13 无监督学习概论

1. 无监督学习基本原理

无监督学习

无监督学习是从无标注的数据中学习数据的统计规律或者说内在结构的机器学习，主要包括聚类、降维、概率估计。无监督学习可以用于数据分析或者监督学习的前处理。

无监督学习使用无标注数据$U = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}$学习或训练，其中$x_i, i = 1,2, \cdots, N$是样本（实例），由$M$维向量。训练数据可以由一个矩阵表示，每一行对应一个特征，每一列对应一个样本。

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{M1} & \cdots & x_{MN} \end{bmatrix}$$

其中，x_{ij}是第j个向量的第i维；$i = 1,2, \cdots, M; j = 1,2, \cdots, N$

无监督学习的模型是函数$z = g_\theta(x)$,条件概率分布$P_\theta(z \mid x)$,或条件概率分布$P_\theta(x \mid z)$。其中$x \in X$是输入,表示样本;$z \in Z$是输出，表示对样本的分析结果，可以是类别、转换、概率；θ是参数。

无监督学习是一个困难的任务，因为数据没有标注，需要从数据中找出规律。模型的输入x在数据中可以观测，而输出z隐藏在数据中。

无监督学习通常需要大量的数据，因为对数据隐藏的规律的发现需要足够的观测。

无监督学习

- 无监督学习的基本想法是对给定数据（矩阵数据）进行某种“压缩”，从而找到数 据的潜在结构。假定损失最小的压缩得到的结果就是最本质的结构。

- 考虑发掘数据的纵向结构

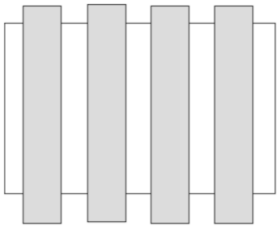
  把相似的样本聚到同类，即对数据进行聚类

- 考虑发掘数据的横向结构

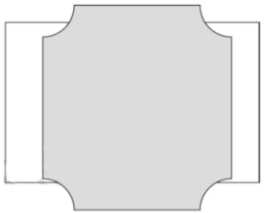
  把高维空间的向量转换为低维空间的向量，即对数据进行降维。

- 同时考虑发掘数据的纵向与横向结构

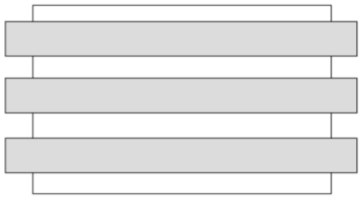
  假设数据由含有隐式结构的概率模型生成得到，从数据中学习该概率模型。



(a) 数据纵向结构



(c) 数据横向纵向结构



(b) 数据横向结构

2. 基本问题

聚类

- 聚类（clustering）是将样本集合中相似的样本（实例）分配到相同的类，不相似的样本分配到不同的类。
- 聚类时，样本通常是欧氏空间中的向量，类别不是事先给定， 而是从数据中自动发现，但类别的个数通常是事先给定的。样本之间的相似度或距离 由应用决定
- 如果一个样本只能属于一个类，则称为硬聚类（hard clustering)
- 如果一个样本可以属于多个类，则称为软聚类（soft clustering)

聚类

假设输入空间是欧氏空间$X \subseteq \mathbf{R}^d$，输出空间是类别集合$Z = \{1,2,\cdots,k\}$

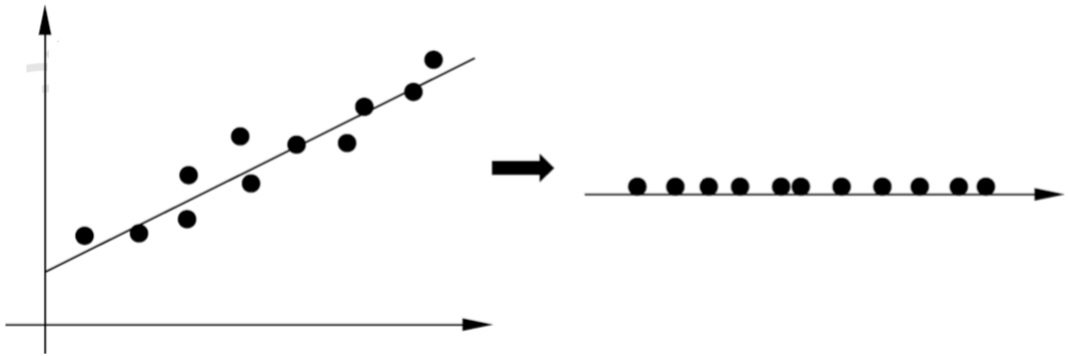
- 聚类的模型是函数$z = g_\theta(x)$或者条件概率分布$P_\theta(z \mid x)$，其中$x \in X$是样本的向量，$z \in Z$是样本的类别，θ是参数
- $z = g_\theta(x)$是硬聚类模型
  - 每一个样本属于某一类$z_i = g_\theta(x_i), i = 1,2,\cdots,N$
- 条件概率分布$P_\theta(z \mid x)$是软聚类模型
  - 每一个样本依概率属于每一个类$P_\theta(z_i \mid x_i), i = 1,2,\cdots,N$
  - 聚类可以帮助发现数据中隐藏的纵向结构（也有例 外，co-clustering 是聚类算法，对样本和特征都进行聚类，同时发现数据中的纵向横向结构)

降维

- 降维（dimensionality reduction）是将训练数据中的样本（实例）从高维空间转换到低维空间
- 假设样本原本存在于低维空间，或者近似地存在于低维空间，通过降维则可以更好地表示样本数据的结构，即更好地表示样本之间的关系
- 高维空间通常是高维的欧氏空间，而低维空间是低维的欧氏空间或者流形(manifold)
- 从高维到低维的降维中，要保证样本中的信息损失最小

降维

- 降维有线性的降维和非线性的降维。



- 二维空间的样本存在于一条直线的附近，可以将样本从二维空间转换到一维空间。通过降维可以更好地表示样本之间的关系。

降维

- 假设输入空间是欧氏空间$X \subseteq \mathbf{R}^d$，输出空间欧氏空间$Z \subseteq \mathbf{R}^{d'}, d' \ll d$，后者的维数低于前者的维数
- 降维的模型是函数$z = g_\theta(x)$，其中$x \in X$是样本的高维向量
  - $z \in Z$ 是样本的低维向量， θ 是参数
  - 函数可以是线性函数也可以是非线性函数
  - 降维的过程就是学习降维模型的过程
  - 降维时，每一个样本从高维向量转换为低 维向量 $z_i = g_\theta(x_i), i = 1,2,\cdots,N$

降维可以帮助发现数据中隐藏的横向结构

概率模型估计

- 假设训练数据由一个概率模型生成，由训练数据学习概率模型的结构和参数。
- 概率模型的结构类型，或者说概率模型的集合事先给定，而模型的具体结构与参数从数据中自动学习。学习的目标是找到最有可能生成数据的结构和参数。
- 概率模型包括混合模型、概率图模型等。
- 概率图模型又包括有向图模型和无向图模型。

概率模型估计

- 概率模型估计(probability model estimation)，简称概率估计，假设训练数据由一个概率模型生成，由训练数据学习概率模型的结构和参数。
- 概率模型的结构类型，或者说概率模型的集合事先给定，而模型的具体结构与参数从数据中自动学习。学习的目标是找到最有可能生成数据的结构和参数。

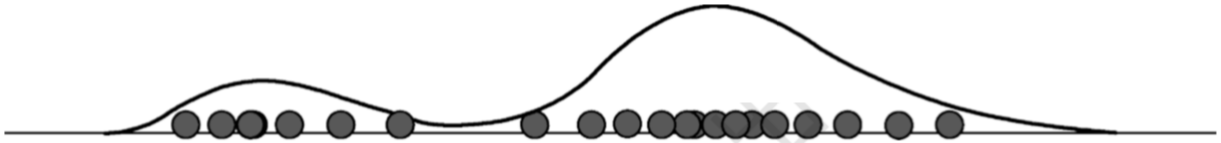


图 13.4　概率模型估计的例子

概率模型估计

- 概率模型表示为条件概率分布$P_\theta(x \mid z)$
- 其中随机变量 x 表示观测数据，可以是 连续变量也可以是离散变量
- 随机变量z表示隐式结构，是离散变量
  - 模型是混合模型时，z表示成分的个数
  - 模型是概率图模型时，z表示图的结构
-

概率模型估计

- 概率模型的一种特殊情况是隐式结构不存在，即满足$P_\theta(x \mid z) = P_\theta(x)$。这时条件概率分布估计变成概率分布估计，只要估计分布$P_\theta(x)$的参数即可。传统统计学中的概率密度估计，比如高斯分布参数估计，都属于这种情况。

概率模型估计

- 概率模型估计是从给定的训练数据$U = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}$中学习模型$P_\theta(x \mid z)$的结构和参数。
  - 计算出模型相关的任意边缘分布和条件分布。
  - 随机变量x是多元变量，甚至是高维多元变量。概率模型估计可以帮助发现数据中隐藏的横向纵向结构。
- 软聚类也可以看作是概率模型估计问题。根据贝叶斯公式
  - $P(z \mid x) = \frac{P(z)P(x|z)}{P(x)} \propto P(z)P(x \mid z)$
- 假设先验概率服从均匀分布，只需要估计条件概率分布$P_\theta(x \mid z)$
  - 通过对条件概率分布$P_\theta(x \mid z)$的估计进行软聚类，这里z表示类别，θ表示参数

3. 机器学习三要素

无监督学习三要素

- 模型
  - 模型就是函数$z = g_\theta(x)$,条件概率分布$P_\theta(z \mid x)$,或条件概率分布$P_\theta(x \mid z)$
  - 在聚类、降维、概率模型估计中拥有不同的形式
- 策略
  - 目标函数的优化
  - 聚类中样本与所属类别中心距离的最小化，降维中样本从高维空间转换到低维空间过程中信息损失的最小化，概率模型估计中模型生成数据概率的最大化
- 算法
  - 迭代算法，通过迭代达到目标函数的最优化。如梯度下降法

层次聚类法、k均值聚类是硬聚类方法，高斯混合模型EM算法是软聚类方法。主成分分析、潜在语义分析是降维方法。概率潜在语义分析、潜在狄利克雷分配是概率模型估计方法。

4. 无监督学习方法

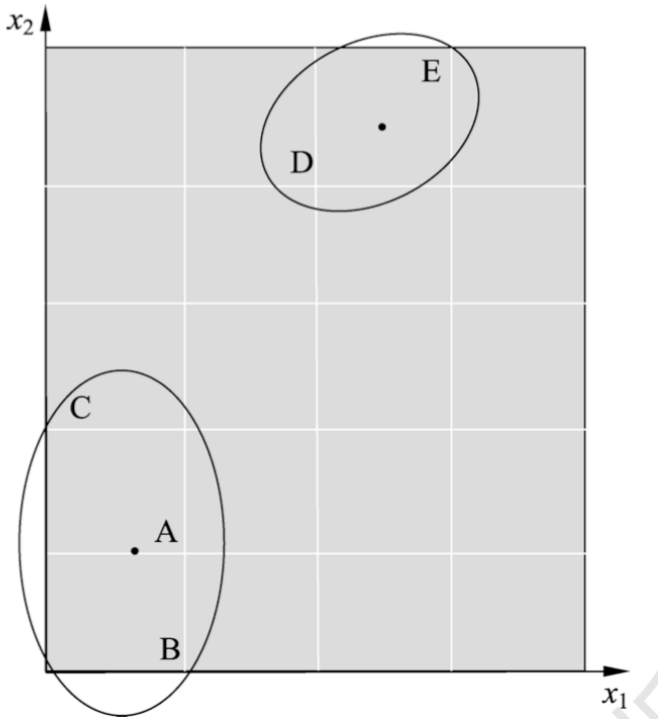
聚类

- 有5个样本A、 B、 C 、 D、 E，每个样本有二维特征x1, X2。通过聚类算法，可以将样本分配到两个类别中。

	A	B	C	D	E
x_1	1	1	0	2	3
x_2	1	0	2	4	5

聚类

- 假设用k均值聚类，k=2。开始可以取任意两点作为两个类的中心
- 依据样本与类中心的欧氏距离的大小，样本分配到两个类中
- 然后计算两个类中样本的均值，作为两个类的新的类中心
- 重复以上操作，直到两类不再改变
- 最后得到聚类结果，A、 B、 C为一个类，D、E为另一个类。



降维

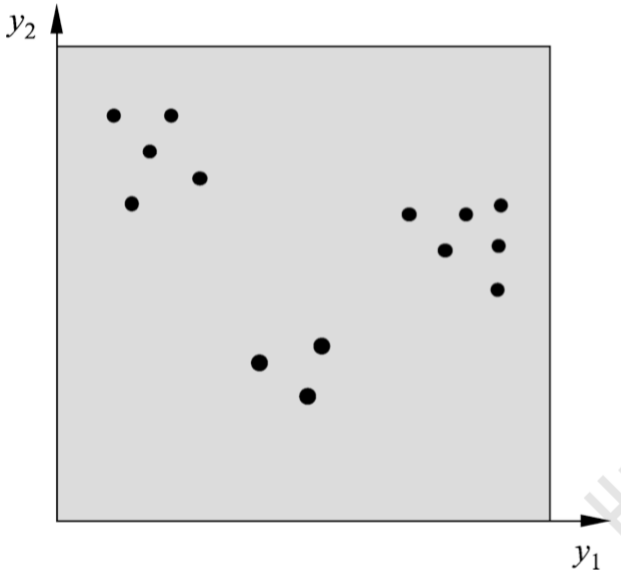
- 给出一个简单的数据集合。有14个样本A、 B、 C、 D等，每个样本有9 维特征

表 13.2　聚类数据

	A	B	C	D	···
x_1	3	0.25	2.8	0.1	···
x_2	2.9	0.8	2.2	1.8	···
x_3	2.2	1	1.5	3.2	···
x_4	2	1.4	2	0.3	···
x_5	1.3	1.6	1.6	0	···
x_6	1.5	2	2.1	3	···
x_7	1.1	2.2	1.2	2.8	···
x_8	1	2.7	0.9	0.3	···
x_9	0.4	3	0.6	0.1	···

降维

- 由于数据是高维（多变量）数据，很难观察变量的样本区分能力，也很难观察样本之间的关系。
- 对数据进行降维，如主成分分析，就可以更直接地分析以上问题。
- 对样本集合进行降维（主成分分析），结果在新的二维实数空间中，有二维新的特征y1, y2, 14个样本分布在不同位置。
- 通过降维，可以发现样本可以分为三个类，二维新特征由原始特征定义。



话题分析

- 话题分析是文本分析的一种技术。
- 给定一个文本集合，话题分析旨在发现文本集合中每个文本的话题，而话题由单词的集合表示。
- 注意，这里假设有足够数量的文本， 如果只有一个文本或几个文本，是不能做话题分析的。
- 话题分析可以形式化为概率模型估计问题，或降维问题。

话题分析

- 给出一个文本数据集合。有6个文本，6个单词，表中数字表示单词在文 本中的出现次数。

单词 \ 文本	doc1	doc2	doc3	doc4	doc5	doc6
word1	1	1				
word2	1		1			
word3		1	1			
word4				1	1	
word5				1		1
word6					1	1

话题分析

- 对数据进行话题分析，如LDA分析，得到由单词集合表示的话题， 以及由话题集合表示的文本。

表 13.4　话题分析（LDA 分析）的结果

单词 \ 话题	topic1	topic2	文本 \ 话题	topic1	topic2
word1	0.33	0	doc1	1	0
word2	0.33	0	doc2	1	0
word3	0.33	0	doc3	1	0
word4	0	0.33	doc4	0	1
word5	0	0.33	doc5	0	1
word6	0	0.33	doc6	0	1

- 具体地话题表示为单词的概率分布，文本表示为话题的概率分布。LDA是含有这些概率分布的模型。

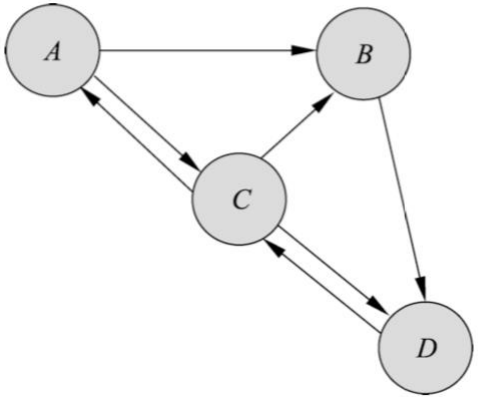
图分析

- 图分析（graph analytics）的目的是发掘隐藏在图中的统计规律或潜在结构。
- PageRank算法是无监督学习方法，主要是发现有向图中的重要结点。
- 给定一个有向图，定义在图上的随机游走即马尔可夫链。
- 随机游走者在有向图上随机跳转，到达一个结点后以等概率跳转到链接出 去的结点，并不断持续这个过程。
- PageRank算法就是求解该马尔可夫链的平稳分布的算法。

Page Rank

- 一个结点上的平稳概率表示该结点的重要性，称为该结点的PageRank值。
- 被指向的结点越多，该结点的PageRank值就越大。
- 被指向的结点的PageRank值越大，该结点的PageRank值就越大。
- PageRank值越大结点也就越重要。

PageRank的原理



- 上图是一个简单的有向图，有4个结点 A,B,C,D。
- 给定这个图，PageRank算法通过迭代求出结点的PageRank值。

PageRank的原理

- 首先， 对每个结点的概率值初始化，表示各个结点的到达概率，假设是等概率的。
- 下一步， 各个结点的概率是上一步各个结点可能跳转到该结点的概率之和。
- 不断迭代，各个结点的到达概率分布趋于平稳分布，也就是PageRank值的分布。

步骤 / 结点	第 1 步	第 2 步	第 3 步
A	$1/4$	$2/24$	$3/24$
B	$1/4$	$5/24$	$4/24$
C	$1/4$	$9/24$	$9/24$
D	$1/4$	$8/24$	$8/24$