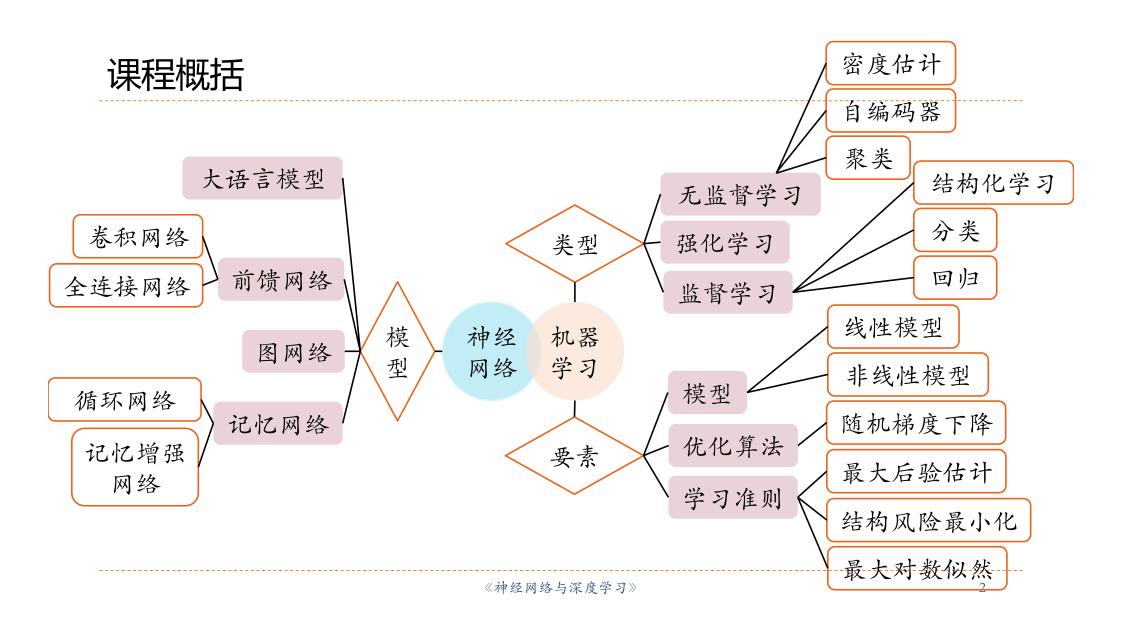
#### 《神经网络与深度学习》





## 内容

#### ▶ 无监督学习

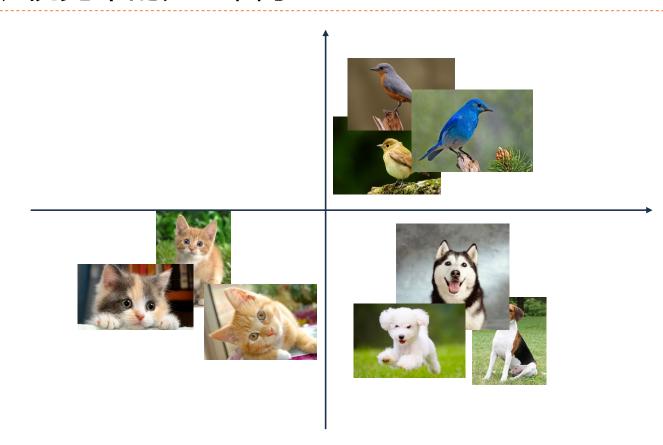
- ▶ 无监督特征学习
  - **)**主成分分析
  - ▶稀疏编码
  - ▶自编码器
  - ▶稀疏自编码器
  - ▶降噪自编码器
- ▶概率密度估计
  - ▶ 参数密度估计
  - ▶非参数密度估计
    - □核方法
    - □K近邻方法

#### ▶生成式模型vs判别式模型

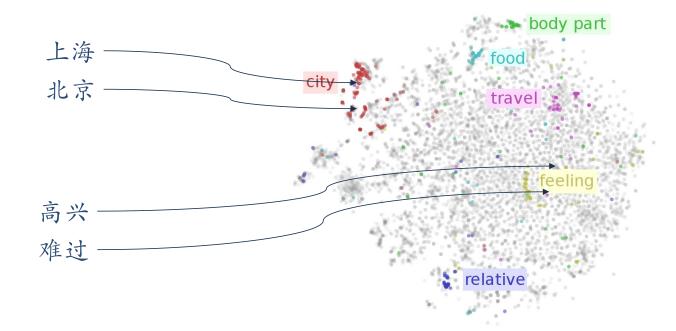
#### 芒果机器学习的无监督学习

- ▶从市场上随机选取的芒果样本(训练数据),列出每个芒果的所有特征:
  - ▶如颜色,果子大小,果核大小,形状,产地,品牌,...
- ▶设计一个学习算法来学习芒果的有价值的特征

# 计算机视觉中的无监督学习

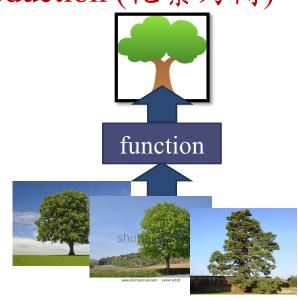


# 自然语言处理中的无监督学习

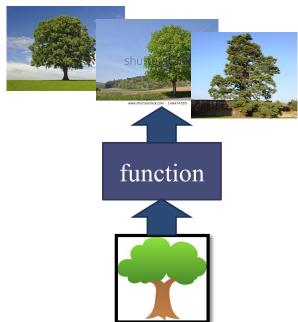


# 深度学习中的无监督学习

Dimension Reduction (化繁为简)



▶Generation (无中生 有)\_\_\_\_



# 无监督学习(Unsupervised Learning)

- ▶监督学习
  - ▶建立映射关系  $f: x \rightarrow y$
- ▶ 无监督学习
  - ▶指从无标签的数据中学习出一些有用的模式。
  - ▶聚类: 建立映射关系  $f: x \to y$ 
    - ▶不借助于任何人工给出标签或者反馈等指导信息
  - >特征学习
  - ▶密度估计 p(x)

# 无监督学习同样有三个基本要素

#### ▶模型

▶自編码器、概率模型

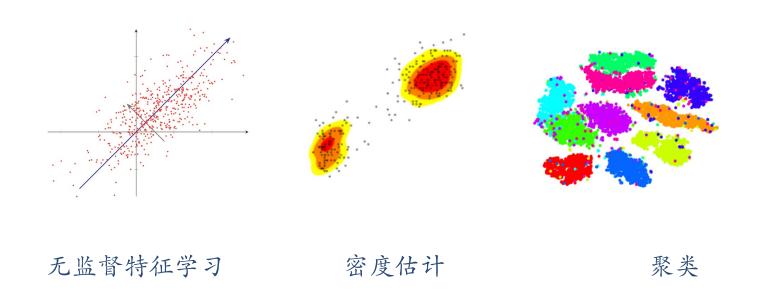
#### >学习准则

▶最大似然估计、最小重构错误

#### ▶优化

▶梯度下降

# 典型的无监督学习问题





# 主成份分析 ( Principal Component Analysis , PCA )

- ▶一种最常用的数据降维方法,使得在 转换后的空间中数据的方差最大。
  - ▶样本点 $x^{(n)} \in R^D$ 投影之后的表示为

$$z^{(n)} = \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}^{(n)}$$

▶所有样本投影后的方差为

$$\sigma(X; \boldsymbol{w}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}^{(n)} - \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \bar{\boldsymbol{x}})^{2}$$

$$= \frac{1}{N} (\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{X} - \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \bar{\boldsymbol{X}}) (\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{X} - \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \bar{\boldsymbol{X}})^{\mathsf{T}}$$

$$= \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{w}, \qquad \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{w} = 1$$

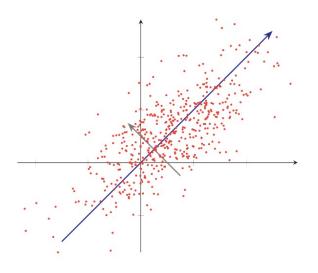
 $\Sigma = \frac{1}{N} (X - \bar{X})(X - \bar{X})^{\mathsf{T}}$  是原始样本的协方差矩阵

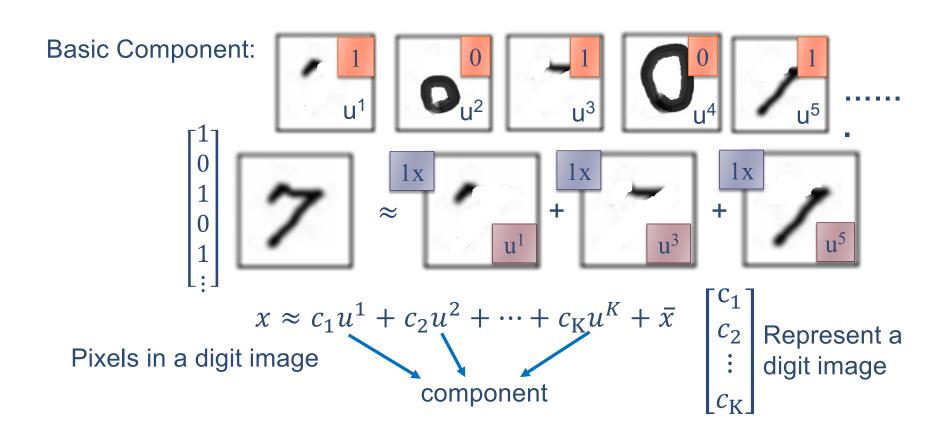
▶目标函数

$$\max_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{w} + \lambda (1 - \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{w})$$

▶对目标函数求导并令导数等于 0,可得

$$\Sigma w = \lambda w$$





$$x - \bar{x} \approx c_1 u^1 + c_2 u^2 + \dots + c_K u^K = \hat{x}$$

Reconstruction error:

$$\|(x - \bar{x}) - \hat{x}\|_2$$

Find  $\{u^1, ..., u^K\}$  minimizing the error

$$L = \min_{\{u^1, ..., u^K\}} \sum \left\| (x - \bar{x}) - \left( \sum_{k=1}^K c_k u^k \right) \right\|_2$$

#### 结论:

 $\{w^1, w^2, \dots w^K\}$  (from PCA) is the component  $\{u^1, u^2, \dots u^K\}$  minimizing L

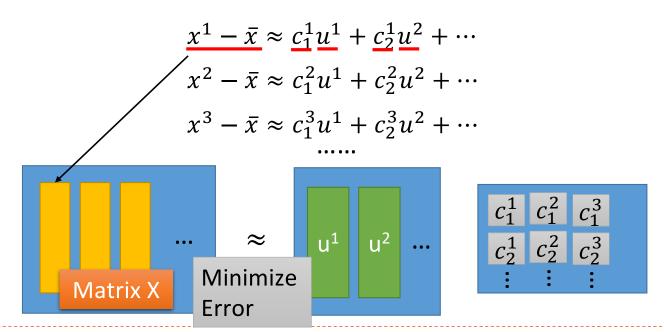
Proof in [Bishop, Chapter 12.1.2]

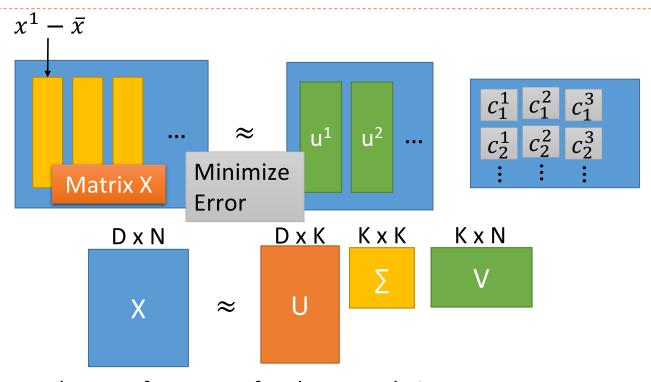
$$x - \bar{x} \approx c_1 u^1 + c_2 u^2 + \dots + c_K u^K = \hat{x}$$

Reconstruction error:

$$\|(x-\bar{x})-\hat{x}\|_2$$

Find  $\{u^1, \dots, u^K\}$  minimizing the error



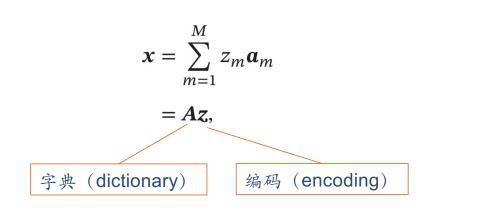


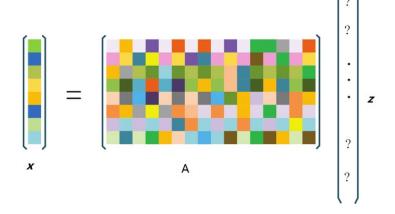
K columns of U: a set of orthonormal eigen vectors corresponding to the K largest eigenvalues of XX<sup>T</sup>

This is the solution of PCA: SVD

# (线性)编码

 $\blacktriangleright$ 给定一组基向量 $A = [a_1, \dots, a_M]$ ,将输入样本x 表示为这些基向量的线性组合





#### 完备性

#### 数学小知识 | 完备性

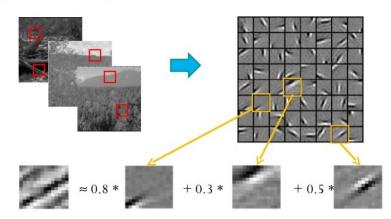
如果M个基向量刚好可以支撑M维的欧氏空间,则这M个基向量是完备的. 如果M个基向量可以支撑D维的欧氏空间,并且M > D,则这M个基向量是过完备的(overcomplete)、冗余的.

"过完备"基向量是指基向量个数远远大于其支撑空间维度. 因此这些基向量一般不具备独立、正交等性质.

#### ▶稀疏编码

▶找到一组"过完备"的基向量 (即M>D) 来进行编码。

#### Sparse coding illustration



 $[a_1, ..., a_{64}] = [0, 0, ..., 0, \mathbf{0.8}, 0, ..., 0, \mathbf{0.3}, 0, ..., 0, \mathbf{0.5}, 0]$  (feature representation)

Slide credit: Andrew Ng Compact & easily interpretable

# 稀疏编码(Sparse Coding)

 $\blacktriangleright$ 给定一组N个输入向量 $x^{(1)},...,x^{(N)}$ , 其稀疏编码的目标函数定义为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{Z}) = \sum_{n=1}^{N} \left( \left\| \boldsymbol{x}^{(n)} - A \boldsymbol{z}^{(n)} \right\|^{2} + \eta \rho(\boldsymbol{z}^{(n)}) \right)$$

 $\triangleright p(\cdot)$ 是一个稀疏性衡量函数, $\eta$ 是一个超参数,用来控制稀疏性的强度。

$$\rho(\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^{p} \mathbf{I}(|z_i| > 0))$$

$$\rho(\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^{p} |z_i|$$

$$\rho(\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^{p} -\exp(-z_i^2)$$

$$\rho(\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^{p} \log(1 + z_i^2)$$

#### 训练过程

#### ▶稀疏编码的训练过程一般用交替优化的方法进行。

1) 固定基向量A,对每个输入 $x^{(n)}$ ,计算其对应的最优编码

$$\min_{\mathbf{z}^{(n)}} \| \mathbf{x}^{(n)} - A\mathbf{z}^{(n)} \|^2 + \eta \rho(\mathbf{z}^{(n)}), \ \forall n \in [1, N].$$

2) 固定上一步得到的编码 $\{\mathbf{z}^{(n)}\}_{n=1}^{N}$ ,计算其最优的基向量

$$\min_{A} \sum_{n=1}^{N} \left( \left\| \mathbf{x}^{(n)} - A \mathbf{z}^{(n)} \right\|^{2} \right) + \lambda \frac{1}{2} \|A\|^{2},$$

## 稀疏编码的优点

#### >计算量

▶稀疏性带来的最大好处就是可以极大地降低计算量。

#### ▶可解释性

▶因为稀疏编码只有少数的非零元素,相当于将一个输入样本表示为 少数几个相关的特征。这样我们可以更好地描述其特征,并易于理 解。

#### >特征选择

▶稀疏性带来的另外一个好处是可以实现特征的自动选择,只选择和 输入样本相关的最少特征,从而可以更好地表示输入样本,降低噪 声并减轻过拟合。

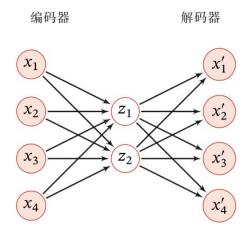
# 自编码器(Auto-Encoder)

- ▶ 編码器 (Encoder)  $f: \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^M$
- ▶解码器 (Decoder)  $g: \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^D$

▶目标函数: 重构错误

$$\mathcal{L} = \sum_{n=1}^{N} \|\mathbf{x}^{(n)} - g(f(\mathbf{x}^{(n)}))\|^{2}$$
$$= \sum_{n=1}^{N} \|\mathbf{x}^{(n)} - f \circ g(\mathbf{x}^{(n)})\|^{2}.$$

#### ▶两层网络结构的自编码器



# 稀疏自编码器

▶通过给自编码器中隐藏层单元Z加上稀疏性限制,自编码器可以学习到数据中一些有用的结构。

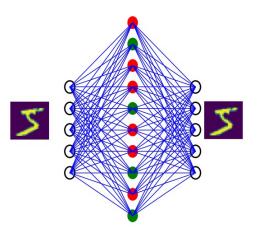
$$x' = f(W^{(2)}z + b^{(2)}),$$

▶目标函数

$$\mathcal{L} = \sum_{n=1}^{N} ||\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}'^{(n)}||^{2} + \eta \rho(\mathbf{Z}) + \lambda ||\mathbf{W}||^{2}$$

▶W表示自编码器中的参数

▶和稀疏编码一样,稀疏自编码器的优点是有很高的可解释性,并同时进行了隐式的特征选择.



#### From PCA to Auto-Encoder

PCA looks like a neural network with one hidden layer (linear activation function)

Autoencoder

If  $\{w^1, w^2, ... w^K\}$  is the component  $\{u^1, u^2, ... u^K\}$ 

$$\hat{x} = \sum_{k=1}^{K} c_k w^k \longrightarrow x - \bar{x}$$

To minimize reconstruction error:

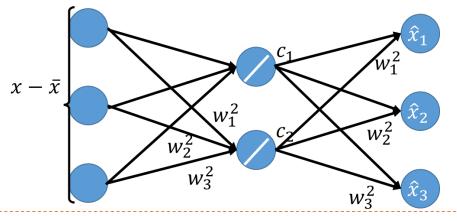
$$c_k = (x - \bar{x}) \cdot w^k$$

K = 2:

It can be deep.



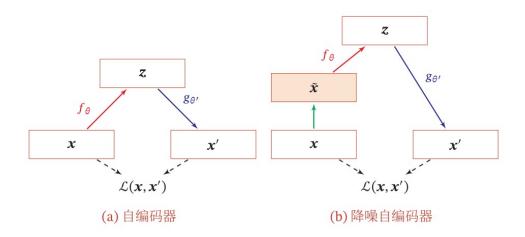
Deep Autoencoder



Minimize error  $x - \bar{x}$ 

## 降噪自编码器

- ▶通过引入噪声来增加编码鲁棒性的自编码器
  - $\blacktriangleright$ 对于一个向量x,我们首先根据一个比例 $\mu$ 随机将x的一些维度的值设置为0,得到一个被损坏的向量 $\tilde{x}$ 。
  - $\blacktriangleright$ 然后将被损坏的向量 $\mathfrak{X}$ 输入给自编码器得到编码Z,并重构出原始的无损输入X。





#### 概率密度估计

- ▶参数密度估计(Parametric Density Estimation)
  - ▶根据先验知识假设随机变量服从某种分布,然后通过训练样本来估计分布的参数.
  - ▶估计方法: 最大似然估计

$$\log p(\mathcal{D}; \theta) = \sum_{n=1}^{N} \log p(\mathbf{x}^{(n)}; \theta).$$

- ▶非参数密度估计(Nonparametric Density Estimation)
  - ▶不假设数据服从某种分布,通过将样本空间划分为不同的区域并估 计每个区域的概率来近似数据的概率密度函数。

## 参数密度估计

#### ▶正态分布

假设样本 $x \in \mathbb{R}^D$  服从正态分布

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\Big(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\Big),$$

其中 $\mu$ 和 $\Sigma$ 分别为正态分布的均值和方差.

数据集  $\mathcal{D} = \{x^{(n)}\}_{n=1}^{N}$  的对数似然函数为

$$\log p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = -\frac{N}{2} \log \left( (2\pi)^D |\boldsymbol{\Sigma}| \right) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} (\boldsymbol{x}^{(n)} - \boldsymbol{\mu})^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x}^{(n)} - \boldsymbol{\mu}).$$

分别求上式关于 $\mu$ , $\Sigma$ 的偏导数,并令其等于0.可得,

$$\begin{split} \boldsymbol{\mu}^{ML} &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{x}^{(n)}, \\ \boldsymbol{\Sigma}^{ML} &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\boldsymbol{x}^{(n)} - \boldsymbol{\mu}^{ML}) (\boldsymbol{x}^{(n)} - \boldsymbol{\mu}^{ML})^{\mathsf{T}}. \end{split}$$

# 参数密度估计

假设样本服从K个状态的多项分布,令 one-hot 向量 $\mathbf{x} \in \{0,1\}^K$ 来表示第k个状态,即 $x_k = 1$ ,其余 $x_{i,i \neq k} = 0$ . 样本 $\mathbf{x}$ 的概率密度函数为

#### >多项分布

$$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}) = \prod_{k=1}^{K} \mu_k^{x_k}, \tag{9.33}$$

其中 $\mu_k$ 为第k个状态的概率,并满足 $\sum_{k=1}^{K} \mu_k = 1$ .

数据集  $\mathcal{D} = \{x^{(n)}\}_{n=1}^{N}$  的对数似然函数为

$$\log p(\mathcal{D}|\mu) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} x_k^{(n)} \log(\mu_k). \tag{9.34}$$

多项分布的参数估计为约束优化问题. 引入拉格朗日乘子 $\lambda$ , 将原问题转换为无约束优化问题.

$$\max_{\mu,\lambda} \quad \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} x_k^{(n)} \log(\mu_k) + \lambda \Big( \sum_{k=1}^{K} \mu_k - 1 \Big). \tag{9.35}$$

分别求上式关于 $\mu_k$ , $\lambda$ 的偏导数,并令其等于0.可得,

$$\mu_k^{ML} = \frac{m_k}{N}, \qquad 1 \le k \le K \tag{9.36}$$

其中 $m_k = \sum_{n=1}^N x_k^{(n)}$ 为数据集中取值为第k个状态的样本数量.

# 参数密度估计一般存在以下问题

#### ▶模型选择问题

- ▶如何选择数据分布的密度函数?
- ▶实际数据的分布往往是非常复杂的,而不是简单的正态分布或多项 分布。

#### ▶ 不可观测变量问题

▶即我们用来训练的样本只包含部分的可观测变量,还有一些非常关键的变量是无法观测的,这导致我们很难准确估计数据的真实分布。

#### ▶维度灾难问题

- >高维数据的参数估计十分困难
- ▶随着维度的增加,估计参数所需要的样本数量指数增加。在样本不足时会出现过拟合。

# 非参数密度估计

$$P = \int_{\mathcal{R}} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

$$P_K = \binom{N}{K} P^K (1 - P)^{1 - K},$$

▶当N 非常大时, 我们可以近似认为

$$P pprox rac{K}{N}$$

▶假设区域R足够小,其内部的概率密 度是相同的,则有

$$P \approx p(\mathbf{x})V$$

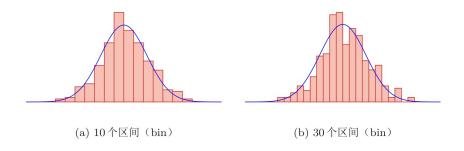
▶结合上述两个公式,得到

$$p(\mathbf{x}) \approx \frac{K}{NV}$$

# 直方图方法 (Histogram Method)

▶一种非常直观的估计连续变量密度函数的方法,可以表示为 一种柱状图。

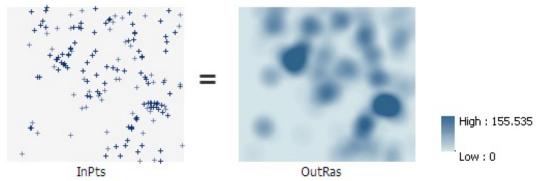
以一维随机变量为例,首先将其取值范围分成M个连续的、不重叠的区间(bin),每个区间的宽度为 $\Delta_m$ . 给定N个训练样本 $\mathcal{D} = \{x^{(n)}\}_{n=1}^N$ ,我们统计这些样本落入每个区间的数量 $K_m$ ,然后将它们归一化为密度函数.



▶缺点: 很难扩展到高维变量

# 核密度估计 (Kernel Density Estimation)

- ▶核密度估计是一种直方图 方法的改进。
  - ▶也叫Parzen窗方法



▶假设R为d维空间中的一个以点x为中心的"超立方体",并定义核函数来表示一个样本z是否落入该超立方体中

$$\phi\left(\frac{z-x}{h}\right) = \begin{cases} 1 & \text{if } |z_i - x_i| < \frac{H}{2}, 1 \le i \le D \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

 $\triangleright$ 点x的密度估计为  $p(x) = \frac{K}{NH^D} = \frac{1}{NH^D} \sum_{n=1}^{N} \phi(\frac{x^{(n)} - x}{H})$ 

## K近邻方法

- ▶核密度估计方法中的核宽度是固定的,因此同一个宽度可能 对高密度的区域过大,而对低密度区域过小。
- ▶一种更灵活的方式是设置一种可变宽度的区域,并使得落入 每个区域中样本数量为固定的K。
- ▶要估计点x的密度,首先找到一个以x为中心的球体,使得落入球体的样本数量为K,就可以计算出点x的密度。



#### 思考

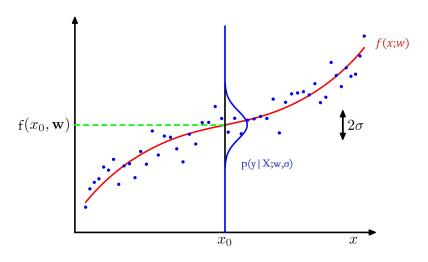
▶分析以下三种密度函数的区别: p(x), p(y|x) and p(x|y)?

- ▶生成式模型Generative model
- ▶判别式模型Discriminative model

## 生成式模型

▶假设标签y为一个随机变量,其服从以均值为 $f(x; w) = w^T x$ ,方差为 $\sigma^2$ 的高斯分布。

$$p(y|\mathbf{x}; \mathbf{w}, \sigma) = \mathcal{N}(y; \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}, \sigma^{2})$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y - \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x})^{2}}{2\sigma^{2}}\right).$$



#### 最大后验估计

$$p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{X},\boldsymbol{y};\boldsymbol{\nu},\sigma) = \frac{p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X};\boldsymbol{\nu},\sigma)}{\sum_{\boldsymbol{w}} p(\boldsymbol{w},\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X};\boldsymbol{\nu},\sigma)}$$

$$\propto p(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X},\boldsymbol{w};\sigma)p(\boldsymbol{w};\boldsymbol{\nu}),$$
后验
posterior
$$\phi(\boldsymbol{w};\boldsymbol{\nu}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{w};\boldsymbol{0},\boldsymbol{\nu}^2I)$$
http://www.posterior

$$\log p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{X},\boldsymbol{y};\nu,\sigma) \propto \log p(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X},\boldsymbol{w};\sigma) + \log p(\boldsymbol{w};\nu)$$

$$\propto -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{n=1}^{N} \left( y^{(n)} - \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}^{(n)} \right)^2 - \frac{1}{2\nu^2} \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{w},$$

$$= -\frac{1}{2\sigma^2} ||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{w}||^2 - \frac{1}{2\nu^2} \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{w}.$$

# 判别式模型

- ▶不在乎联合概率分布p(x,y)
- ▶直接建模条件概率p(y|x)

## 结构风险最小化

#### ▶结构风险最小化准则

$$\mathcal{R}(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2} ||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{w}||^2 + \frac{1}{2} \lambda ||\boldsymbol{w}||^2,$$

#### ▶得到

$$\boldsymbol{w}^* = (\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathsf{T}} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{y},$$

▶岭回归(Ridge Regression)

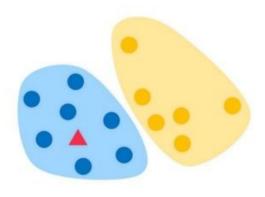
# 生成式模型 vs. 判别式模型

#### Discriminative vs. Generative

# Discriminative decision boundary

- Only care about estimating the conditional probabilities
- Very good when underlying distribution of data is really complicated (e.g. texts, images, movies)

#### Generative



- Model observations (x,y) first, then infer p(y|x)
- Good for missing variables, better diagnostics
- Easy to add prior knowledge about data

#### Discriminative v.s. Generative

$$P(C_1|x) = \sigma(w \cdot x + b)$$

directly find  $P(C_1|x)$ 

Find  $P(C_1, x)$ , P(x)

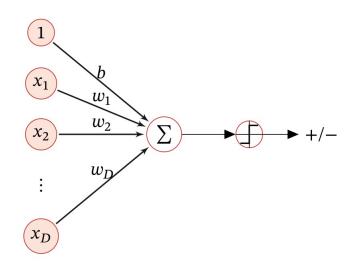
#### Discriminative: Logistic Regression

#### ▶模型

$$g(f(\mathbf{x}; \mathbf{w})) = \begin{cases} 1 & \text{if } f(\mathbf{x}; \mathbf{w}) > 0 \\ 0 & \text{if } f(\mathbf{x}; \mathbf{w}) < 0 \end{cases}$$
$$g(\mathbf{x}): 決策函数 \qquad f(\mathbf{x}; \mathbf{w}): 判別函数$$

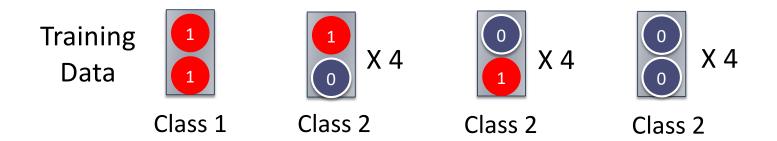
g(x):决策函数 (decision function)

f(x; w):判别函数 (discriminant function)



#### Generative v.s. Discriminative

#### **Example**



Testing Data

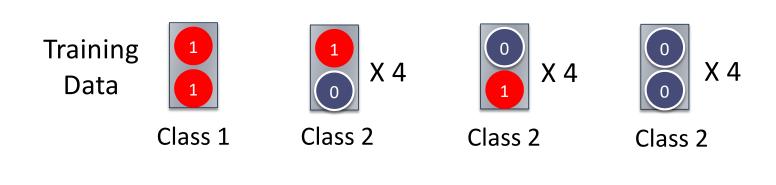


How about 朴素贝叶斯(Naïve Bayes)?

$$P(x|C_i) = P(x_1|C_i)P(x_2|C_i)$$

#### Generative

#### **Example**



$$P(C_1) = \frac{1}{13} \qquad P(x_1 = 1 | C_1) = 1 \qquad P(x_2 = 1 | C_1) = 1$$

$$P(C_2) = \frac{12}{13} \qquad P(x_1 = 1 | C_2) = \frac{1}{3} \qquad P(x_2 = 1 | C_2) = \frac{1}{3}$$

《神经网络与深度学习》