CS182 Introduction to Machine Learning

Recitation 1

2025.2.26

课程安排

- Grading
  作业 30% + 期末project 30% + 期末考试 40%
- Recitation
- Homework
- Project

What is taught in IML

对于大二、大三同学来说, IML可能是第一次学习与人工智能、神经网络等词汇有较强关联的课程，但：

- IML (以及他对应的研究生课ML)主要关注机器学习领域的数学理论
- 大量用到线性代数和概率论等前置课程知识
  侧重于基于概率、基于统计的学习模型
  (而不是深度学习及PyTorch的使用)
- 较少的关于深度学习领域的介绍

To learn more on math and theory:

- Numerical Optimization (SI152)
- Convex Optimization (SI151A, SI251)
- Machine Learning (CS282)
- Reinforcement Learning (SI252)
- …

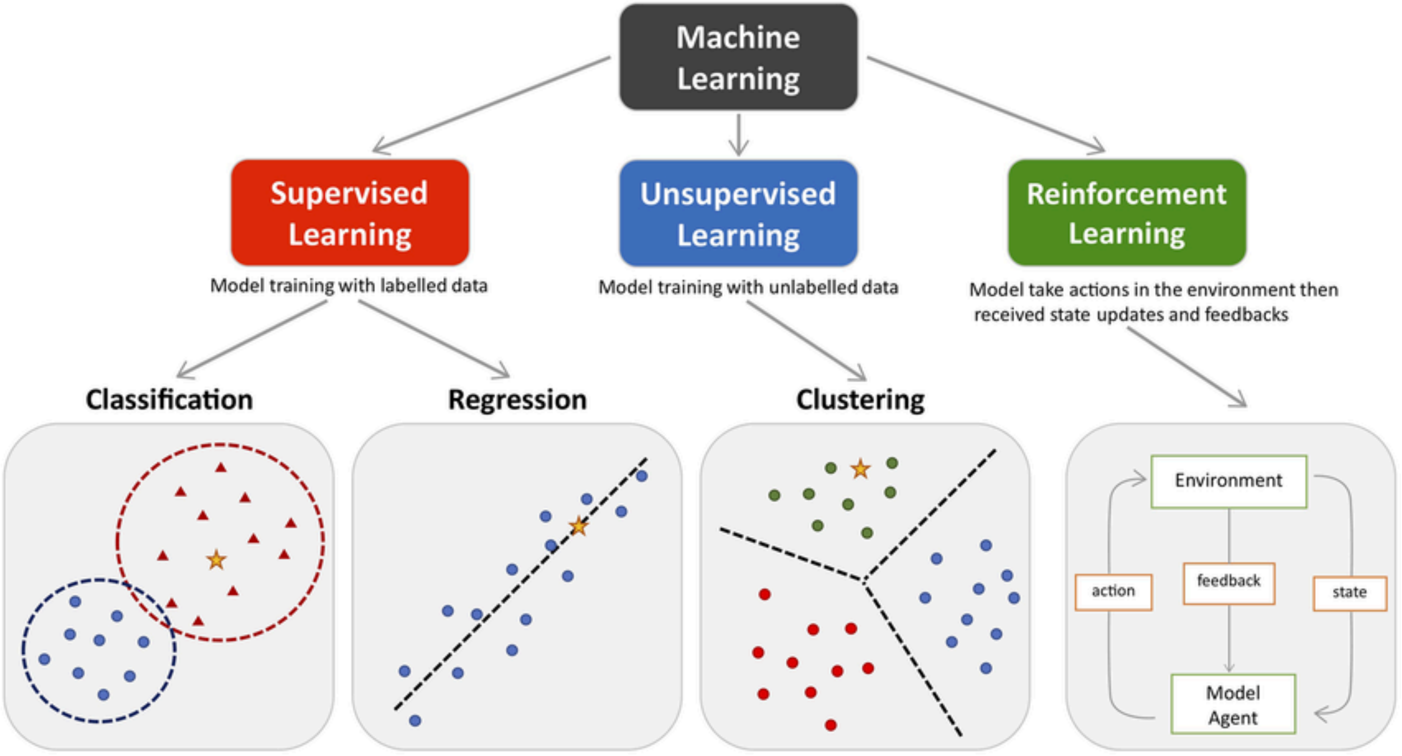
To learn more on deep learning and applications:

- Computer Vision (CS172, CS271, CS272)
- Natural Language Processing (CS274A)
- Deep Learning (CS280)
- …

> 各种网上的课程e.g. CS229, CS231n, CS224n

Types of Machine Learning

- 监督学习
  (分类、回归)
- 无监督学习
  (聚类、降维、生成模型)
- 强化学习



Recitation schedule

- Math reviews(or maybe previews)
  - Information Theory
  - Linear Algebra
  - Probability and Statistics
  - Optimization
- Course reviews
- Homework recitation

Review(Preview): Linear Algebra

- 为什么用到线性代数：
  - 线性代数是描述空间和变换的工具，让描述问题变得简单
  - 大量学习算法通过建模输入空间到输出空间的变换来解决问题
  - 线性代数的矩阵分解理论提供了寻找主成分的理论基础
- 用哪些线性代数：
  - 矩阵的基本运算和性质(回忆一下特殊矩阵：对称矩阵、对角矩阵、单位矩阵、正交矩阵、上三角矩阵)
  - 常用的两种矩阵分解: 特征值分解、SVD分解
  - 最小二乘法
  - 矩阵求导*(由于将向量记作行向量还是列向量有分歧，因此有两套矩阵求导公式，请注意如果没有特殊说明，我们均默认列向量)

Review(Preview): Probability & Statics

- 什么用到概率论与数理统计：
  - 概率论为机器学习提供了问题的假设
  - 回归和分类问题都可以描述为一个估计问题
  - 数据的分布往往服从正态分布
- 用哪些知识：
  - 常用的概率公式(条件概率、全概率、贝叶斯)
  - 常用的分布和他们的特殊性质(正态、泊松、两点、二项、均匀)
  - 常用的统计量(均值、方差、协方差)和他们的无偏估计

Review(Preview): Optimization

- 通常讨论凸优化的范围
    - 凸集
    - 凸函数
    - 凸优化问题
- 优化方法
    - Lagrange Duality
    - KKT method
    - Gradient Descent(SGD, ...)

Review(Preview): Information Theory

- Decision Tree in Lecture 3
    - Entropy
    - Cross Entropy
    - Mutual Information
    - KL Divergence
- More details: EE142

> reference repo: https://github.com/zsc2003/ShanghaiTech-EE142

Entropy 熵

$\log x$若无特殊说明, 默认为$\log_2 x$, $0\log 0 = 0$.

离散型随机变量$\mathcal{X}$看作是有限的, i.e. $|\mathcal{X}| < +\infty$.

$x \in \mathcal{X}$

事件x发生的概率为$p(x)$, 则x的信息量为$\log \dfrac{1}{p(x)}$.

离散型随机变量X的熵 (entropy) $H(X)$ 或写作 $H(p)$: 所有事件发生的期望信息量

$$H(X) = -\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log p(x)$$

$$= \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log\frac{1}{p(x)}$$

$X \sim P$

$$= \mathbb{E}_X\left[\log\frac{1}{p(x)}\right]$$

Entropy 熵

$$\begin{aligned} H(X) &= -\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log p(x) \\ &= \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log\frac{1}{p(x)} \\ &= \mathbb{E}\left[\log\frac{1}{p(x)}\right] \end{aligned}$$

- $0 \le H(X) \le \log|\mathcal{X}|$.
  - X为冲激函数时取0 事件是确定的(deterministic), 信息量为0.
  - X为均匀分布时取到 $\log|\mathcal{X}|$.

Joint Entropy 联合熵 $H(X, Y)$

$$
\begin{aligned}
H(X,Y) &= -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} \underline{p(x,y)} \log \underline{p(x,y)} \\
&= \sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} \boxed{p(x,y)} \log \frac{1}{p(x,y)} \\
&= \mathbb{E}_{X,Y}\left[\log \frac{1}{p(x,y)}\right]
\end{aligned}
$$

$$p(x) = \sum_{y} p(y)p(x|y)$$

条件熵 (conditional entropy) $H(Y|X)$:

$$\boxed{H(Y|X) = \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x) H(Y|X=x)}$$

$$= -\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x) \sum_{y\in\mathcal{Y}} p(y|x) \log p(y|x)$$

$$= \sum_{x\in\mathcal{X}} \sum_{y\in\mathcal{Y}} \underline{p(x,y)} \log \frac{1}{\underline{p(y|x)}}$$

$$= \mathbb{E}_{X,Y}\left[\log \frac{1}{p(y|x)}\right]$$

$$E(g(x)) = \int_x f(x) g(x) dx$$

$\underline{H(Y|X=x)}$

Chain Rule

chain rule:

$$H(X_1, X_2, \cdots, X_n) = \sum_{i=1}^{n} H(X_i|X_1, X_2, \cdots, X_{i-1}) = \sum_{i=1}^{n} H(X_i|X_{i+1}, \cdots, X_n)$$

二元情况:

$$H(X,Y) = H(X) + H(Y|X)$$ $= H(Y) + H(X|Y)$

> proof: chain rule of probability
>
> $$p(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i|x_1, x_2, \cdots, x_{i-1}) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i|x_{i+1}, \cdots, x_n)$$

$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_1|x_2)$

Cross Entropy

$H(p) = -\sum_x p(x) \log p(x)$

> 通常被用作分类任务中的损失函数

一个分类任务中, 标签的真实分布为$p(x)$, 模型的预测分布为$q(x)$. 则模型的交叉熵(cross entropy)为:

$$
\begin{aligned}
H(p, q) &= -\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log q(x) \\
&= \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log \frac{1}{q(x)} \\
&= \mathbb{E}_{x \sim p(x)} \left[\log \frac{1}{q(x)} \right]
\end{aligned}
$$

$H(p,q) \neq H(q,p)$

$H(p) = \sum_x p(x)\log\frac{1}{p(x)}$

$H(p,q) = \sum_x p(x)\log\frac{1}{q(x)}$

KL Divergence (KL散度)

两个分布$p(x), q(x)$的相对熵 Relative Entropy(KL-Divergence):

$$
\begin{aligned}
D\left(p(x) \| q(x)\right) &= \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)} = E_p\left[\log\frac{p(x)}{q(x)}\right] \le \log\left[E_p\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right)\right] \\
&= \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log p(x) + \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\log\frac{1}{q(x)} = \log\left(\sum_x p(x)\cdot q\right. \\
&= -H(p) + H(p,q)
\end{aligned}
$$

- $D(p\|q) \neq D(q\|p)$
- 物理意义: 两个分布之间的距离(相似性).
- 当真实分布$p(x)$固定时, KL散度和交叉熵等价, 只是多了一个常数项.
- $D\left(p(x)\|q(x)\right) \geq 0.$
  当且仅当$p(x) = q(x)$时等号成立(Jensen's Inequality成立条件: 函数是线性的).

concave

$f(E(x)) \ge E(f(x))$

$$D(p\|q) = \sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}$$

$$= E_p\left[\log\frac{p(x)}{q(x)}\right] \le \log\left[E_p\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right)\right]$$

$$= \log\left(\sum_x p(x)\cdot\frac{p(x)}{q(x)}\right)$$

$$-D(p\|q) = \sum_x p(x)\log\frac{q(x)}{p(x)} = E_p\left(\log\frac{q(x)}{p(x)}\right)$$

$$\le \log\left(E_p\left(\frac{q(x)}{p(x)}\right)\right)$$

$$= \log\left(\underbrace{\sum_x p(x)\frac{q(x)}{p(x)}}_{1}\right)$$

$$= 0$$

$$\log\frac{q(x)}{p(x)} =$$

Correlation 相关性

概率论衡量两个变量相关程度(概率论方法):

$$\rho_{X,Y} = \frac{\operatorname{Cov}(X,Y)}{\sqrt{\operatorname{Var}(X)\operatorname{Var}(Y)}} \in [-1,1]$$

只能刻画**线性**相关性, 且正负相关程度相同(正负相关).

X,Y独立, 则$\rho_{X,Y}=0$. 但是$\rho_{X,Y}=0$**不一定**独立.

> e.g. $Y=X^2, X\sim N(0,1) \Rightarrow \mathbb{E}(X)=0, \operatorname{Var}(X)=1, \mathbb{E}(Y)=\mathbb{E}(X^2)=1$
> $\operatorname{Cov}(X,Y)=\mathbb{E}(XY)-\mathbb{E}(X)\mathbb{E}(Y)=0$

$Gaussian$分布独立 $\Leftrightarrow$ 不相关.

Mutual Information

$0 \le H(X) \le \log|X|$

信息论衡量方法(用bit衡量):

$I(X;Y)$: X,Y之间的互信息(mutual information).

$p(y,x) \quad p(y)p(x)$

$$I(X;Y) = \sum_{x,y} p(x,y) \log \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} = D\left(p(x,y) \| p(x)p(y)\right)$$

- $I(X;Y) = I(Y;X)$
- $0 \le I(X;Y) \le \min\{H(X), H(Y)\}$

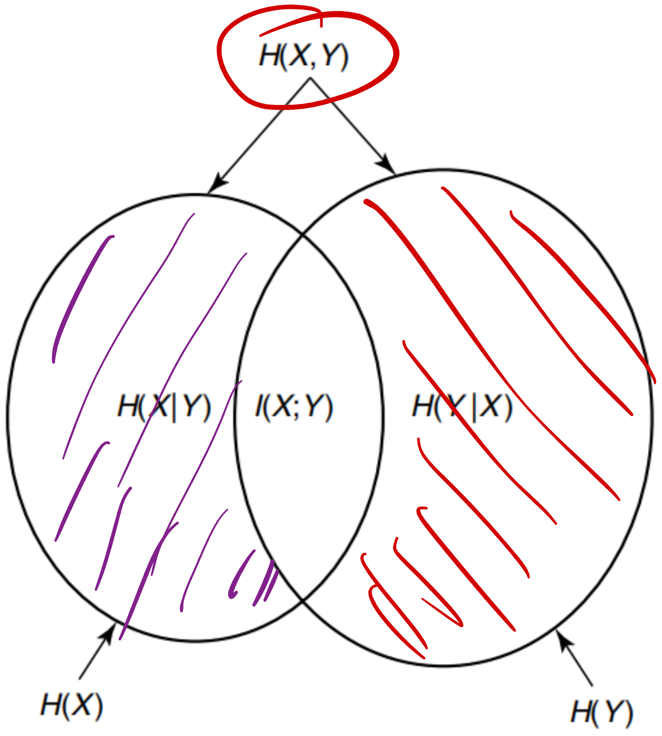
$I(X;Y) = H(X) - H(X|Y) \le H(X)$
$= H(Y) - H(Y|X) \le H(Y)$

  - $0 \le I(X;Y)$: 当且仅当 $p(x,y) = p(x)p(y)$ 时等号成立, 即X,Y独立.
  - $I(X;Y) \le \min\{H(X), H(Y)\}$: Since $H(X) \ge 0$, similarly, $H(X|Y) \ge 0$.

$$I(X;Y) = H(X) - H(X|Y) \le H(X)$$

当且仅当$H(X|Y) = 0$时等号成立. 另一个同理.

Mutual Information



Relationship between entropy and mutual information.

$$H(X,Y) = H(X) + H(Y|X) = H(Y) + H(X|Y)$$

$$I(X;Y) = H(X) - H(X|Y) = H(Y) - H(Y|X)$$

$$= H(X) + H(Y) - H(X,Y)$$

Decision Tree

$I(x_1;Y)$

$I(x_2;Y)$

- 离散属性的决策树

$\frac{a_1+a_2}{2}$

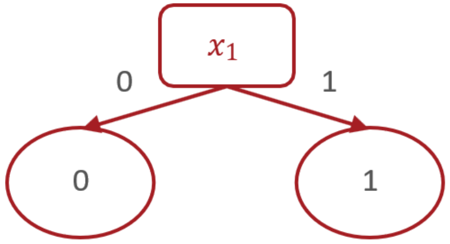
$\vdots$

$\frac{a_i+a_{i+1}}{2}$

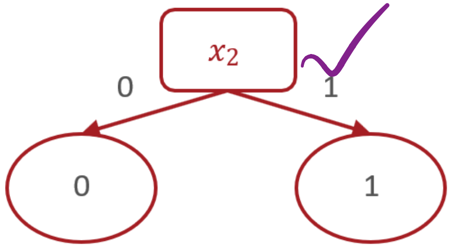
$\vdots$

a_1
a_2
$\vdots$
a_n

x_1	x_2	y
1	0	0
1	0	0
1	0	1
1	0	1
1	1	1
1	1	1
1	1	1
1	1	1



Mutual Information: 0

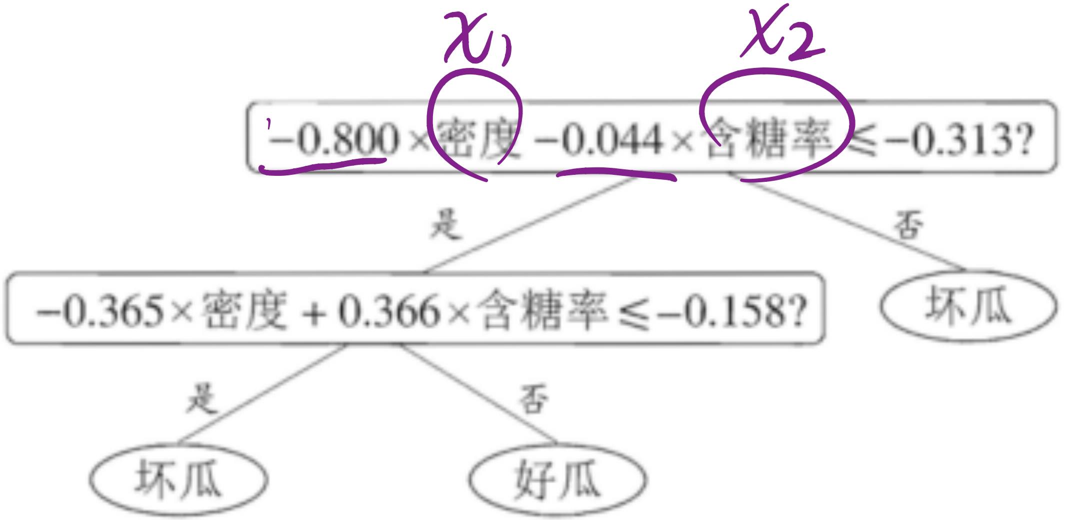


Mutual Information: $-\frac{2}{8}\log_2\frac{2}{8}-\frac{6}{8}\log_2\frac{6}{8}-\frac{1}{2}(1)-\frac{1}{2}(0)\approx 0.31$

按互信息高的方式划分

Decision Tree

- 连续属性的决策树



> 对连续的属性进行划分, 选择一个阈值进行划分(e.g. 二分)
> 含参的多变量决策树(trainable)
> 多棵决策树 boosting (random forest)

Convex f

1° $\forall\ x, y \in D,\ \theta \in [0,1]$

$$f(\theta x + (1-\theta)y) \leq \theta f(x) + (1-\theta) f(y)$$