数据挖掘与机器学习

潘斌

panbin@nankai.edu.cn

范孙楼227

上节回顾

- 贝叶斯分类器
- 典型分类器：朴素贝叶斯

本节提要

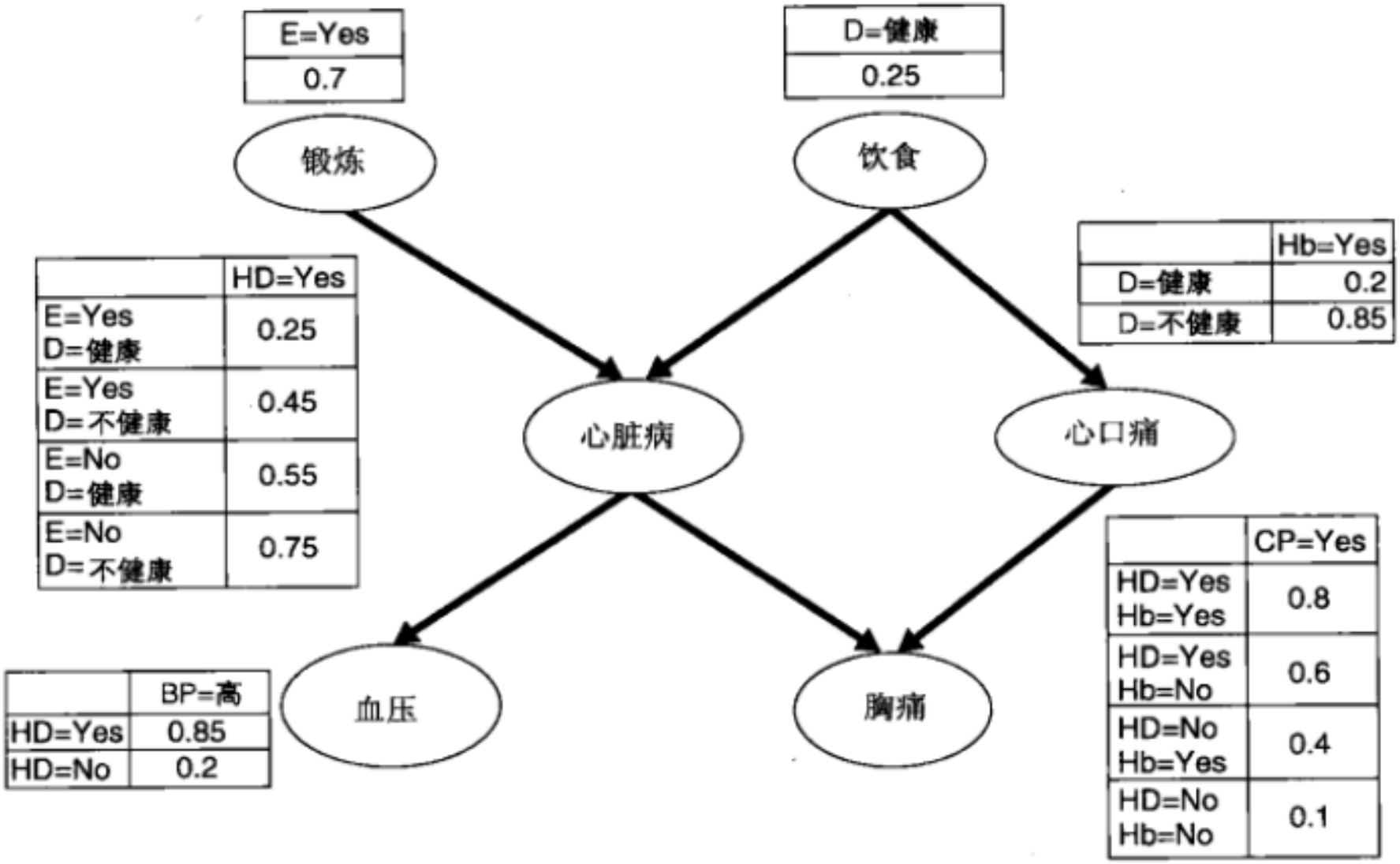
- 非线性分类器
- 贝叶斯网络
- 贝叶斯神经网络

贝叶斯信念网络（BAYES BELIEF NETWORKS, BBN）

- 简称贝叶斯网络，表述变量的一个子集上的条件独立性假定。
- 贝叶斯网络中的一个节点，如果它的父母节点已知，则它条件独立与它的所有非后代节点。

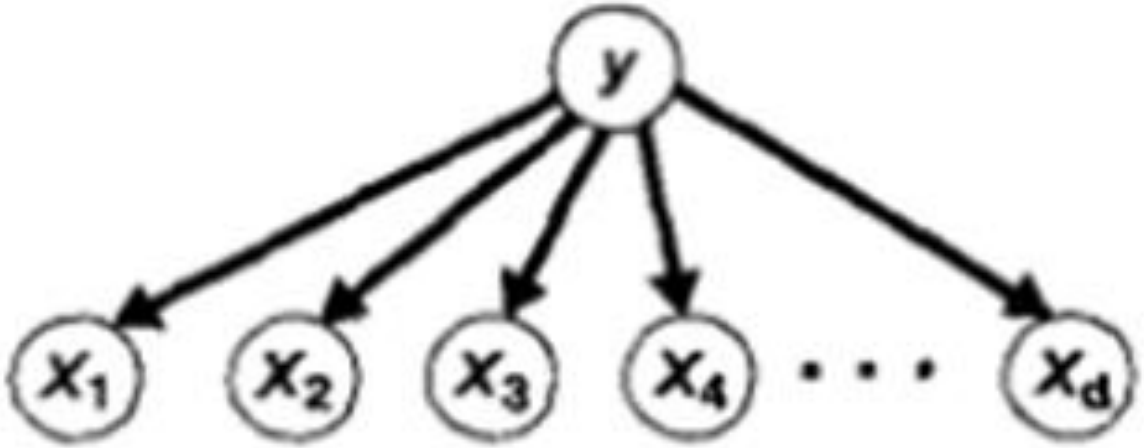
贝叶斯信念网络的表示

- 一个有向无环图(directed acyclic graph, or DAG)，指定一组条件独立性假定，表示变量间的依赖关系
  - 每个节点表示一个变量，每条弧表示两个变量间的依赖关系
  - 如从X到Y有一条有向弧，则X是Y的父母，Y是X的子女
  - 如网络中存在一条从X到Z的有向路径，则X是Z的祖先，Z是X的后代
- 一个概率表，即一组局部条件概率集合，把各节点和它的直接父节点关联起来
  - 如节点X没有父母节点，则表中只包含先验概率P(X)
  - 如节点X只有一个父母节点Y，则表中包含条件概率P(X|Y)
  - 如节点X有多个父母节点{Y1,…,YK}，则表中包含条件概率P(X| Y1,…,YK)

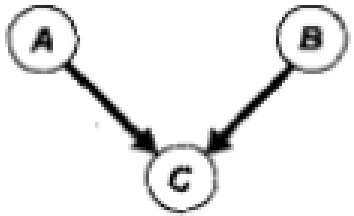


发现心脏病和心口痛病人的贝叶斯网络

朴素贝叶斯分类器中的条件独立假设也可以用贝叶斯网络表示。

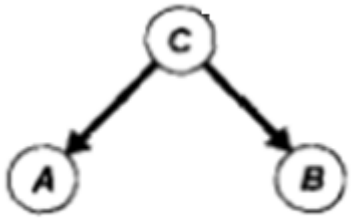


贝叶斯网络中三个变量间的典型依赖关系



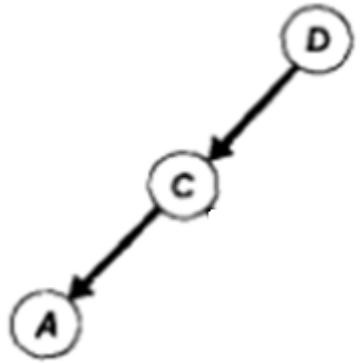
(a)

V型结构（V-Structure）、冲撞结构



(b)

“同父”结构（CommonParent）



(c)

顺序结构

贝叶斯神经网络（BAYESIAN NEURAL NETWORK）

- 什么是贝叶斯神经网络
- 为什么需要贝叶斯神经网络
- 贝叶斯神经网络如何实现

什么是贝叶斯神经网络

- 传统神经网络通过最小化损失函数求出参数的点估计
- 贝叶斯神经网络希望求w的分布而不是w的极大似然估计
- 网络的输出表示为

$$P(y|x) = E_{P(w|D)}[P(y|x,w)]$$

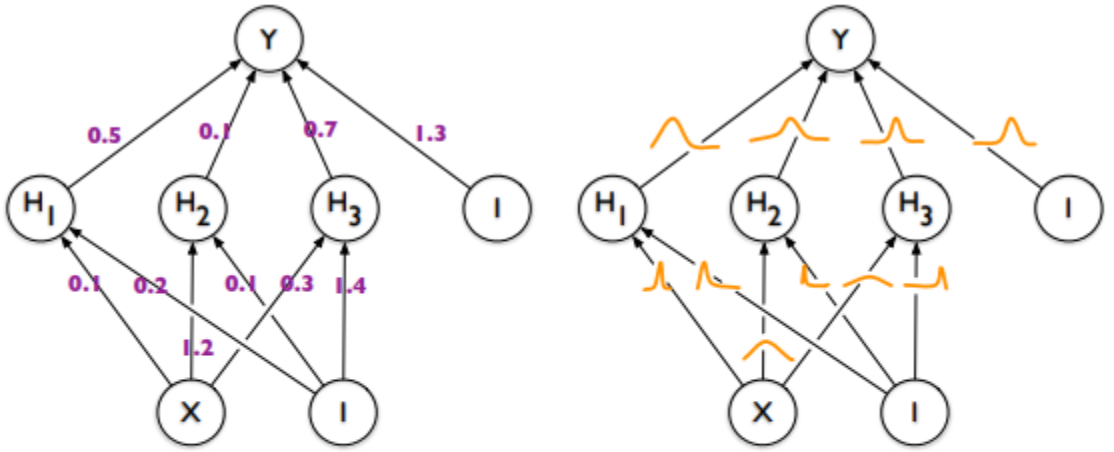


Figure 1. Left: each weight has a fixed value, as provided by classical backpropagation. Right: each weight is assigned a distribution, as provided by Bayes by Backprop.

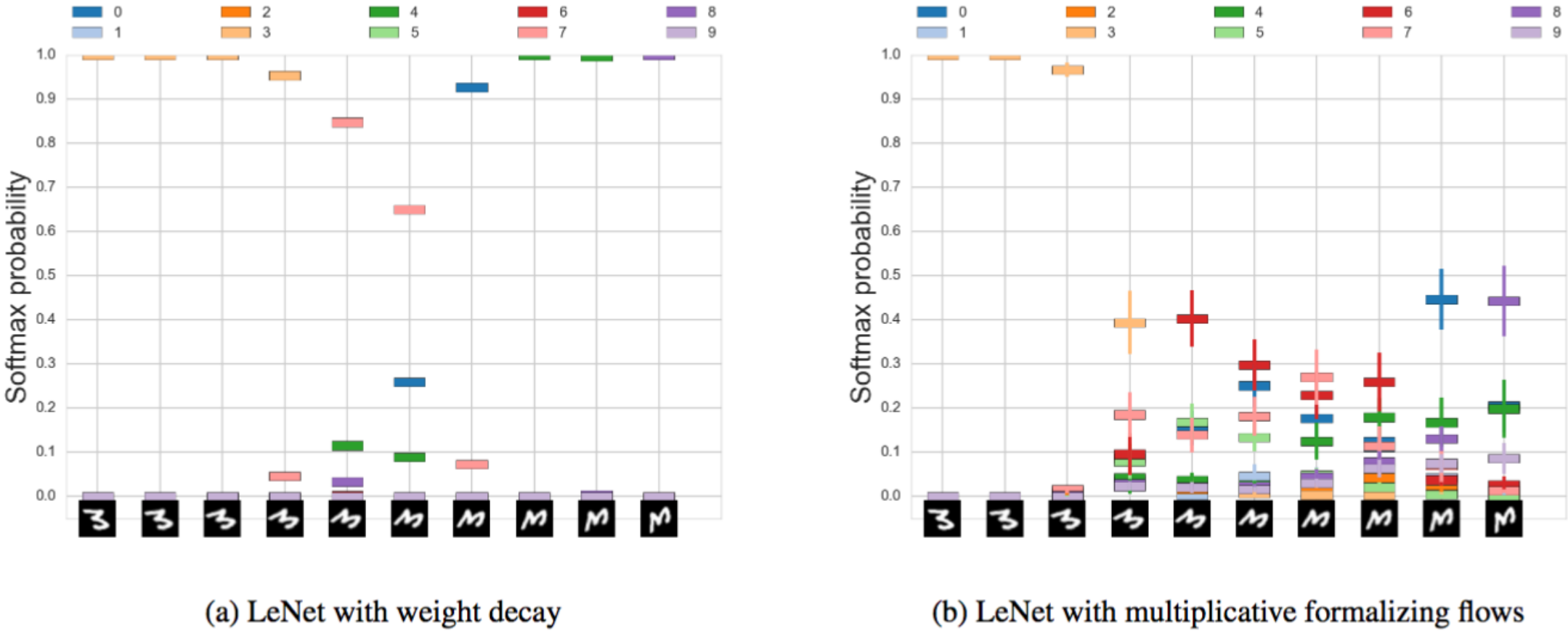
为什么需要贝叶斯神经网络

- 1、贝叶斯神经网络相当于最全面的集成模型
- $w \sim P(w|D)$，每个w的样本都对应一个可能的模型
- $P(y|x) = E_{P(w|D)}[P(y|x,w)]$ 即是所有可能模型的预测结果的加权平均

为什么需要贝叶斯神经网络

- 2、贝叶斯神经网络可以估计预测结果的不确定性
  - 普通神经网络的输出是点估计，通常过于自信
  - 贝叶斯神经网络可以推导出输出的分布

贝叶斯神经网络可以估计预测结果的不确定性（UNCERTAINTY）



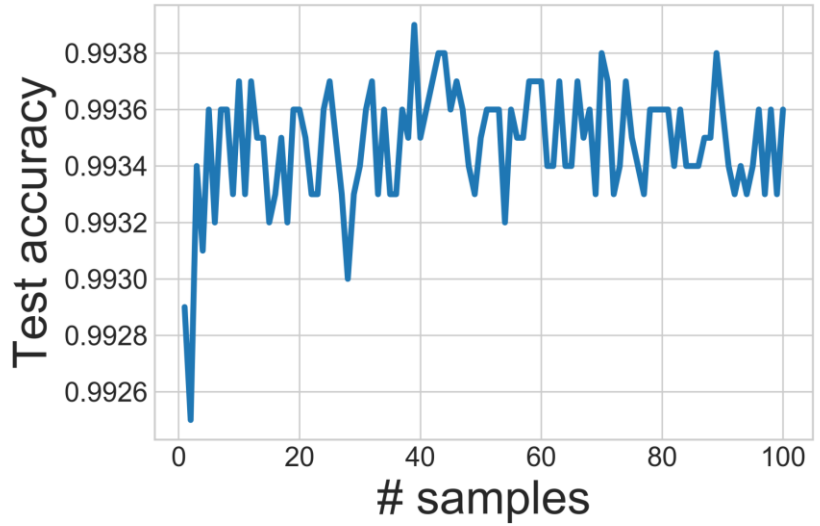
(a) LeNet with weight decay

(b) LeNet with multiplicative formalizing flows

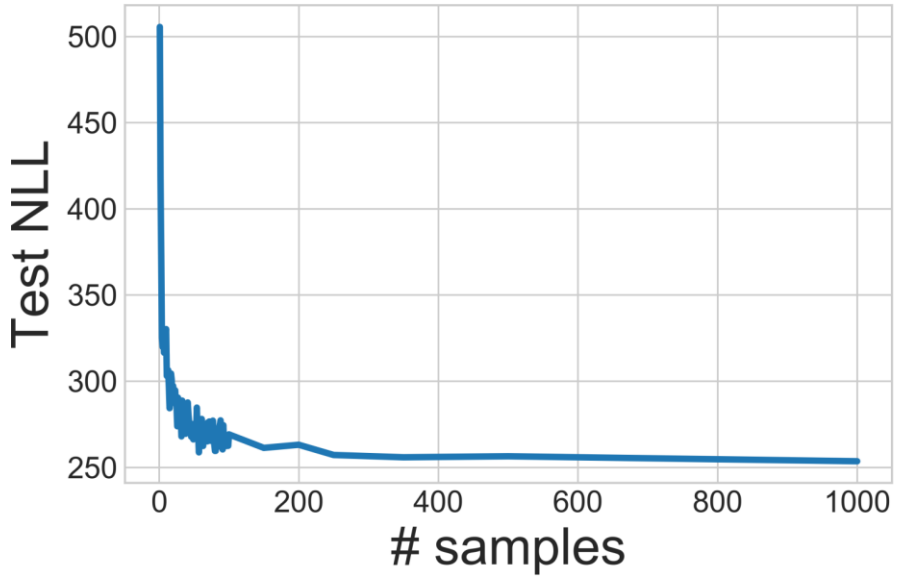
Louizos, Christos, and Max Welling. "Multiplicative normalizing flows for variational bayesian neural networks." ICML 2017

为什么需要贝叶斯神经网络

- 贝叶斯神经网络还可以反映网洛训练过程中的不确定性



测试准确率快速接近最优值并且开始摆动



但负对数似然持续下降

贝叶斯神经网络如何实现

- $P(w|D)$维度极高，直接推导比较困难，而且不易于使用
- 使用变分推断(variational inference)估计$P(w|D)$，即寻找一个简单的分布$q(w|\theta)$来逼近$P(w|D)$
- 逼近过程可以通过最小化两个分布的KL散度（Kullback-Leibler divergence）实现：$D_{KL}[q(w)||p(w)] = \int q(w) log \frac{q(w)}{p(w)} dw$

- θ的求导过程：

$$\theta^* = argmin_\theta D_{KL}[q(w|\theta)||P(w|D)]$$

$$= argmin_\theta \int q(w|\theta) log \frac{q(w|\theta)}{P(w|D)} dw$$

注意到 $\mathbf{P}(w|D) = \frac{P(D|w)P(w)}{P(D)}$

$$\hat{\theta}_{\mathrm{MLE}} = \arg\min - \sum_{i=1}^{n} \log P(x_i;\theta)$$

$$= argmin_\theta \int q(w|\theta) log \frac{q(w|\theta)P(D)}{P(w)P(D|w)} dw$$

$$= argmin_\theta \int q(w|\theta) log \frac{q(w|\theta)}{P(w)} dw - \int q(w|\theta) logP(D|w) dw + \int q(w|\theta) logP(D) dw$$

$$= argmin_\theta D_{KL}[q(w|\theta)||P(w)] - E_{q(w|\theta)}[logP(D|w)] + logP(D)$$

常数

- 最终，网络的优化目标为：

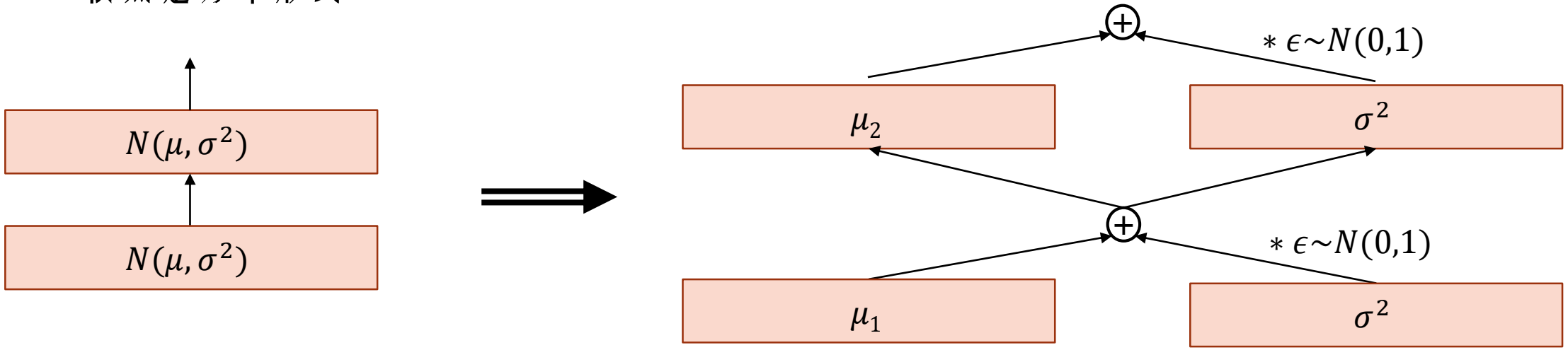
$$F(D,\theta) = -E_{q(w|\theta)}[logP(D|w)] + D_{KL}[q(w|\theta)||P(w)]$$

负对数似然，理解为一般损失函数

正则化项

贝叶斯神经网络如何实现

- 虽然利用变分推断简化了贝叶斯神经网络，但如何利用梯度下降法对分布进行优化?
- 重参数法（Reparameterization）：
  假设变分分布为正态分布$q(w|\theta) = q(w|\mu,\sigma^2) = N(\mu,\sigma^2)$,
  可以把参数的随机性迁移出去$(w|\mu,\sigma^2) = \mu + \sigma^2 \cdot \epsilon, \epsilon \sim N(0,1)$
- 这样就把贝叶斯神经网络的待求解的参数转化成了普通数值，但最终向前传播时的参数依然是分布形式



5 非线性分类器

- 5.1 多类问题概述
- 5.2 最小距离分类器
- 5.3 分段线性分类器概述
- 5.5 近邻法分类器
- 5.4 决策树
- 5.6 人工神经网络
- 5.7 SVM

5.1 多类问题概述

- **5.1.1** 多类问题
- **5.1.2** 解决方案

5.1.1 多类问题概述

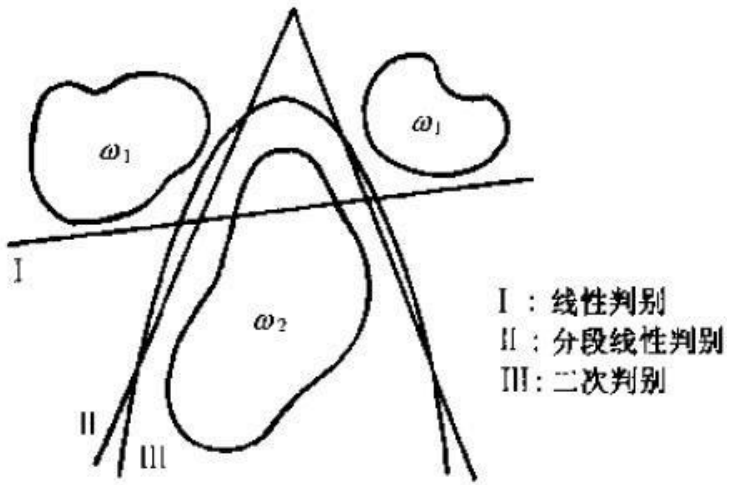
- **多类问题包括**
  - 多类情况（类别数$C > 2$）
    - 单峰分布
    - 多峰分布

5.1.1 多类问题

- **多类问题包括**
  - 两类情况（C = 2）
    - 样本集具有多峰分布

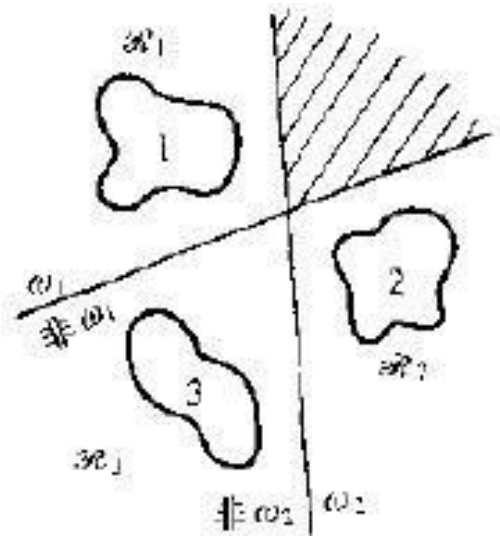
5.1.2 解决方案

- 如何解多类问题
  - Bayes分类器
    - 二次型判别函数
  - 线性分类器
  - 其它分类器



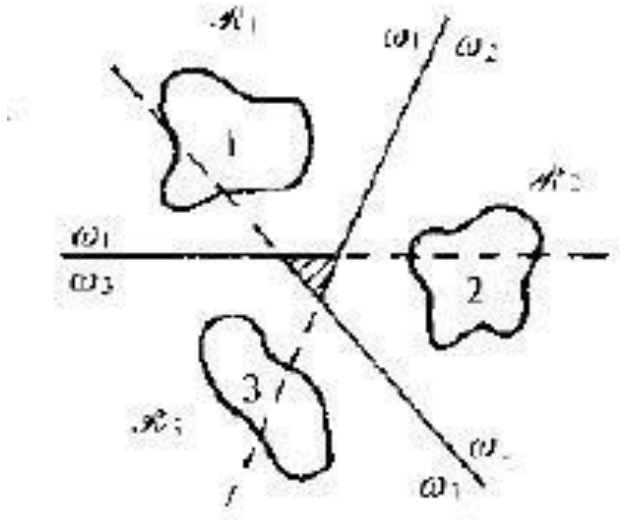
5.1.2 解决方案

- **多类问题是否可以用线性分类器解？**
  - 思路一
    - 对“类与类的非”进行线性分类
    - 只需要C – 1个线性分类器就可以



5.1.2 解决方案

- **多类问题是否可以用线性分类器解？**
  - 思路二
    - “两两分类”进行线性分类
    - 需要C(C – 1)/2个线性分类器就可以

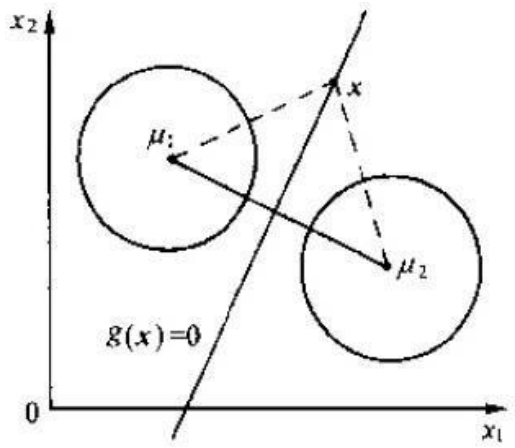


5.2 最小距离分类器

- 5.2.1 最小距离分类器原理
- 5.2.2 分段最小距离分类器
- 5.2.3 特点

5.2.1 最小距离分类器原理

- **回顾两类单峰线性分类器**
  - 垂直平分 / 最小距离分类器
  - 基于两类样本均值点作垂直平分线

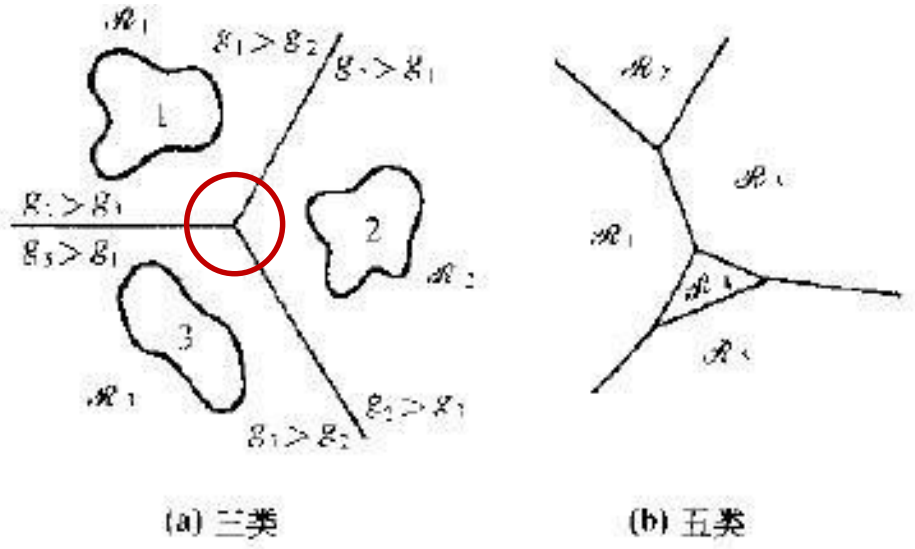


5.2.1 最小距离分类器原理

- **其最小距离形式**
  - 判别函数
    - $G_1(x) = d_1(x) = \|x - m_1\|$
    - $G_2(x) = d_2(x) = \|x - m_2\|$
  - 决策规则
    - 对于未知样本x，若$d_1(x) < d_2(x)$，则x决策为ω_1类
    - 若$d_1(x) > d_2(x)$，则x决策为ω_2类

5.2.1 最小距离分类器原理

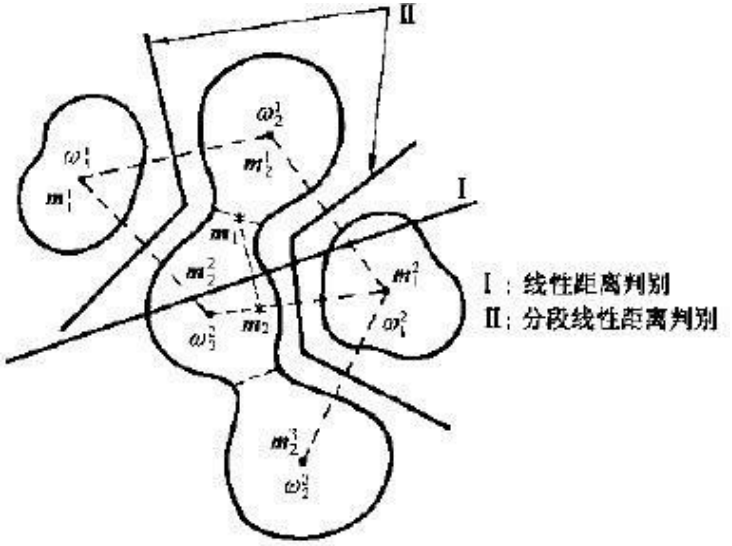
- 直接使用可以解决多类问题
  - 解决C类单峰问题



(a) 三类　　(b) 五类

5.2.1 最小距离分类器原理

- 直接使用可以解决多类问题
  - 解决两类多峰问题



5.2.2 分段最小距离分类器

- **问题**
  - 已知各类及其子类
  - 求分段最小距离分类器

5.2.2 分段最小距离分类器

- **分类器设计**
  - 先求各子类均值
    - m_{ij} （ω_i类的第j子类）
  - 定义各类判别函数
    - $G_i(x) = \min_j \| x - m_{ij} \|$
  - 决策规则
    - 对于未知样本x，若$G_k(x) = \min_i G_i(x)$，则x决策为ω_k类

5.2.3 特点

- **分类器特点**
  - 解决两类多峰或多类问题的分段线性分类器
  - 可以解决几乎所有分类问题但要已知各类子类
  - 概念直观简单，未经优化
  - 分类器设计简单容易
  - （无重叠区或空白区）

5.3 分段线性分类器概述

- 5.3.1 问题与思路
- 5.3.2 设计说明

5.3.1 问题与思路

- **思路**
  - 参考分段最小距离分类器
    - 定义判别函数
    - 定义决策规则

5.3.1 问题与思路

- 针对不同已知条件
  - 1、已知各类子类个数及子类分布区域
  - 2、已知各类子类个数（分布区域不知）
  - 3、一般情况（子类个数和分布区域均不知）

5.3.2 设计说明

- **两种判别函数的区别**
  - 小写g函数（分界面）
    - 每段设计一个g函数，容易做
    - 多个分段，如何判断正负侧，需要特殊规则
  - 大写G函数（计算值）
    - 每个子类设计一个G函数，需要知道类别分布区域
    - 直接计算Max或Min，判别规则简单

5.3.2 设计说明

- **设计关键**
  - 如何确定各类的子类个数
  - 如何确定子类的分布区域
  - 如何求解各子类的权向量和阈值权
  - 若采用小写g函数，决策规则如何

5.5 近邻法分类器

- 5.5.1 近邻法原理
- 5.5.2 最近邻法
- 5.5.3 k-近邻法
- 5.5.4 近邻法分类器错误率

5.5.1 近邻法原理

- 近邻法分类是一种简单实用的分类方法
  - 分段线性分类器

5.5.1 近邻法原理

- **最小距离分类器**
  - 用均值点作为代表点，按最近均值点进行决策
  - 有时候均值点不具有很好的代表性
- **近邻法分类器思路**
  - 全部训练样本都是代表点，按最近邻点进行决策

5.5.2 最近邻法

- **问题**
  - 设C类问题：$\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_C$
  - ω_i类样本集$Z_i = \{\ldots, x_{ik}, \ldots\}$
  - 求近邻法分类器

5.5.2 最近邻法

- **判别函数**
  - 定义$G_i(x) = \min \| x - x_{ik} \|$　　$i = 1, 2, \ldots, C$
- **决策规则**
  - 对于未知样本x，若$G_j(x) = \min G_i(x)$，则$x \in \omega_j$
- **决策面**

5.5.2 最近邻法

- **实例**
  - 甲类：$[0\ \ 3]^T$、$[2\ \ 4]^T$、$[1\ \ 3]^T$、$[2\ \ 3]^T$、$[0\ \ 2]^T$
  - 乙类：$[4\ \ 1]^T$、$[3\ \ 2]^T$、$[2\ \ 1]^T$、$[3\ \ 0]^T$、$[3\ \ 1]^T$
  - 待分类样本为$x = [5\ \ 0]^T$，问x应决策为哪一类？

5.5.2 最近邻法

- **近邻法特点**
  - 可以解决几乎所有分类问题
  - 概念直观简单未经优化，但错误率并不高
  - 分类器设计容易
  - 运算量大，需要设计快速算法

5.5.2 最近邻法

- **快速算法**
  - 剪辑法
    - 进行预分类
    - 剪辑掉错分样本
    - 剪辑法可以重复进行

5.5.2 最近邻法

- 快速算法
  - 剪辑法例一

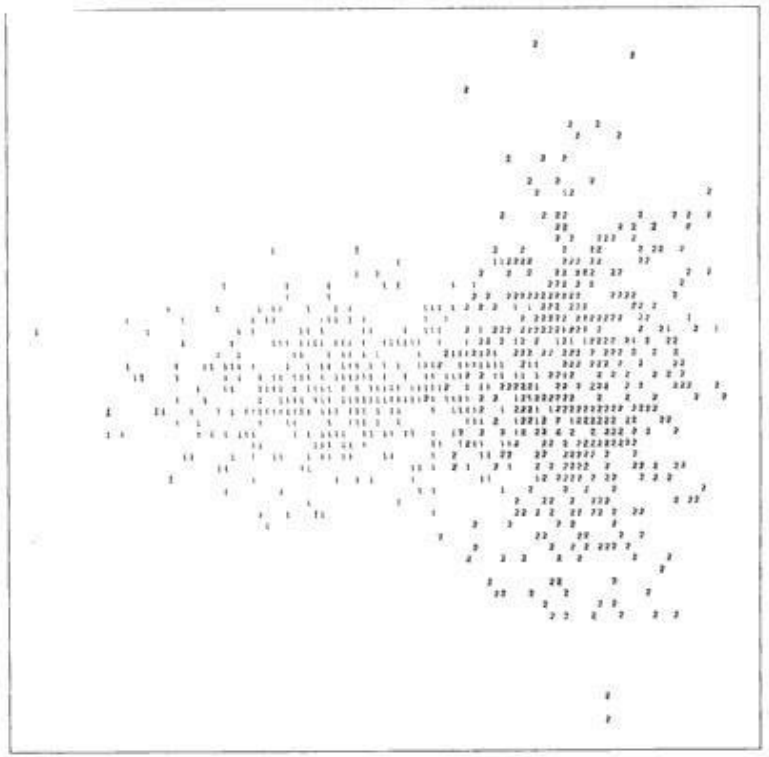


图 6.5 MULTIEDIT 算法实验：原始样本集

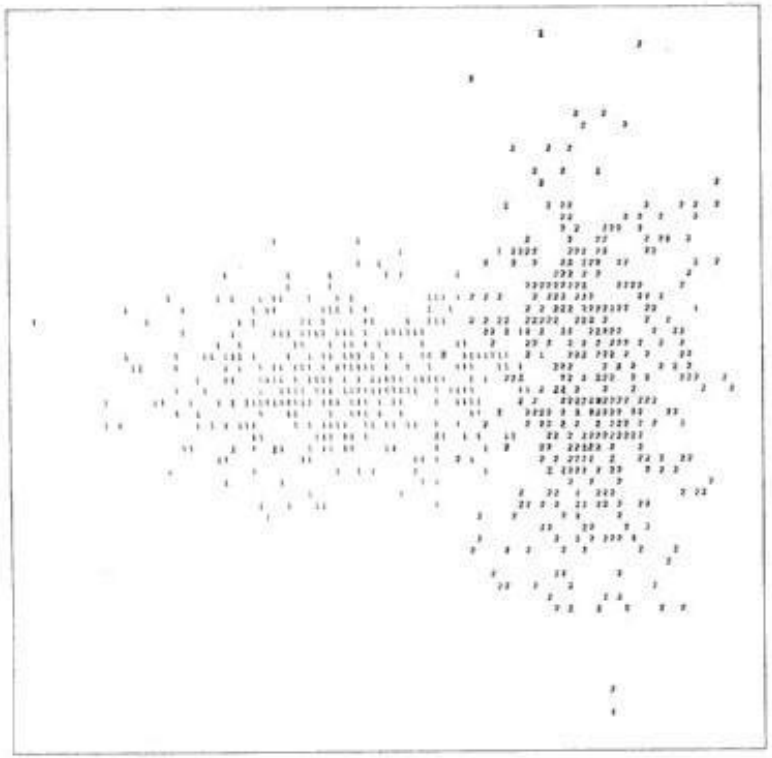


图 6.6 MULTIEDIT 算法实验：第一次迭代后留下的样本

5.5.2 最近邻法

- 快速算法
  - 剪辑法例一

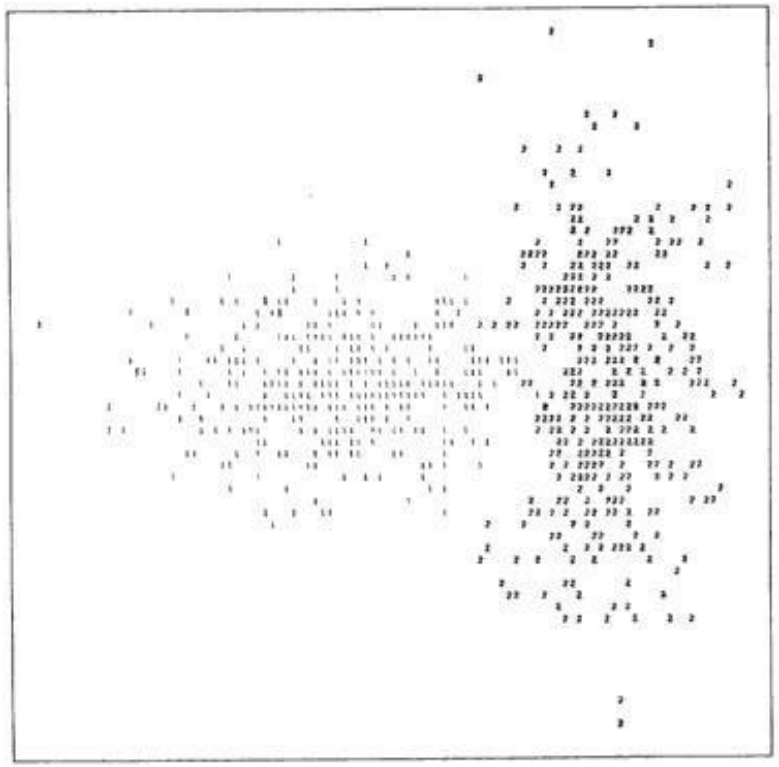


图 6.7 MULTIEDIT 算法实验：经三次迭代后留下的样本

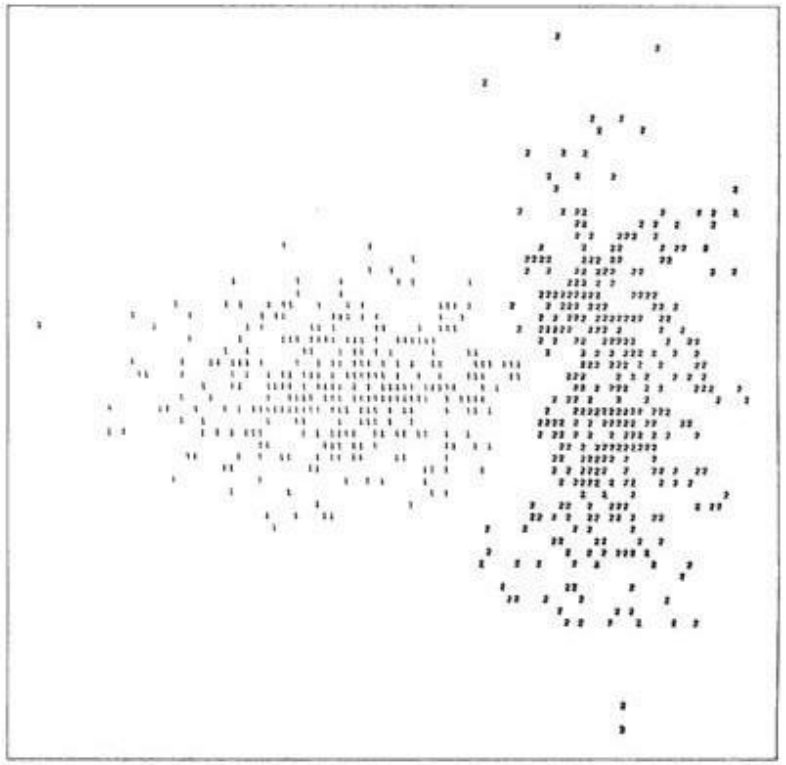


图 6.8 MULTIEDIT 算法实验：算法终止时留下的样本

5.5.2 最近邻法

- 快速算法
  - 剪辑法例二

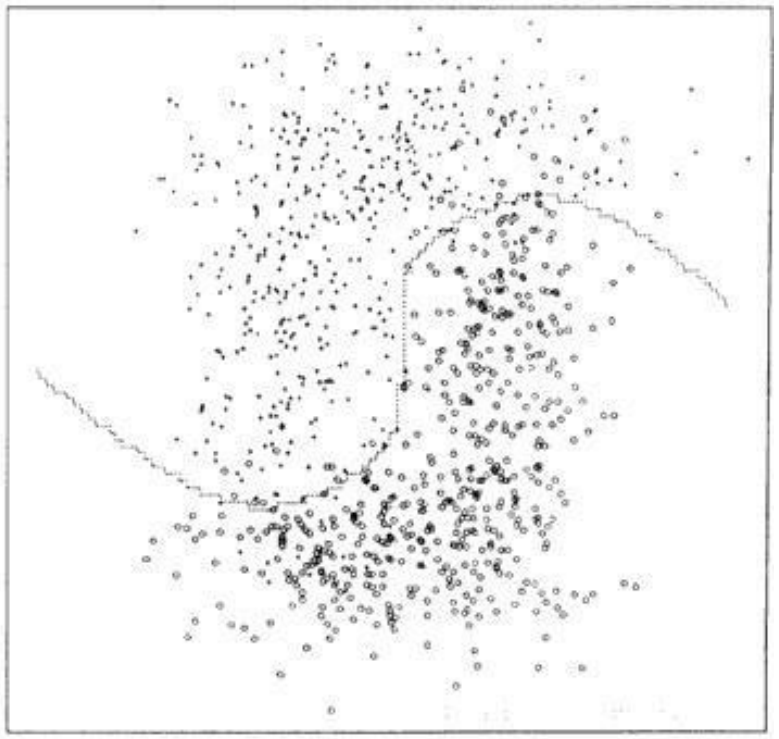


图 6.9 非正态分布下 MULTIEDIT 重复剪辑实验：初始样本集

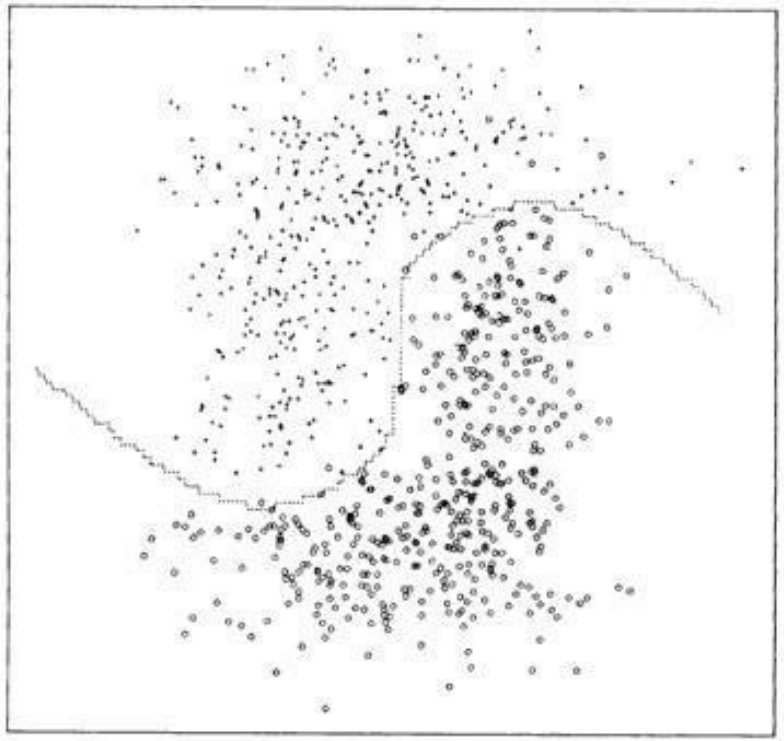


图 6.10 非正态分布下 MULTIEDIT 重复剪辑实验：第一次剪辑后的样本集

5.5.2 最近邻法

- 快速算法
  - 剪辑法例二

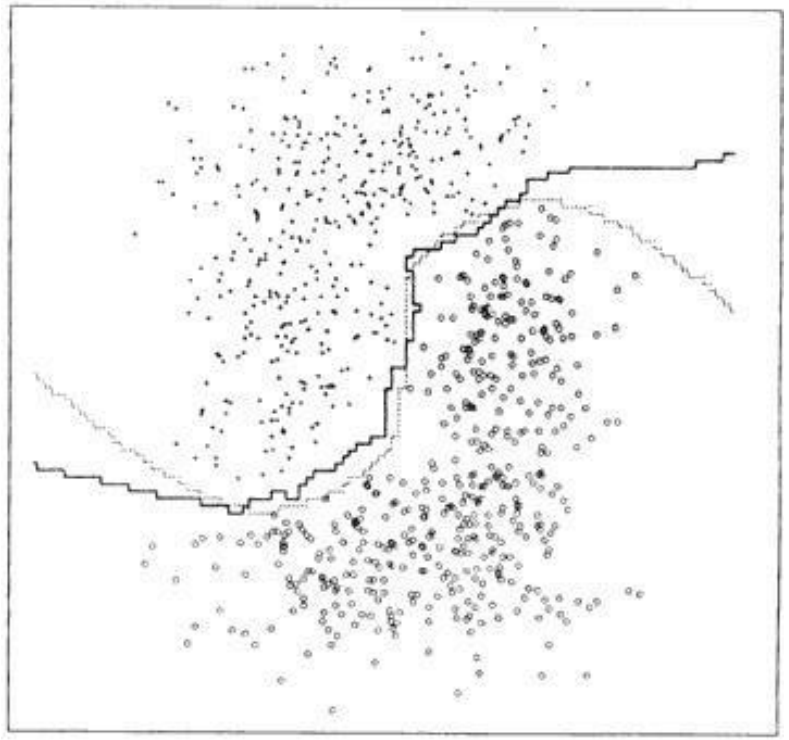


图 6.11 非正态分布下 MULTIEDIT 重复剪辑实验:最终结果

5.5.2 最近邻法

- **快速算法**
  - 压缩法
    - 大多数样本参与计算，但却不起决定作用，是多余样本。
  - 压缩法步骤
    - 每类各取一个代表样本（例如均值点近邻），组成压缩样本集Z_s。
    - 以当前Z_s对样本集做最近邻分类，然后将错分样本放入Z_s。
    - 重复上述步骤，直至无样本放入为止。

5.5.2 最近邻法

- 快速算法
  - 压缩法示例

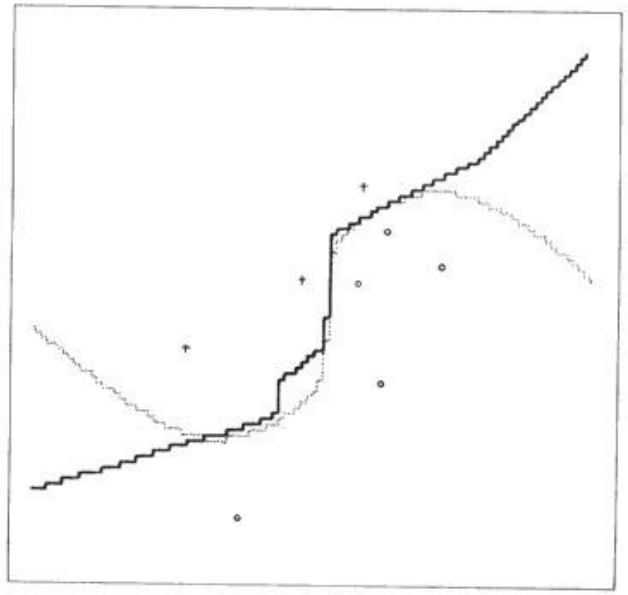


图 6.12　图 6.9 的数据经 MULTIEDIT 算法剪辑之后再使用 CONDENSING 压缩近邻算法的结果

5.5.3 k-近邻法

- **最近邻法的问题**
  - 噪点干扰
- **k-近邻法**

5.5.3 k-近邻法

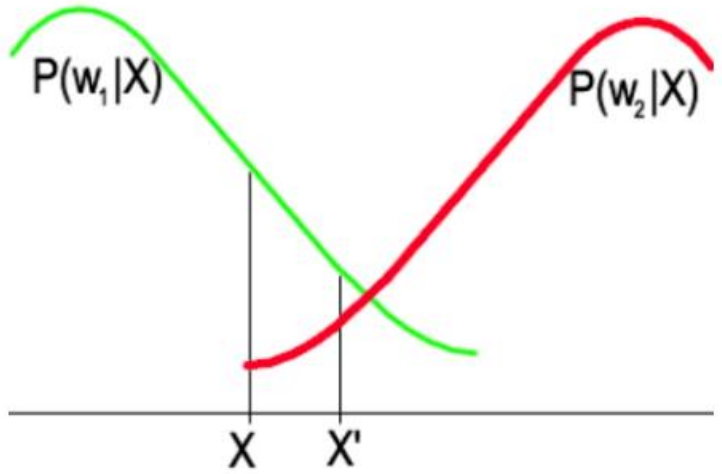
- **判别函数**
  - 定义$G_i(x) = k_i$　　$i = 1, 2, \ldots, C$
- **决策规则**
  - 对于未知样本x，若$G_j(x) = \max G_i(x)$，则$x \in \omega_j$

5.5.4 近邻法分类错误率

- 近邻法分类错误率定义
  - 最近邻法
    - 设有N个训练样本
    - 未知样本x的最近邻为x’
    - 再设最小错误率Bayes分类器的错误率为P*
  - 则平均错误率定义为

$$P_N(e) = \int\int P_N(e \mid x, x')\, p(x' \mid x) dx'\, p(x) dx$$

$$P(e) = \lim_{N \to \infty} P_N(e)$$

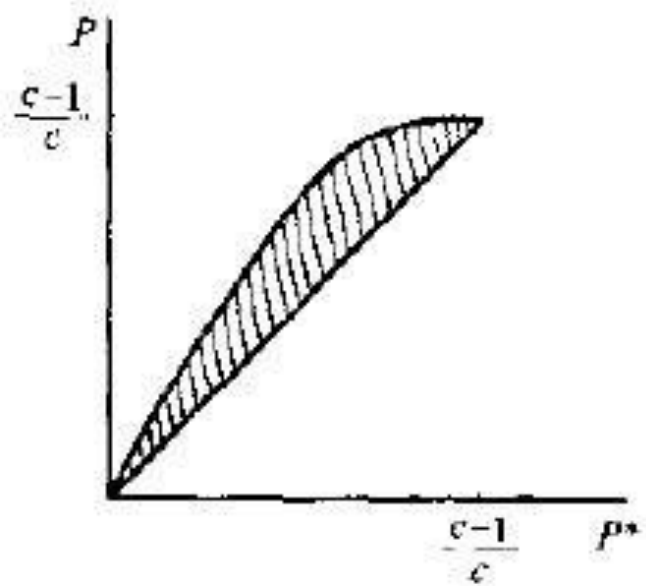


5.5.4 近邻法分类错误率

- 近邻法错误率上下界
  - 最近邻法

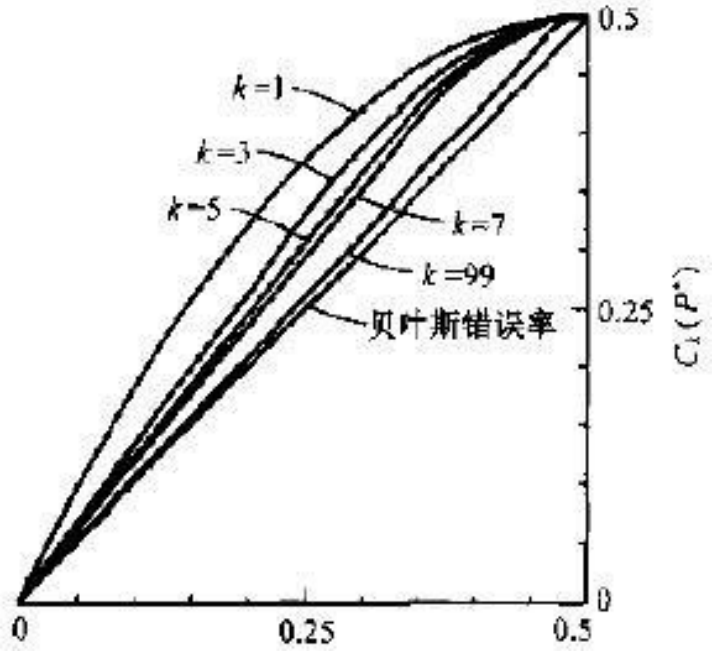
$$P^* \le P \le P^*(2 - \frac{c}{c-1} P^*)$$

$$\begin{aligned} P(err) &= 1 - \sum_{c \in Y} P(c|x) P(c|z) \\ &\cong 1 - \sum_{c \in Y} P^2(c|x) \\ &<= 1 - P^2(c^*|x) \\ &= (1 + P(c^*|x))(1 - P(c^*|x)) \\ &<= 2*(1 - P(c^*|x)) \end{aligned}$$



5.5.4 近邻法分类器错误率

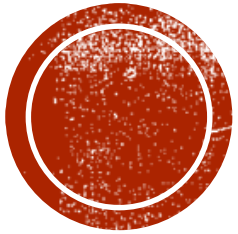
- 近邻法错误率上下界
  - k-近邻法



练习

- **4、已知**
  - 甲类样本4个：$[2\ \ 2]^T$、 $[2\ \ 3]^T$ 、 $[1\ \ 2]^T$ 、 $[2\ \ 1]^T$
  - 乙类样本4个：$[-2\ \ -2]^T$、 $[-3\ \ -2]^T$ 、 $[-1\ \ -2]^T$ 、 $[-2\ \ -3]^T$

  - 试用3近邻分类器对未知样本$[-1\quad -1]^T$ 和$[3\ \ 2]^T$进行分类。



决策树

Decision Tree

决策树的组织形式

- 通过一系列精心构思的关于测试记录属性的问题，可以解决分类问题。
- 每当一个问题得到答案，后继问题随即而来，直到得到记录的类标号。
- 决策树是一种非参数的监督学习方法，它主要用于分类和回归。目的是构造一种模型，使之能够从样本数据的特征属性中，通过学习简单的决策规则——IF THEN规则，从而预测目标变量的值。

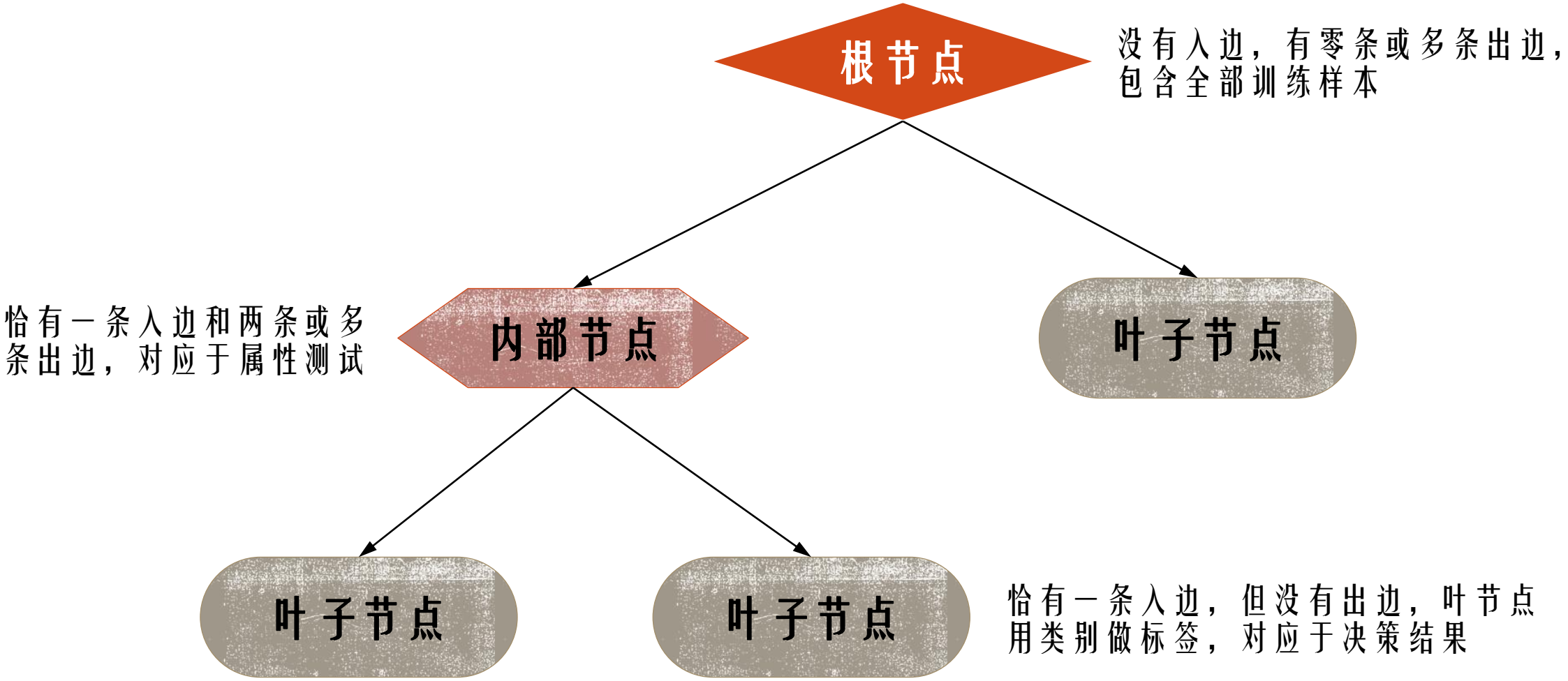
- 决策树是一种由节点和有向边组成的层次结构
  - **根节点（root node）**

    没有入边，有零条或多条出边
  - **内部节点（internal node）**

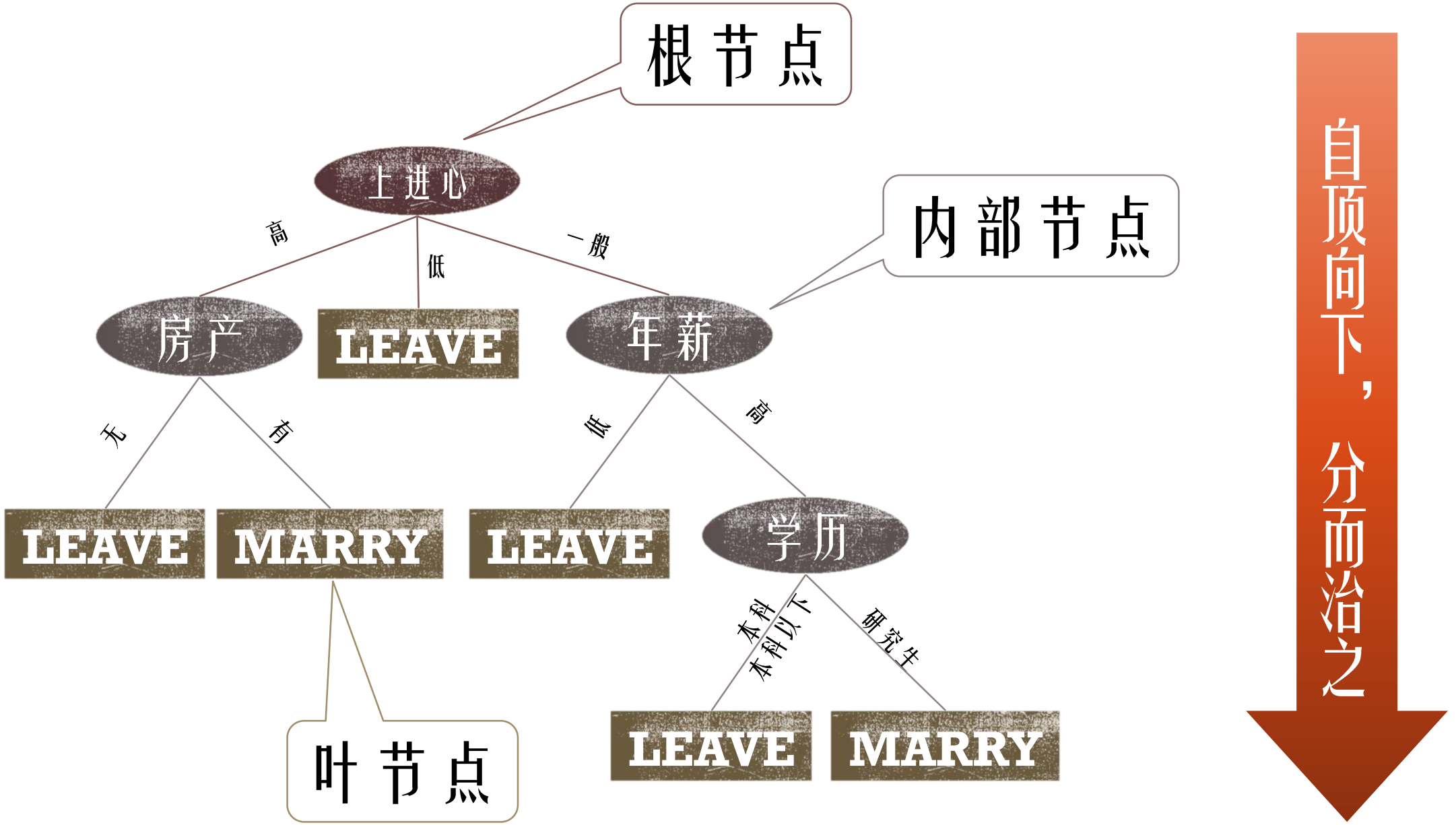
    恰有一条入边和两条或多条出边
  - **叶节点（leaf node）或终节点（terminal node）**

    恰有一条入边，但没有出边

    每个叶节点都赋予一个类标号



决策树内部的每一个节点代表的是对一个特征的测试，树的分支代表该特征的每一个测试结果，从根节点到每个叶子节点的路径对应一条决策规则


根节点
上进心
高
低
一般
房产
LEAVE
年薪
内部节点
无
有
低
高
LEAVE
MARRY
LEAVE
学历
本科
本科以下
研究生
LEAVE
MARRY
叶节点
自顶向下，分而治之

决策树归纳算法

- 贪心策略
  - 采用自上而下的递归构造（top-down induction）贪婪搜索遍历可能的决策树空间。
- 可以构造的决策树的数目达到指数级。

HUNT算法

- Hunt等人于1966年提出，是许多决策树算法的基础。
- 算法基本过程
  - 记D_t为到达节点t的训练记录集
  - 如果D_t包含的记录属于同一个类y_t，那么t为叶子节点，标记为y_t。
  - 如果D_t包含属于多个类的记录，使用属性测试条件将数据划分为更小的子集。对于属性测试条件的每个输出，创建一个子女节点，并依测试结果将D_t中的记录分配到子女节点中去。
  - 递归地对每个子女节点应用该算法。

- 例：预测贷款申请者会否按时归还贷款
  - 为此，考察以前贷款者的贷款记录

	二元的	分类的	连续的	类
Tid	有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
1	是	单身	125K	否
2	否	已婚	100K	否
3	否	单身	70K	否
4	是	已婚	120K	否
5	否	离异	95K	是
6	否	已婚	60K	否
7	是	离异	220K	否
8	否	单身	85K	是
9	否	已婚	75K	否
10	否	单身	90K	是

训练数据集：预测拖欠银行贷款的贷款者

- 初始决策树只有一个节点，类标号为“拖欠贷款者 = 否”

	二元的	分类的	连续的	类
Tid	有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
1	是	单身	125K	否
2	否	已婚	100K	否
3	否	单身	70K	否
4	是	已婚	120K	否
5	否	离异	95K	是
6	否	已婚	60K	否
7	是	离异	220K	否
8	否	单身	85K	是
9	否	已婚	75K	否
10	否	单身	90K	是

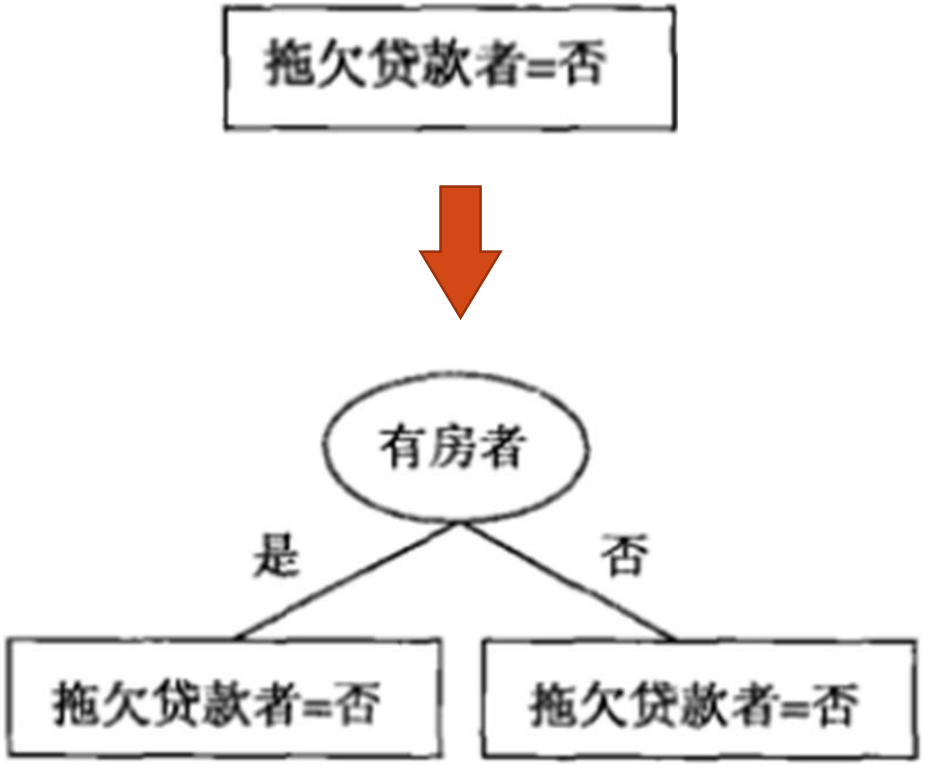
训练数据集：预测拖欠银行贷款的贷款者

拖欠贷款者=否

- 进一步细化该树，根据“有房者”测试条件，创建两个子女节点，将训练数据划分为两类较小的子集

	二元的	分类的	连续的	类
Tid	有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
1	是	单身	125K	否
2	否	已婚	100K	否
3	否	单身	70K	否
4	是	已婚	120K	否
5	否	离异	95K	是
6	否	已婚	60K	否
7	是	离异	220K	否
8	否	单身	85K	是
9	否	已婚	75K	否
10	否	单身	90K	是

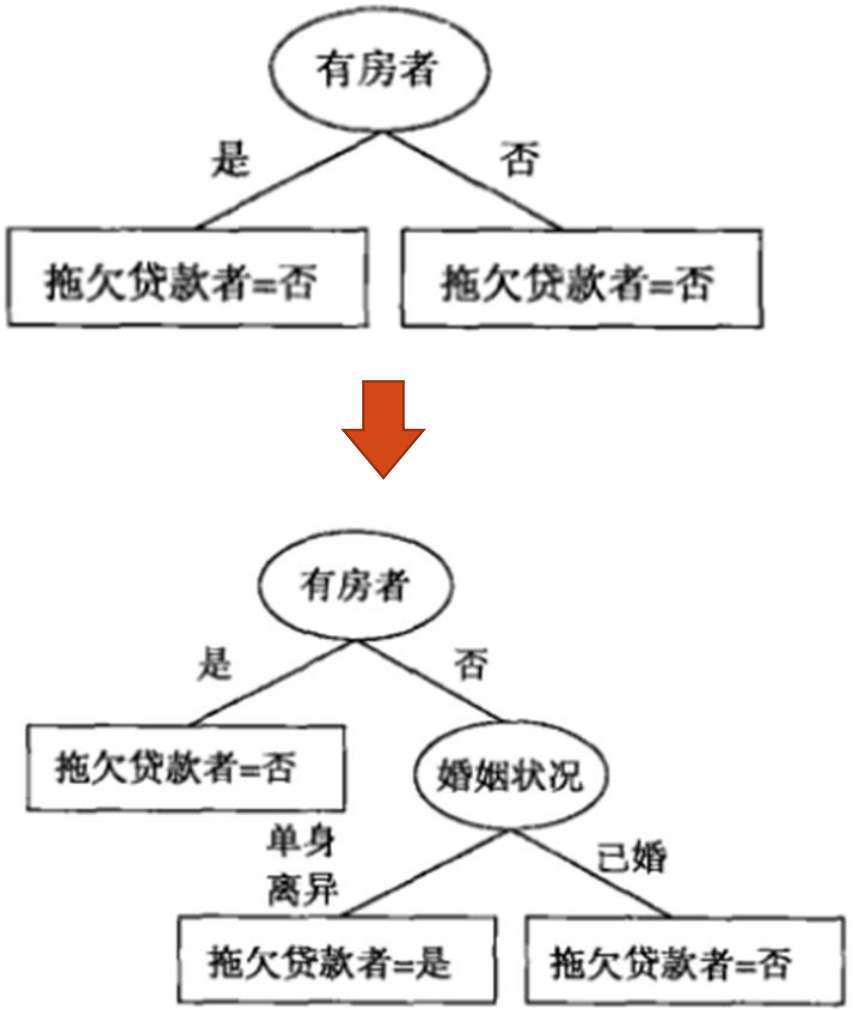
训练数据集：预测拖欠银行贷款的贷款者



- 对根节点的每个子女节点递归地调用Hunt算法

	二元的	分类的	连续的	类
Tid	有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
1	是	单身	125K	否
2	否	已婚	100K	否
3	否	单身	70K	否
4	是	已婚	120K	否
5	否	离异	95K	是
6	否	已婚	60K	否
7	是	离异	220K	否
8	否	单身	85K	是
9	否	已婚	75K	否
10	否	单身	90K	是

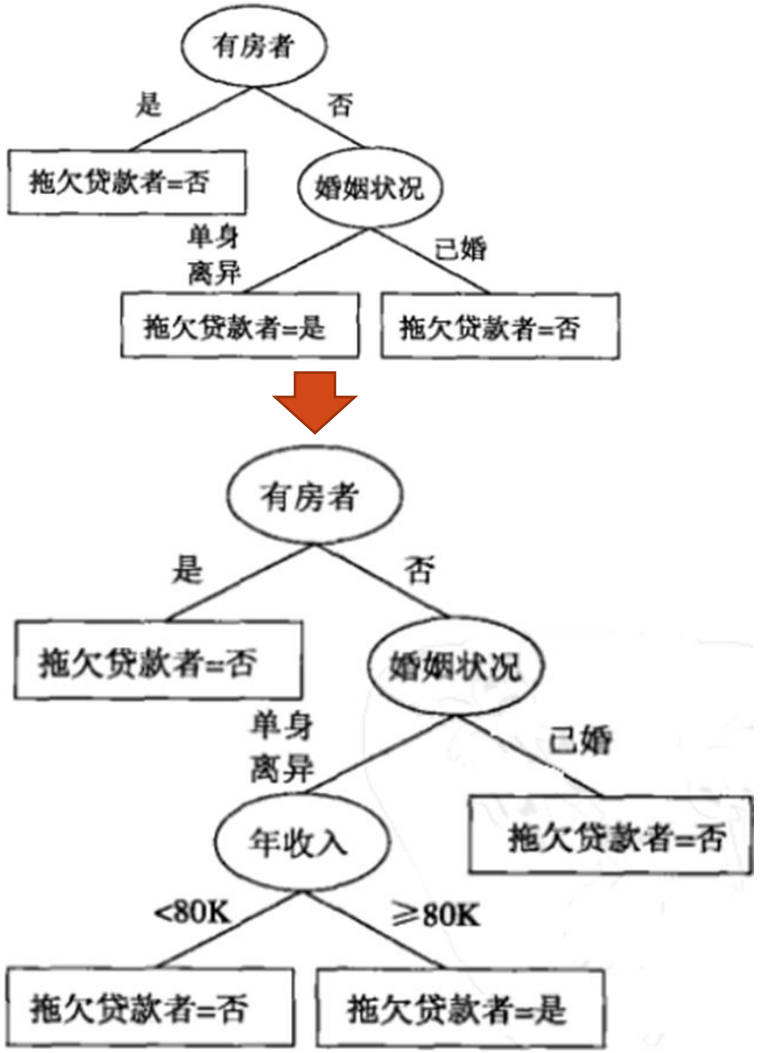
训练数据集：预测拖欠银行贷款的贷款者



- 继续算法直至所有记录都属于同一个类

	二元的	分类的	连续的	类
Tid	有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
1	是	单身	125K	否
2	否	已婚	100K	否
3	否	单身	70K	否
4	是	已婚	120K	否
5	否	离异	95K	是
6	否	已婚	60K	否
7	是	离异	220K	否
8	否	单身	85K	是
9	否	已婚	75K	否
10	否	单身	90K	是

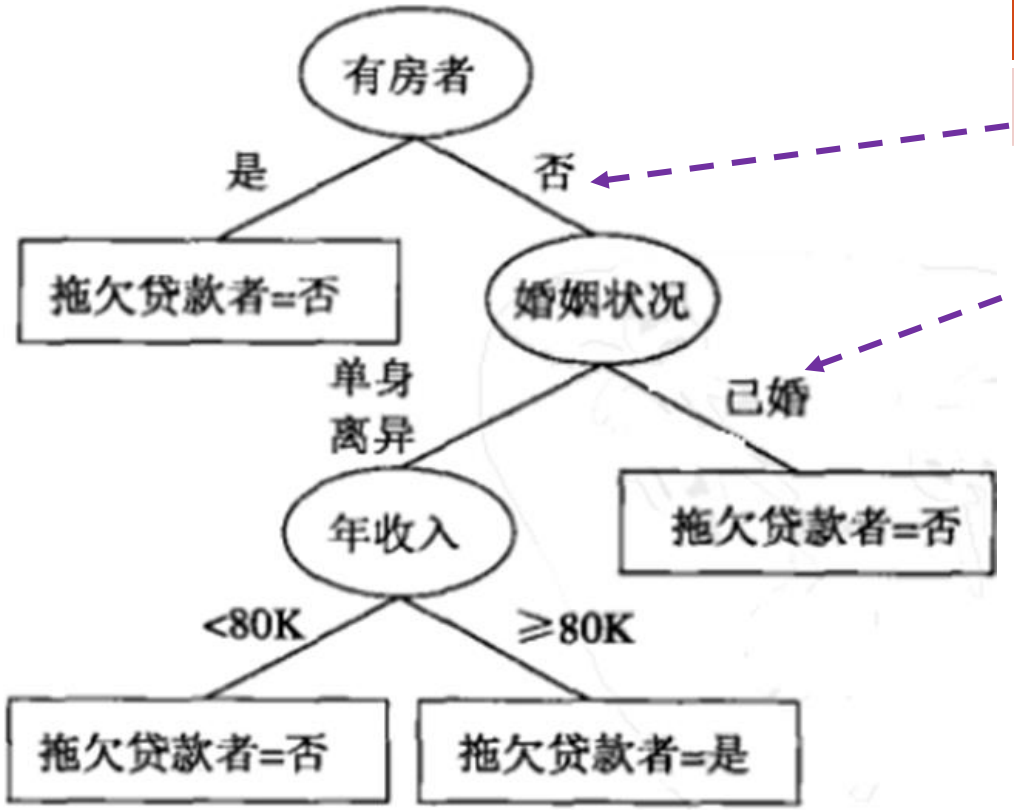
训练数据集：预测拖欠银行贷款的贷款者



利用决策树进行分类

- 一旦构造了决策树，则可对测试记录进行分类。
  - 从树的根节点开始，将测试条件用于测试记录，根据测试结果选择适当的分支
  - 沿着该分支
    - 到达另一个内部节点，使用新的测试条件
    - 到达一个叶节点
  - 叶节点的类标号被赋值给该测试记录

从根节点开始



对未知记录应用模型

有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
否	已婚	85k	?

拖欠贷款者=否

为什么第一次选择“有房者”来作为测试条件?
我们是依据什么原则来选取属性测试条件的?

☞ 事实上，如果我们选择的属性测试条件不同，对于同一数据集来说所建立的决策树可能相差很大。

因此，在构建决策树时我们需要关心的问题包括：

1. 如何选择最优的属性测试条件?
2. 何时停止分裂?

何时停止分裂?

- 所有记录属于同一类
- 各属性值所占比例相同
- 没有相匹配的记录

如何选择最优的属性测试条件?

类分布

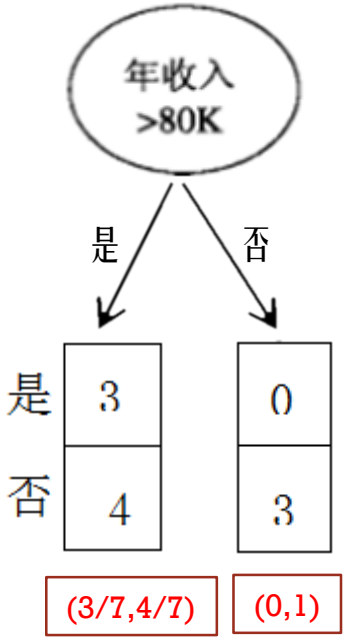
- p(i|t)是给定节点t中属于类i的记录所占的比例
  - 有时直接用pi表示该比例
  - 如，某结点样例集中正例和反例各有10个，则类分布为（0.5，0.5）

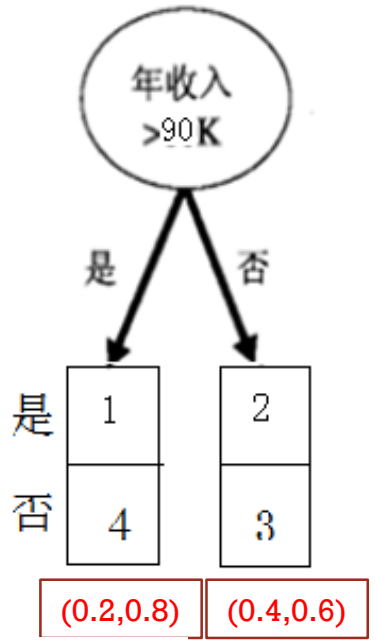
考察依属性“年收入”划分前后的类分布变化

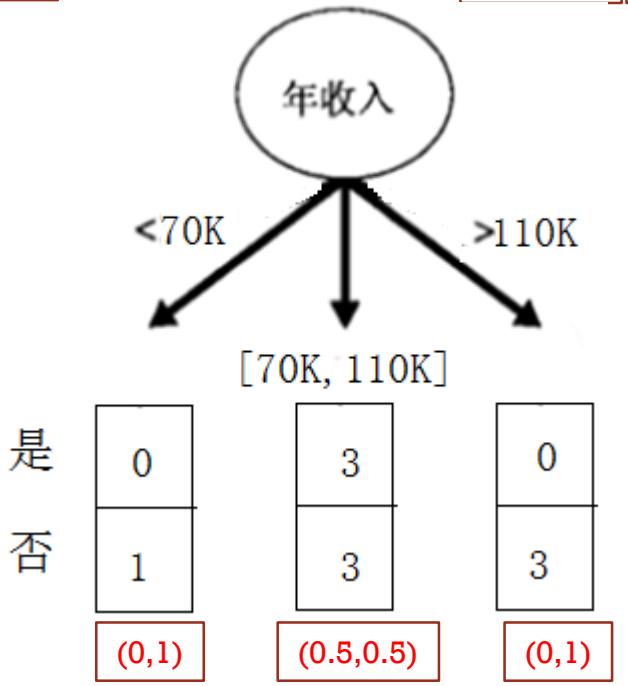
如何划分该属性最优?

Tid	有房者	婚姻状况	年收入	拖欠贷款者
1	是	单身	125K	否
2	否	已婚	100K	否
3	否	单身	70K	否
4	是	已婚	120K	否
5	否	离异	95K	是
6	否	已婚	60K	否
7	是	离异	220K	否
8	否	单身	85K	是
9	否	已婚	75K	否
10	否	单身	90K	是

划分前：(0.3,0.7)





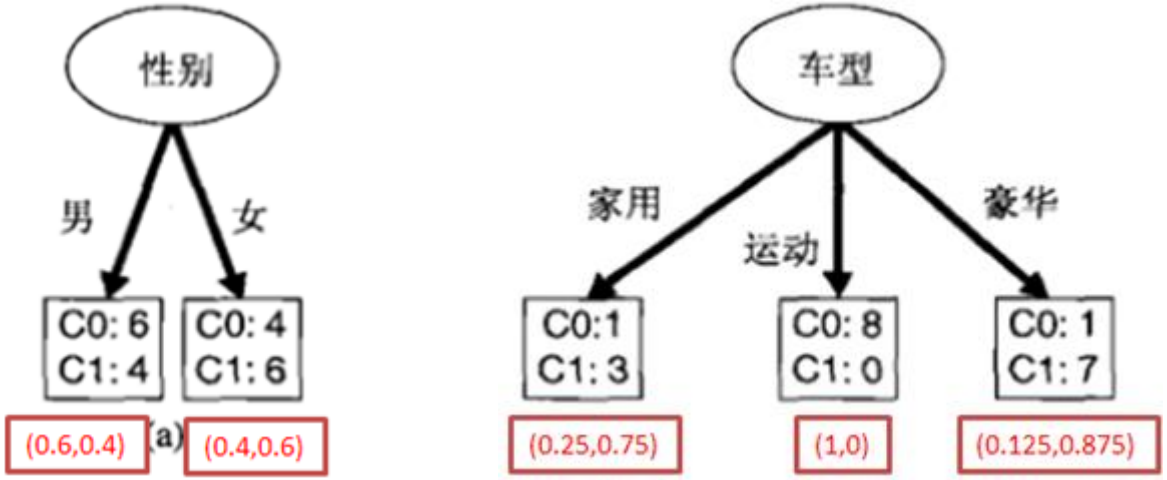


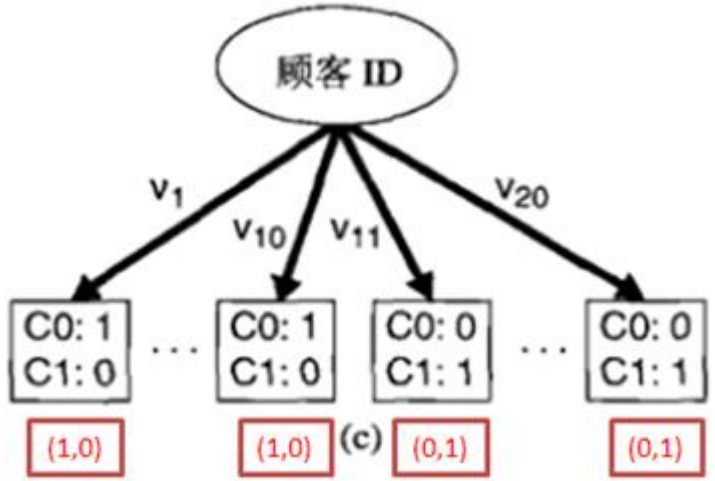
划分前：(0.5,0.5)

考察分别依属性“性别”、“车型”、“顾客ID”划分后的类分布。

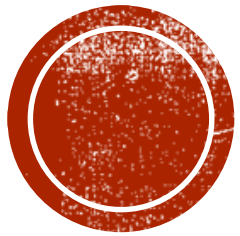
数据集

顾客 ID	性别	车型	衬衣尺码	类
1	男	家用	小	C0
2	男	运动	中	C0
3	男	运动	中	C0
4	男	运动	大	C0
5	男	运动	加大	C0
6	男	运动	加大	C0
7	女	运动	小	C0
8	女	运动	小	C0
9	女	运动	中	C0
10	女	豪华	大	C0
11	男	家用	大	C1
12	男	家用	加大	C1
13	男	家用	中	C1
14	男	豪华	加大	C1
15	女	豪华	小	C1
16	女	豪华	小	C1
17	女	豪华	中	C1
18	女	豪华	中	C1
19	女	豪华	中	C1
20	女	豪华	大	C1





哪个属性用来划分数据最优？



THE END!