

# 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用 未知目标检测 论文阅读报告

报告人：宋明辉

HPCL

April 24, 2018

# 报告内容

- 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用
- 2 未知目标检测

# 报告说明

在这一部分，将省略物理背景，而将关注以下几点：

- 实验目的
- 应用背景及输入的数据格式 (而不关注数据产生背后的物理原理)
- 用到的算法
- 结果

[1] Ueno, T. etc. 2018. Adaptive design of an X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy experiment with Gaussian process modelling. npj Computational Materials

[2] Li, L.etc. 2018. Machine learning-enabled identification of material phase transitions based on experimental data: Exploring collective dynamics in ferroelectric relaxors. Science Advances

- 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用
  - 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
  - 基于机器学习算法分析材料的相变
  - 小结
  
- 2 未知目标检测
  - 研究现状
  - 未知目标检测与 Zero-shot Learning
  - Unseen Class Discovery
  - 相关文献

## 摘要 (目的)

- 借助 Gaussian Process(GP) Regression, 利用少量光谱数据点预测完整连续的光谱, 分析材料的磁矩 (Magnetic Moments)
- 减少试验次数, 提高效率

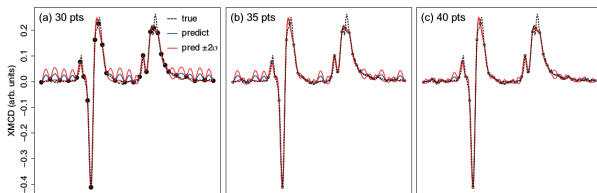


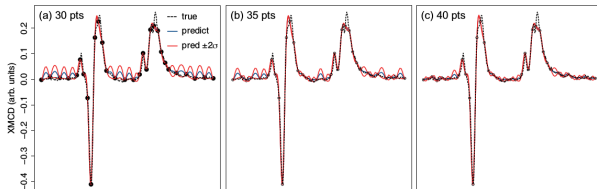
Fig. 1 : 示意图

图中, Black Dashed: 真实的光谱数据; Blue Solid: GP 的预测结果; Black filled circles: 用到的数据点; Red Solid: 预测波形的  $\pm 2\sigma$  置信区间.

## 背景

为了得到材料的光谱图进行分析，  
**传统的做法：**

- 利用大量不同波长 Wavelength 或能量 (Energy) 的 X 射线对材料进行扫描 (Point by Point Scanning)，得到满足信噪比要求的光谱图<sup>1</sup>。
- 实验测量 (Measurement) 与分析 (Analysis) 是分离的



<sup>1</sup>与 Wavelength 或 Energy 成非线性关系

## 实验手段对比

为了得到材料的光谱图进行分析，

**传统的做法：**

- 利用大量不同波长 Wavelength 或能量 (Energy) 的 X 射线对材料进行扫描 (Point by Point Scanning)，得到满足信噪比要求的光谱图<sup>2</sup>。
- 实验测量 (Measurement) 与分析 (Analysis) 是分离的

**论文提出的解决思路：**

- 初始化
  - 在  $S_m M_{4,5}$  吸收谱的 Pre-edge、Post-edge 之间均匀采样 (30 个)
  - 在峰值附近采样
- 采样新的数据点  
若初始化中得到的数据点不满足需要，则重新进行采样。
- 利用 GP 对离散的采样点进行插值回归，得到连续的图谱

<sup>2</sup>与 Wavelength 或 Energy 成非线性关系

## 新的测量方式

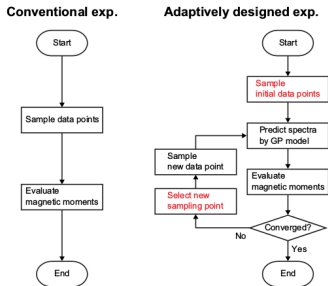


Fig. 2: 对比图

注意，判断算法的有效性是通过计算磁矩来确定的，而不是预测完全正确的光谱。

与传统的测量方式相比，优势在于：

- 依靠高效的采样、GP 回归策略，降低了所需的数据采样点。Initial data points 只需要 30 个

采样策略同样对结果具有较大的影响。在 Select new sampling point 中用的策略：

- 最大方差采样
- 随机采样
- 以方差为权重的随机采样



## 几种采样类型的实际表现

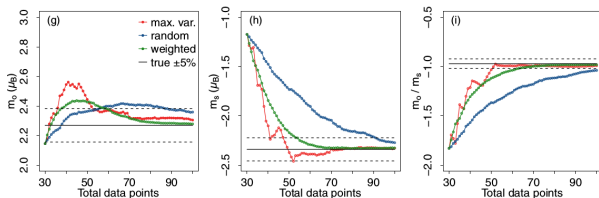


Fig. 3：三类采样方式的实验效果

可以看出，**最大方差采样**效果最好，收敛速度最快。

## 具体算法

- 实验设置
  - $S_mC_{o_5}$  的 XMCD(X-ray Magnetic Circular Dichroism) 以及 XAS(X-ray Absorption Spectrum) 光谱
  - $FeC_o$  合金的上述光谱
- Magneto-optical sum rules  
对 XMCD 与 XAS 光谱应用 Magneto-optical Sum Rules 可以得到材料的磁矩: Orbital Magnetic Moment( $m_o$ ), Spin Magnetic Moment( $m_s$ )
- GP 产生连续光谱

## GP 回归算法 --模型

- 模型

构建输入与输出的关系。

$$y(x_i) = \mu + z(x_i), i \in 1, \dots, n$$

其中,  $x_i$  为 Energy(或波长),  $y(x_i)$  为对应的输出, 即光谱。在高斯模型中,  $z(x_i)$  为正态分布:  $z(x_i) \sim \text{Norm}_x(0, \sigma^2 R_{ij})$ ,  $R_{ij}$  为高斯相关函数  $R_{ij} = \exp(-\theta |x_i - x_j|^2)$ , 最终得到  $Y$  符合多元高斯分布:

$$Y \sim \text{Norm}_Y(\mathbf{1}_n \mu, \sigma^2 R)$$

- 学习

利用最大似然法确定模型中的参数  $\theta$ 。

- 推理

对于新得到的数据进行预测。

# GP 回归算法 -- 学习与推理

- 学习

最大化似然法计算  $\hat{\theta}$ :

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta} \log[\operatorname{Pr}(Y|X, \theta)]$$

- 推理

利用学习得到的  $\hat{\theta}$ , 进行预测:

$$\hat{y}(x^*) = \hat{\mu} + r^T R^{-1} (Y - \mathbf{1}_n \hat{\mu})$$

Figure 3 consists of three subplots, (a), (b), and (c), each showing the evolution of a mass ratio  $m_e/m_b$  over a range of total data points from 30 to 100. The x-axis for all plots is 'Total data points' with ticks at 30, 50, 70, and 90. The y-axis for all plots is ' $m_e/m_b$ '.

- Plot (a):** The y-axis ranges from 2.0 to 3.0. The 'true' value (black line) starts at approximately 2.8 and decreases to about 2.2. The 'Gaussian' model (red line with dots) follows the true value closely. The 'Exp. (p=1)' model (blue line with dots) starts at ~2.8 and drops sharply to ~2.2 by 50 data points. The 'Matérn (k=0.5)' (green), 'Matérn (k=1)' (purple), and 'Matérn (k=1.5)' (brown) models start at ~2.8 and drop to ~2.2 by 50 data points, with some initial oscillations.
- Plot (b):** The y-axis ranges from -3.0 to 0.0. The 'true' value (black line) starts at approximately -1.0 and increases to about -0.5. The 'Gaussian' model (red line with dots) follows the true value closely. The 'Exp. (p=1)' model (blue line with dots) starts at ~-1.0 and drops sharply to ~-2.5 by 50 data points. The 'Matérn (k=0.5)' (green), 'Matérn (k=1)' (purple), and 'Matérn (k=1.5)' (brown) models start at ~-1.0 and drop to ~-2.5 by 50 data points, with some initial oscillations.
- Plot (c):** The y-axis ranges from -4 to 0. The 'true' value (black line) starts at approximately -1.0 and decreases to about -3.0. The 'Gaussian' model (red line with dots) follows the true value closely. The 'Exp. (p=1)' model (blue line with dots) starts at ~-1.0 and drops sharply to ~-3.0 by 50 data points. The 'Matérn (k=0.5)' (green), 'Matérn (k=1)' (purple), and 'Matérn (k=1.5)' (brown) models start at ~-1.0 and drop to ~-3.0 by 50 data points, with some initial oscillations.

- 通过在少量 Energy 得到的离散光谱点，利用 GP 回归算法得到连续的光谱图，然后进行磁矩分析，提高了实验效率
- 在进行 GP 计算时，可以进一步借助一些近似算法来加快计算。

- 预测的光谱图与实际光谱图之间还是有差距，只不过满足了后续的磁矩分析要求的精度
- 可进一步提高收敛速度

## 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用

- 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
- 基于机器学习算法分析材料的相变
- 小结

## 2 未知目标检测

- 研究现状
- 未知目标检测与 Zero-shot Learning
- Unseen Class Discovery
- 相关文献

## 摘要 (目的)

- 利用机器学习算法，在序参量<sup>3</sup>未知的情况下，得到材料的纳米尺度的结构相变图，以及临界区 (Critical Regimes) 及相界 (Phase Boundaries) 等。

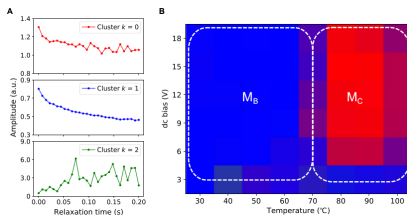


Fig. 4: 示意图

<sup>3</sup>相变临界点的一个物理量，如温度、电压等

## 背景

### 相变 (Phase Transition):

- 研究相变，有助于研究相变临界区发生的磁极系数 (Susceptibility) 的增强 (Enhancement)
- 相变可由序参数 (Order parameter) 表征
- 对于纳米尺度的结构，序参数的确定是十分复杂的，无论是理论研究还是实验研究，均是如此
- 可以利用机器学习自动生成特征 (Feature) 代替不可测量 (Unmeasurable。或未知 Unknown) 的序参数

### 测量装置:

- Piezoresponce Force Microscopy(PFM), 可以测量纳米尺度下 Piezoresponce 效应, 序参数未知
- 材料: PMN-27.5PT Crystals



## 实验步骤

- **开始:**  
测量 2D Ising System 的参数: Ferromagnetic(逆磁性)-to-Paramagnetic(顺磁性) 的相变、比热容。自由度 (DoF) 已知
- **施加电场**  
对应于不同的电场强度, 测量若干个 “Relaxation Curves”:  
 $A = A_1, A_2, \dots, A_n, A_i \in R^d$ ,  $n=100$  为 Curves 的数量,  $d=28$  为维度、等于测量次数 (number of time steps)。此时 DoF 未知
- **改变温度**  
对应每一个电场强度, 测试八种不同的温度。所以共:  $100 * 8$  个松弛曲线
- **利用 K-means 对上述 Curves 进行聚类**  
类别数  $k$  由人为输入, 试验中,  $k = 3$

## 用到的机器学习算法 --PCA

试验中，共设置了  $n=100$  个不同的电场强度，对应于每一个电场强度是维度  $d=28$  的一维向量，表征在  $d$  个不同时间点测量得到的数据；同时，试验中进一步设置了 8 个不同的温度。因此，得到的输入数据为一个  $800 \times 28$  的矩阵。

- PCA

对输入矩阵  $M$  进行 SVD 分解

$$M = USV^T$$

矩阵  $V$  中每一列为  $M$  的奇异向量，其对应的奇异值降序排列，在分析实验数据时，基于  $V$  的前若干列(主成份)进行分析相变情况。示意图见下页。

## 实验结果 --PCA

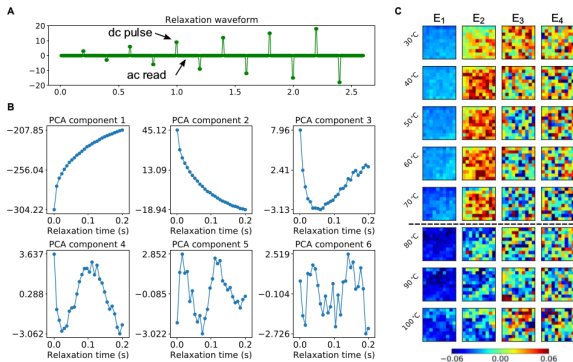


Fig. 5 : PCA 结果

从图 c 中可以看出，前两个最大的奇异值在  $70^{\circ}\text{C}$  与  $80^{\circ}\text{C}$  之间变化较大，意味着相变发生。

## 用到的机器学习算法 --K Means

### PCA 算法的缺点:

- 缺少物理解释
- 在辨别不同相 (Phase) 时, 特征值较小但比较重要的成份被忽略

### 改进 (使用 K-means):

$$\operatorname{argmin} \sum_{j=1}^k \sum_{A \in S_j} \|A - \mu_j\|^2$$

其中,  $A$  为输入的 28 维向量, 代表一个测量曲线,  $\mu_j$  为第  $j$  类的中心,  $S_j$  为属于第  $j$  类的向量的集合。

- 使用所有数据, 而不像 PCA 那样仅使用少数数据
- 每一类中心对应与材料的一种“相”(Phase)

## 实验结果 --K Means

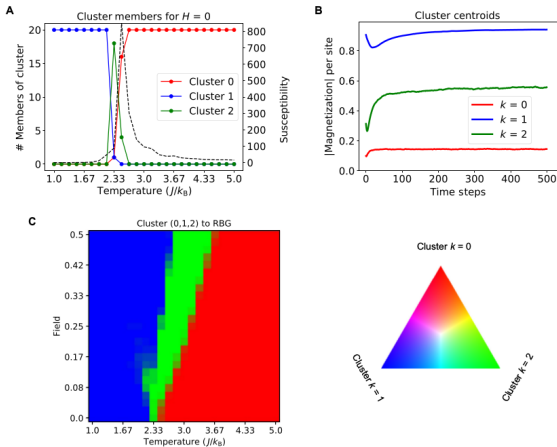


Fig. 6 : K-Means 结果

## 优势与不足

- **优势:**

- 基于实验数据，可自动生成相变图，而无需复杂的计算序参数
- 算法较简单

- **不足:**

- 需要人为输入聚类数，即  $k$

## 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用

- 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
- 基于机器学习算法分析材料的相变
- 小结

## 2 未知目标检测

- 研究现状
- 未知目标检测与 Zero-shot Learning
- Unseen Class Discovery
- 相关文献

# 机器学习在材料相变、光谱分析中的应用两篇论文小结

这两个实验：

- 体现了在两个方面的应用：

- 改进实验手段 (如降低光谱图生成过程中所需的数据点 (Scanning points))
- 帮助实验结果的数据分析

- 具有以下特点：

- 用到的机器学习算法都比较简单，如 K-Means, PCA, 高斯回归等
- 提高了实验效率



## 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用

- 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
- 基于机器学习算法分析材料的相变
- 小结

## 2 未知目标检测

- 研究现状
- 未知目标检测与 Zero-shot Learning
- Unseen Class Discovery
- 相关文献

# 未知目标检测科学问题

未知目标检测与以下几个研究方向比较接近：

- **One-shot/Few-shot Learning**

少样本学习。

训练集中存在少量的目标类型样本。

- **Zero-shot Learning (ZSL)**

零样本学习。

训练集中不存在目标类型样本，测试集中不存在已知类型样本。

- **Open-set Recognition**

最符合我们的目的。测试集里面同时存在已知与未知目标类型。

- **Life-long Machine learning**

## 相关算法

- 基于高层特征 ----属性的学习算法
- 迁移学习
- 增量学习 (Incremental Learning)
- RNN Memory Based
- 度量学习
- 元学习 (Meta Learning)
- Learning to learn
- 关系网络 (Relation Network)  
等。

# 未知目标检测与 Zero-shot Learning

文章 [1] 中对 Zero-shot Learning (ZSL) 的解释:

*ZSL aims to recognize an object instance from a new category **never seen** before.*

*The task of identifying classes without any observed data is called ZSL.*

*\*\* The ZSL can be considered a type of life-long learning. ... This ability is termed "learning to learn".*

文章 [2] 中对未知目标检测的叙述:

*... This situation calls for open-world classification or simply open classification which can classify those examples from the seen classes and also detect/reject examples from unseen or novel classes.*

# Recent Advances in ZSL

## Recent Advances in Zero-shot Recognition.

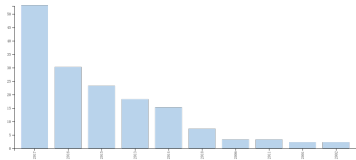


Fig. 7: 相关文章数，关键字：Zero shot learning

- 基本框架  
借助语义的帮助，进行识别。步骤：
  - 基于 Embedding Model 建立目标(包括已知与未知)与语义之间的映射关系
  - 基于 Recognition 模块判断目标是否为未知

文章分别对上述两个步骤进行了综述。[4] 与 [3](CVPR2018 Oral) 基本符合这个框架。

# 未知目标检测

## Unseen Class Discovery in Open-world classification

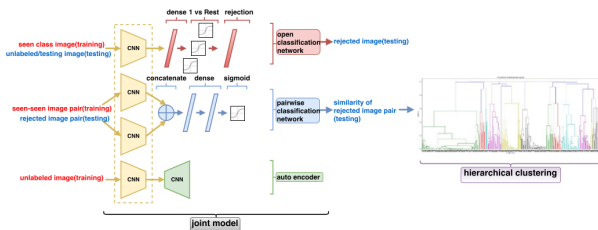


Fig. 8：示意图

由四部分组成：Open Classification Network(OCN), Pairwise Classification Network(PCN), Auto-encoder, Hierarchical clustering

## 算法细节

- OCN:  
结构：一层卷积 + 最大池化层 + 两层全连接 + ReLU + 1-vs-rest layer  
主要通过 1-vs-rest 层实现未知目标检测，以 m 个 sigmoid 函数 + 阈值的方式实现
- PCN:  
判断一对目标是否属于同一类
- Auto-encoder  
对未知目标生成表示
- Hierarchical clustering  
对未知目标 (Rejected object) 进行聚类学习。

# References I

-  Yanwei Fu, etc. *Recent Advances in Zero-shot Recognition*. [arXiv:1710.04837](#), 2017.
-  Lei Shu, Hu Xu, Bing Liu. *Unseen Class Discovery in Open-world Classification*. [arXiv:1801.05609](#), 2018.
-  Xiaolong Wang, Yufei Ye, Abhinav Gupta. *Zero-shot Recognition via Semantic Embedding and Knowledge Graphs*. [arXiv:1803.08035](#), 2018.
-  Yan Li, etc. *Discriminative Learning of Latent Features for Zero-Shot Recognition*. [arXiv:1803.06731](#), 2018.
-  Chen Zhiyuan, Bing Liu. *Lifelong machine learning*. *Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning*, 2016.



## 研究课题组

付彦伟、

- 付彦伟，复旦大学大数据学院
- Lampter,
- Liu Bing，伊利诺伊大学洛杉矶分校

请各位老师、同学批评指正！