

《机器学习基础》



无监督特征学习

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 $f: x \rightarrow y$
 - ▶ 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

内容

▶ 无监督特征学习

- ▶ 稀疏编码

- ▶ 自编码器

- ▶ 稀疏自编码器

- ▶ 降噪自编码器



稀疏编码

回顾主成分分析(PCA)

► x_i : 原始数据, y_i : PCA 降到 k 维后的数据

► 平均投影误差:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x_i - y_{k,i}\|^2$$

(线性) 编码

- ▶ 给定一组基向量 $A = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_M]$, 将输入样本 \mathbf{x} 表示为这些基向量的线性组合

$$\mathbf{x} = \sum_{m=1}^M z_m \mathbf{a}_m$$
$$= \mathbf{A}\mathbf{z},$$

字典 (dictionary)

编码 (encoding)

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{z}$$

完备性

数学小知识 | 完备性

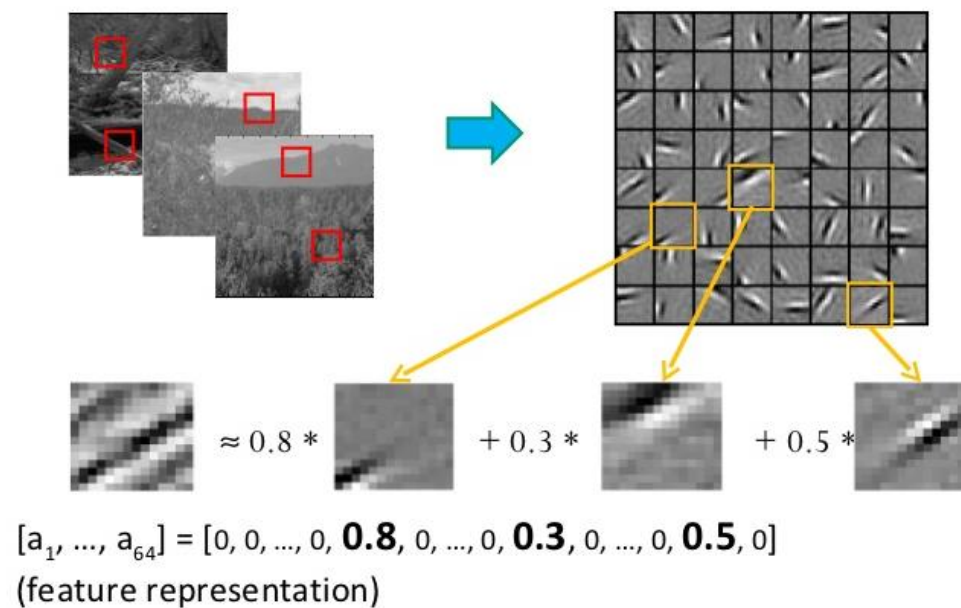
如果 M 个基向量刚好可以支撑 M 维的欧氏空间, 则这 M 个基向量是完备的. 如果 M 个基向量可以支撑 D 维的欧氏空间, 并且 $M > D$, 则这 M 个基向量是过完备的 (overcomplete)、冗余的.

“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



Slide credit: Andrew Ng

Compact & easily interpretable

稀疏编码 (Sparse Coding)

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

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

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

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

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

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

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

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 \mathbf{A} , 对每个输入 $\mathbf{x}^{(n)}$, 计算其对应的最优编码

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

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

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

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。



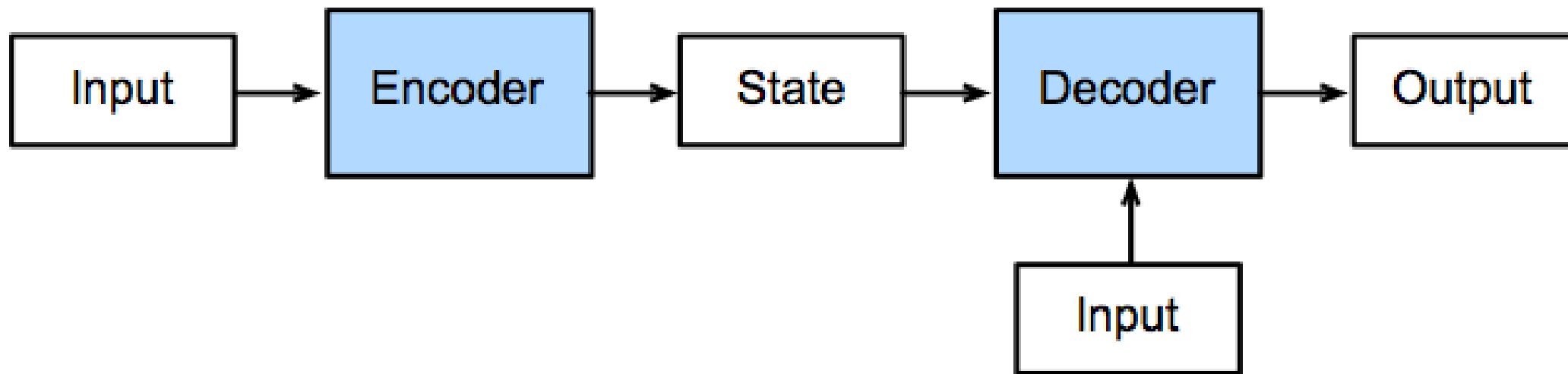
自编码器

编码器 - 解码器架构

▶ 通过编码 - 解码过程实现输入数据的“重构”，并在这一过程中学习数据的潜在特征表示。

- ▶ 编码器 (Encoder) 加工输入
- ▶ 解码器 (Decoder) 生成输出

▶ 训练：



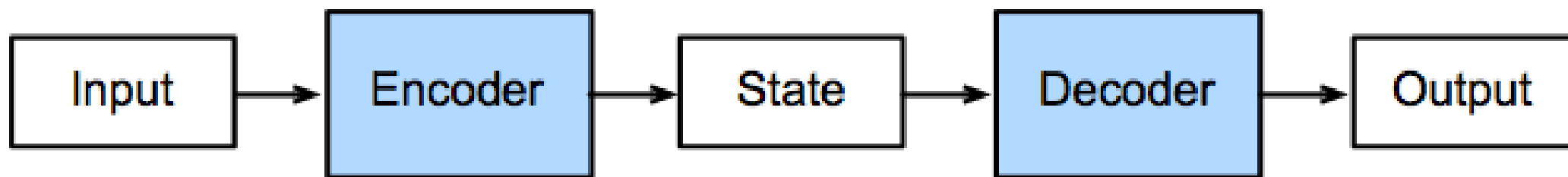
编码器 - 解码器架构

▶ 通过编码 - 解码过程实现输入数据的“重构”，并在这一过程中学习数据的潜在特征表示。

▶ 编码器 (Encoder) 加工输入

▶ 解码器 (Decoder) 生成输出

▶ 使用：



自编码器 (Auto-Encoder)

► 编码器 (Encoder)

► 解码器 (Decoder)

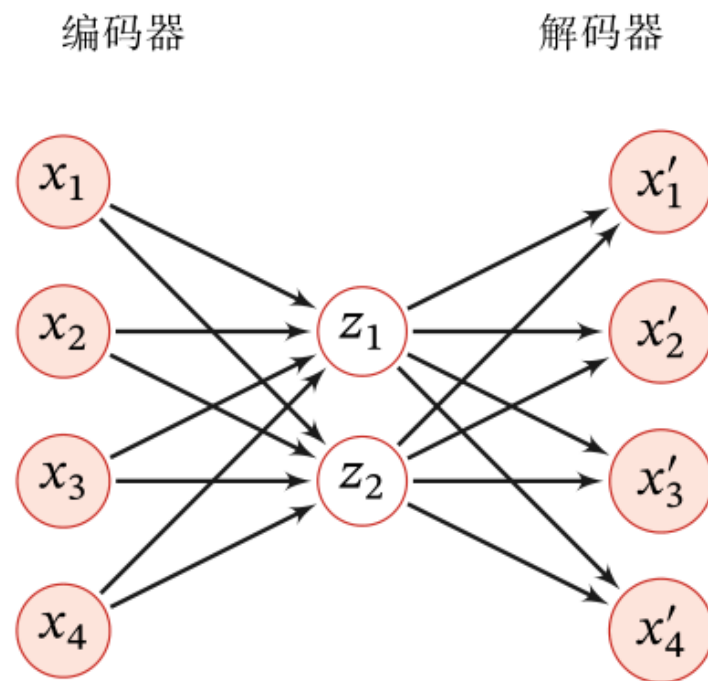
$$f : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^M$$

$$g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^D$$

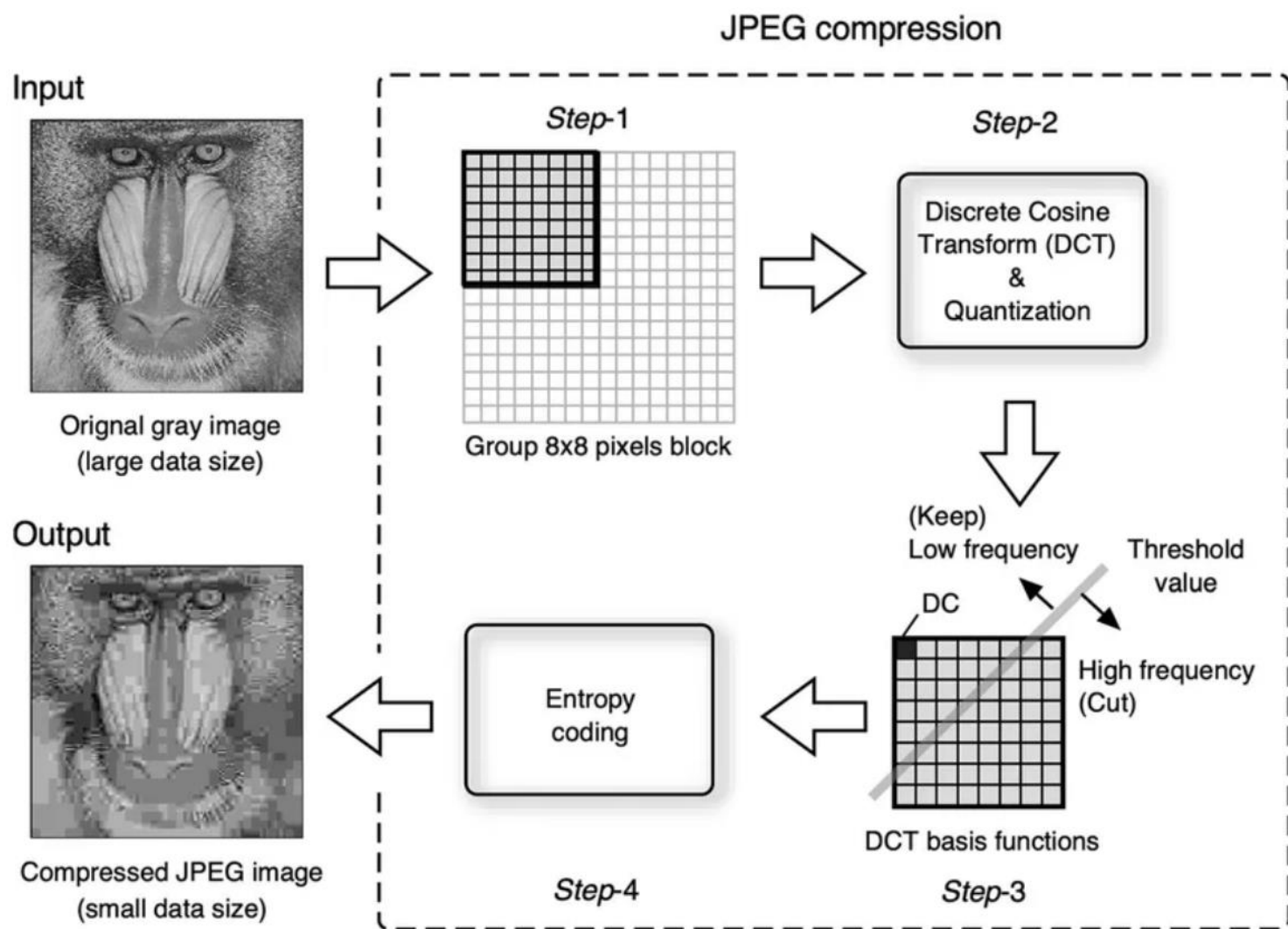
► 目标函数：重构错误

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

► 两层网络结构的自编码器



自编码器 (Auto-Encoder)



JPEG pipeline (Figure is taken from[3])

稀疏自编码器

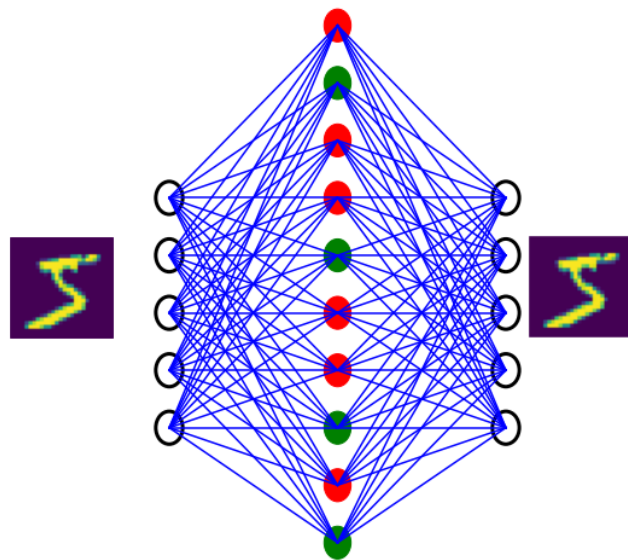
▶ 通过给自编码器中隐藏层单元 z 加上稀疏性限制，自编码器可以学习到数据中一些有用的结构。

▶ 目标函数

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

▶ \mathbf{W} 表示自编码器中的参数

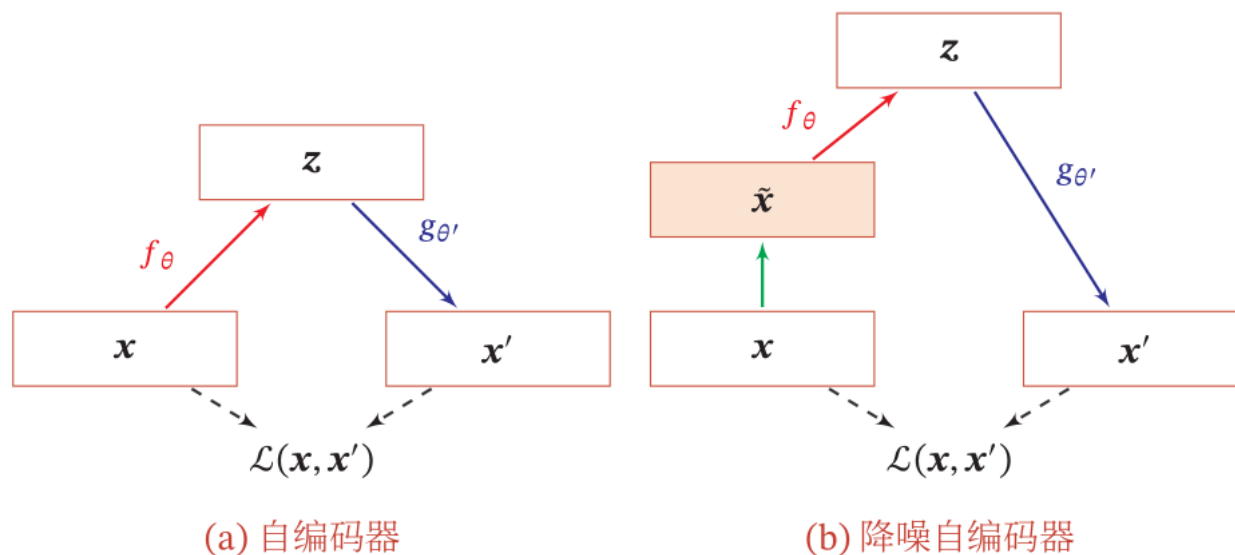
▶ 和稀疏编码一样，稀疏自编码器的优点是有很高的可解释性，并同时进行了隐式的特征选择。



降噪自编码器

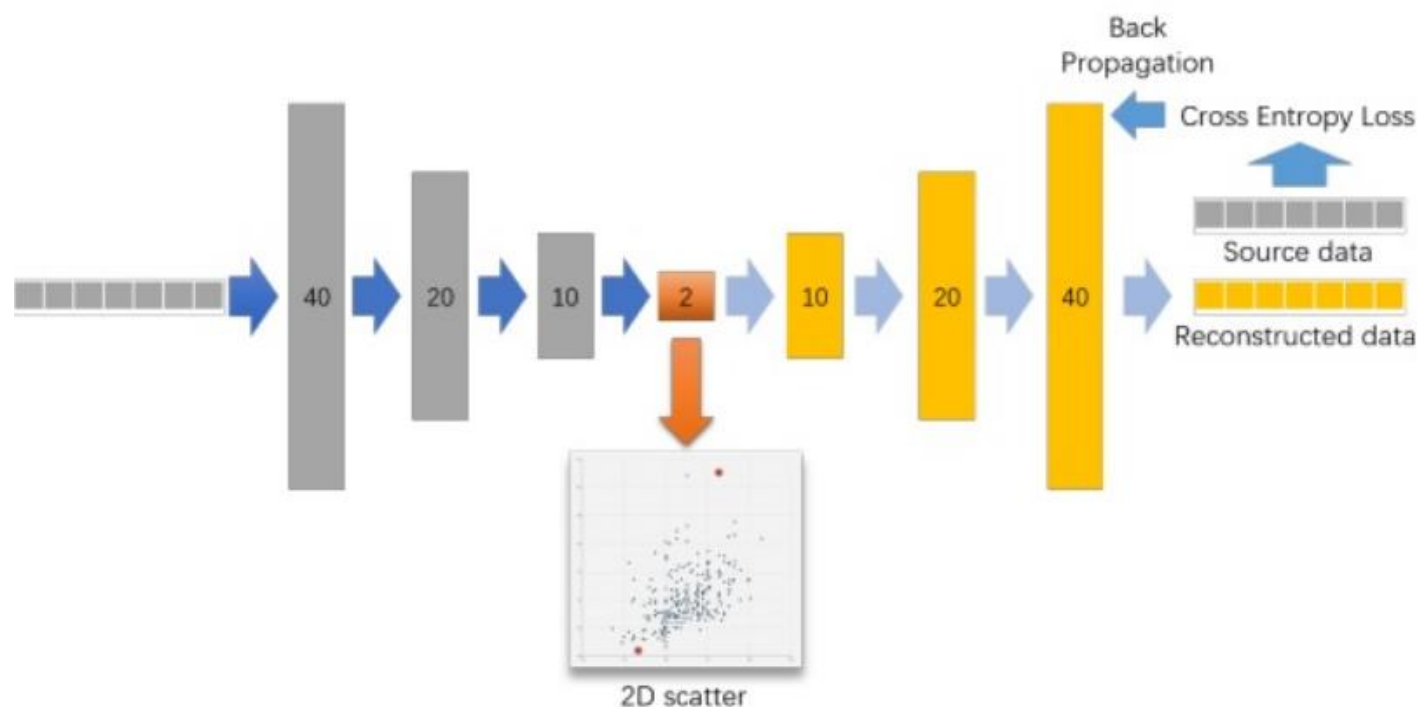
▶ 通过引入噪声来增加编码鲁棒性的自编码器

- ▶ 对于一个向量 \mathbf{x} ，我们首先根据一个比例 μ 随机将 \mathbf{x} 的一些维度的值设置为0，得到一个被损坏的向量 $\tilde{\mathbf{x}}$ 。
- ▶ 然后将被损坏的向量 $\tilde{\mathbf{x}}$ 输入给自编码器得到编码 \mathbf{z} ，并重构出原始的无损输入 \mathbf{x} 。



堆叠自编码器

- ▶ 仅使用两层神经网络的自编码器还不足以获取一种好的数据表示。
- ▶ 为了获取更好的数据表示，我们可以使用更深层的神经网络。



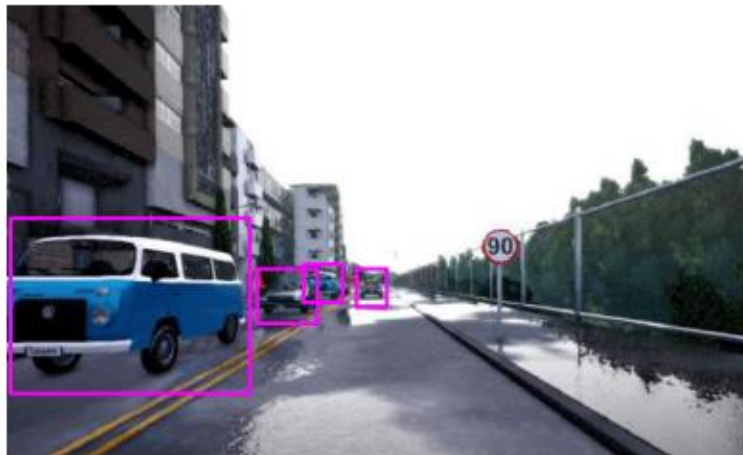


U-Net

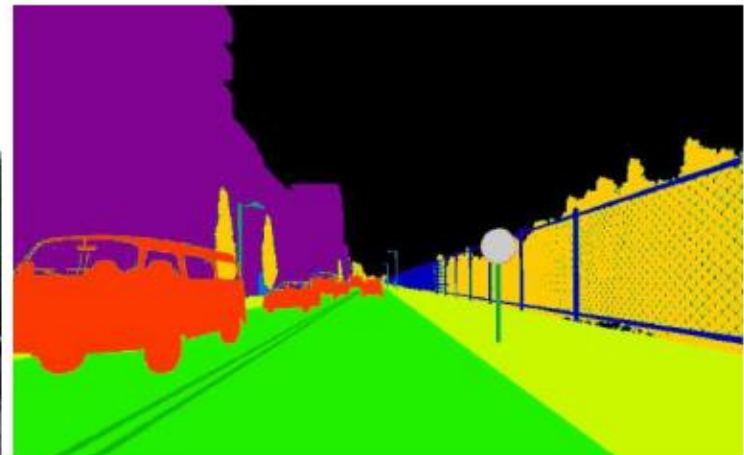
图像分割任务



Input image



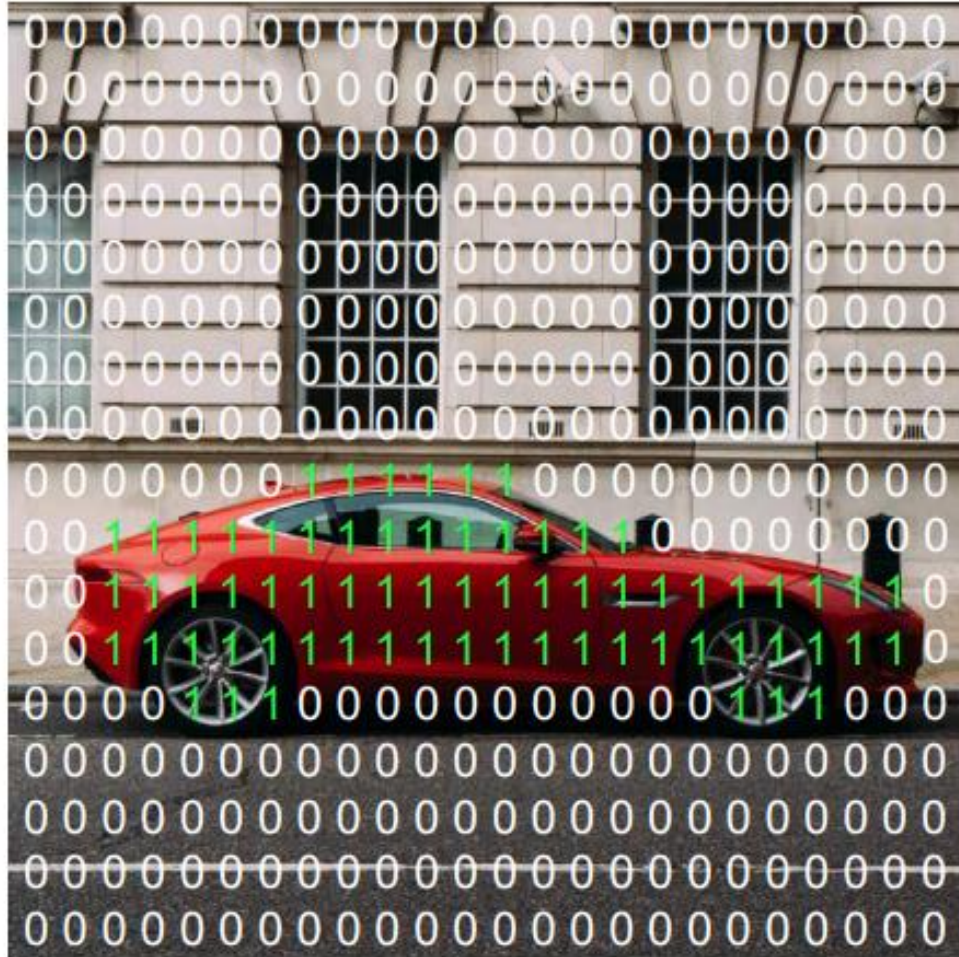
Object Detection



Semantic Segmentation

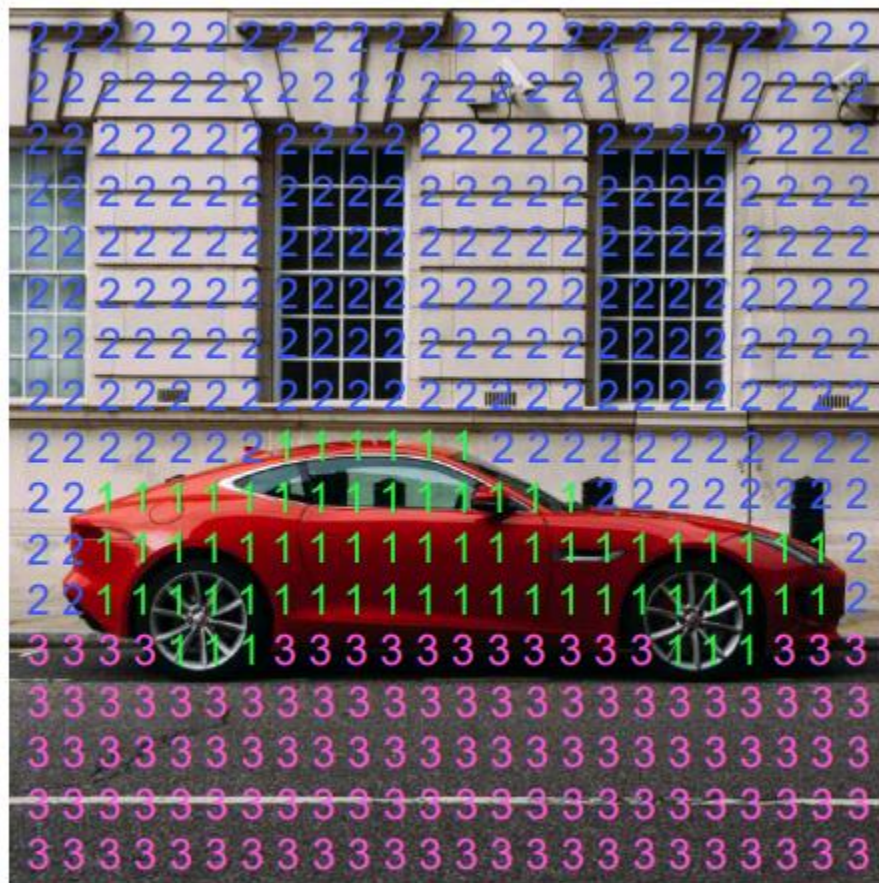
<https://cs230.stanford.edu/files/C4M3.pdf>

Per-pixel class labels



- ▶ 1. Car
- ▶ 0. Not Car

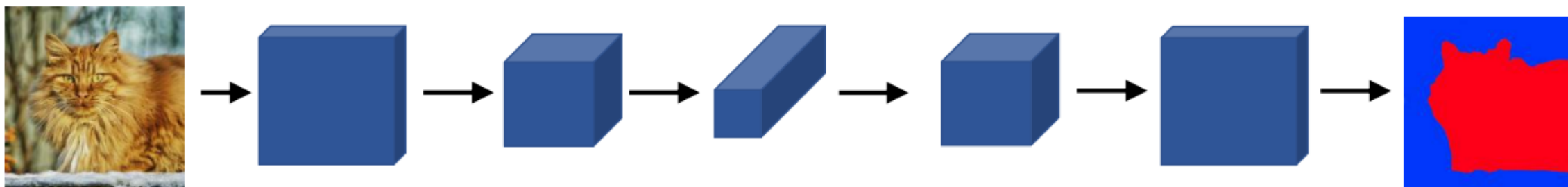
Per-pixel class labels



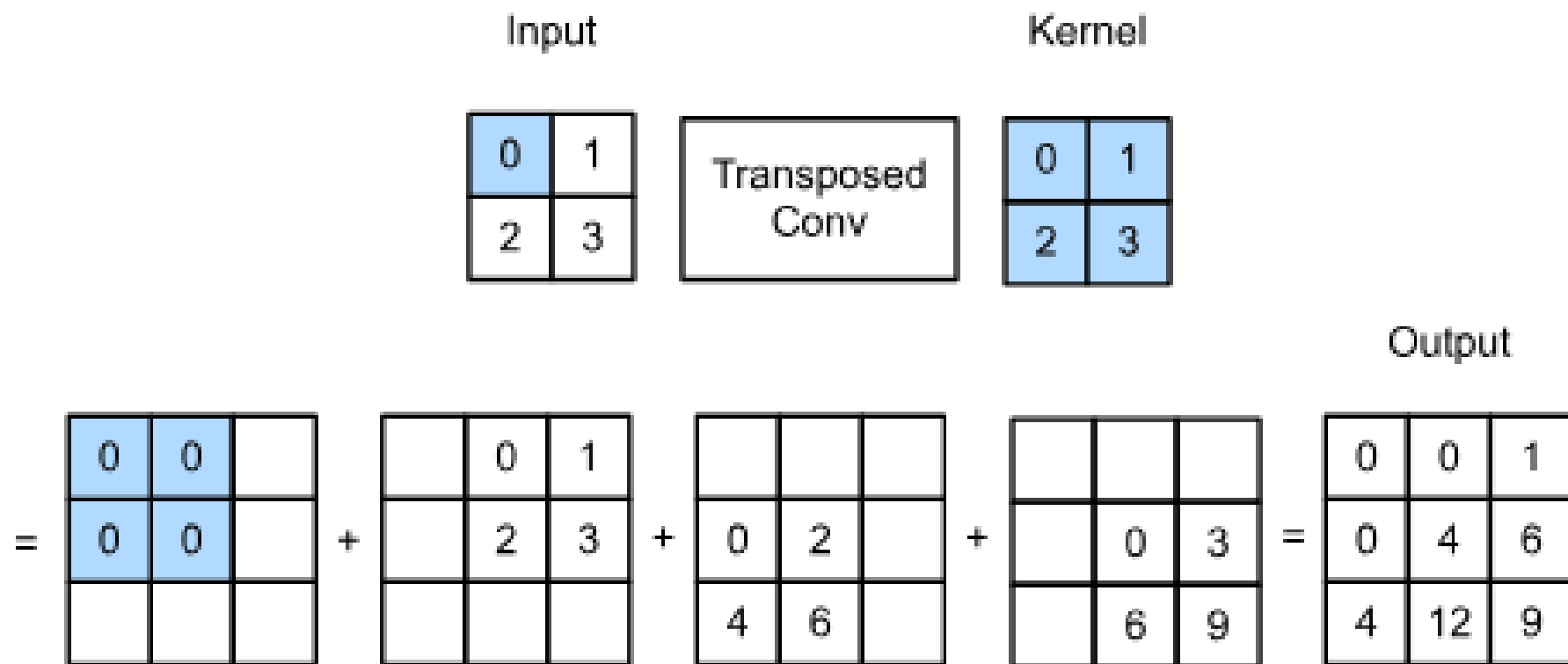
1. Car
2. Building
3. Road



图像分割学习

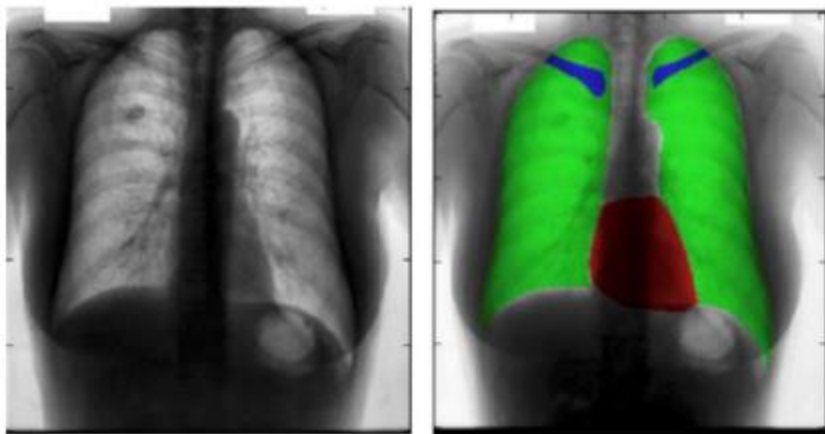


转置卷积

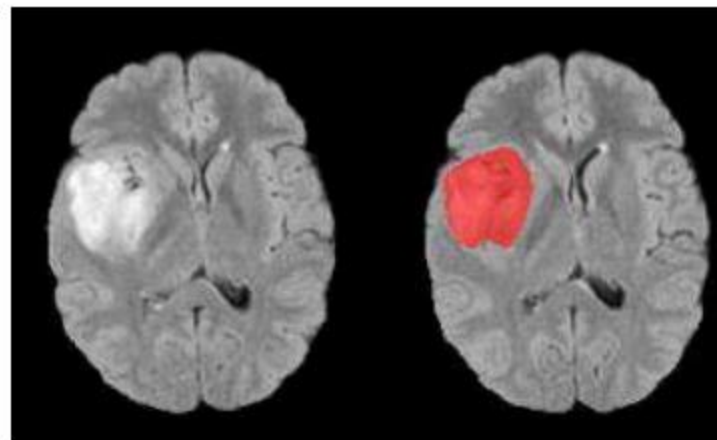


U-Net

- ▶ U-Net: 特殊设计的 Encoder-Decoder 结构
- ▶ 原论文中, U-Net属于监督学习

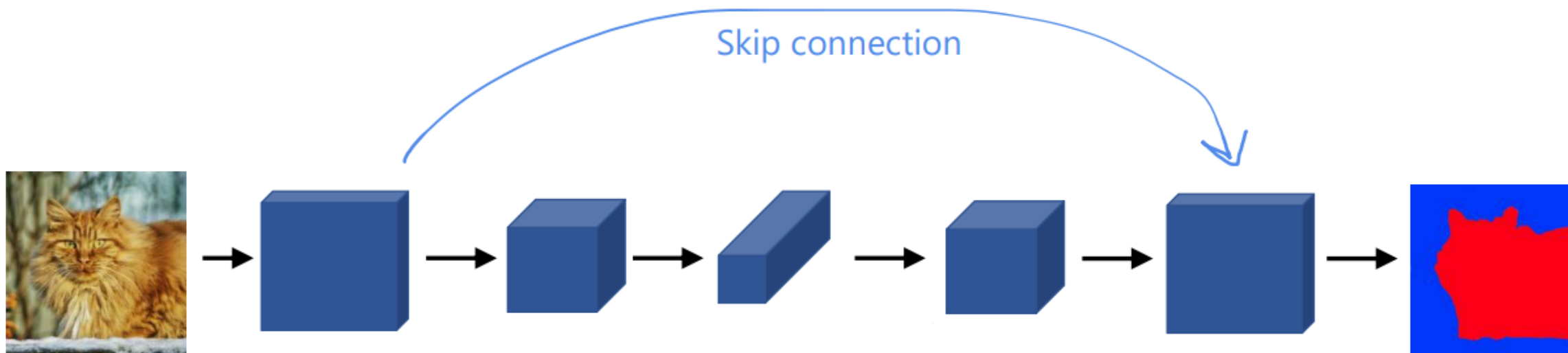


Chest X-Ray



Brain MRI

图像分割学习



Skip Connection

▶ 直接连接编码器和解码器的对应层：

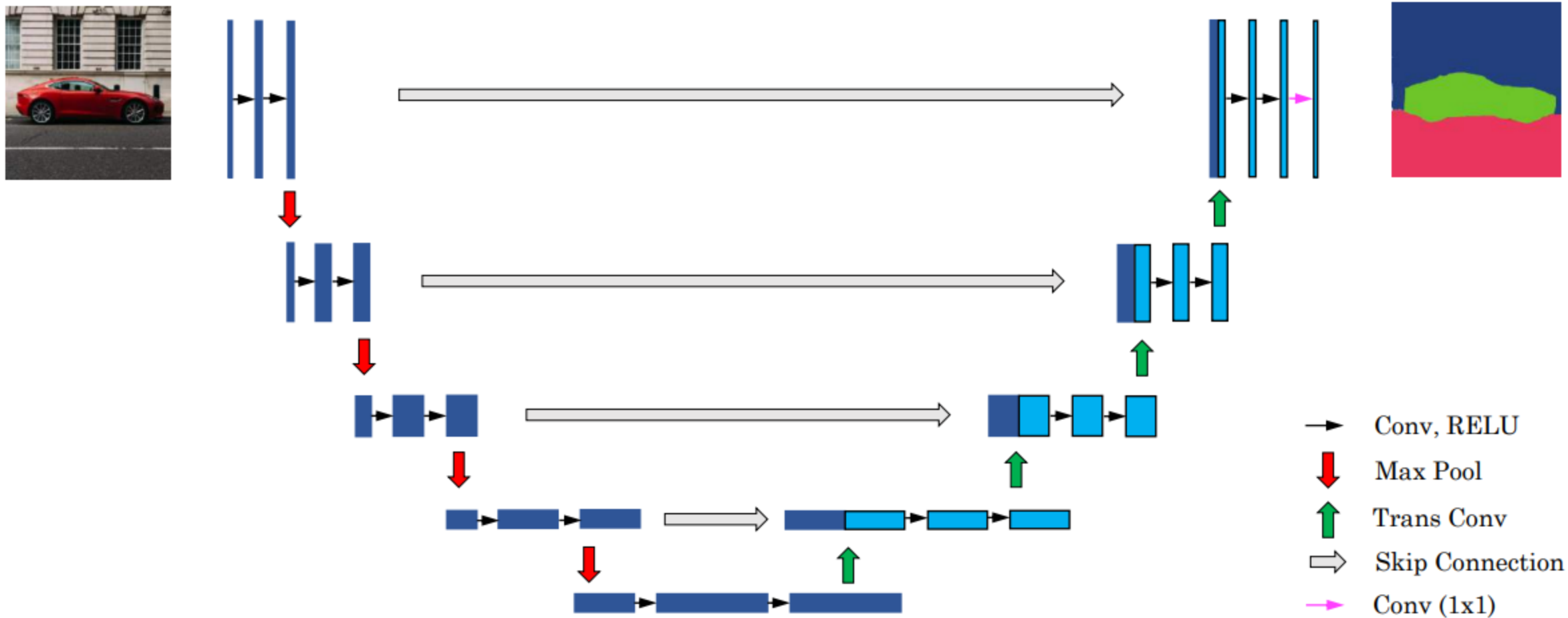
▶ 将编码器中浅层的高分辨率特征（含空间细节）与解码器中同尺寸的特征图（含语义信息）融合，形成“语义+细节”的互补特征。

▶ 若解码器某层特征为 D_i ，编码器对应层特征为 E_i ，则融合后特征

$$F_i = \text{Concat}(D_i, E_i)$$

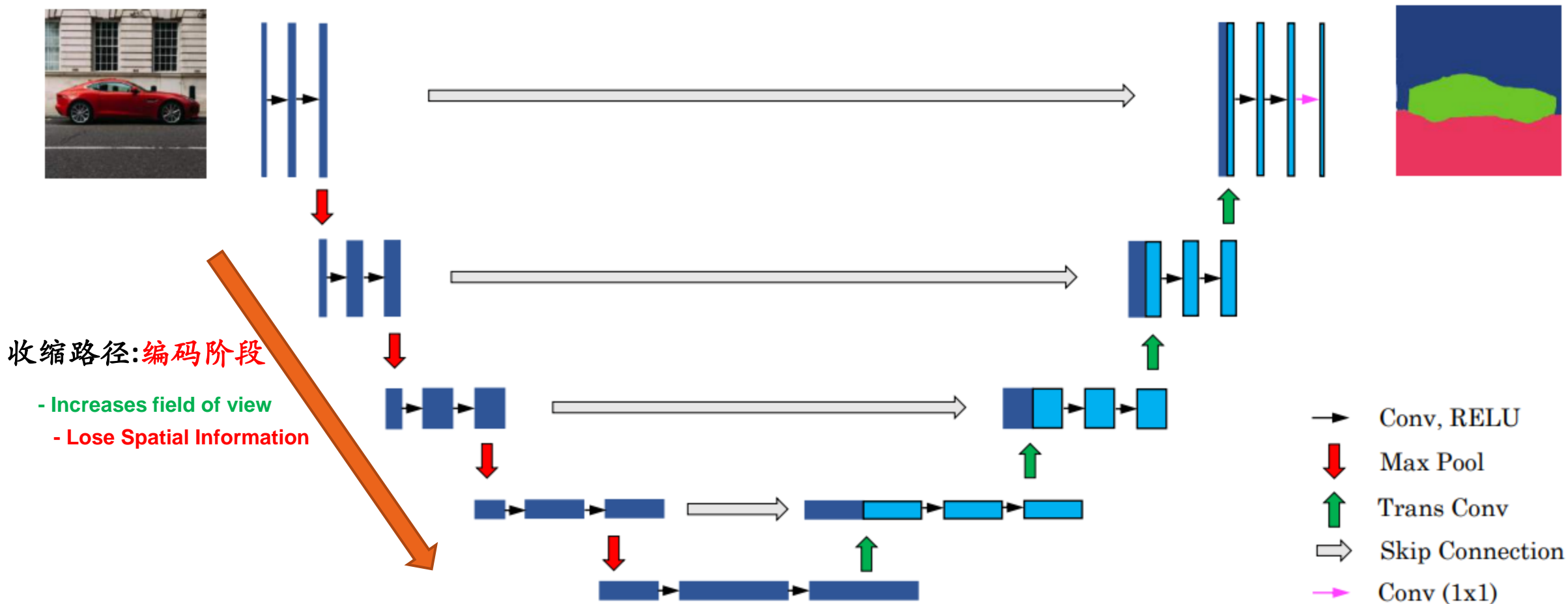
其中Concat表示通道维度上的拼接。

U-Net 架构



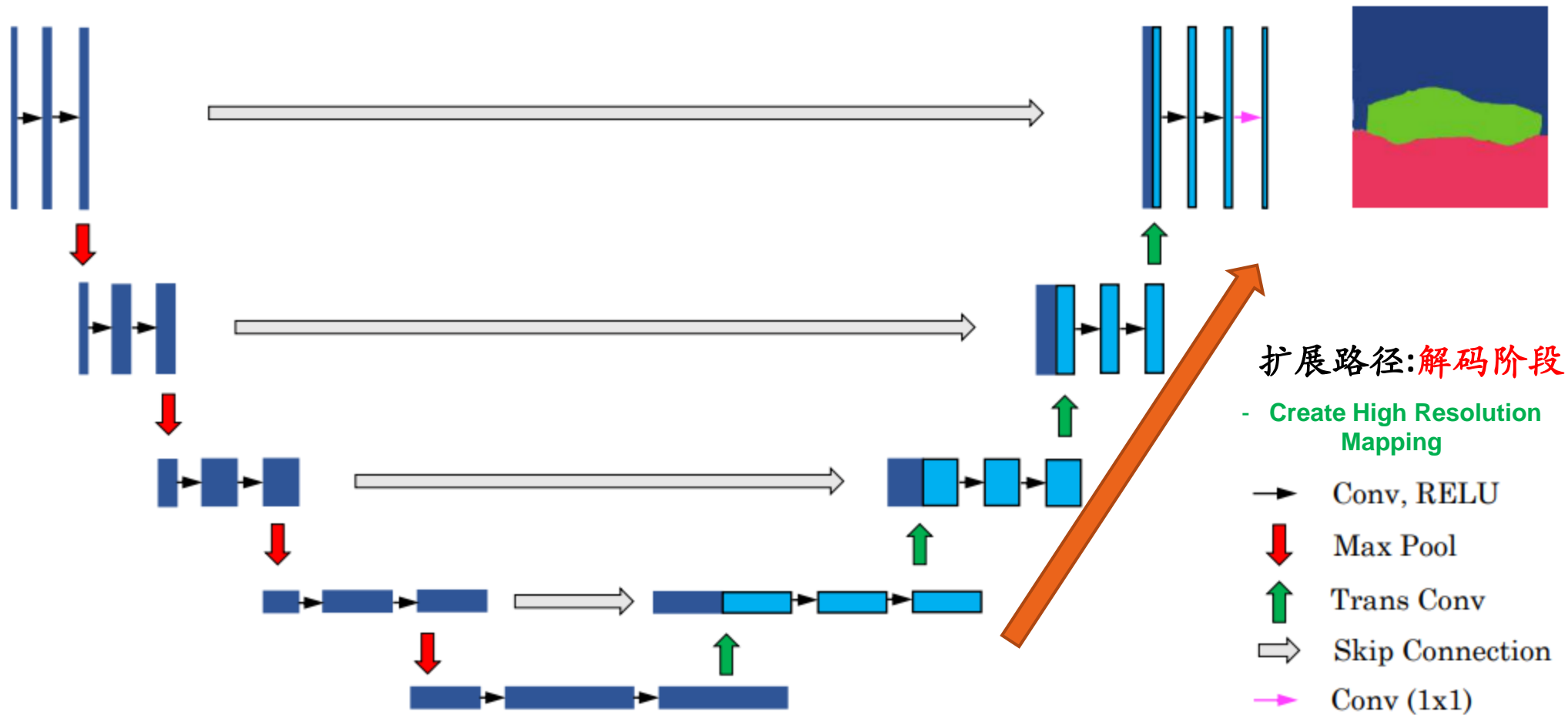
Ronneberger et al. (2015) U-net Architecture

U-Net 架构



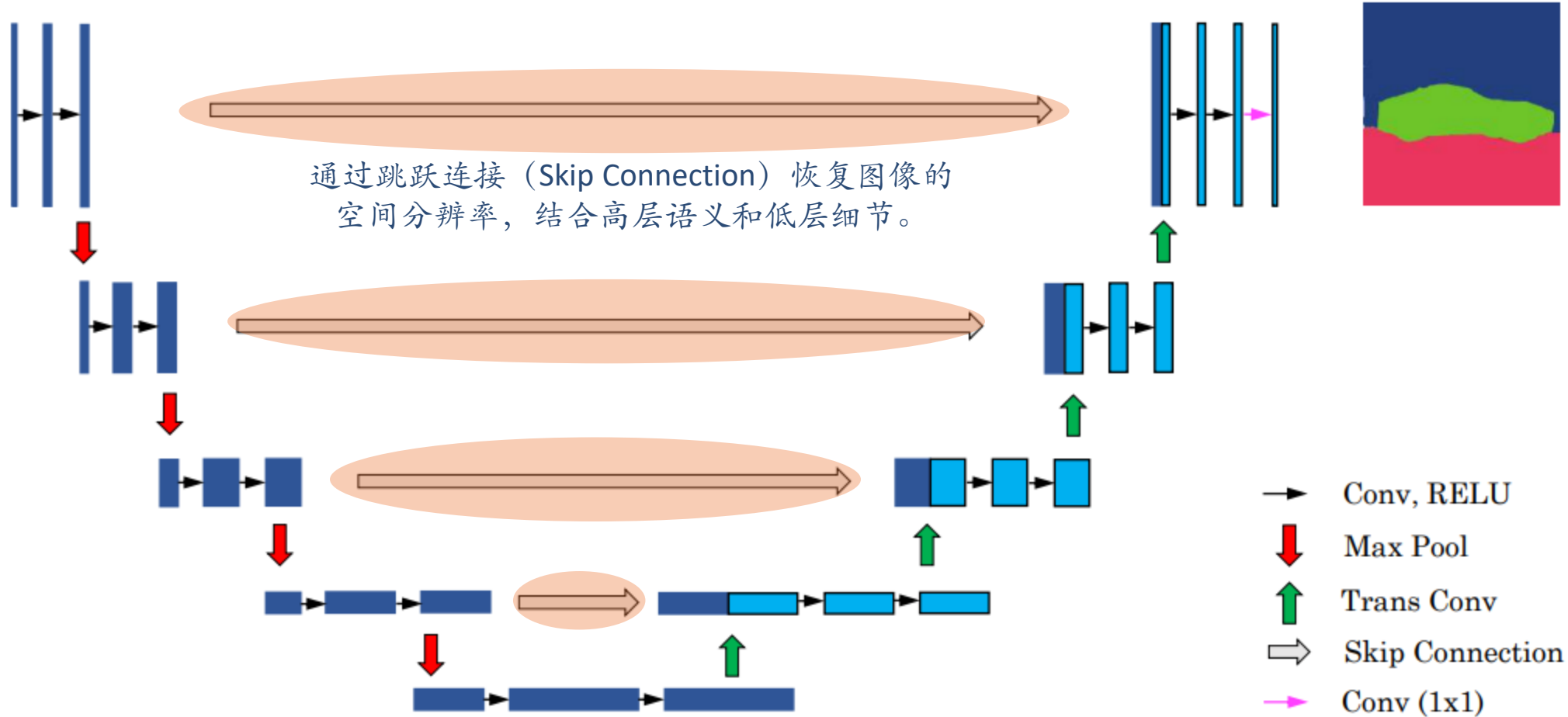
Ronneberger et al. (2015) U-net Architecture

U-Net 架构

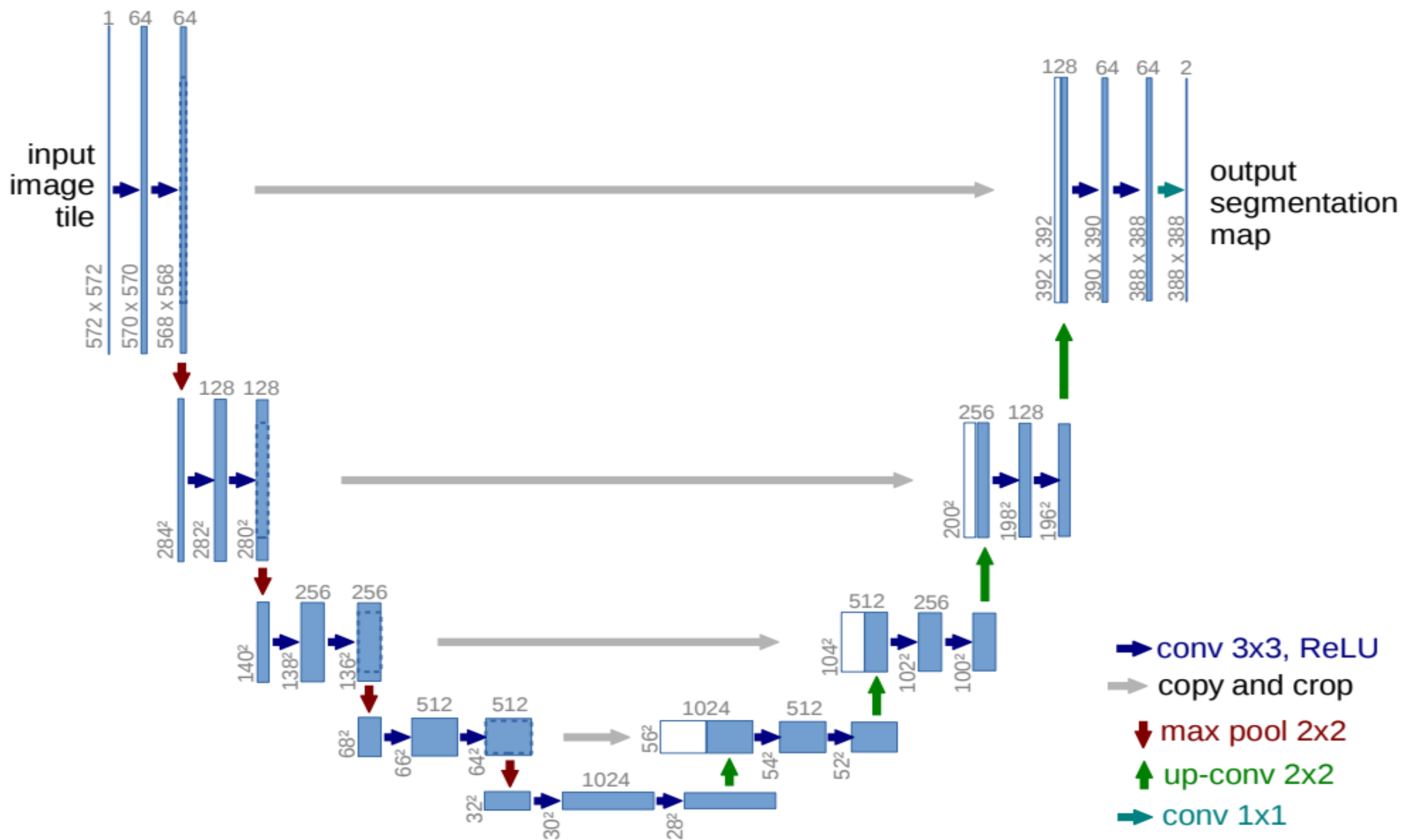


Ronneberger et al. (2015) U-net Architecture

U-Net 架构



Ronneberger et al. (2015) U-net Architecture



HeLa 细胞分割实验

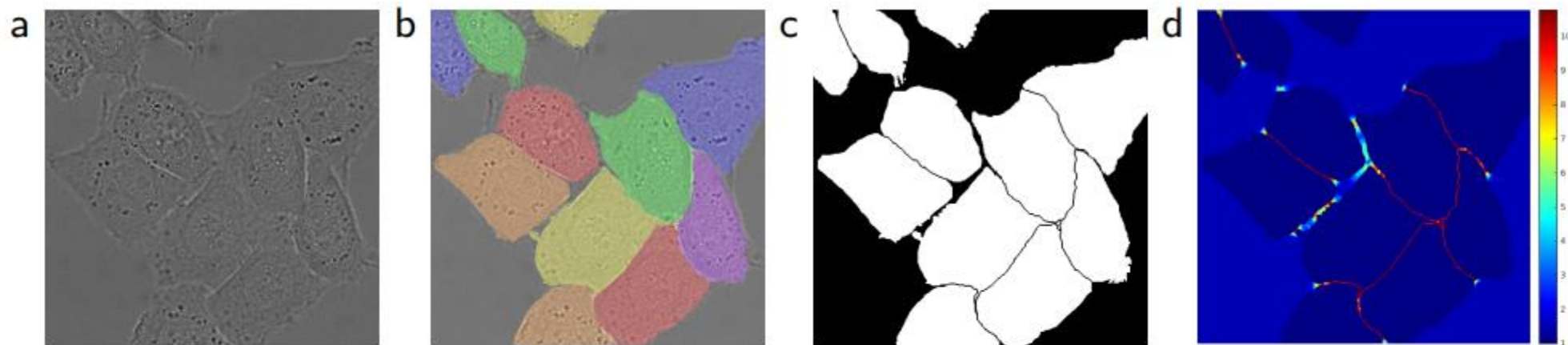


Fig. 3. HeLa cells on glass recorded with DIC (differential interference contrast) microscopy. (a) raw image. (b) overlay with ground truth segmentation. Different colors indicate different instances of the HeLa cells. (c) generated segmentation mask (white: foreground, black: background). (d) map with a pixel-wise loss weight to force the network to learn the border pixels.