_w \mathbf{w}}$$



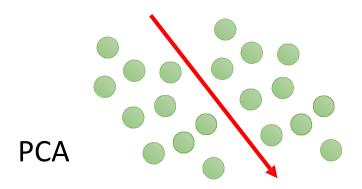
主成分分析: 与线性判别分析法的异同

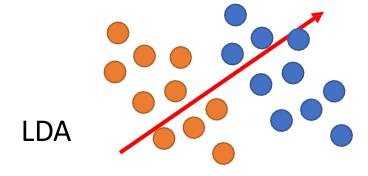
	Fisher线性判别分析	主成分分析
是否需要样本标签	监督学习	无监督学习
降维方法	优化寻找特征向量w	优化寻找特征向量w
目标	类内方差小、类间距离大	寻找投影后数据之间方差最大的投 影方向
维度	LDA降维后所得到维度是与数据样 本的类别个数 <i>K</i> 有关	PCA对高维数据降维后的维数通常远 小于原始数据特征维度即可



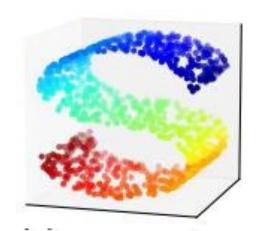
主成分分析的缺点

• 无监督





• 线性



http://www.astroml.org/book figures/chapter7/fig S manifold PCA.html



其他常用降维方法

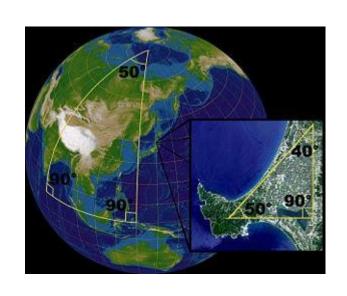
- 非负矩阵分解(non-negative matrix factorization, NMF)
- 多维尺度法(Metric multidimensional scaling, MDS)
- 流形学习:局部线性嵌入(Locally Linear Embedding, LLE)

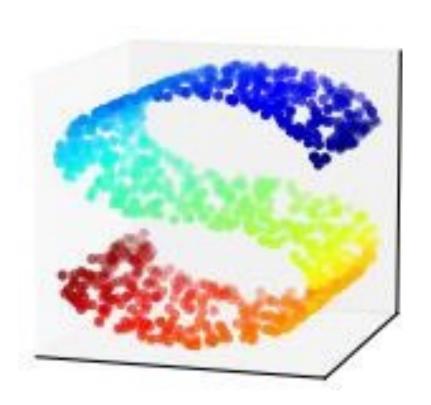


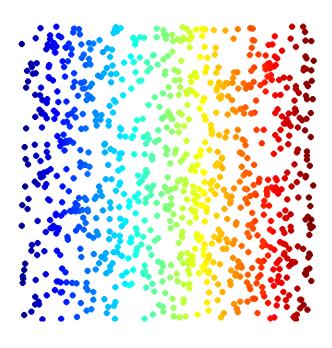
局部线性嵌入(Locally Linear Embedding, LLE)

- PCA、NMF和MDS都属于线性降维方法,LLE是一种非线性降维方法。
- LLE的基本假设是:一个流形的局部可以近似于一个欧式空间,每个样本均可以利用其邻居进行线性重构。换句话说,如果假设数据是局部线性的(即使数据的原始高维空间是非线性流形嵌入),于是可以用和邻居数据的线性关系进行局部重构。
- 局部线性嵌入保留了每个数据的局部性质,利用局部线性来逼近全局非线性,通过相互重 叠的局部邻域提供全局结构信息,最终保持数据整体几何信息。

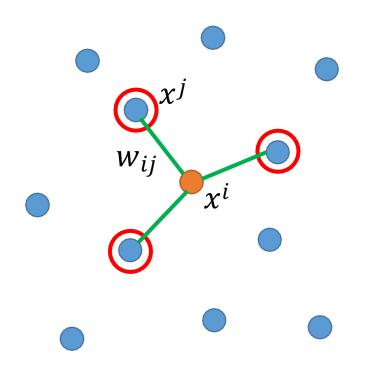












 w_{ij} 表示 x^i 和 x^j 之间的关系

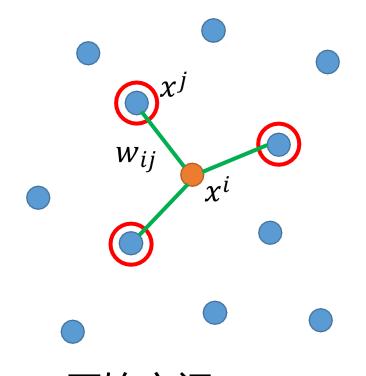
找到一组wij 以最小化

$$\sum_{i} \left\| x^{i} - \sum_{j} w_{ij} x^{j} \right\|_{2}$$

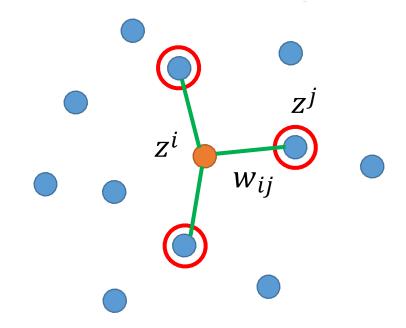
然后基于 w_{ij} 找出降维后的结果 z^i 和 z^j



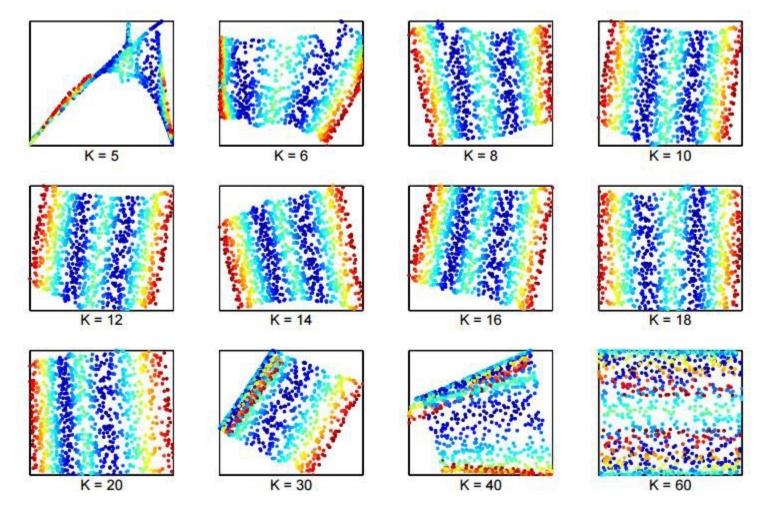
保持 wii 不变



找出一组
$$z^i$$
 以最小化:
$$\sum_i \left\| z^i - \sum_j w_{ij} z^j \right\|_2$$







Lawrence K. Saul, Sam T. Roweis, "Think Globally, Fit Locally:Unsupervised Learning of Low Dimensional Manifolds", JMLR, 2013 https://cs.nyu.edu/~roweis/lle/



更多非线性降维方法

- 局部线性嵌入 Locally Linear Embedding (LLE): [Alpaydin, Chapter 6.11]
- 拉普拉斯特征图 Laplacian Eigenmaps: [Alpaydin, Chapter 6.12]
- t-SNE
 - Laurens van der Maaten, Geoffrey Hinton, "Visualizing Data using t-SNE", JMLR, 2008
 - Excellent tutorial: https://github.com/oreillymedia/t-SNE-tutorial



- 一、K均值聚类
- 二、主成分分析
- 三、特征人脸方法
- 四、潜在语义分析
- 五、期望最大化算法



特征人脸方法: 动机

- 特征人脸方法是一种应用主成份分析来实现人脸图像降维的方法,其本质是用一种称为"特征人脸(eigenface)"的特征向量按照线性组合形式来表达每一张原始人脸图像,进而实现人脸识别。
- •由此可见,这一方法的关键之处在于如何得到特征人脸。

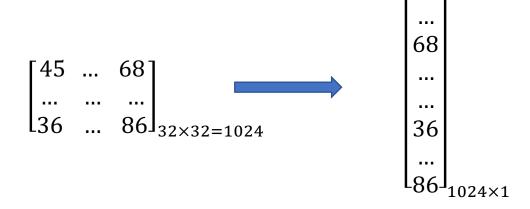
用(特征)人脸表示人脸,而非用像素点表示人脸



特征人脸方法: 算法描述







г45⁻

- 将每幅人脸图像转换成列向量
- 如将一幅32×32的人脸图像转成1024×1的列向量

特征人脸: 算法描述

 $Y \in R^{n \times l}$ $X \in R^{n \times d}$ $W \in R^{d \times l}$

- 输入: $n \cap 1024$ 维人脸样本数据所构成的矩阵X, 降维后的维数l
- 输出:映射矩阵 $W = \{w_1, w_2, ..., w_l\}$ (其中每个 w_j ($1 \le j \le l$)是一个特征人脸)
- 算法步骤:
 - 1: 对于每个人脸样本数据 x_i 进行中心化处理: $x_i = x_i \mu$, $\mu = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_j$
 - 2: 计算原始人脸样本数据的协方差矩阵: $\Sigma = \frac{1}{n-1}X^TX$
 - 3: 对协方差矩阵Σ进行特征值分解,对所得特征根从到小排序 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_d$
 - 4: 取前l个最大特征根所对应特征向量 $w_1, w_2, ..., w_l$ 组成映射矩阵W
 - 5:将每个人脸图像 x_i 按照如下方法降维: $(x_i)_{1\times d}(W)_{d\times l}=1\times l$



特征人脸: 算法描述

- 每个人脸特征向量 $oldsymbol{w}_i$ 与原始人脸数据 $oldsymbol{x}_i$ 的维数是一样的,均为1024。
- 可将每个特征向量还原为32×32的人脸图像, 称之为特征人脸, 因此可得到l个特征人脸。

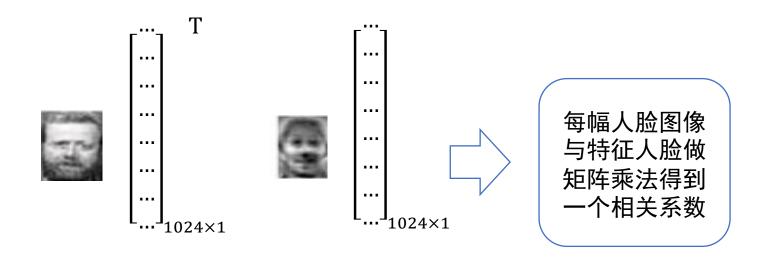


400个人脸(左)和与之对应的36个特征人脸



基于特征人脸的降维

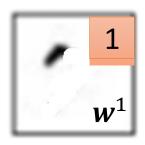
- 将每幅人脸分别与每个特征人脸做矩阵乘法,得到一个相关系数
- · 每幅人脸得到l个相关系数⇒每幅人脸从1024维约减到l维



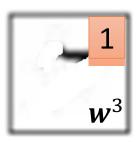


主成分分析: 另一个角度
$$\hat{x} = \sum_{k=1}^{K} y_k w^k \longleftrightarrow (x - \overline{x}) \quad y_k = (x - \overline{x}) \cdot w^k$$

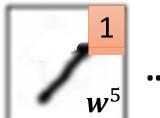
主成分:



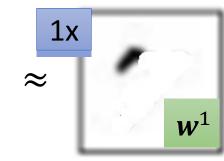


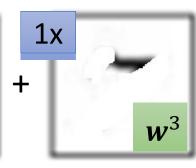


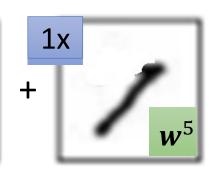












 $\mathbf{x} \approx y_1 \mathbf{w}^1 + y_2 \mathbf{w}^2 + \dots + y_K \mathbf{w}^K + \overline{\mathbf{x}}$ 手写数字 图像的像 素值表达



基于特征人脸的降维

由于每幅人脸是所有特征人脸的线性组合,因此就实现人脸从"像素点表 达"到"特征人脸表达"的转变。每幅人脸从1024维约减到l维。



 $= \alpha_{i1} \times \left| +\alpha_{i2} \times \right| + \dots + \alpha_{il} \times \left| + \dots + \alpha_{il} \times \right|$









 $(\alpha_{i1}, \dots \alpha_{il})$

 \boldsymbol{x}_i

使用l个特征人脸的线性组合来表达原始人脸数据 x_i

 x_i 的像素点 空间表达 32×32

 x_i 的人脸子 空间的1个系 数表达

在后续人脸识别分类中,就使用这1个 系数来表示原始人脸图像。即计算两 张人脸是否相似,不是去计算两个 32×32矩阵是否相似,而是计算两个 人脸所对应的1个系数是否相似



人脸表达的方法对比: 聚类、主成份分析、非负矩阵分解

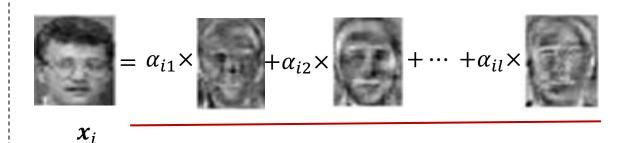


 \boldsymbol{x}_i

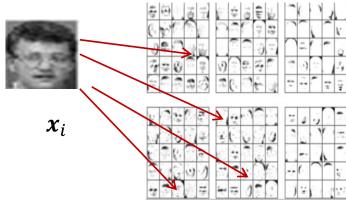
聚类表示:

用待表示人 脸最相似的 聚类质心来 表示





特征人脸(主成分分析)表示:使用l个特征人脸的线性组合来表达原始人脸数据 x_i





人脸表达后的分析与处理

