

人工智能

第9讲:机器学习-无监督学习II

张晶

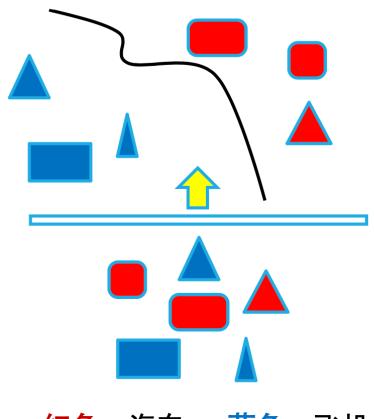
2023年春季

● 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

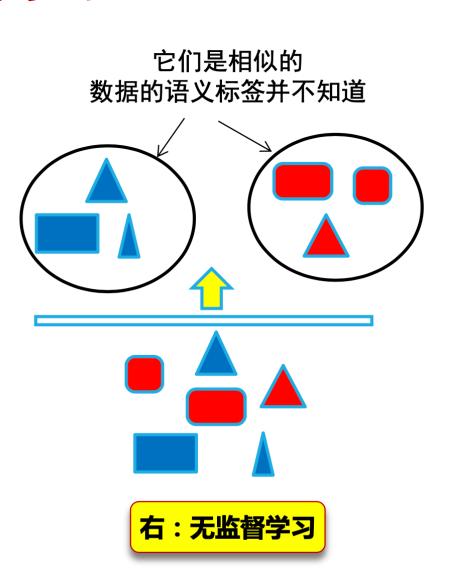


监督学习 versus 无监督学习



红色: 汽车 蓝色: 飞机

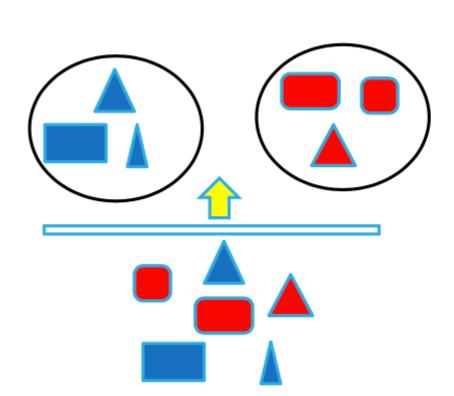
左:监督学习



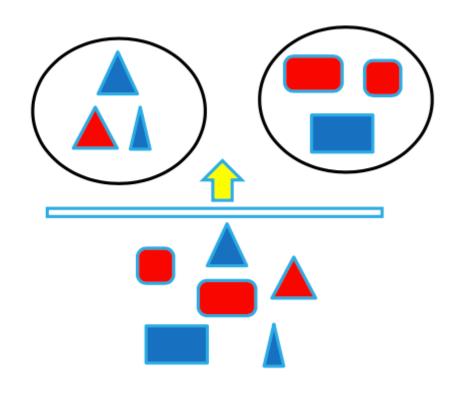


无监督学习:数据特征和相似度函数都很重要

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



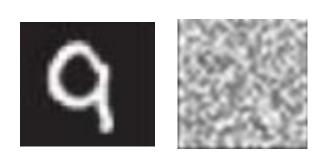
回顾: K均值聚类 (K-means 聚类)

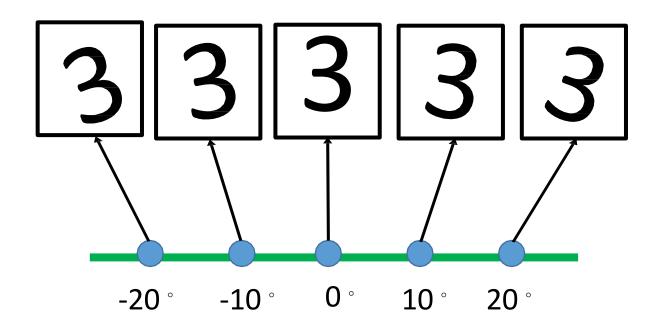




回顾: 主成分分析: Principle Component Analysis (PCA)

- 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"



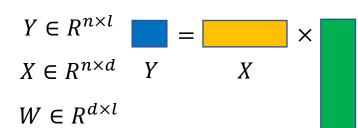




回顾: 主成分分析: 算法描述

- 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 $x_i (1 \le i \le n) \in \mathbb{R}^d$
- 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 $\underline{Y} = \underline{XW}$

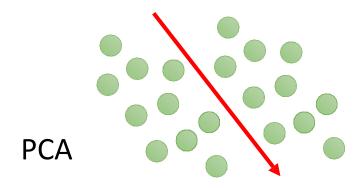
降维 原始映射 结果 数据矩阵

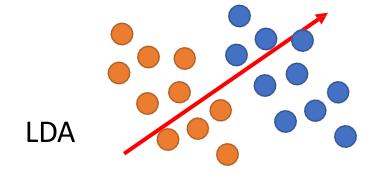




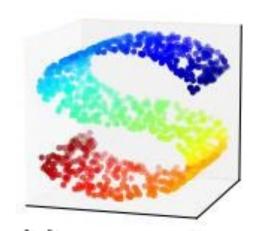
回顾: 主成分分析的缺点

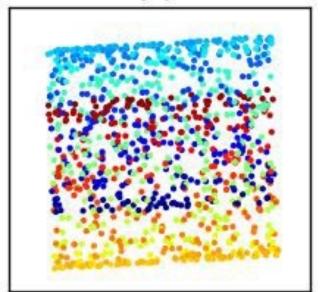
• 无监督





• 线性

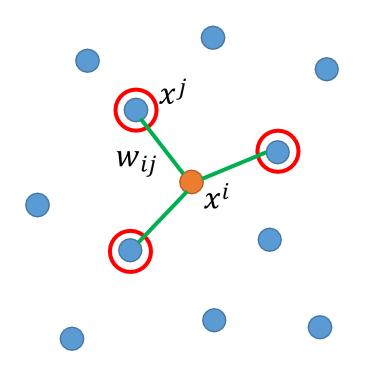




http://www.astroml.org/book_figures/c hapter7/fig_S_manifold_PCA.html



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



 w_{ij} 表示 x^i 和 x^j 之间的关系

找到一组wij 以最小化

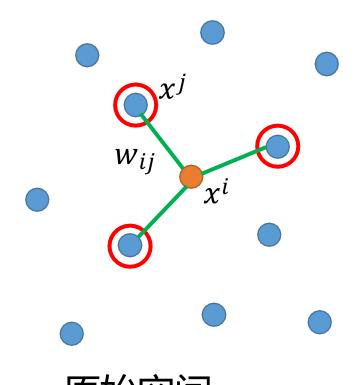
$$\sum_{i} \left\| x^{i} - \sum_{j} w_{ij} x^{j} \right\|_{2}$$

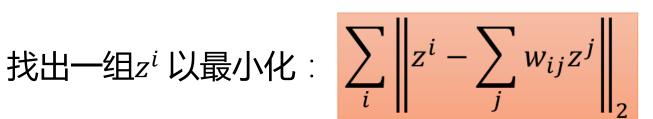
然后基于 w_{ij} 找出降维后的结果 z^i 和 z^j

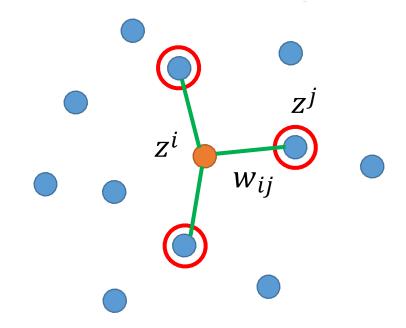


回顾: 局部线性嵌入 (Locally Linear Embedding, LLE)

保持 wij 不变









回顾: 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。



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









 \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l个系数是否相似



- 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



潜在语义分析(Latent Semantic Analysis): 动机

- 潜在语义分析是一种从海量文本数据中学习单词-单词、单词-文档以及文档-文档之间隐性关系, 档以及文档-文档之间隐性关系, 进而得到文档和单词表达特征的方法。
- 该方法的基本思想是综合考虑某些单词在哪些文档中同时出现,以此来决定该词语的含义与其他的词语的相似度。

潜在语义分析,又叫 隐性语义分析(latent semantic analysis, LSA 或latent semantic indexing, LSI)



潜在语义分析思想

- · 潜在语义分析先构建一个单词-文档(term-document)矩阵A
- 进而寻找该矩阵的低秩逼近(low rank approximation)[Markovsky 2012]
- 来挖掘单词-单词、单词-文档以及文档-文档之间的关联关系。



潜在语义分析思想

机器学习(Machine Learning):

a1: Efficient Algorithms for Non-convex Isotonic Regression through Submodular Optimization

a2: Combinatorial Optimization with Graph Convolutional Networks and Guided Tree Search

a3: An Improved Analysis of Alternating Minimization for Structured Multi-Response Regression

a4: Analysis of Krylov Subspace Solutions of Regularized Non-Convex Quadratic Problems

a5: Post: Device Placement with Cross-Entropy Minimization and Proximal Policy Optimization

基因编辑(gene editing)类别:

b1: CRISPR/Cas9 and TALENs generate heritable mutations for genes involved in small RNA processing of Glycine max and Medicago truncatula

b2: Generation of D1-1 TALEN isogenic control cell line from Dravet syndrome patient iPSCs using TALEN-mediated editing of the SCN1A gene

b3: Genome-Scale CRISPR Screening Identifies Novel Human Pluripotent Gene Networks

b4: Champions: A phase 1/2 clinical trial with dose escalation of SB-913 ZFN-mediated in vivo human genome editing for treatment of MPS II (Hunter syndrome)



机器学习(Machine Learning):

a1: Efficient Algorithms for Non-convex Isotonic Regression through Submodular Optimization

■ 第一步: 计算单词-文档矩阵

	a1	a2	a3	a4	a5	b1	b2	b 3	b4
nonconvex	1	0	0	1	0	0	0	0	0
regression	1	0	1	0	0	0	0	0	0
optimization	1	1	0	0	1	0	0	0	0
network	0	1	0	0	0	0	0	1	0
analysis	0	0	1	1	0	0	0	0	0
minimization	0	0	1	0	1	0	0	0	0
gene	0	0	0	0	0	1	1	1	0
syndrome	0	0	0	0	0	0	1	0	1
editing	0	0	0	0	0	0	1	0	1
human	0	0	0	0	0	0	0	1	1

表中数据表示某个单词在某个文档标题中出现的次数



机器学习(Machine Learning):

- a1: Efficient Algorithms for Non-convex Isotonic Regression through Submodular Optimization
- a2: Combinatorial Optimization with Graph Convolutional Networks and Guided Tree Search

a3: An Improved Analysis of Alternating Minimization for Structured Multi-Response Regression

- a4: Analysis of Krylov Subspace Solutions of Regularized Non-Convex Quadratic Problems
- a5: Post: Device Placement with Cross-Entropy Minimization and Proximal Policy Optimization

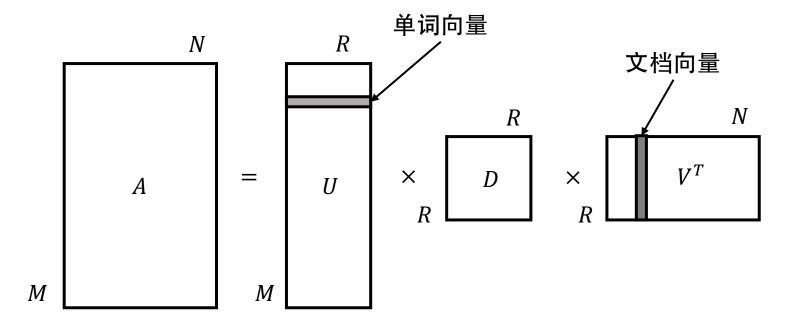
基因编辑(gene editing)类别:

- b1: CRISPR/Cas9 and TALENs generate heritable mutations for genes involved in small RNA processing of Glycine max and Medicago truncatula
- b2: Generation of D1-1 TALEN isogenic control cell line from Dravet syndrome patient iPSCs using TALEN-mediated editing of the SCN1A gene
- b3: Genome-Scale CRISPR Screening Identifies Novel Human Pluripotent Gene Networks
- b4: Champions: A phase 1/2 clinical trial with dose escalation of SB-913 ZFN-mediated in vivo human genome editing for treatment of MPS II (Hunter syndrome)



■ 第二步: 奇异值分解

图5.8 单词-文档矩阵的奇异值分解示意



假设单词总数为M,文档总数为N,R为被分解矩阵的秩



回顾: 主成分分析-最小化重构误差

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

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

优化问题:通过最小化L得到w,

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

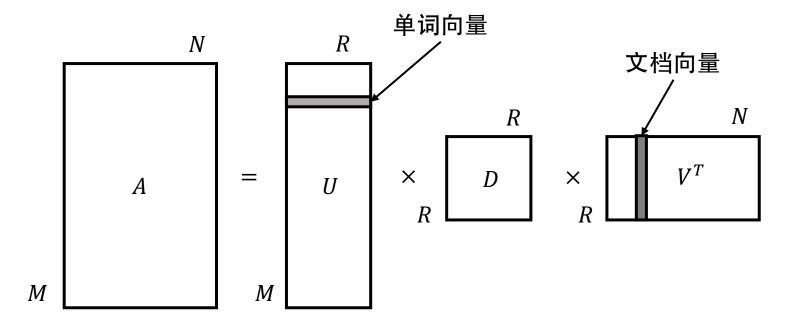
优化过程:对 $x-\overline{x}$ 进行奇异值分解,得到的U矩阵即为K个w构成映射矩阵。

(与最大化方差目标函数求解结果相同!)



■ 第二步: 奇异值分解

图5.8 单词-文档矩阵的奇异值分解示意



假设单词总数为M,文档总数为N,R为被分解矩阵的秩



■ 第二步: 奇异值分解

$$U = \begin{cases} -0.09 & -0.38 & -0.14 & -0.04 & 0.71 & -0.02 & 0.12 & 0.33 & 0.45 & -0. \\ -0.1 & -0.47 & -0.2 & -0.06 & 0. & -0.06 & -0.76 & -0.38 & -0.01 & 0. \\ -0.18 & -0.53 & 0.44 & 0.51 & 0. & -0.14 & 0.16 & 0.09 & -0.42 & -0. \\ -0.28 & -0.08 & 0.57 & -0.23 & -0. & 0.32 & 0.17 & -0.5 & 0.38 & 0. \\ -0.07 & -0.35 & -0.4 & -0.46 & -0. & 0.22 & 0.46 & -0.19 & -0.45 & -0. \\ -0.09 & -0.38 & -0.14 & -0.04 & -0.71 & -0.02 & 0.12 & 0.33 & 0.45 & -0. \\ -0.52 & 0.13 & 0.16 & -0.47 & 0. & -0.65 & -0.04 & 0.16 & -0.11 & -0. \\ -0.45 & 0.16 & -0.32 & 0.34 & -0. & 0.01 & 0.11 & -0.19 & 0.08 & 0.71 \\ -0.45 & 0.16 & -0.32 & 0.34 & -0. & 0.01 & 0.11 & -0.19 & 0.08 & -0.71 \\ -0.42 & 0.1 & 0.09 & -0.11 & -0. & 0.63 & -0.32 & 0.49 & -0.22 & -0. \end{cases}$$

对表5.2中的单词-文档矩阵进行奇异值分解,得到的结果展示。

$$V^{T} = \begin{cases} -0.15 & -0.18 & -0.1 & -0.06 & -0.11 & -0.21 & -0.58 & -0.49 & -0.54 \\ -0.59 & -0.26 & -0.51 & -0.31 & -0.39 & 0.06 & 0.19 & 0.07 & 0.18 \\ 0.05 & 0.57 & -0.42 & -0.3 & 0.17 & 0.09 & -0.26 & 0.46 & -0.3 \\ 0.27 & 0.18 & -0.37 & -0.33 & 0.32 & -0.31 & 0.13 & -0.54 & 0.38 \\ 0.5 & 0. & -0.5 & 0.5 & -0.5 & 0. & 0. & 0. & -0. \\ -0.19 & 0.15 & 0.11 & 0.16 & -0.14 & -0.53 & -0.52 & 0.25 & 0.53 \\ -0.51 & 0.36 & -0.19 & 0.62 & 0.3 & -0.04 & 0.21 & -0.2 & -0.1 \\ 0.05 & -0.56 & -0.33 & 0.19 & 0.58 & 0.21 & -0.3 & 0.2 & 0.16 \\ 0.07 & -0.27 & -0.07 & 0. & 0.14 & -0.72 & 0.38 & 0.33 & -0.36 \end{cases}$$



\boldsymbol{A}	=
Л	_

nonconvex

optimization network

analysis minimization

editing human • 下面给出了选取矩阵U、矩阵D和矩阵V的子部分重建所得矩阵 $A_2 = \sum_{i=1}^2 u_i \sigma_i v_i^T$

	(a1	a2	a3	a4	a5	b1	b2	b3	<i>b</i> 4
	nonconvex	0.56	0.27	0.49	0.3	0.37	-0.01	-0.05	0.05	-0.05
	regression	0.68	0.33	0.59	0.36	0.45	-0.01	-0.06	0.05	-0.06
	optimization	0.79	0.4	0.68	0.41	0.53	0.02	0.02	0.14	0.02
	network	0.22	0.18	0.17	0.1	0.15	0.13	0.36	0.32	0.33
$A_2 = \langle$	analysis	0.51	0.25	0.44	0.27	0.34	-0.01	-0.06	0.03	-0.06
	minimization	0.56	0.27	0.49	0.3	0.37	-0.01	-0.05	0.05	-0.05
	gene	0.01	0.16	-0.03	-0.02	0.02	0.29	0.81	0.66	0.75
	syndrome	-0.05	0.11	-0.07	-0.05	-0.02	0.26	0.72	0.58	0.67
	editing	-0.05	0.11	-0.07	-0.05	-0.02	0.26	0.72	0.58	0.67
	ig(human	0.01	0.13	-0.02	-0.01	0.02	0.23	0.65	0.53	0.6



 $corr(X,Y) = \frac{Cov(X,Y)}{\sqrt{Var(X)Var(Y)}} = \frac{Cov(X,Y)}{\sigma_x \sigma_y}$

- 第四步:挖掘语义关系
- 基于原始单词-文档矩阵A, 可以计算任意两个文档之间 的皮尔逊相关系数,从而得 到文档-文档相关系数矩阵:

基于重建单词-文档矩阵A₂,可以计算任意两个文档之间的皮尔逊相关系数,从而得到文档-文档相关系数矩阵:



- 通过观察两个相关系数矩阵可以发现,基于重建单词-文档矩阵A₂得到的相关系数矩阵中文档-文档之间的相关关系更加明确,由于经过隐性语义分析,可以看到相关性矩阵中的数值已经可以反映不同文档蕴含的语义关系。
- 机器学习类别所包含五篇文档的平均相关性上升到0.989,基因编辑类别所包含四篇文档的平均相关性上升到1.00。机器学习类别所包含文档与基因编辑类别所包含文档之间的平均相关性为-0.93。
- 可以看出,隐性语义分析对原始单词-文档矩阵中所蕴含关系进行了有效挖掘,能刻画单词-单词、单词-文档以及文档-文档之间语义关系。



- · 与PCA的关系:
 - LSA可以看出是PCA的一种特殊应用
 - PCA通过先通过标准化预处理数据: $X = \frac{X^{\sigma rg} \mu}{\sigma}$
 - LSA实际是没有经过数据标准化的PCA
 - 因为在文本分析问题中,如果进行标准化,一些不重要的低频词的作用 会被放大。



- 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



- 假设需要调查我们学校学生的身高分布。
- 假设学校所有学生的身高服从正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ 。
- 这个分布的均值 μ 和方差 σ^2 未知。
- 可以用极大似然法估计未知参数!
 - 未知参数: 均值 μ 和方差 σ^2



- •上面假设学校所有学生的身高服从正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ 。
- 但实际情况是男生和女生分别服从两种不同的正态分布:
 - 男生 $\in N(\mu_1, \sigma_1^2)$
 - 女生 $\in N(\mu_2, \sigma_2^2)$
- 这两个分布的均值 μ_1 、 μ_2 和方差 σ_1^2 、 σ_2^2 未知。
- 如果能够分别对男生、女生进行数据采样
- 依然可以用极大似然法分别估计未知参数!
 - 未知参数:均值 μ_1 和方差 σ_1^2 以及均值 μ_2 和方差 σ_2^2



- •上面假设学校所有学生的身高服从正态分布 $N(\mu,\sigma^2)$ 。
- 但实际情况是男生和女生分别服从两种不同的正态分布:
 - 男生 $\in N(\mu_1, \sigma_1^2)$
 - 女生 $\in N(\mu_2, \sigma_2^2)$
- 这两个分布的均值 μ_1 、 μ_2 和方差 σ_1^2 、 σ_2^2 未知。
- 如果无法分别对男生、女生进行数据采样(男女为隐变量)
- 使用期望最大化算法分别估计未知参数!
 - 未知参数:均值 μ_1 和方差 σ_1^2 以及均值 μ_2 和方差 σ_2^2



期望最大化(expectation maximization, EM)

- EM算法是一种重要的用于解决含有<mark>隐变量(latent variable)</mark>问题的参数估 计方法。
- EM算法分为求取期望(E步骤, expectation)和期望最大化(M步骤, maximization)两个步骤。
 - 在EM算法的E步骤时,先假设模型参数的初始值,估计隐变量取值;
 - 在EM算法的M步骤时,基于观测数据、模型参数和隐变量取值一起来最大化"拟合"数据,更新模型参数。
- 基于所更新的模型参数,得到新的隐变量取值(EM算法的 E 步),然后继续极大化"拟合"数据,更新模型参数(EM算法的M步)。
- 以此类推迭代,直到算法收敛,得到合适的模型参数。



从K均值聚类到期望最大化算法

- K均值算法可以被看做EM算法的一种特殊实现
- 其隐变量即为各聚类中心
- 在E步骤中,通过欧氏距离来估计各数据点最有可能归属于哪个 聚类中心;
- 在M步骤中,通过计算均值更新聚类中心位置来最大化这些数据 点属于该聚类中心的可能性。



EM算法更多阅读:

- Book:
 - PRML, Section 9, Mixture Models and EM
- Tutorial:
 - Do, C., Batzoglou, S. What is the expectation maximization algorithm?. *Nature Biotechnology*, **26**, 897–899 (2008). https://doi.org/10.1038/nbt1406



总结

- 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



作业一

$\mathbf{Q} \mathbf{4}$

假设家庭成员知识图谱如图1所示。分别运用FOIL算法和路径排序算法推出James和Ann的Mother关系。

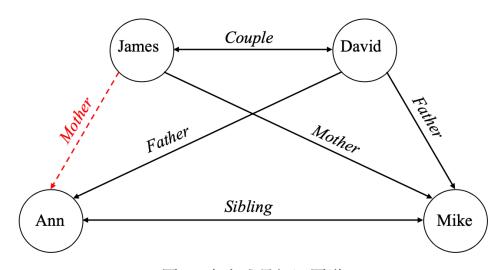


图 1: 家庭成员知识图谱



作业一

- 常见问题:
 - 关于箭头方向
 - 关于训练集构建
 - 关于分类器

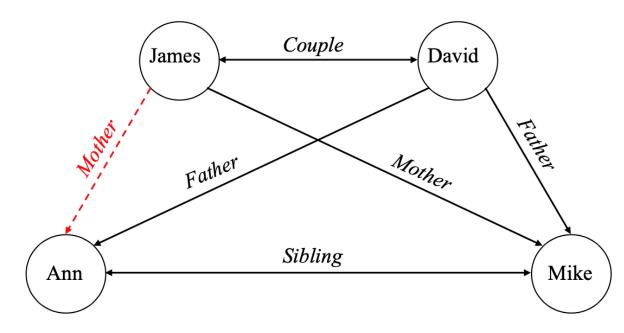


图 1: 家庭成员知识图谱



作业一

Q 5

表 1给出了不同年龄段运动人数、胆固醇超标人数以及胆固醇超标率的统计数据。请对这些数据进行分析,解释运动情况跟胆固醇超标率的关系。

表 1: 申请人数与录取人数数据

年龄	运动人数	胆固醇超标人数	胆固醇超标率(%)	不运动人数	胆固醇超标人数	胆固醇超标率(%)
50-60	825	575	70	25	22	88
40-50	560	353	63	108	75	70
30-40	417	138	33	300	131	44
20-30	373	22	6	375	65	17
总计	2175	1088	50	808	293	36

作业一、二典型问答题

Q5

表 1给出了不同年龄段运动人数、胆固醇超标人数以及胆固醇超标率的统计数据。请对这些数据进行分析,解释运动情况跟胆固醇超标率的关系。

表 1: 申请人数与录取人数数据

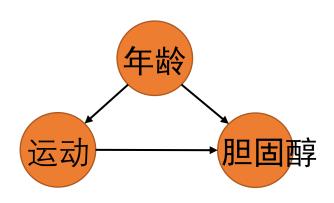
年龄	运动人数	胆固醇超标人数	胆固醇超标率(%)	不运动人数	胆固醇超标人数	胆固醇超标率(%)
50-60	825	575	70	25	22	88
40-50	560	353	63	108	75	70
30-40	417	138	33	300	131	44
20-30	373	22	6	375	65	17
总计	2175	1088	50	808	293	36

作业一

- 1. 分析数据,定义变量
 - X = 0表示不运动,X = 1表示运动
 - *Z* = 0,1,2,3 分别表示不等年龄层次
 - Y = 0表示胆固醇不超标, Y = 1表示胆固醇超标
- 2. 构建因果图
- 3. 根据因果图发现运动和胆固醇之间存在"年龄"这个混杂因子,
 - 需要进行调整公式计算,从而得到真正的因果效应:

•
$$P(Y = 1|do(X = 1)) = \sum_{i=0}^{3} P(Y = 1|X = 1, Z = i)P(Z = i)$$

•
$$P(Y = 1|do(X = 0)) = \sum_{i=0}^{3} P(Y = 1|X = 0, Z = i)P(Z = i)$$





• 作业二

Q 3

奖励

图4展示了一个蒙特卡洛树搜索的例子。其中每个叶子结点(终止结点)下标出了该结点的奖励。为了最大化取得的奖励,可利用蒙特卡洛树搜索求解奖励的最大路径。假设执行了若干步骤后,算法的状态如图4所示,结点内的数字分别表示"总奖励/访问次数",虚线结点表示尚未扩展的结点。算法此时正要开始下一轮的选择-扩展-模拟-反向传播的迭代。

- a) 假设UCBI算法中的超参数C=1, 请计算并画出算法选择过程经过的路径。
- b) 请继续执行扩展、模拟、反向传播步骤,并画出完成后的搜索树状态。(为了避免随机性,假设扩展总是扩展最左侧的未扩展结点,模拟总是选择最左侧的路径)。
- c) 尝试进行若干次迭代,请问此时算法是否能有效地找到奖励最大的叶子结点(奖励为9),那么进行足够多次迭代以后又如何?如果希望提高算法的效果,应该做出怎样的调整?

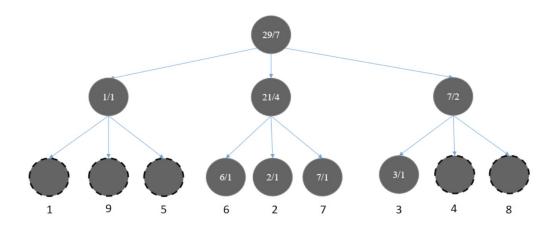


图 4: 一棵蒙特卡洛树搜索的搜索树



• 作业二

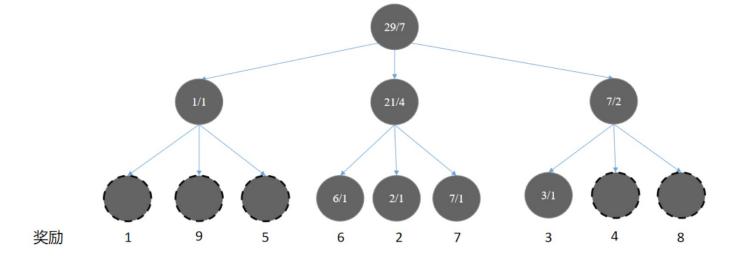


图 4: 一棵蒙特卡洛树搜索的搜索树

- 常问问题:
 - 子结点奖励数和访问次数加起来不等于其父结点奖励数和访问次数
- 答疑
 - 其父结点可能在之前的步骤中被扩展并模拟过