

深度学习:从理论到实践

第一章:深度学习基础(上)



课程大纲



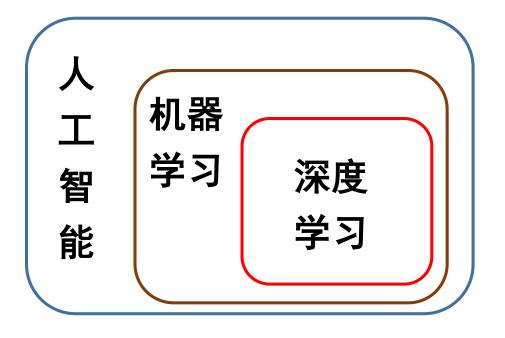
- ✓ 机器学习与深度学习
- ✓ 贝叶斯决策论
- ✓ 密度估计
 - ◆ 参数估计:极大似然估计与EM算法
 - ◆ 非参数估计: KNN与Parzen窗估计

课程大纲



- ✓ 机器学习与深度学习
- ✓ 贝叶斯决策论
- ✓ 密度估计
 - ◆ 参数估计: 极大似然估计与EM算法
 - ◆ 非参数估计: KNN与Parzen窗估计





分类器构造

- 1. 回归
- 2. 支持向量机
- 3. 神经网络
- 4. 决策树、随机森林
- 5. 独立于算法的机器学习



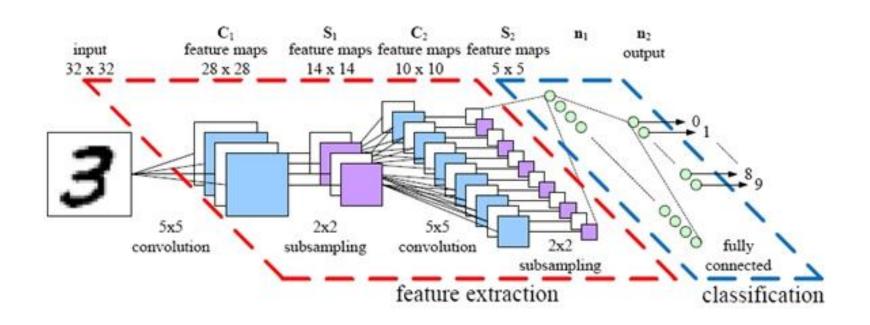
机器 学习 深度 智 学习 能

机器学习任务

- 1. 监督学习
- 2. 无监督学习
- 3. 半监督学习
- 4. 强化学习

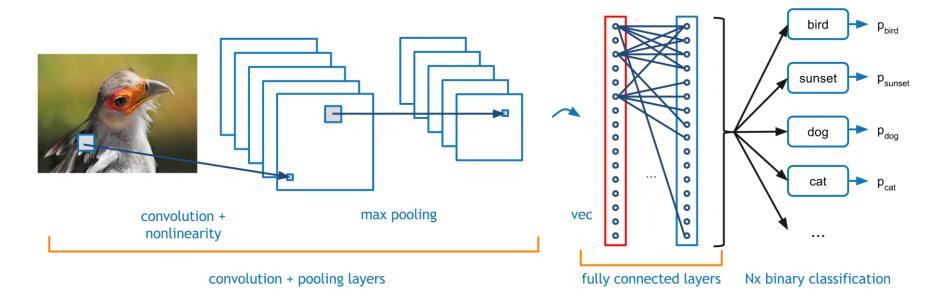


文字分类



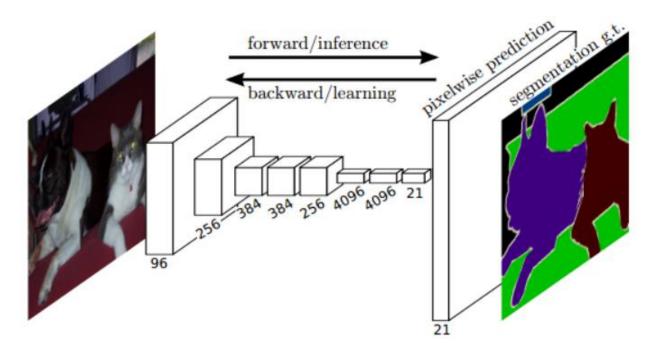


动物分类



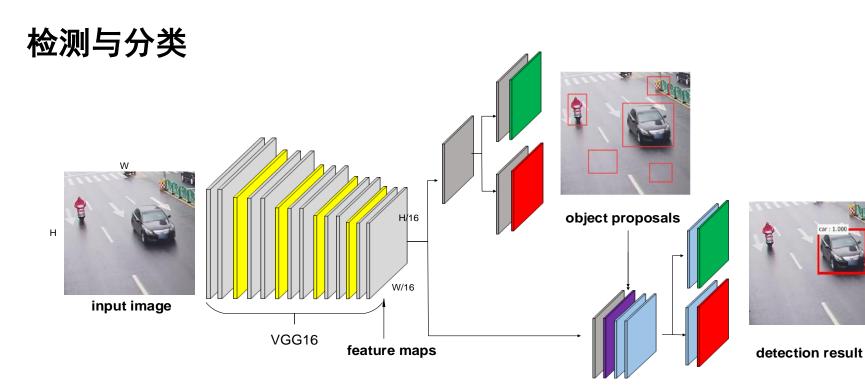


图像分割



卷积神经网络 目标分割

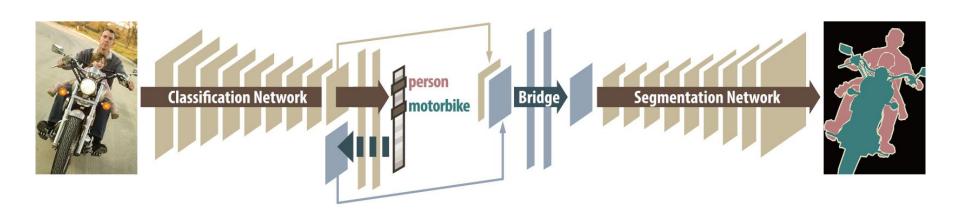






检测与分割

卷积神经网络目标检测与分割





课程目标

- 1. 能从机器学习、模式识别等角度看深度学习
- 2. 深入理解深度学习理论知识
- 3. 熟悉常见深度学习模型以及实现方法
- 4. 熟悉Caffe深度学习开发框架

课程大纲



- ✓ 机器学习与深度学习
- ✓ 贝叶斯决策论
- ✓ 密度估计
 - ◆ 参数估计: 极大似然估计与EM算法
 - ◆ 非参数估计: KNN与Parzen窗估计

贝叶斯决策一引言



问 题: 警察判断驾驶员是否酒驾。

判别方法:观察驾驶员的脸部颜色(发红的程度)。

驾驶员的脸色红到什么程度,可以认为是酒驾呢?

贝叶斯决策一引言



问题形式化:

- ω_1 表示酒驾事件, ω_2 表示未酒驾事件
- *x* 表示驾驶员脸红的程度

为了判断是否酒驾,可计算两个后验概率 $P(\omega_1|x)$ 和 $P(\omega_2|x)$

判断方法:如果 $P(\omega_1 \mid x) > P(\omega_2 \mid x)$,则判断该驾驶员酒驾了。

贝叶斯决策一引言



问题1:后验概率是否满足

归一化条件。

贝叶斯决策的核心概念:

类 别: ω_i , $i=1,\ldots,c$

特征矢量: $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_d] \in \mathbb{R}^d$

先验概率: $P(\omega_i)$ $\sum_{i=1}^{c} P(\omega_i) = 1$

概率密度函数(条件概率、似然): $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{\omega}_i)$

后验概率: $P(\omega_i \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_i)P(\omega_i)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_i)P(\omega_i)}{\sum_{i=1}^{c} p(\mathbf{x} \mid \omega_i)P(\omega_i)}$

贝叶斯决策一最小错误率



分类错误率(两类问题):

$$P(e) = \int P(e \mid x) p(x) dx$$
 其中,
$$P(e \mid x) = \begin{cases} P(\omega_2 \mid x), & \text{如果決策 } x \in \omega_1 \\ P(\omega_1 \mid x), & \text{如果决策 } x \in \omega_2 \end{cases}$$

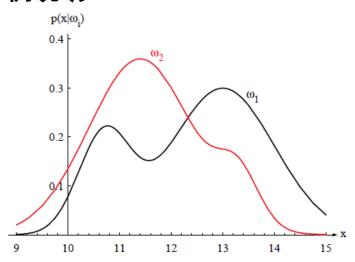
最小错误率决策: $\min P(e)$

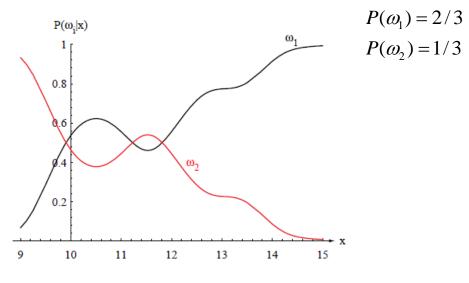
判断方法: 如果 $P(\omega_1 | x) > P(\omega_2 | x)$, 则 $x \in \omega_1$, 否则 $x \in \omega_2$ 。

贝叶斯决策一最小错误率



举例说明:





$$P(\omega_i \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_i)P(\omega_i)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x} \mid \omega_i)P(\omega_i)}{\sum_{i=1}^{c} p(\mathbf{x} \mid \omega_i)P(\omega_i)}$$

贝叶斯决策一简要总结



贝叶斯问题:

- ✔ 是否可以直接使用先验进行判断?(可以,但是准度不高。)
- ✓ 先验和后验的关系?(通过似然或者观察,将先验转换为后验。)
- ✓ 如果似然分布一样,会怎么样?(后验和先验一致,相当于用先验)
- ✓ 引入新的观察(特征),后验是否可转换为先验?(理论上可以,通常 将所有特征一起考虑,即一起用于计算似然。)

贝叶斯决策一简要总结



贝叶斯问题:

- ✓ 除了最小错误率贝叶斯决策,还有其它决策吗?(有,例如:最小风险贝叶斯决策,将风险因子考虑在内。)
- ✓ 后验计算的核心是先验和似然(类条件概率密度),如何估计?(先验 通常利用已知的知识得到,似然一般通过数据估计得到。)

课程大纲



- ✓ 机器学习与深度学习
- ✓ 贝叶斯决策论
- ✓ 密度估计
 - ◆ 参数估计: 极大似然估计与EM算法
 - ◆ 非参数估计: KNN与Parzen窗估计



问题描述

给定样本 $D = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$,估计分布的参数 θ

要求

- ◆ 分布:分布的类型确定,参数确定但未知
- ◆ 样本: 所有样本要求独立同分布



最大似然估计期望所有样本的似然最大。即

$$\max p(D|\boldsymbol{\theta}) = p(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, ..., \boldsymbol{x}_n|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^n p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{\theta})$$

样本独立

对数似然函数
$$l(\boldsymbol{\theta}) \equiv \ln p(D|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n} \ln p(\boldsymbol{x}_k|\boldsymbol{\theta})$$

求解 $\theta = \arg \max_{\theta} l(\theta)$ 最优的必要条件,极值点导数为0

$$0 = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} l(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{n} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \ln p(\boldsymbol{x}_{k} | \boldsymbol{\theta})$$



例子1:假设所有样本服从方差已知而均值未知的高斯分布,确定均值 μ

第一步: 计算每个样本的 $\ln p(\mathbf{x}_k|\boldsymbol{\mu}) = -\frac{1}{2}\ln \left[(2\pi)^d |\boldsymbol{\Sigma}| \right] - \frac{1}{2}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_k - \boldsymbol{\mu})$

对数似然函数

第二步: 计算每个样本的参数 θ (均值 μ)的导数 $\nabla_{\theta} \ln p(\mathbf{x}_k|\mu) = \mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_k - \mu)$

第三步: 所有样本导数求和为 $0 \sum_{k=1}^{n} \Sigma^{-1}(\mathbf{x}_k - \hat{\mu}) = 0 \implies \hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{x}_k$

多维高斯分布
$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right]$$



例子2: 假设所有样本服从均值方差都未知的一维高斯分布,确定均值和方差

第〇步: 确定参数形式 $\theta_1 = \mu$ and $\theta_2 = \sigma^2$

第一步: 计算每个样本的对数似然函数 $\ln p(x_k|\theta) = -\frac{1}{2} \ln 2\pi\theta_2 - \frac{1}{2\theta_2} (x_k - \theta_1)^2$

第二步: 计算每个样本的参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的导数 $\nabla_{\boldsymbol{\theta}} l = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \ln p(x_k | \boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\theta_2} (x_k - \theta_1) \\ -\frac{1}{2\theta_2} + \frac{(x_k - \theta_1)^2}{2\theta_2^2} \end{bmatrix}$

第三步: 所有样本导数求和为0

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{\hat{\theta}_2} (x_k - \hat{\theta}_1) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} x_k \quad \Longrightarrow \quad -\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{\hat{\theta}_2} + \sum_{k=1}^{n} \frac{(x_k - \hat{\theta}_1)^2}{\hat{\theta}_2^2} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (x_k - \hat{\mu})^2$$

一维高斯分布
$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma} \right)^2 \right]$$



问题描述:

数据缺失情况下的参数估计,即:给定输入数据

$$\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_n\} = \mathcal{D}_g \cup \mathcal{D}_b$$

其中,部分样本 $\mathbf{x}_k = \{\mathbf{x}_{kg}, \mathbf{x}_{kb}\}$ 。估计参数 $\boldsymbol{\theta}$ 。

要求

和最大似然估计的要求一致。



期望最大化算法(EM算法)的核心思路:迭代优化。即:给定上次迭代参数 θ^i ,估计新的参数 θ^{i+1} 。因此,EM算法的整体框架如下:

- 1. 初始化 θ^0 以及i=0
- 2. $do i \leftarrow i + 1$
- 3. 利用 $\boldsymbol{\theta}^i$ 更新 $\boldsymbol{\theta}^{i+1}$;
- 4. until 终止条件
- 5. 返回 $\theta = \theta^{i+1}$

EM算法的两个核心问题

- 1. 如何利用 θ^i 更新 θ^{i+1}
- 2. 如何确认定终止条件



如何利用参数 θ^i 估计新参数 θ

1. 利用参数 θ^i ,对缺失函数求期望(<mark>期望步</mark>)

$$Q(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\theta}^i) = \mathcal{E}_{\mathcal{D}_b}[\ln p(\mathcal{D}_g, \mathcal{D}_b; \boldsymbol{\theta}) | \mathcal{D}_g; \boldsymbol{\theta}^i]$$

2. 最大化期望(最大化步)

$$\boldsymbol{\theta}^{i+1} \leftarrow \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\boldsymbol{\theta}; \; \boldsymbol{\theta}^i)$$

终止条件(参数变化很小) $Q(\boldsymbol{\theta}^{i+1}; \boldsymbol{\theta}^i) - Q(\boldsymbol{\theta}^i; \boldsymbol{\theta}^{i-1}) \leq T$



例子1: 假设数据由二维空间的4个点组成,如下:

$$\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4\} = \{\binom{0}{2}, \binom{1}{0}, \binom{2}{2}, \binom{*}{4}\}$$

其中*表示样本4的第一个特征值未知(或缺失)。目的,估计二维高斯分布(协方差矩阵为对角阵),

即估计
$$heta=\left(egin{array}{c} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \sigma_1^2 \\ \sigma_2^2 \end{array}
ight)$$
,已知的初始化为 $heta^0=\left(egin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{array}
ight)$



期望步(对缺失数据计算期望):

$$Q(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\theta}^{0}) = \mathcal{E}_{x_{41}}[\ln p(\mathbf{x}_{g}, \mathbf{x}_{b}; \boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{0}; \mathcal{D}_{g})]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{k=1}^{3} \ln p(\mathbf{x}_{k}|\boldsymbol{\theta}) + \ln p(\mathbf{x}_{4}|\boldsymbol{\theta}) \right] p(x_{41}|\boldsymbol{\theta}^{0}; x_{42} = 4) dx_{41}$$

$$= \sum_{k=1}^{3} \left[\ln p(\mathbf{x}_{k}|\boldsymbol{\theta}) \right] + \int_{-\infty}^{\infty} \ln p\left(\left(\frac{x_{41}}{4} \right) \middle| \boldsymbol{\theta} \right) \underbrace{\frac{p\left(\left(\frac{x_{41}}{4} \right) \middle| \boldsymbol{\theta}^{0} \right)}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} p\left(\left(\frac{x'_{41}}{4} \right) \middle| \boldsymbol{\theta}^{0} \right) dx'_{41} \right)}_{\equiv K} dx_{41}$$



期望步(对缺失数据计算期望):

$$Q(\boldsymbol{\theta}; \; \boldsymbol{\theta}^{0}) = \sum_{k=1}^{3} [\ln p(\mathbf{x}_{k}|\boldsymbol{\theta})] + \frac{1}{K} \int_{-\infty}^{\infty} \ln p\left(\binom{x_{41}}{4} \middle| \boldsymbol{\theta}\right) \frac{1}{2\pi \left|\binom{1-0}{0-1}\right|} \exp\left[-\frac{1}{2}(x_{41}^{2} + 4^{2})\right] dx_{41}$$
$$= \sum_{k=1}^{3} [\ln p(\mathbf{x}_{k}|\boldsymbol{\theta})] - \frac{1+\mu_{1}^{2}}{2\sigma_{1}^{2}} - \frac{(4-\mu_{2})^{2}}{2\sigma_{2}^{2}} - \ln (2\pi\sigma_{1}\sigma_{2}).$$



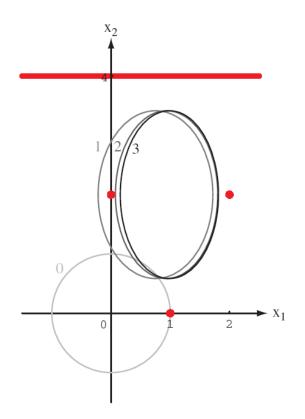
最大化步(期望最大化):

$$\max \sum_{k=1}^{3} [\ln p(\mathbf{x}_k | \boldsymbol{\theta})] - \frac{1 + \mu_1^2}{2\sigma_1^2} - \frac{(4 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} - \ln (2\pi\sigma_1\sigma_2)$$

求解结果:
$$\theta^1 = \begin{pmatrix} 0.75 \\ 2.0 \\ 0.938 \\ 2.0 \end{pmatrix}$$



迭代过程:



3次迭代后的结果

$$\mu = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 2.0 \end{pmatrix}$$
, and $\Sigma = \begin{pmatrix} 0.667 & 0 \\ 0 & 2.0 \end{pmatrix}$



例子2: 多高斯参数估计。多高斯分布定义如下:

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k p(\mathbf{x} \mid \theta_k)$$

subject to
$$\sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1$$

其中, $p(\mathbf{x}|\theta_k) = \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mu_k, \Sigma_k)$ 为单高斯分布。



最大似然估计(1. 计算对数似然, 2. 对参数求导为0)

$$\max LL = \log \prod_{n=1}^{N} p(\mathbf{x}_n) = \sum_{n=1}^{N} \log \sum_{k=1}^{K} \pi_k p(\mathbf{x}_n \mid \theta_k)$$
$$\nabla_{\pi_k} LL = 0, \quad \nabla_{\mu_k} LL = 0, \quad \nabla_{\Sigma_k} LL = 0$$

无法解析求解!



EM估计:将数据看作是不完整数据,每个数据包含隐含的类别指示变量

$$z_{nk} \in \{0,1\}, k = 1,...,K$$

期望步, 定义期望: $Q(\Theta, \Theta^{old}) = \sum_{\mathbf{Z}} \log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \Theta) p(\mathbf{Z} | \mathbf{X}, \Theta^{old})$

期望计算如下: $Q(\Theta, \Theta^{old}) = \mathbb{E}_{\mathbf{Z}}[\log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} \mid \Theta)] = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \gamma(z_{nk}) \{\log \pi_k + \log \mathcal{N}(\mathbf{X} \mid \mu_k, \Sigma_k)\}$

$$p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} \mid \Theta) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \pi_k^{z_{nk}} \mathcal{N}(\mathbf{x}_n \mid \mu_k, \Sigma_k)^{z_{nk}} \qquad \gamma(z_{nk}) = P(z_{nk} = 1 \mid \mathbf{x}_n) = \frac{\pi_k N(\mathbf{x}_n \mid \mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j N(\mathbf{x}_n \mid \mu_j, \Sigma_j)}$$



EM估计:将数据看作是不完整数据,每个数据包含隐含的类别指示变量

$$z_{nk} \in \{0,1\}, \quad k = 1, ..., K$$

最大化步(求导为0) $\nabla_{\pi_k}Q=0$, $\nabla_{\mu_k}Q=0$, $\nabla_{\Sigma_k}Q=0$

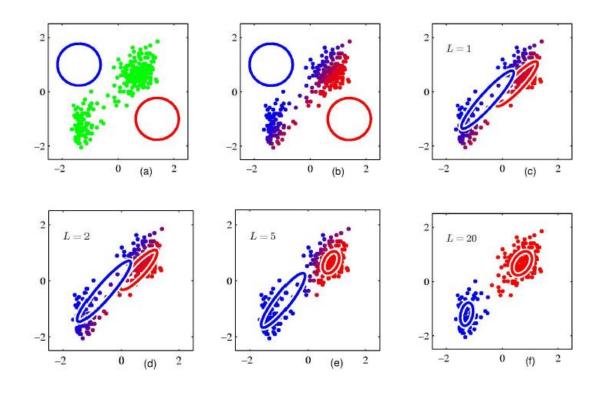
$$\begin{split} \mu_k^{new} &= \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) \mathbf{x}_n \\ \Sigma_k^{new} &= \frac{1}{N_k} \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk}) (\mathbf{x}_n - \mu_k^{new}) (\mathbf{x}_n - \mu_k^{new})^T \\ \pi_k^{new} &= \frac{N_k}{N} \end{split}$$

$$N_k = \sum_{n=1}^N \gamma(z_{nk})$$

参数估计一EM算法



EM估计(示例图)



非参数估计一密度估计



密度估计问题:假定n个样本 $x_1,...,x_n$ 独立同分布,服从于概率密度函数p(x)。现在要估计p(x)。

首先,样本x落入区域 \mathcal{R} 中的概率为 $P = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{t}) d\mathbf{t}$,则 $P \approx p(\mathbf{x})V$.

其中,V是区域 \mathcal{R} 所包含的体积。

同时,概率P也可由落入区域 \Re 中的样本比例估计得到,即:

$$P \approx k/n$$

其中k为落入区域 \mathcal{R} 的样本数目, n为总样本数目.

$$P \approx p(x)V \approx k/n$$



$$p(x) \approx \frac{k/n}{V}$$

非参数估计一密度估计



密度估计问题:假定n个样本 $x_1,...,x_n$ 独立同分布,服从于概率密度函数 p(x)。现在要估计p(x)。

$$p(x) \approx \frac{k/n}{V}$$

 $p(x) \approx \frac{k/n}{V}$ 为估计密度函数,需要计算局部样本数k 和体积V



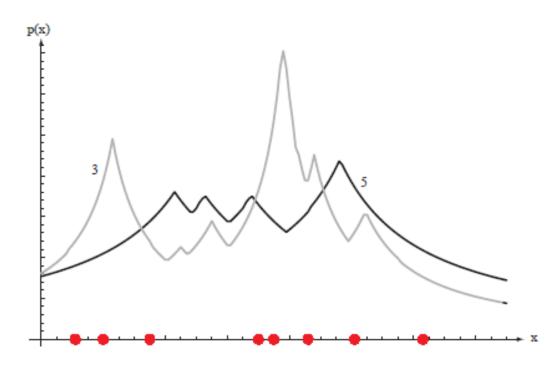
KNN(K-近邻): 固定局部样本数k, 体积V变化

Parzen窗: 固定体积V, 局部样本数k变化

非参数估计一KNN



KNN例子(1维):



非参数估计一KNN



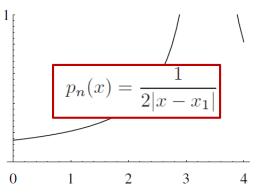
KNN例子:

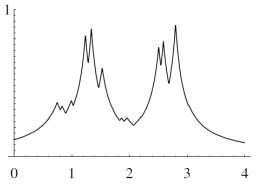
$$k_n = \sqrt{n}$$

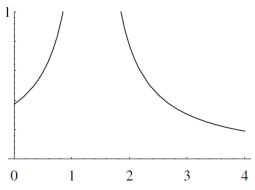
$$n = 1$$
$$k_n = 1$$

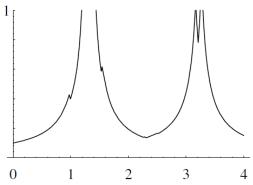
注意: 当*n*有限时, 估计会非常崎岖不平

$$n = 16$$
$$k_n = 4$$









非参数估计一KNN

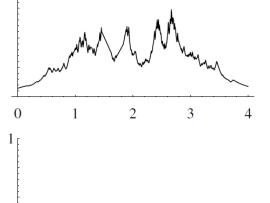
 $n = \infty$ $k_n = \infty$

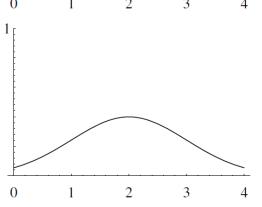


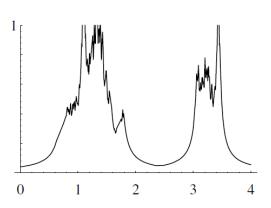
KNN例子:

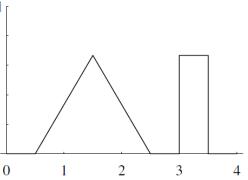
$$k_n = \sqrt{n} \qquad \text{n = 256} \\ k_n = 16$$

注意: 当*n*有限时, 估计会非常崎岖不平









非参数估计—Parzen窗估计



Parzen窗估计(固定体积,变化局部样本数)

窗函数(方窗函数)
$$\varphi(\mathbf{u}) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & |u_j| \leq 1/2 & j=1,...,d \\ 0 & \text{otherwise.} \end{array} \right.$$

该方窗函数带宽h,看作是1

体积为
$$V_n = h_n^d$$
 的局部区域内样本数 $k_n = \sum_{i=1}^n \varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right)$

Parzen窗密度估计
$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{V_n} \varphi\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{h_n}\right)$$

非参数估计—Parzen窗估计



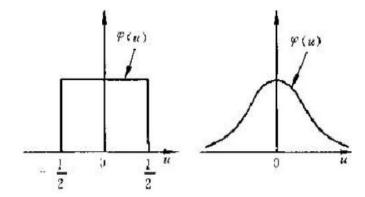
核函数(方窗函数函数的推广)一直观上,可看作样本的权重

方窗核:
$$\varphi(\mathbf{u}) = \begin{cases} 1 & |u_j| \le 1/2 & j = 1, ..., d \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$|u_j| \le 1/2$$
 otherwise.

$$j = 1, ..., d$$

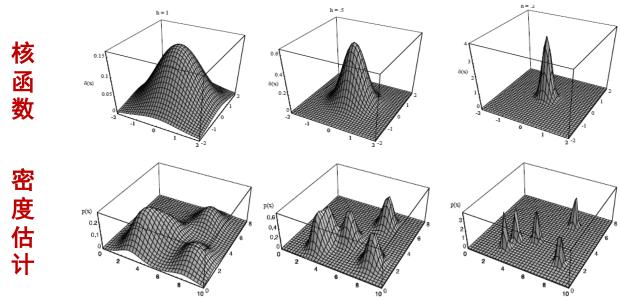
高斯核:
$$\varphi(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{u}}$$



非参数估计—Parzen窗估计



Parzen窗估计例子: 高斯核函数, h = 1,0,5,0.2



h(带宽)越大,密度估计越平滑,反之亦然。h越小,容易过拟合。

总结



- ✔ 简述了机器学习与深度学习
- ✓ 简要讲解了贝叶斯决策理论,同时讲解一种常用的贝叶斯决策方法:最小误差贝叶斯决策
- ✔ 通过案例详细讲解了两种密度估计方法

参考文献



- ✓ 《模式分类》
- ✓ 《模式识别与机器学习》
- ✓ 深度学习相关论文(图片使用)

在线问答









感谢各位聆听

Thanks for Listening •

