Security Level:



- 0 机器学习
- 1 监督学习--回归
- 2 监督学习--分类
- 3 非监督学习--聚类
- 4 非监督学习--降维
- 5 神经网络与深度学习
- 6 关于模型评价标准





3.1 聚类分析

- 聚类: 根据数据的"相似性"将数据归纳为多类的过程
- 良好的聚类效果需满足:
 - 。 同一类中,样本之间保证高相似性
 - 。类与类之间,样本之间要高差异性或不相似
- 相似性衡量标准的选择,对于聚类(clustering)十分重要
- 如何评估样本之间相似性? 相似性的衡量标准?



(1) 相似性



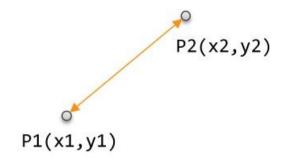


(2) 相似性衡量方法

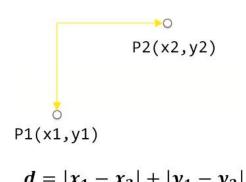
(1) 欧氏距离

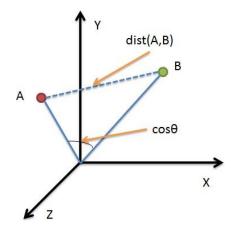
(2) 曼哈顿距离

(3) 余弦相似度



$$d = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \qquad d = |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2|$$





(3) 典型聚类算法

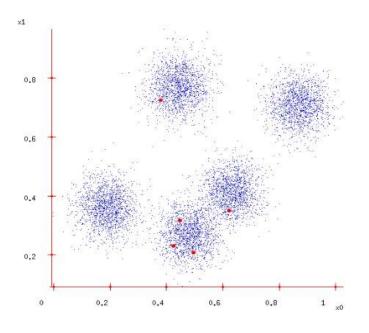
- K-means: 建立数据的不同分割,并用欧氏距离等评价 聚类结果
- GMM:对于每个类假定一个分布模型,试图找到每个 类最好的模型
- Aprior: 从数据背后发现事物之间可能存在的关联或者 联系



- k-means算法也就是k均值算法
- k-means算法以k为参数,把n个对象分成k个簇(类)
- 处理过程1:

。 选择k个点作为初始的聚类中心;

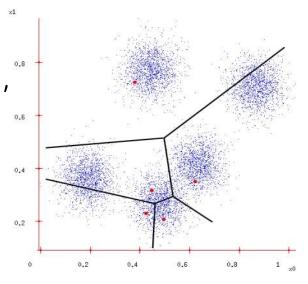
$$\mu^{(0)} = \mu_1^{(0)}, \dots, \ \mu_k^{(0)}$$



- k-means算法也就是k均值算法
- k-means算法以k为参数,把n个对象分成k个簇(类)
- 处理过程2:

。剩下的点,根据其与聚类中心的<mark>欧式距离</mark>, 将其归入最近的簇

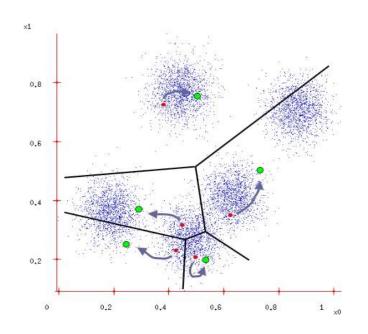
$$C^{(t)}(j) \leftarrow \arg\min_{i} ||\mu_i - x_j||^2$$



- » k-means算法也就是k均值算法
- > k-means算法以k为参数,把n个对象分成k个簇(类)
- > 处理过程3:

。对每个簇,计算所有点的<mark>均值</mark> 作为新的聚类中心

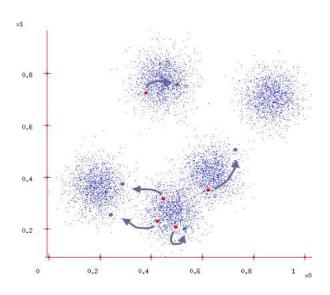
$$\mu_i^{(t+1)} \leftarrow \arg\min_{\mu} \sum_{j:C(j)=i} ||\mu - x_j||^2$$



- k-means算法也就是k均值算法
- k-means算法以k为参数,把n个对象分成k个簇(类)
- 处理过程4:

■ 重复(2),(3)步骤, 直到聚类中心不再发生改变

$$F(\mu, C) = \sum_{j=1}^{m} ||\mu_{C(j)} - x_j||^2 \quad \min_{\mu} \min_{C} F(\mu, C)$$





3.2 K-means---关键问题导读

(1)K值怎么确定?

- 解决方案:根据实际的业务需求,人工来指定。
- (2)关于初始质心的选择,会对分类结果产生很大影响,可能偏离全局最优解或者增加计算量。
 - 解决方案:随机多次选择不同的初始聚类中心,反复多次进行实验。
- (3)如何判断算法是否该停止?
 - 解决方法:随机选择质心,迭代计算每个数据到新质心的 距离,直到新质心和原质心相等,算法结束。



3.2 K-means----实例

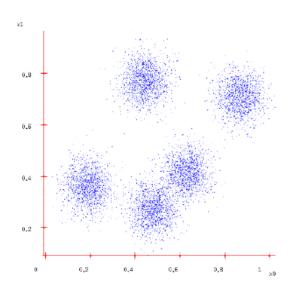
> Kmeans_user_age. clustering

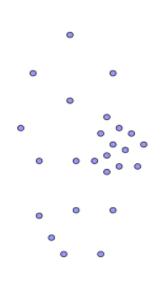
3.2 K-means---局限性

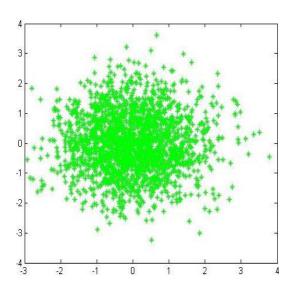
- 属于"硬聚类",每个样本只能属于一个类别。
- K-means对异常点的"免疫力"差,异常值对其聚类中心影响比较大(改进:中心不直接取均值,而是找均值最近的样本点代替 -- k-medoids算法)。
- 对于团状的数据点集区分度好,对于带状(环绕)等"非凸"形状不太好。



GMM的产生解决了K-means的局限性







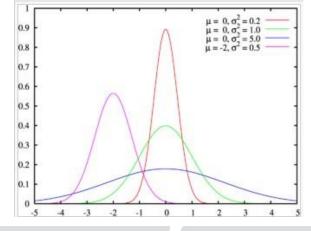


- 1 GMM是如何解决上述问题:
 - 求解每个测试数据属于某个类别的概率(软指标)
- 2 GSM (高斯模型)
 - 。 给定均值和方差,将一个事物分解为基于高斯概率密度函数 (正态分布曲线)形成的模型,表示随机变量每个取值有多大

的可能性

$$P(x) = arphi(x;\mu,\sigma) = rac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp(-rac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$$

$$\theta = (\mu, \sigma^2)$$





- 3 GMM (高斯混合模型)
 - □ K个GSM混合成一个GMM,每个GSM称为GMM的一个component,也就是分为K个类。

$$P(y \mid \theta) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \phi(y \mid \theta_k)$$

- 求和式的各项的结果就分别代表样本y属于各个类的概率
- ak: 样本y属于第k个类的概率



属于假设有K个类,样本数量分别为N₁,N₂,...,N_k且N₁+N₂+...+N_k=N,即有观测数据y₁,y₂,...,y_k,第k个分类的样本集合表示为S(k),上式中的三个参数可表示为:

$$\alpha_{k} = N_{k}/N \qquad = \frac{P(z = k \mid y_{j}, \theta)}{\sum_{k=1}^{K} P(z = k, y_{j} \mid \theta)} \qquad \alpha_{k} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk}}{N} \qquad (10)$$

$$\mu_{k} = \frac{1}{N_{k}} \sum_{y \in S(k)} y \qquad = \frac{P(y_{j} \mid z = k, \theta) P(z = k \mid \theta)}{\sum_{k=1}^{K} P(y_{j} \mid z = k, \theta) P(z = k \mid \theta)} \qquad \mu_{k} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk} y_{j}}{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk}} \qquad (11)$$

$$\sigma_{k}^{2} = \frac{1}{N_{k}} \sum_{y \in S(k)} (y - \mu_{k})^{2} \qquad = \frac{\alpha_{k} \phi(y_{j} \mid \theta_{k})}{\sum_{k=1}^{K} \alpha_{k} \phi(y_{j} \mid \theta_{k})} \qquad \sigma_{k}^{2} = \frac{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk} (y_{j} - \mu_{k})^{2}}{\sum_{j=1}^{N} \gamma_{jk}} \qquad (12)$$

ak指的是第k个component被选中的概率, rjk需要对所有的数据 j 进行累加



选取初始值 θ^0 初始化 θ ,

repeat{

(1)估计每个数据的每个component生成概率,即 $^{\gamma_{jk}}$:

$$\gamma_{jk} = \frac{\alpha_k \phi(y_j \mid \theta_k)}{\sum_{k=1}^K \alpha_k \phi(y_j \mid \theta_k)}$$

(2)根据 $^{\gamma_{jk}}$,估计每个component的参数,得:

}直到收敛



3.3 GMM—GMM与K-means

- 4 GMM与K-means相同点
 - 。 需要指定K值
 - 需要指定初始值,K-means的中心点,GMM的参数
 - 都是含有EM算法思想
- 5 GMM与K-means不同点
 - □ 优化目标函数不同, K-means: 最短距离(硬指标); GMM: 最大 化log似然估计, 求解每个观测数据属于每个component的概率 (软指标)



3.4 Aprori算法

- 关联分析是一种在大规模数据集中寻找有趣关系的任务
- 这些任务有两种形式: 频繁项集和关联规则
 - 。频繁项集:经常出现在一块的物品的集合;
 - 。 关联规则: 两种物品之间可能存在很强的关系;
- 关联分析典型方法: Apriori算法

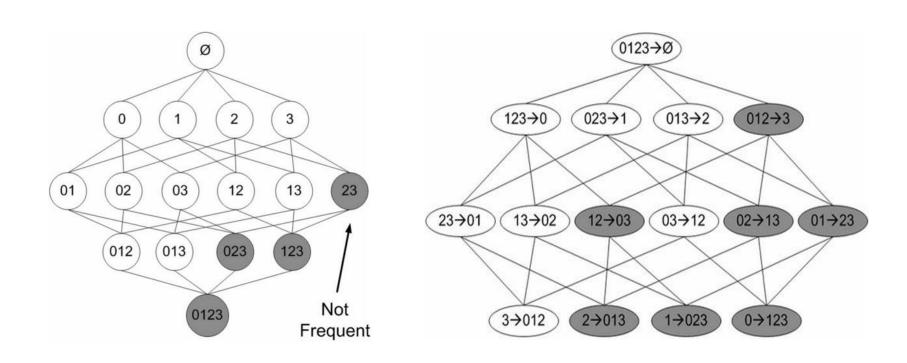


3.4 Aprori算法

- 1 使用Apriori算法来发现频繁项集
 - 两个输入参数分别是最小支持度和数据集,根据最小支持度确实频 繁项集。
- 2 从频繁项集中挖掘关联规则
 - 从一个频繁项集开始,创建一个规则列表,首先将规则的右边限定为一个元素,对这些规则进行测试,接下来合并剩下的规则来创建一个新的规则列表,规则的右边限定为两个元素,项集中挖掘关联规则。
- 3Apriori原理是说如果某个项集是频繁的,那么它的所有 子集也是频繁的。



支持度与可信度



支持度 可信度



3.4 Aprori算法

交易号码	商品				
0	豆奶,莴苣				
1	莴苣,尿布,啤酒,甜菜				
2	豆奶,尿布,啤酒,橙汁				
3	莴苣,豆奶,尿布,啤酒				
4	莴苣,豆奶,尿布,橙汁				

> 频繁项集:例{尿布,啤酒}

。 支持度: 数据集中包含指定项集的记录所占的比例

> 从频繁项集到关联规则

□ 可信度: support(P|H)/support(P)



类别 包括的主要算法

- ンナ V M----- 哲分 V MEDOIDC哲分 CLADANC符

划分方法 K-Means算法、K-MEDOIDS算法、CLARANS算法

层次分析法 BIRCH算法、CURE算法、CHAMELEON算法

74 1/17 1/14

基于密度的方法 DBCSCAN算法、DENCLUE算法、OPTICS算法

基于网格的方法 STING算法、CLIOUE算法、WAVE——CLUSTER算法

基于模型的方法 统计学方法、神经网络方法

7法、仲经网络万法



算法名称	算法描述
K-Means	K-均值聚类也称为快速聚类法,在最小化误差函数的基础上将数据划分为预定的类数K。该算法原理简单并便于处理大量数据
K-中心点	K-均值算法对孤立点的敏感性, K-中心点算法不采用簇中对象的平均值作为簇中心, 而选用簇中离平均值最近的对象作为簇中心
系统聚类	系统聚类也称为多层次聚类,分类的单位由高到低呈树形结构,且所 处的位置越低,其包含的对象就越少,但这些对象间的共同特征越多。 该聚类方法只适用在小数据量的时候使用,数据量大的时候速度会非 常慢



- 0 机器学习
- 1 监督学习--回归
- 2 监督学习--分类
- 3 非监督学习--聚类
- 4 非监督学习--降维
- 5 深度学习
- 6 关于模型评价标准





4.1 降维

- 1 降维的过程
 - 降维是指在某些限定条件下,降低随机变量个数,得到一组 "不相关"主变量的过程。
- 2 降维的作用:特征选择和特征提取
 - 特征选择:假定数据中包含大量冗余或无关变量(或称特征、 属性等),旨在从原有变量中找出主要变量。
 - 特征提取:将高维数据转化为低维数据的过程,可能舍弃原数据、构造新变量,其代表方法为主成分分析(PCA)。



4.1 降维

学生编号	语文	数学	物理	化学
1	90	140	99	100
2	90	97	88	92
3	90	110	79	83
2555 5				

如果根据成绩判断学习的情况,直观上,哪些科目成绩对判断结果可能没有影响??

学生编号	数学	物理	化学	语文	历史	英语
1	65	61	72	84	81	79
2	77	77	76	64	70	55
3	67	63	49	65	67	57
4	80	69	75	74	74	63
5	74	70	80	84	82	74
6	78	84	75	62	72	64
7	66	71	67	52	65	57
8	77	71	57	72	86	71
9	83	100	79	41	67	50
197 11	4 2 4		8864 A			

当科目更多,无法直接观察呢??



4.1 降维

- 3 降维后,欲达到的目标
 - 。减少冗余信息造成的误差,可提高识别精度或分类效果
 - 。寻找数据内部的本质结构特征
 - 。加速后续计算的速度
 - 在很多算法中,降维算法成为了数据预处理的一部分,如主成分分析(PCA)。事实上,有一些算法如果没有降维预处理,其实是很难得到很好的效果的。



4.2 PCA

1 PCA降维

- Principal Component Analysis(PCA)是最常用的线性降维方法。
- 。它的目标是通过某种<mark>线性投影</mark>,将高维的数据映射到低维的空间中表示,并期望在所投影的维度上数据的<mark>方差最大</mark>,以此使用较少的数据维度,同时保留住较多的原数据点的特性。

4.2 PCA

- 2 降维的过程(设有m条n维数据)
 - 。 将原始数据按列组成n行m列矩阵X
 - 。数据预处理:将X的每一行(代表一个属性字段)进行零均值化,即减去这一行的均值
 - 。 求出协方差矩阵 $C = \frac{1}{m}XX^{\mathsf{T}}$
 - 。求出协方差矩阵的特征值及对应的特征向量
 - 。将特征向量按对应特征值大小从上到下按行排列成矩阵,取前*k* 行组成矩阵P
 - $\mathbf{Y} = PX$ 即为从n维降维到k维后的数据



4.2 PCA — 关键问题导读

如何选择这个投影方向,才能尽量保留最多的原始信息呢?

解决方案:

。 一种直观的方法是观察,

- 投影后的投影值尽可能分散



4.2 PCA - 实例

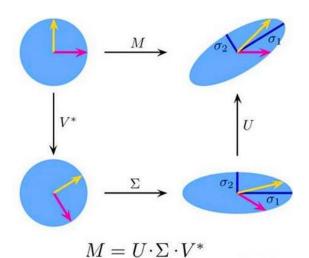
> PCA.example



4.3 SVD

- 1 SVD (奇异值分解) 与 PCA:
 - □ PCA的实现一般有两种,一种是用特征值分解去实现的,一种是用奇异值分解去实现的。

2 SVD实现的原理:





- 0 机器学习
- 1 监督学习--回归
- 2 监督学习--分类
- 3 非监督学习--聚类
- 4 非监督学习--降维
- 5 神经网络与深度学习
- 6 关于模型评价标准



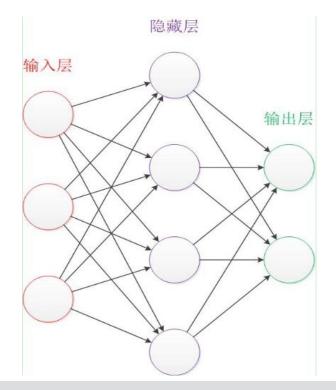


5.1 神经网络与深度学习

- 神经网络,是将许多个单一"神经元"联结在一起,一个 "神经元"的输出就可以是另一个"神经元"的输入。
- 神经网络中,神经元处理单元可表示不同的对象,例如特征、 字母、概念,或者一些有意义的抽象模式。
- 网络中处理单元的类型分为三类:输入单元、输出单元和隐单元。
 - 。 输入单元接受外部的信号与数据;
 - 输出单元实现系统处理结果的输出;
 - 。 隐单元是处在输入和输出单元之间,
 - 神经元间的连接权值反映了单元间的连接强度,信息的表示和处理体现在网络处理单元的连接关系中。

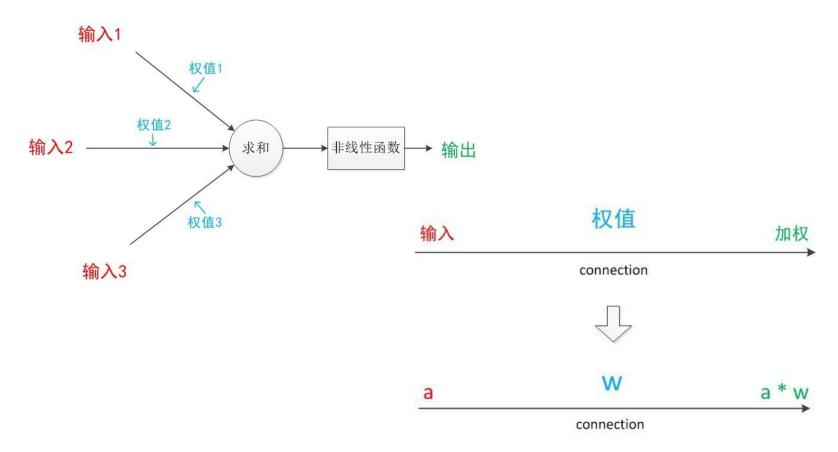


下图是一个包含三个层次的神经网络。红色的是输入层,绿色的是输出层,紫色的是中间层(也叫隐藏层)。输入层有3个输入单元,隐藏层有4个单元,输出层有2个单元。



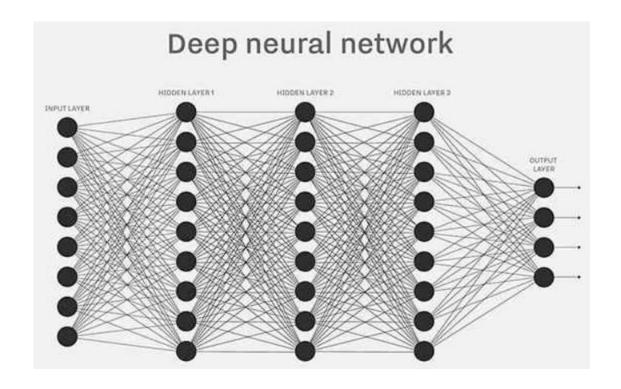


• 神经网络抽象为数学模型



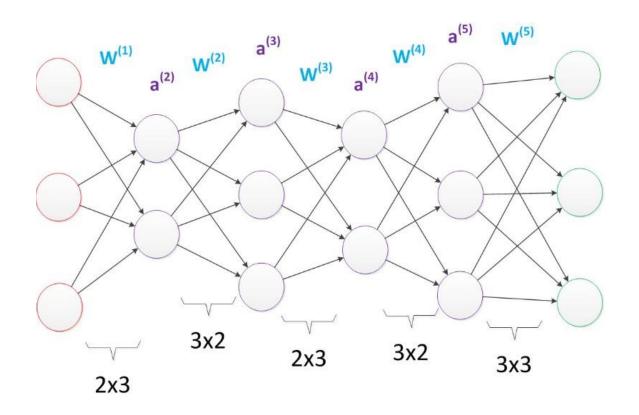


深度学习是基于人工神经网络的研究,含多个隐层的多层感知器就是一种深度学习结构。



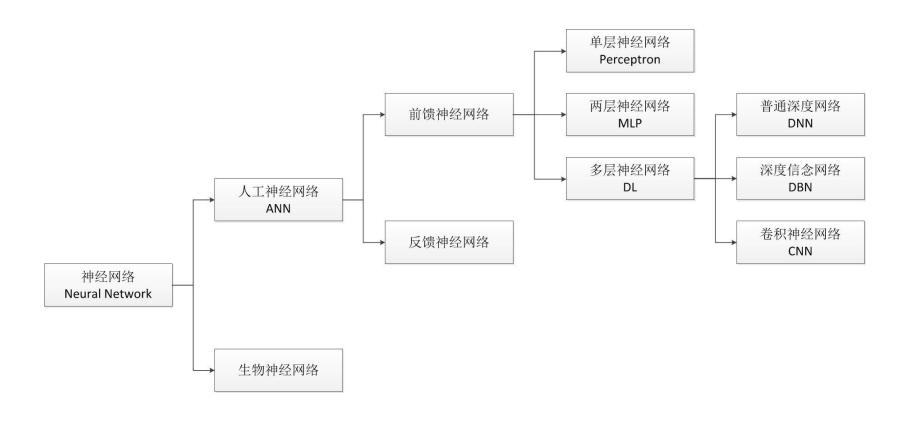


• 深度学习分解为多个简单的网络



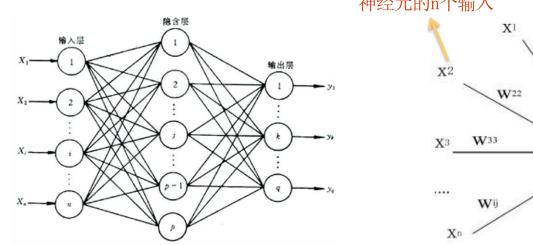


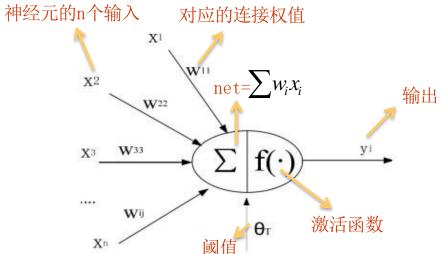
• 神经网络与深度学习的关系与分类





• 人工神经网络 (Artifical Neural Network, ANN) 结构







• 数学建模:

$$o_j = f\left(\text{net}_j\right) = f\left(\sum_{i=1}^n w_{ji} x_i - \theta_j\right) = f\left(\sum_{i=0}^n w_{ji} x_i\right)$$

其中, Θ_j 是阈值; $w_{j0}=-\Theta_j$; $x_0=1$;

训练(学习)过程

- □ Step1 设置连接权W的初值。对权系数W= (w;i) 的各个元素置 一个较小的随机值。
- □ Step2 输入样本 $X=(x_1, x_2, ..., x_n)$,以及它的期望输出 $Y = (y_1, y_2, ..., y_n)$
- 。 Step3 计算感知器的实际输出值 $o_j = f\left(\sum_{i=0}^n \mathbf{w}_{ji} \mathbf{x}_i\right)$
- □ Step4 根据实际输出求误差

$$e_j = y_j - o_j$$



- 训练 (学习) 过程
 - 。Step5 用误差ei去调整权值

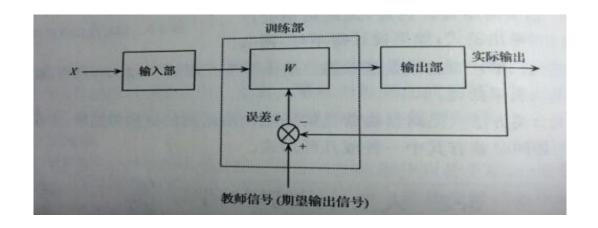
$$w_{ji}(n+1)=w_{ji}(n)+\eta e_{j} x_{i}$$
, $i=0,1, ..., n$

- W_{ii} (n) 是第n次调整连接权值;
- η称为学习效率,且0 < η ≤ 1,用于调整权值的调整速度。通常,η 的取值不能太大,如果η的取值太大,则会影响 W_{ji} (n)的稳定,η的 取值太小则会使 W_{ji} (n)得收敛速度太慢。当实际输出和期望值y相同时,有 W_{ji} (n+1)= W_{ji} (n)。
- 。Step6 转到step2,一直执行到一切样本均稳定为止。



5.3 BP神经网络

- 经典网络模型—BP神经网络
 - BP神经网络(Back Propagation Neural Network),即误差后向传播神经网络,是一种按误差逆向传播算法训练的多层前馈网络,是目前应用最广泛的网络模型之一。





5.3 BP神经网络

• BP神经网络训练过程

E.3 E=E/2.0

```
。 初始化连接权值vki 和wik;
。 初始化精度控制系数ε;
= E= \varepsilon+1;
\square while E > \varepsilon do
 1. E=0
 2. 对S中的每一个样本 (Xp, Yp)
      1. 计算出Xp,对应的实际输出op;
  2. 计算出E<sub>p</sub>;
      E.2.3 E=E+E_p;
      E.2.4 根据Aw_{jk}^{i} = \eta \delta_{j} Z_{k}调整输出层的权值w_{jk} (n);
      E.2.4 根据Av_{ki} = \eta \delta_k X_i调整输出层的权值v_{ki} (n);
```



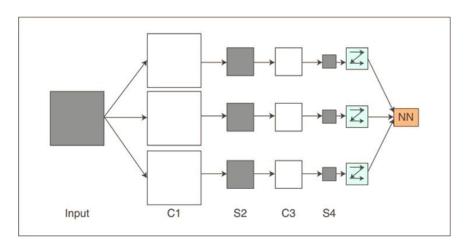
- 卷积神经网络 (CNN)
 - 是神经网络的一种,专门用来处理矩阵输入的任务,能够将矩阵形式的输入编码为较低维度的一维向量,而保留大多数有用信息。

应用领域:

- 图像分类,目标检测,目标识别,目标跟踪,文本检测和识别以及位置估计
- 。很少应用于数据分类领域



• CNN模型结构



- 。 C层为特征提取层;
- 。 S层是特征映射层,
- 特征映射结构采用影响函数核小的sigmoid函数作为卷积网络的激活函数。



- 给出训练样本集 {*X*_i, *Y*_i}
- 根据Xi以及CNN的模型结构,前向传播(forward propagation)
- 前向传播结果计算出模型输出 y_i , 并计算出损失函数 $J(\theta) = L(y, y')$
- 根据损失函数进行反向传播(back propagation),计算出所以参数梯度
- 根据参数梯度进行梯度下降算法,求取最后模型参数



• CNN优点:

- 避免了显式的特征抽取,而隐式地从训练数据中进行学习
- 。 同一特征映射面上的神经元权值相同,所以网络可以并行学习
- 布局更接近于实际的生物神经网络,权值共享降低了网络的复杂性,避免了特征提取和分类过程中数据重建的复杂度



5.5 RNN

• 递归神经网络

- 作用跟卷积神经网络是一样的,将矩阵形式的输入编码 为较低维度的一维向量,而保留大多数有用信息。
- 跟卷积神经网络的区别在于,卷积神经网络更注重全局的模糊感知,而RNNs则是注重邻近位置的重构

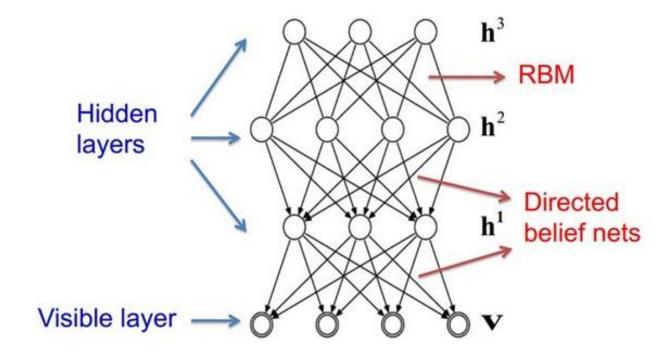
应用领域:

。 自然语言处理



5.6 DBN

DBN结构



5.6 DBN

DBN网络中存在的问题:

- 需要为训练提供一个有标签的样本集;
- 。 学习过程较慢;
- 。 不适当的参数选择会导致学习收敛于局部最优解



- 0 机器学习
- 1 监督学习--回归
- 2 监督学习--分类
- 3 非监督学习--聚类
- 4 非监督学习--降维
- 5 神经网络与深度学习
- 6 关于模型评价标准





6 关于模型的评价

- 回归模型评估:
 - 。模型的拟合度
 - 。偏差平方和
 - 。局部最优值与全局最优
- 分类模型评估:
 - □ 准确率、精确率、召回率、F1值
 - □ ROC曲线和AUC



6.1 方差与协方差

• 定义:

方差:用于两个及两个以上样本均数差别的显著性检验,即判断 总体的真实情况与原假设是否有显著性差异

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (X_i - \bar{X})^2}{n}$$

 $s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n-1}$ 。 协方差:表示的是两个文里总体决定的期望

$$Cov(X,Y) = E[(X-E[X])(Y-E[Y])]$$

$$= E[XY] - 2E[Y]E[X] + E[X]E[Y]$$

$$= E[XY] - E[X]E[Y]$$

- = E[XY] E[X]E[Y] = 3 当多个变量独立时,用万左米评估这种影响的差异。
- 当多个变量相关时,用协方差来评估这种影响的差异,用于评估 它们因相关而产生的对应变量的影响

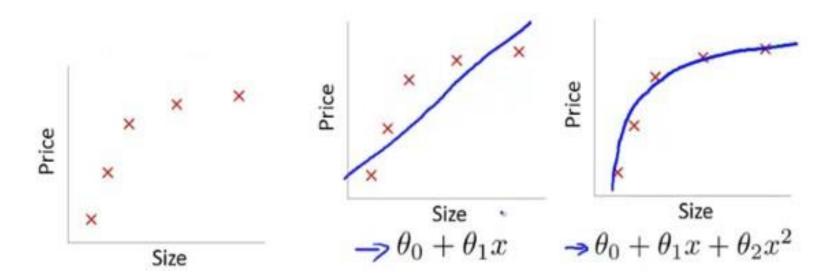


• 拟合程度

- 以合度检验是对已制作好的预测模型进行检验,比较它们的预测结果与实际发生情况的吻合程度。
- 由测量的数据,估计一个假定的模型/函数。拟合的模型是 否合适?可分为以下三类:
 - 欠拟合
 - 合适拟合
 - 过拟合



欠拟合:选定的模型没有很好地捕捉到数据特征,不能 够很好地拟合数据



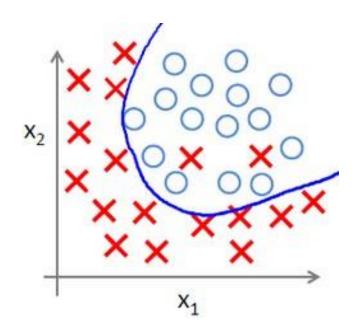


• 解决方案:

- 添加其他特征项,有时候模型出现欠拟合的时候是因为特征项不够导致的。
- 添加多项式特征,这个在机器学习算法里面用的很普遍,可以将 线性模型添加二次项或者三次项使模型泛化能力更强。
- 。减少正则化参数,正则化的目的是用来防止过拟合的,模型出现了欠拟合,则需要减少正则化参数。

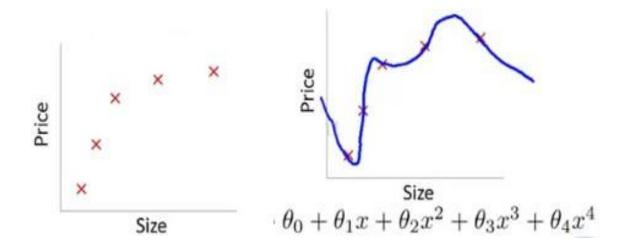


合适拟合:选定的模型很好地捕捉到数据特征,能够很好地拟合数据,允许个别失误





过拟合:模型将数据学得太彻底,把噪声数据的特征也学习到了,导致在后期测试时候不能够很好地识别训练集外的数据,模型泛化能力太差,只适用于训练和测试的数据。





• 解决方案:

- 重新清洗数据,通过人工选择,或者采用模型选择算法,减少特征的数量。
- 增大数据的训练量,还有一个原因就是我们用于训练的数据量太小导致的,训练数据占总数据的比例过小。采用正则化方法。如:为防止过拟合的模型出现,在损失函数里增加一个每个特征的惩罚因子。这个就是正则化。如正则化的线性回归的损失函数:

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

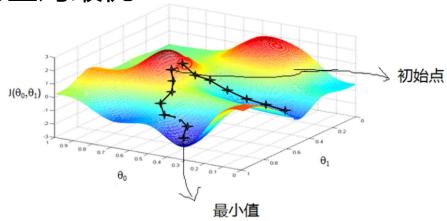


• 偏差平方和

$$\sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \left(a + bx_i \right) \right]^2$$

评估标准:要使得回归系数最优,则需要保证所有数据偏差的平方和最小

• 局部最优值与全局最优



对函数进行凸优化时,如果使用导数方法(如:梯度下降法)来
 寻找最优解,有可能陷入到局部最优解而非全局最优解。为了防止得到局部最优,可以对梯度下降法进行一些改进,防止陷入局部最优。



6.3 分类模型评估参数

- 准确率
 - □ Precision =提取出的正确信息条数 / 提取出的信息条数
- 召回率
 - □ Recall = 提取出的正确信息条数 / 样本中的信息条数
- F1值 (综合评估)
 - □ F1 = 正确率 * 召回率 * 2 / (正确率 + 召回率)

TN: 预测为负,实际为负 TP: 预测为正,实际为正 准确率: TP/(TP+FP)

FN: 预测为负,实际为正 FP: 预测为正,实际为负 召回率: TP/(TP+FN)



6.3 分类模型评估参数

一个数据库有500个文档,其中有50个文档符合定义的问题。系统提取筛选到75个文档,但是只有45个符合定义的问题。

- \neg TP = 45; FP: 30; TN: 425; FN: 5;
- □ 准确率P=TP/(TP+FP)=45/75=60%
- □ 召回率R=TP/(TP+FN)=45/50=90%
- F1:正确率 * 召回率 * 2 / (正确率 + 召回率) = 72%

TP: 预测为正,实际为正

FP: 预测为正,实际为负

TN: 预测为负,实际为负

FN: 预测为负,实际为正

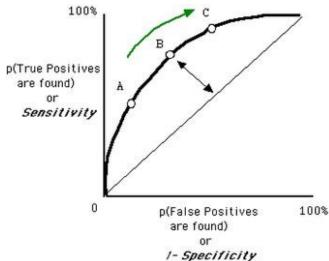
准确率: TP/(TP+FP)

召回率: TP/(TP+FN)



6.4 ROC曲线与AUC

- ROC (Receiver Operating Characteristic)曲线
 - □ 由两个变量1-specificity 和 Sensitivity绘制。1-specificity=FPR,即负正类率。Sensitivity即是真正类率,TPR(True positive rate),反映了正类覆盖程度,曲线距离左上角越近,证明分类器效果越好。





6.4 ROC曲线与AUC

• AUC曲线

AUC曲线是ROC曲线所覆盖的区域面积,AUC越大,分类器分类效果越好。假设分类器的输出是样本属于正类的socre(置信度),则AUC的物理意义为,任取一对(正、负)样本,正样本的score大于负样本的score的概率,且概率为:

$$\frac{\sum_{\text{所有正样本}} \operatorname{rank} - \operatorname{M}(\operatorname{M}+1)/2}{M*N}$$

■ 取N*M(N为正样本数, M为负样本数) rank=n(n=N+M)

