

“十三五”国家重点图书出版规划项目

机器学习 算法导论

王磊 王晓东 著



清华大学出版社

“十三五”国家重点图书出版规划项目

机器学习 算法导论



王磊 王晓东 著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书全面讲述机器学习理论基础、算法实现及使用方法。第1章简要介绍机器学习及其算法;第2~9章主要介绍监督式学习算法,其中包括监督式学习算法基础、线性回归算法、机器学习中的搜索算法、Logistic回归算法、支持向量机算法、决策树、神经网络和深度学习;第10、11章着重介绍无监督学习算法,其中包括降维算法和聚类算法;第12章讲述强化学习的相关知识;附录提供了学习本书必备的数学基础知识和Python语言与机器学习工具库。

本书可作为计算机科学与技术、智能科学与技术等专业高年级本科生和研究生教材,也可供人工智能领域特别是机器学习方向从事研究、开发工作的科技人员参考。

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签,无标签者不得销售。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

机器学习算法导论/王磊,王晓东著. —北京:清华大学出版社,2019

ISBN 978-7-302-52456-4

I. ①机… II. ①王… ②王… III. ①机器学习—算法 IV. ①TP181

中国版本图书馆CIP数据核字(2019)第043575号

责任编辑:张瑞庆 战晓雷

封面设计:常雪影

责任校对:焦丽丽

责任印制:李红英

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦A座 邮 编:100084

社总机:010-62770175 邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

课件下载: <http://www.tup.com.cn>, 010-62795954

印 装 者:三河市君旺印务有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm 印 张:25

字 数:578千字

版 次:2019年7月第1版

印 次:2019年7月第1次印刷

定 价:59.90元

产品编号:079602-01

前 言

人类社会的发展经历了农耕社会、工业社会、信息社会,现在进入智能社会。在这漫长的发展进程中,人类不断从学习中积累知识,为人类文明打下了坚实的基础。学习是人与生俱来的最重要的一项能力,是人类智能(human intelligence)形成的必要条件。从20世纪90年代开始,互联网从根本上改变了人们的生活。进入21世纪后,人工智能以润物无声、潜移默化的方式深刻地改变着整个世界。与新一代人工智能相关的学科发展和技术创新正在引发链式突破,推动经济社会各领域从数字化、网络化向智能化方向加速跃升。发展智能科学与技术已经提升到国家战略高度。在这个迅猛发展的学科中,机器学习是发展最快的分支之一。图灵奖得主 John E. Hopcroft 教授认为,计算机科学发展到今天,机器学习是核心,它是使计算机具有智能的根本途径。机器学习的理论和实践涉及概率论、统计学、逼近论、凸分析、最优化理论、算法复杂度理论等多领域的交叉学科。除了有其自身的学科体系外,机器学习还有两个重要的辐射功能:一是为应用学科提供解决问题的方法与途径;二是为一些传统学科,如统计学、理论计算机科学、运筹优化等,找到新的研究问题。因此,大多数世界著名大学的计算机学科把机器学习列为人工智能的核心方向。

作为一门应用学科,机器学习的应用涵盖自然语言处理、图像识别以及一系列预测与决策问题。特别是其中的深度学习理论更是诸多高精尖人工智能技术的核心,它是 AlphaGo 计算机智能围棋博弈系统、无人驾驶汽车和工业界人工智能助理等新兴技术的灵魂。因此,掌握机器学习的理论与实践技术是学习现代人工智能科学最重要的一步。本书将介绍一系列经典的机器学习算法,既对这些算法进行理论分析,也结合具体应用介绍它们在 Python 和 Tensorflow 中的实现及使用方法。本书的第1章首先简要介绍机器学习及其算法;第2~9章主要介绍监督式学习算法。其中包括监督式学习算法基础、线性回归算法、机器学习中的搜索算法、Logistic 回归算法、支持向量机算法、决策树、神经网络和深度学习。第10、11章着重介绍无监督学习算法,其中包括降维算法和聚类算法。第12章讲述强化学习的相关知识。除前两章外,各章内容均相对独立,读者可以根据自己的兴趣和需要选择阅读。

根据课时安排情况,一个学期的本科生课程可以讲授除了第 9 章和第 12 章外的全部内容。研究生课程则可以讲授全部内容。

本书在内容的组织上力求从理论、抽象和设计 3 方面阐述机器学习理论基础、算法实现和具体应用技巧。在讲述机器学习算法核心知识的同时,着力培养读者的计算思维能力。计算思维是人类科学思维中以抽象化和自动化为特征,或者说以形式化、程序化和机械化为特征的思维形式。读者通过对本书的学习,应该能够从机器学习的理论基础和实际应用两个层面全面掌握其核心技术,同时计算思维能力得到显著提高,对于整个课程讲述的机器学习算法核心知识能够做到知其然且知其所以然。在面临现实世界的真实挑战时,能够以算法的观点思考问题,应用数学知识设计高效、安全的解决方案,采用抽象和分解方法迎战浩大复杂的任务或设计巨大复杂的智能系统,从中体会计算机科学和人工智能技术带来的快乐和力量。书中除第 1 章外,每章都安排了与讲授内容密切相关的习题,这些习题分为两类:一类是理论分析题,其目的是帮助读者巩固复习本章内容,或引导读者扩展与本章内容相关的知识;另一类是算法实现题,其目的是培养读者的算法实践能力,通过这类习题,可以检验读者对本章主要内容的理解程度和对相关算法的具体应用能力。

作者由衷感谢汤芑、田俊、汤秉诚、罗锴等专家、同行和朋友对本书的巨大贡献。没有他们一如既往的无私帮助和支持,本书是不可能完成的。作者还要感谢本书的责任编辑张瑞庆编审,以及清华大学出版社负责本书编辑出版工作的全体人员,他们为本书的出版付出了大量辛勤劳动,他们以认真细致、一丝不苟的工作保证了本书的出版质量。本书的全部章节由王磊博士完成。王晓东教授对本书各章节的文字做了修改和润色。汤芑博士和田俊教授在百忙中认真审阅了全书,提出了许多宝贵的改进意见。在此,谨向每一位关心和支持本书编写工作的人士表示衷心的感谢。

读者可从 GitHub 网站的本书页面 https://github.com/wangleil8/machine_learning 下载本书的源代码、测试数据以及书中插图和源代码的彩色图片。

作者热忱欢迎同行专家和读者对本书提出宝贵意见,使本书内容在使用过程中不断改进,日臻完善。

作 者

2019 年 5 月

图书资源支持

感谢您一直以来对清华版图书的支持和爱护。为了配合本书的使用,本书提供配套的资源,有需求的读者请扫描下方的“书圈”微信公众号二维码,在图书专区下载,也可以拨打电话或发送电子邮件咨询。

如果您在使用本书的过程中遇到了什么问题,或者有相关图书出版计划,也请您发邮件告诉我们,以便我们更好地为您服务。

我们的联系方式:

地 址: 北京市海淀区双清路学研大厦 A 座 701

邮 编: 100084

电 话: 010-62770175-4608

资源下载: <http://www.tup.com.cn>

客服邮箱: tupjsj@vip.163.com

QQ: 2301891038 (请写明您的单位和姓名)

资源下载、样书申请



书圈



扫一扫, 获取最新目录

用微信扫一扫右边的二维码,即可关注清华大学出版社公众号“书圈”。

目 录

第 1 章 机器学习算法概述

1

- 1.1 什么是机器学习 2
- 1.2 机器学习的形式分类 4
 - 1.2.1 监督式学习 4
 - 1.2.2 无监督学习 7
 - 1.2.3 强化学习 8
- 1.3 机器学习算法综览 9
- 1.4 有关术语的约定 15
- 小结 16

第 2 章 监督式学习算法基础

17

- 2.1 监督式学习基本概念 17
- 2.2 经验损失最小化架构 20
- 2.3 监督式学习与经验损失最小化实例 23
- 2.4 正则化算法 29
- 小结 34
- 习题 35

第 3 章 线性回归算法

38

- 3.1 线性回归基本概念 38
- 3.2 线性回归优化算法 43
- 3.3 多项式回归 49
- 3.4 线性回归的正则化算法 52
- 3.5 线性回归的特征选择算法 58
 - 3.5.1 逐步回归 58
 - 3.5.2 分段回归 63

小结	66
习题	66

第 4 章 机器学习中的搜索算法

70

4.1 梯度下降算法与次梯度下降算法	71
4.2 随机梯度下降算法	77
4.3 牛顿迭代算法	83
4.4 坐标下降算法	87
小结	91
习题	92

第 5 章 Logistic 回归算法

94

5.1 Logistic 回归基本概念	94
5.2 Logistic 回归优化算法	100
5.3 分类问题的度量	107
5.3.1 准确率	107
5.3.2 精确率与召回率	108
5.3.3 ROC 曲线及 AUC 度量	112
5.4 Softmax 回归	115
5.4.1 Softmax 回归基本概念	115
5.4.2 Softmax 回归优化算法	116
5.4.3 Softmax 模型与指数分布族	121
小结	123
习题	123

第 6 章 支持向量机算法

126

6.1 支持向量机基本概念	126
6.1.1 支持向量机思想起源	127
6.1.2 支持向量机的凸优化描述	129
6.1.3 支持向量机的对偶	132
6.2 支持向量机优化算法	133
6.3 核方法	140
6.4 软间隔支持向量机	147

6.4.1 软间隔支持向量机基本概念	147
6.4.2 软间隔支持向量机优化算法	149
6.4.3 Hinge 损失与软间隔支持向量机	152
小结	153
习题	154

第 7 章 决策树

158

7.1 决策树的基本概念	158
7.2 决策树优化算法	166
7.2.1 决策树回归问题的 CART 算法	166
7.2.2 决策树分类问题的 CART 算法	168
7.3 CART 算法实现及应用	171
7.3.1 决策树 CART 算法基类	171
7.3.2 决策树回归问题的 CART 算法的实现及应用	175
7.3.3 决策树分类问题的 CART 算法的实现及应用	178
7.4 集成学习算法	180
7.4.1 随机森林分类算法	181
7.4.2 随机森林回归算法	187
7.5 梯度提升决策树回归算法	189
小结	192
习题	193

第 8 章 神经网络

197

8.1 神经网络基本概念	197
8.1.1 神经网络模型	197
8.1.2 神经网络算法描述	202
8.2 神经网络优化算法	204
8.3 神经网络算法实现	208
8.4 神经网络的 TensorFlow 实现	216
小结	218
习题	218

第 9 章 深度学习

222

9.1 卷积神经网络	222
------------	-----

9.1.1	滤镜	224
9.1.2	卷积层	226
9.1.3	卷积神经网络的实现	230
9.2	循环神经网络	237
9.2.1	循环神经网络基本概念	238
9.2.2	循环神经网络的实现	241
9.2.3	时间反向传播算法	245
9.2.4	长短时记忆基本概念	246
9.2.5	长短时记忆的实现	249
	小结	250
	习题	251

第 10 章 降维算法

256

10.1	主成分分析法	256
10.1.1	算法思想	256
10.1.2	算法实现	261
10.1.3	奇异值分解	263
10.2	主成分分析的核方法	265
10.2.1	主成分分析法的等价形式	265
10.2.2	核方法算法描述	266
10.2.3	核方法算法实现	268
10.3	线性判别分析法	271
10.3.1	算法思想	271
10.3.2	算法实现	273
10.4	流形降维算法	275
10.4.1	局部线性嵌入法	276
10.4.2	多维缩放法	280
10.5	自动编码器	284
	小结	287
	习题	288

第 11 章 聚类算法

293

11.1	k 均值算法	293
11.2	合并聚类算法	298

11.3 DBSCAN 算法	304
小结	309
习题	310

第 12 章 强化学习

313

12.1 强化学习基本概念	314
12.1.1 马尔可夫环境模型	314
12.1.2 策略	316
12.2 动态规划型算法	318
12.2.1 值迭代算法	319
12.2.2 策略迭代算法	323
12.3 时序差分型算法	327
12.4 深度 Q 神经网络	335
12.5 策略梯度型算法	341
12.5.1 REINFORCE 算法	342
12.5.2 Actor-Critic 算法	345
小结	348
习题	349

附录 A 机器学习数学基础

352

A.1 线性代数	352
A.2 微积分	357
A.3 优化理论	361
A.3.1 凸函数的定义及判定	361
A.3.2 无约束凸优化问题	362
A.3.3 带约束凸优化问题	364
A.4 概率论简介	366

附录 B Python 语言与机器学习工具库

370

B.1 Python 语言基础	370
B.2 SciPy 工具库	374
B.2.1 NumPy 简介	374
B.2.2 Matplotlib 简介	378

B.2.3	Pandas 简介	379
B.3	Sklearn 简介	380
B.4	TensorFlow 简介	383

附录 C 本书使用的数据集

387

参考文献

388

第 1 章 机器学习算法概述

2016年3月15日下午,举世瞩目的围棋人机大战在围棋世界冠军李世石与人工智能博弈软件 AlphaGo 之间展开第五局对战。最终李世石在万般无奈之下投子认输,这场旷世围棋人机大战以 AlphaGo 4 : 1 胜出的结局落下了帷幕。此后,AlphaGo 及其后继者 AlphaZero 一路高歌猛进,所向披靡,横扫世界围棋职业棋坛,一次又一次向人类展示出其超强的人工智能智力,而它的灵魂正是本书所关注的核心内容——机器学习算法。

从 20 世纪 90 年代开始,互联网改变了人们的生活。谷歌、亚马逊等互联网公司 of 信息全球化做出了重大的贡献。进入 21 世纪后,苹果智能手机 iPhone 的出现再一次带来了技术的革新。诸多 App 层出不穷,为人们的衣食住行带来了巨大的便利。下一轮创新的浪潮将来自何方? 许多学者、工程师与企业家认为,人工智能将引领未来的潮流。

人工智能的概念是由以麦卡赛、明斯基、罗切斯特和香农等为首的一批科学家在 1956 年提出的。为什么一个已有 60 余年历史的学科又重新走进了人们视野的中心? 回顾历史,每一次潮流的兴起都伴随着科技的创新。例如,互联网的兴起源于高速光缆的问世,手机 App 的繁荣源于智能手机的诞生。那么,又是什么新兴的技术突破为人工智能领域注入了新鲜的活力? 可以说,人工智能的核心是机器学习,而机器学习的核心是算法。近年来,机器学习算法的研究屡屡取得重大成功,特别是深度学习算法,更是一次次地展示出无与伦比的威力。同样重要的是,GPU(图像处理器)的高速发展,使得大规模深度学习成为可能。所以,正是机器学习算法理论及相应硬件技术的突破使人工智能焕发新生。

谈到人工智能与机器学习,人们眼前会立刻浮现出诸多异彩纷呈的场景。在这些场景中,有无人驾驶汽车穿行于车水马龙,有智能机器人探索宇宙太空,有面部识别系统精确定位寻踪于茫茫人海,还有 AlphaGo 智能博弈软件与人类围棋世界冠军激战,如图 1.1 所示。

所有这些场景都源于机器学习带来的新一轮技术创新浪潮。十几年前,这些场景也许只出现在科幻影视作品中,而今天,人工智能的创新将它们变成了现实,并且彻底地改变了人们的生活。那么,是什么样的技术支持着这些精彩纷呈的应用? 机器如何通过学习获取智

能? 人类在机器学习的过程中扮演了什么样的角色? 机器学习算法与传统的计算机算法有什么区别与联系? 相信读者一定会有许多这样的问题, 这些也正是本书要一一回答的问题。本章将对机器学习领域加以概述, 使读者对这一领域有一个全局性的认识。在后续的章节中, 本书还将从理论与实践两个方面对机器学习及其算法理论进行深入的探讨。



图 1.1 机器学习场景

1.1 什么是机器学习

什么是机器学习? 通俗地讲, 机器学习是智能体通过模拟或实现人类的学习行为来获取新的知识或技能, 重新组织已有的知识结构, 以不断改善自身智能。机器学习大师 Tom Mitchell 从技术层面给出了一个在业界广为引用的抽象定义^①: 给定任务 T 、相关的经验 E 以及关于学习效果的度量 P , 机器学习就是通过对经验 E 的学习来优化任务 T 完成效果的度量 P 的一个过程。

以下通过两个例子来具体阐述这个概念。在一个无人驾驶汽车系统中, 机器学习的任务是根据路况确定驾驶方式。例如, 遇到红灯应当刹车, 遇到行人应当避让, 等等。学习效果的度量可以是事故发生的概率。经验就是大量的人类驾驶数据。一般来说, 训练一个无人驾驶汽车系统需要上百万公里且包含各种路况的人类驾驶数据。从这些数据中, 机器学习算法能提取出在各种路况下人类的正确驾驶方式。然后, 在无人驾驶的情况下, 根据学习到的相应驾驶方式来操纵汽车。例如, 如果路口亮起红灯, 人类驾驶员就会刹车。机器学习算法提取出这一模式, 从而能在传感器识别出红灯时发出刹车的指令。

再来看博弈系统的例子。在这个系统里机器学习的任务是根据对手的招数给出应招。其学习效果可以用软件的胜率来度量。学习的经验来自两个方面。首先是人类棋手的历史对局, 也就是棋谱数据。从成千上万的棋谱数据中, 机器学习算法提取出在以往类似盘面中

^① 原文如下: A computer program is said to learn from experience E with respect to some class of tasks T and performance measure P , if its performance at tasks in T , as measured by P , improves with experience E .

胜率最高的应招,并结合自身的计算做出反应。其次,博弈系统也通过自身的实战对局来进行强化学习。例如,在某场对局中,如果人类战胜了软件,那么机器学习算法将把这场对局以较高权重加入其数据库中,从而避免在未来的对局中出现类似的错误。

从上面的两个例子可以看出,机器学习的原理与人类学习十分相似:对已知的经验信息加以提炼,以掌握完成某项任务的方法。在机器学习中,用于学习的经验数据称为训练数据,完成任务的方法称为模型。机器学习的核心就是针对给定任务,设计出以训练数据为其输入,以模型为其输出的算法(见图 1.2)。所以,有时人们也说,机器学习算法的职责是通过训练数据来训练模型。



图 1.2 机器学习算法工作原理

那么机器学习与人类学习的区别何在?换句话说,机器学习算法能完成哪些人类难以完成的任务?简单来说有以下两点。

第一,机器学习算法可以从海量数据中提取与任务相关的重要特征。例如,在虹膜识别技术中,机器学习算法能从众多医学数据以及生物特征中选取细丝、冠状、条纹、隐窝等细节特征,来区别任意两个不同的虹膜。而这样的任务往往令人类望而却步。

第二,机器学习算法可以自动地对模型进行调整,以适应不断变化的环境。例如,在房价预测系统中,机器学习算法能自动根据类似的小区的最新交易记录,对某小区的房价预测做出迅速调整。这样的反应速度往往非人力所能及。

然而,机器学习也并非无所不能。机器学习面临的第一个问题是:机器学习算法需要大量的训练数据来训练模型。在数据不足的情况下,机器学习算法往往会面临两个挑战。第一,训练数据的代表性不够好。这使得模型在面对完全陌生的任务场景时会“不知所措”。例如,如果在无人驾驶汽车算法的训练数据中没有包含雪天的行驶记录,那么经训练所得到的模型很可能无法在雪天给出正确的驾驶指令。第二,训练数据的一些特殊的特征可能将模型带入过度拟合的误区。过度拟合就是指算法过度解读训练数据,从而失去了模型的可推广性。在无人驾驶汽车的例子中,如果训练数据不足,例如只有两条数据:遇到红灯停车,遇到红色“停止”标志停车,在这种情况下,机器学习算法可能会从仅有的这两条数据中提炼出如下模型:前方出现红色物体则停车,这就是过度拟合。如何通过算法设计的技巧来克服上述困难,是本书后续章节中要探讨的重要内容。

机器学习面临的第二个问题是:目前它还没有在创造性的工作领域中取得成效。例如,艺术创作还主要依赖于人类的情感与思维,许多构造性的数学证明还无法由机器学习来完成,许多猜想性质的科学研究也仍然需要科学家的灵感与智慧。

最后需要指出的是,机器的智能终究是人类赋予的。机器学习的灵魂是算法,而算法的

设计者是人类。正因如此,掌握机器学习的算法设计艺术是打开未来之门的钥匙。这也是本书希望读者实现的目标。

1.2 机器学习的形式分类

通过 1.1 节中介绍的例子可以看到,机器学习问题种类繁多。本节要介绍一种常用的机器学习的学习形式的分类方法。机器学习最主要的两种形式是监督式学习与无监督学习。除此之外,还有一个介于两者之间的形式——强化学习。

1.2.1 监督式学习

监督式学习是最常见的一类机器学习的学习形式。在这一类机器学习的学习形式中,每一条训练数据都含有两部分信息:特征组与标签。一条训练数据中的特征组是对相应对象的特征的描述,而标签则是对象的一个属性。监督式学习的任务是根据对象的特征组对标签的取值进行预测。

手写数字识别是一个经典的监督式学习问题。这个问题的任务是识别各式各样的手写数字。图 1.3 是 20 张手写数字图片。

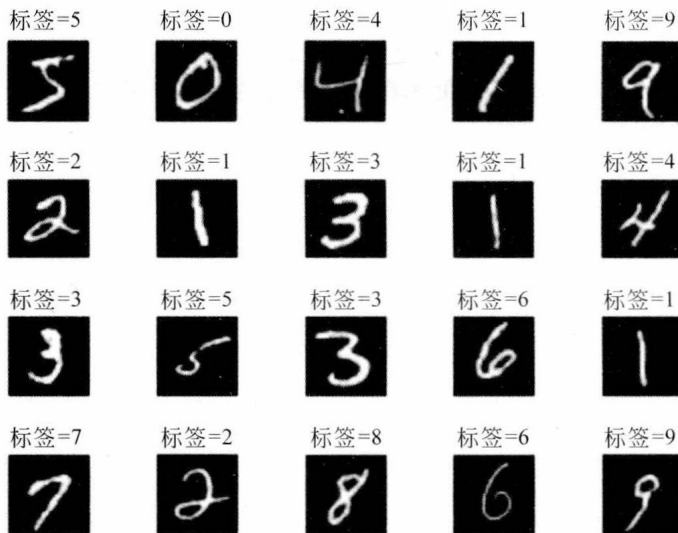


图 1.3 20 张手写数字图片

图 1.3 中的 20 张图片就是关于这个任务的 20 条训练数据。每一条训练数据都由特征组和标签组成。特征组是图片的像素灰度矩阵,标签是图片中的数字。

在监督式学习中,通常有两种获取标签值的方法。

第一种方法是人工标注。例如,在许多电影推荐系统中,一些用户在观影之后会给电影打分。如果该系统希望通过机器学习来更好地为用户推荐其他电影,这样的分数就可以作

为训练数据的标签。除此之外,有些公司提供专业人工标注服务。如果某项任务需要持续稳定的人工标签,那么可以利用这些公司的资源。

第二种方法是数据自带标签。例如,点击率预测是搜索引擎技术中至关重要的一个问题。它直接关系到搜索结果的优劣。众所周知,搜索引擎的主要任务是返回与用户搜索关键字相关联的链接。图 1.4 是谷歌搜索引擎对“人工智能”这一搜索关键字返回的链接。



图 1.4 谷歌搜索引擎对“人工智能”返回的链接

显而易见,越有可能被用户点击的链接,应当被排在越高的位置。所以,机器学习在这里的任务就是预测每一个备选的链接被当前用户点击的概率。在任一时刻,每一次搜索都会返回给用户一系列的链接。其中的某些链接被点击了,但仍会有一些链接没有被用户点击,这些信息都会被完整无误地记录在搜索引擎的日志中。每一条日志一般都包含以下信息:搜索发起人、关键字、搜索引擎返回的一条链接以及用户是否点击了该链接。这些日志数据构成了点击率预测问题的训练数据。日志中的各类信息构成特征组,标签值则是 0 或者 1: 如果一个链接被点击了,其标签值是 1; 否则,其标签值就是 0。由此可见,这个例子中的训练数据具有自带标签,而不需要额外的人工标注。

根据训练数据所带标签值的特性,又可以将监督式学习分为两类。

1. 分类问题

如果标签只取有限个可能值,则称相应的监督式学习为分类问题。直观地说,每一个标签值代表一个类。在手写数字识别问题中,标签只取 0~9 这 10 个可能值,这是含有 10 个类别的分类问题。在点击率预测问题中,标签只取 0 和 1 两个可能值,这是含有两个类别的分类问题。称一个含有 k 个类别的分类问题为 k 元分类问题。

分类问题的任务又可以分为两种形式。第一种任务的形式是,要求对类别做出明确的预测。例如,在手写数字识别问题中,要求输出对给定图片中的数字的预测。这种任务形式就称为类别预测任务。第二种任务的形式是,要求计算出给定对象属于每一个类别的概率。例如,在点击率预测问题中,要求输出用户点击给定链接的概率。这种任务形式就称为概率