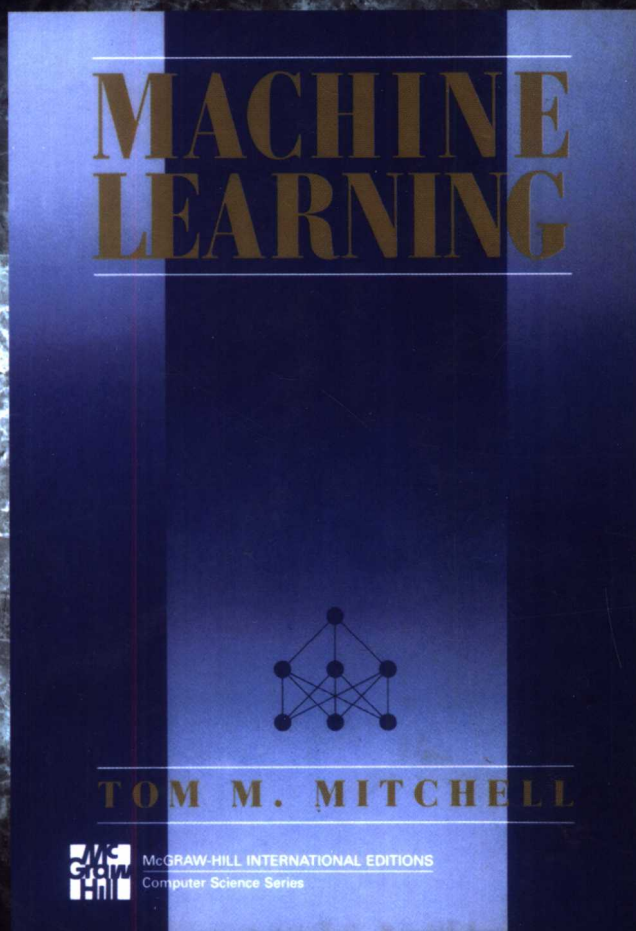


计 算 机 科 学 丛 书

机器学习

(美) Tom M. Mitchell 著 曾华军 张银奎 等译
卡内基梅隆大学



Machine Learning



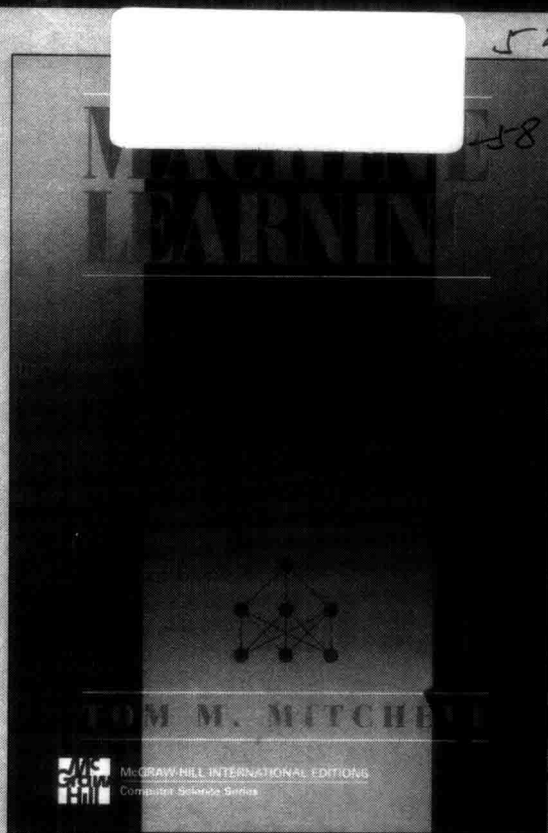
机械工业出版社
China Machine Press



计 算 机 科 学 丛 书

机器学习

(美) Tom M. Mitchell 著 曾华军 张银奎 等译
卡内基梅隆大学



Machine Learning

机械工业出版社
China Machine Press

本书展示了机器学习中核心的算法和理论，并阐明了算法的运行过程。本书综合了许多的研究成果，例如统计学、人工智能、哲学、信息论、生物学、认知科学、计算复杂性和控制论等，并以此来理解问题的背景、算法和其中的隐含假定。本书可作为计算机专业本科生、研究生教材，也可作为相关领域研究人员、教师的参考书。

Tom M. Mitchell: Machine Learning (ISBN 0-07-115467-1).

Copyright ©1997 by The McGraw-Hill Companies, Inc.

Original language published by The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved. No part of this publication may be reproduced or distributed in any means, or stored in a database or retrieval system, without the prior written permission of the publisher.

Simplified Chinese translation edition jointly published by McGraw-Hill Education (Asia) Co. and China Machine Press.

本书中文简体字翻译版由机械工业出版社和美国麦格劳-希尔教育(亚洲)出版公司合作出版。未经出版者预先书面许可，不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分。

本书封面贴有 McGraw-Hill 公司防伪标签，无标签者不得销售。

版权所有，侵权必究。

本书版权登记号：图字：01-2002-0357

图书在版编目 (CIP) 数据

机器学习 / (美) 米歇尔 (Mitchell, T. M.) 著; 曾华军等译. —北京: 机械工业出版社, 2003. 1

(计算机科学丛书)

书名原文: Machine Learning

ISBN 7-111-10993-7

I. 机… II. ①米… ②曾… III. 机器学习 IV. TP181

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 077094 号

机械工业出版社 (北京市西城区百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

责任编辑: 吴怡

北京第二外国语学院印刷厂印刷·新华书店北京发行所发行

2003 年 1 月第 1 版第 1 次印刷

787mm × 1092mm 1/16 · 18.75 印张

印数: 0 001-5000 册

定价: 35.00 元

凡购本书, 如有倒页、脱页、缺页, 由本社发行部调换

译者序

“机器学习”一般被定义为一个系统自我改进的过程，但仅仅从这个定义来理解和实现机器学习是困难的。从最初的基于神经元模型以及函数逼近论的方法研究，到以符号演算为基础的规则学习和决策树学习的产生，和之后的认知心理学中归纳、解释、类比等概念的引入，至最新的计算学习理论和统计学习的兴起（当然还包括基于马尔可夫过程的增强学习），机器学习一直都在相关学科的实际应用中起着主导作用。研究人员们借鉴了各个学科的思想来发展机器学习，但关于机器学习问题的实质究竟是什么尚无定论。不同的机器学习方法也各有优缺点，只在其适用的领域内才有良好的效果。因此，以枚举的方法描述机器学习中的各个理论和算法可能是最合适的途径。

《机器学习》一书正是以这种途径来介绍机器学习的。其主要涵盖了目前机器学习中各种最实用的理论和算法，包括概念学习、决策树、神经网络、贝叶斯学习、基于实例的学习、遗传算法、规则学习、基于解释的学习和增强学习等。对每一个主题，作者不仅进行了十分详尽和直观的解释，还给出了实用的算法流程。此外，书中还包括一章对学习算法的精度进行实验评估的内容。书后的习题和参考文献提供了进一步思考相关问题的线索，在网址 <http://www-2.cs.cmu.edu/~tom/mlbook.html> 上也可以找到关于该书的讲演幻灯片、例子程序和数据等信息。在卡内基梅隆等许多大学，本书都被作为机器学习课程的教材。

本书的作者 Tom M. Mitchell 在机器学习领域享有盛名。他是卡内基梅隆大学的教授，目前在 WhizBang! 实验室担任副主席和首席科学家。他还是美国人工智能协会 (AAAI) 的主席，并且是《机器学习》杂志和国际机器学习年度会议 (ICML) 的创始人。

笔者在翻译过程中力求忠于原著。由于本书涉及了多个学科的内容，因此其中许多的专业术语尽量遵循其所在学科的标准译法，并在有可能引起歧义和冲突之处做了适当调整。同时，我们在专业术语第一次出现的地方注上了英文原文，以方便读者的对照理解。

全书的翻译由曾华军和张银奎合作完成，并得到了周志华、苏中、景风、钱芳、孙晓明、余世鹏、秦文、姚良基和张西焯等同志的许多帮助。由于水平有限，书中错误和不妥之处在所难免，恳请读者批评指正。

前 言

机器学习这门学科所关注的问题是：计算机程序如何随着经验积累自动提高性能。近年来，机器学习被成功地应用于很多领域，从检测信用卡交易欺诈的数据挖掘程序，到获取用户阅读兴趣的信息过滤系统，再到能在高速公路上自动行驶的汽车。同时，这个学科的基础理论和算法也有了重大进展。

这本教材的目标是展现机器学习中核心的算法和理论。机器学习从很多学科吸收了成果和概念，包括统计学、人工智能、哲学、信息论、生物学、认知科学、计算复杂性和控制论等。笔者相信，研究机器的最佳途径是从这些学科的观点看待机器学习，并且以此来理解问题的背景、算法以及其中隐含的假定。这些在以往很难做到，因为在这一领域缺少包容广泛的原始资料，本书的主要目的就是提供这样的一份资料。

由于素材的多学科性，本书不要求读者具有相应的知识背景，而是在必要时介绍其他一些学科的基本概念，如统计学、人工智能、信息论等。介绍的重点是与机器学习关系最密切的那些概念。本书可以作为计算机科学与工程、统计学和社会科学等专业的大学生或研究生的教材，也可作为软件研究人员或从业人员的参考资料。指导本书写作的两条原则为：第一，它是在校大学生可以理解的；第二，它应该包含我希望我自己的博士生在开始他们的机器学习研究前要掌握的内容。

指导本书写作的第三条原则是：它应该体现理论和实践间的均衡。机器学习理论致力于回答这样的问题“学习性能是怎样随着给定的训练样例的数量而变化的？”和“对于各种不同类型的学习任务，哪个学习算法最适合？”利用来自统计学、计算复杂性和贝叶斯分析的理论成果，这本书讨论了这一类理论问题。同时本书也涵盖很多实践方面的内容：介绍了这一领域的主要算法，阐明了算法的运行过程。其中一些算法的实现和数据可以在因特网上通过网址 <http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook.html> 得到，包括用于人脸识别的神经网络的源代码和数据、用于信贷分析的决策树学习的源代码和数据及分析文本文档的贝叶斯分类器的源代码和数据。我很感谢那些帮助我创建这些在线资源的同事，他们是：Jason Rennie、Paul Hsiung、Jeff Shufelt、Matt Glickman、Scott Davies、Joseph O’ Sullivan、Ken Lang、Andrew McCallum 和 Thorsten Joachims。

出版者的话

文艺复兴以降，源远流长的科学精神和逐步形成的学术规范，使西方国家在自然科学的各个领域取得了垄断性的优势；也正是这样的传统，使美国在信息技术发展的六十多年间名家辈出、独领风骚。在商业化的进程中，美国的产业界与教育界越来越紧密地结合，计算机学科中的许多泰山北斗同时身处科研和教学的最前线，由此而产生的经典科学著作，不仅肇划了研究的范畴，还揭橥了学术的源变，既遵循学术规范，又自有学者个性，其价值并不会因年月的流逝而减退。

近年，在全球信息化大潮的推动下，我国的计算机产业发展迅猛，对专业人才的需求日益迫切。这对计算机教育界和出版界都既是机遇，也是挑战；而专业教材的建设在教育战略上显得举足轻重。在我国信息技术发展时间较短、从业人员较少的现状下，美国等发达国家在其计算机科学发展的几十年间积淀的经典教材仍有许多值得借鉴之处。因此，引进一批国外优秀计算机教材将对我国计算机教育事业的发展起积极的推动作用，也是与世界接轨、建设真正的世界一流大学的必由之路。

机械工业出版社华章图文信息有限公司较早意识到“出版要为教育服务”。自1998年始，华章公司就将工作重点放在了遴选、移译国外优秀教材上。经过几年的不懈努力，我们与Prentice Hall, Addison-Wesley, McGraw-Hill, Morgan Kaufmann等世界著名出版公司建立了良好的合作关系，从它们现有的数百种教材中甄选出Tanenbaum, Stroustrup, Kernighan, Jim Gray等大师名家的一批经典作品，以“计算机科学丛书”为总称出版，供读者学习、研究及度藏。大理石纹理的封面，也正体现了这套丛书的品位和格调。

“计算机科学丛书”的出版工作得到了国内外学者的鼎力襄助，国内的专家不仅提供了中肯的选题指导，还不辞劳苦地担任了翻译和审校的工作；而原书的作者也相当关注其作品在中国的传播，有的还专诚为其书的中译本作序。迄今，“计算机科学丛书”已经出版了近百个品种，这些书籍在读者中树立了良好的口碑，并被许多高校采用为正式教材和参考书籍，为进一步推广与发展打下了坚实的基础。

随着学科建设的初步完善和教材改革的逐渐深化，教育界对国外计算机教材的需求和应用都步入一个新的阶段。为此，华章公司将加大引进教材的力度，在“华章教育”的总规划之下出版三个系列的计算机教材：针对本科生的核心课程，剔抉外版菁华而成“国外经典教材”系列；对影印版的教材，则单独开辟出“经典原版书库”；定位在高级教程和专业参考的“计算机科学丛书”还将保持原来的风格，继续出版新的品种。为了保证这三套丛书的权威性，同时也为了更好地为学校和老师服务，华章公司聘请了中国科学院、北京大学、清华大学、国防科技大学、复旦大学、上海交通大学、南京大学、浙江大学、中国科技大学、哈尔滨工业大学、西安交通大学、中国人民大学、北京航空航天大学、北京邮电大学、中山大学、解放军理工大学、郑州大学、湖北工学院、中国国家信息安全测评认证中心等国内重点大学和科研机构在计算机的各个领域的著名学者组成“专家指导委员会”，为我们提供选题意见和出版监督。

“国外经典教材”是响应教育部提出的使用外版教材的号召，为国内高校的计算机本科教学度身订造的。在广泛地征求并听取丛书的“专家指导委员会”的意见后，我们最终选定了这20多种篇幅内容适度、讲解鞭辟入里的教材，其中的大部分已经被M.I.T.、Stanford、U.C. Berkley、C.M.U.等世界名牌大学采用。丛书不仅涵盖了程序设计、数据结构、操作系统、计算机体系结构、数据库、编译原理、软件工程、图形学、通信与网络、离散数学等国内大学计算机专业普遍开设的核心课程，而且各具特色——有的出自语言设计者之手、有的历三十年而不衰、有的已被全世界的几百所高校采用。在这些圆熟通博的名师大作的指引之下，读者必将在计算机科学的宫殿中由登堂而入室。

权威的作者、经典的教材、一流的译者、严格的审校、精细的编辑，这些因素使我们的图书有了质量的保证，但我们的目标是尽善尽美，而反馈的意见正是我们达到这一终极目标的重要帮助。教材的出版只是我们的后续服务的起点。华章公司欢迎老师和读者对我们的工作提出建议或给予指正，我们的联系方法如下：

电子邮件：hzedu@hzbook.com

联系电话：(010) 68995265

联系地址：北京市西城区百万庄南街1号

邮政编码：100037

专家指导委员会

(按姓氏笔画顺序)

尤晋元
石教英
张立昂
邵维忠
周克定
郑国梁
高传善
裘宗燕

王 珊
吕 建
李伟琴
陆丽娜
周傲英
施伯乐
梅 宏
戴 葵

冯博琴
孙玉芳
李师贤
陆鑫达
孟小峰
钟玉琢
程 旭

史忠植
吴世忠
李建中
陈向群
岳丽华
唐世渭
程时端

史美林
吴时霖
杨冬青
周伯生
范 明
袁崇义
谢希仁

目 录

译者序	2.7.1 一个有偏的假设空间	28
前言	2.7.2 无偏的学习器	29
第1章 引言	2.7.3 无偏学习的无用性	30
1.1 学习问题的标准描述	2.8 小结和补充读物	32
1.2 设计一个学习系统	习题	34
1.2.1 选择训练经验	第3章 决策树学习	38
1.2.2 选择目标函数	3.1 简介	38
1.2.3 选择目标函数的表示	3.2 决策树表示法	38
1.2.4 选择函数逼近算法	3.3 决策树学习的适用问题	39
1.2.5 最终设计	3.4 基本的决策树学习算法	40
1.3 机器学习的一些观点和问题	3.4.1 哪个属性是最佳的分类属性	40
1.4 如何阅读本书	3.4.2 举例	43
1.5 小结和补充读物	3.5 决策树学习中的假设空间搜索	45
习题	3.6 决策树学习的归纳偏置	46
第2章 概念学习和一般到特殊序	3.6.1 限定偏置和优选偏置	46
2.1 简介	3.6.2 为什么短的假设优先	47
2.2 概念学习任务	3.7 决策树学习的常见问题	48
2.2.1 术语定义	3.7.1 避免过度拟合数据	49
2.2.2 归纳学习假设	3.7.2 合并连续值属性	53
2.3 作为搜索的概念学习	3.7.3 属性选择的其他度量标准	53
2.4 FIND-S: 寻找极大特殊假设	3.7.4 处理缺少属性值的训练样例	54
2.5 变型空间和候选消除算法	3.7.5 处理不同代价的属性	55
2.5.1 表示	3.8 小结和补充读物	56
2.5.2 列表后消除算法	习题	56
2.5.3 变型空间的更简洁表示	第4章 人工神经网络	60
2.5.4 候选消除学习算法	4.1 简介	60
2.5.5 算法的举例	4.2 神经网络表示	61
2.6 关于变型空间和候选消除的说明	4.3 适合神经网络学习的问题	62
2.6.1 候选消除算法是否会收敛到正确的假设	4.4 感知器	63
2.6.2 下一步需要什么样的训练样例	4.4.1 感知器的表征能力	63
2.6.3 怎样使用不完全学习概念	4.4.2 感知器训练法则	64
2.7 归纳偏置	4.4.3 梯度下降和 delta 法则	65
	4.4.4 小结	69
	4.5 多层网络和反向传播算法	70
	4.5.1 可微阈值单元	70

4.5.2 反向传播算法	71	6.3.2 MAP假设和一致学习器	117
4.5.3 反向传播法则的推导	74	6.4 极大似然和最小误差平方假设	118
4.6 反向传播算法的说明	76	6.5 用于预测概率的极大似然假设	121
4.6.1 收敛性和局部极小值	76	6.6 最小描述长度准则	123
4.6.2 前馈网络的表征能力	77	6.7 贝叶斯最优分类器	125
4.6.3 假设空间搜索和归纳偏置	77	6.8 GIBBS算法	126
4.6.4 隐藏层表示	78	6.9 朴素贝叶斯分类器	126
4.6.5 泛化、过度拟合和停止判据	79	6.10 举例：学习分类文本	129
4.7 举例：人脸识别	82	6.11 贝叶斯信念网	132
4.7.1 任务	82	6.11.1 条件独立性	132
4.7.2 设计要素	83	6.11.2 表示	133
4.7.3 学习到的隐藏层表示	85	6.11.3 推理	134
4.8 人工神经网络的高级课题	86	6.11.4 学习贝叶斯信念网	134
4.8.1 其他可选的误差函数	86	6.11.5 贝叶斯网的梯度上升训练	134
4.8.2 其他可选的误差最小化过程	87	6.11.6 学习贝叶斯网的结构	136
4.8.3 递归网络	87	6.12 EM算法	136
4.8.4 动态修改网络结构	88	6.12.1 估计 k 个高斯分布的均值	137
4.9 小结和补充读物	89	6.12.2 EM算法的一般表述	138
习题	90	6.12.3 k 均值算法的推导	139
第5章 评估假设	95	6.13 小结和补充读物	140
5.1 动机	95	习题	141
5.2 估计假设精度	95	第7章 计算学习理论	144
5.2.1 样本错误率和真实错误率	96	7.1 简介	144
5.2.2 离散值假设的置信区间	96	7.2 可能学习近似正确假设	145
5.3 采样理论基础	98	7.2.1 问题框架	145
5.3.1 错误率估计和二项比例估计	98	7.2.2 假设的错误率	146
5.3.2 二项分布	99	7.2.3 PAC可学习性	147
5.3.3 均值和方差	100	7.3 有限假设空间的样本复杂度	148
5.3.4 估计量、偏差和方差	100	7.3.1 不可知学习和不一致假设	150
5.3.5 置信区间	101	7.3.2 布尔文字的合取是 PAC 可学习的	151
5.3.6 双侧和单侧边界	103	7.3.3 其他概念类别的 PAC 可 学习性	152
5.4 推导置信区间的一般方法	104	7.4 无限假设空间的样本复杂度	153
5.5 两个假设错误率间的差异	105	7.4.1 打散一个实例集合	153
5.6 学习算法比较	106	7.4.2 Vapnik-Chervonenkis 维度	154
5.6.1 配对 t 测试	108	7.4.3 样本复杂度和 VC 维	155
5.6.2 实际考虑	109	7.4.4 神经网络的 VC 维	156
5.7 小结和补充读物	109	7.5 学习的出错界限模型	157
习题	110	7.5.1 FIND-S 算法的出错界限	157
第6章 贝叶斯学习	112	7.5.2 HALVING 算法的出错界限	158
6.1 简介	112	7.5.3 最优出错界限	159
6.2 贝叶斯法则	113	7.5.4 加权多数算法	159
6.3 贝叶斯法则和概念学习	115		
6.3.1 BRUTE-FORCE 贝叶斯概念学习	115		

7.6 小结和补充读物	161	10.4.2 术语	203
习题	162	10.5 学习一阶规则集: FOIL	204
第 8 章 基于实例的学习	165	10.5.1 FOIL 中的候选特化式 的生成	206
8.1 简介	165	10.5.2 引导 FOIL 的搜索	206
8.2 k -近邻算法	166	10.5.3 学习递归规则集	208
8.2.1 距离加权最近邻算法	167	10.5.4 FOIL 小结	208
8.2.2 对 k -近邻算法的说明	168	10.6 作为逆演绎的归纳	208
8.2.3 术语注解	169	10.7 逆归纳	210
8.3 局部加权回归	169	10.7.1 一阶归纳	212
8.3.1 局部加权线性回归	169	10.7.2 逆归纳: 一阶情况	212
8.3.2 局部加权回归的说明	170	10.7.3 逆归纳小结	214
8.4 径向基函数	170	10.7.4 泛化、 θ -包容和涵蕴	214
8.5 基于案例的推理	172	10.7.5 PROGOL	215
8.6 对消极学习和积极学习的评论	175	10.8 小结和补充读物	215
8.7 小结和补充读物	176	习题	217
习题	177	第 11 章 分析学习	220
第 9 章 遗传算法	179	11.1 简介	220
9.1 动机	179	11.2 用完美的领域理论学习: PROLOG-EBG	223
9.2 遗传算法	179	11.3 对基于解释的学习的说明	228
9.2.1 表示假设	181	11.3.1 发现新特征	229
9.2.2 遗传算子	182	11.3.2 演绎学习	230
9.2.3 适应度函数和假设选择	183	11.3.3 基于解释的学习的归纳偏置	230
9.3 举例	184	11.3.4 知识级的学习	231
9.4 假设空间搜索	186	11.4 搜索控制知识的基于解释的学习	232
9.5 遗传编程	188	11.5 小结和补充读物	234
9.5.1 程序表示	188	习题	236
9.5.2 举例	189	第 12 章 归纳和分析学习的结合	239
9.5.3 遗传编程说明	190	12.1 动机	239
9.6 进化和学习模型	191	12.2 学习的归纳 - 分析途径	241
9.6.1 拉马克进化	191	12.2.1 学习问题	241
9.6.2 鲍德温效应	191	12.2.2 假设空间搜索	242
9.7 并行遗传算法	192	12.3 使用先验知识得到初始假设	242
9.8 小结和补充读物	192	12.3.1 KBANN 算法	243
习题	193	12.3.2 举例	243
第 10 章 学习规则集合	197	12.3.3 说明	245
10.1 简介	197	12.4 使用先验知识改变搜索目标	247
10.2 序列覆盖算法	198	12.4.1 TANGENTPROP 算法	248
10.2.1 一般到特殊的柱状搜索	198	12.4.2 举例	249
10.2.2 几种变型	200	12.4.3 说明	250
10.3 学习规则集: 小结	201	12.4.4 EBNN 算法	251
10.4 学习一阶规则	202	12.4.5 说明	254
10.4.1 一阶 Horn 子句	203		

12.5 使用先验知识来扩展搜索算子	255	13.3.3 举例	269
12.5.1 FOCL 算法	255	13.3.4 收敛性	270
12.5.2 说明	257	13.3.5 实验策略	271
12.6 研究现状	258	13.3.6 更新序列	271
12.7 小结和补充读物	258	13.4 非确定性回报和动作	272
习题	259	13.5 时间差分学习	274
第 13 章 增强学习	263	13.6 从样例中泛化	275
13.1 简介	263	13.7 与动态规划的联系	275
13.2 学习任务	265	13.8 小结和补充读物	276
13.3 Q 学习	267	习题	277
13.3.1 Q 函数	267	附录 符号约定	281
13.3.2 一个学习 Q 的算法	268		

第1章 引言

自从计算机问世以来,人们就想知道它们能不能自我学习。如果我们理解了它们学习的内在机制,即怎样使它们根据经验来自动提高,那么影响将是空前的。想像一下,在未来,计算机能从医疗记录中学习,获取治疗新疾病最有效的方法;住宅管理系统分析住户的用电模式,以降低能源消耗;个人软件助理跟踪用户的兴趣,并为其选择最感兴趣的在线早间新闻。对计算机学习的成功理解将开辟出许多全新的应用领域,并使其计算能力和可定制性上升到新的层次。同时,透彻理解机器学习的信息处理算法,也会有助于更好地理解人类的学习能力(及缺陷)。

目前,我们还不知道怎样使计算机具备和人类一样强大的学习能力。然而,一些针对特定学习任务的算法已经产生。关于学习的理论认识已开始逐步形成。人们开发出很多实践性的计算机程序来实现不同类型的学习,一些商业化的应用也已经出现。例如,对于语音识别这样的课题,迄今为止,基于机器学习的算法明显胜过其他的方法。在数据挖掘领域,机器学习算法理所当然地被用来从包含设备维护记录、借贷申请、金融交易、医疗记录等此类信息的大型数据库中发现有价值的信息。随着对计算机认识的日益成熟,机器学习必将在计算机科学和技术中扮演越来越重要的角色!

我们可以通过一些专项成果看到机器学习这门技术的现状:计算机已经能够成功地识别人类的讲话(Waibel 1989, Lee 1989);预测肺炎患者的康复率(Cooper et al. 1997);检测信用卡的欺诈;在高速公路上自动驾驶汽车(Pomerleau 1989);以接近人类世界冠军的水平对弈西洋双陆棋[⊙]这样的游戏(Tesauro 1992, 1995)。已有很多理论成果能够对训练样例数量、假设空间大小和已知假设中的预期错误这三者间的基本关系进行刻画。我们正开始获取人类和动物学习的原始模型,用以理解它们和计算机的学习算法间的关系(例如, Laird et al. 1986, Anderson 1991, Qin et al. 1992, Chi & Bassock 1989, Ahn & Brewer 1993)。在过去的十年中,无论是应用、算法、理论,还是生物系统的研究,都取得了令人瞩目的进步。机器学习最新的几种应用被归纳在表 1-1 中。Langley & Simon(1995)以及 Rumelhart et al.(1994)调查了机器学习的一些其他应用。

表 1-1 机器学习的一些成功应用

● 学习识别人类的讲话

所有最成功的语音识别系统都使用了某种形式的机器学习技术。例如,SPHINX 系统(参见 Lee 1989)可针对特定讲话者学习语音识别策略,从检测到的语音信号中识别出基本的音素(phoneme)和单词。神经网络学习方法(例如 Waibel et al. 1989)和隐马尔可夫模型(hidden Markov model)学习方法(参见 Lee 1989)在语音识别系统中也非常有效。它们可以让系统自动适应不同的讲话者、词汇、麦克风特性和背景噪音等等。类似的技术在很多信号解释课题中也有应用潜力

⊙ 一种类似飞行棋的游戏,双方各持十五子,通过掷骰子来决定棋子移动的步数。——译者注

- 学习驾驶车辆

机器学习方法已经用于训练计算机控制的车辆,使其在各种类型的道路上正确行驶。例如,ALVINN 系统(Pomerleau 1989)已经能利用它学会的策略独自在高速公路的其他车辆之间奔驰,以 70 英里的时速共行驶了 90 英里。类似的技术可能在很多基于传感器的控制问题中得到应用

- 学习分类新的天文结构

机器学习方法已经被用于从各种大规模的数据库中发现隐藏的一般规律。例如,决策树学习算法已经被美国国家航空和航天局(NASA)用来分类天体,这些天体来自第二帕洛马天文台的太空观察结果(Fayyad et al. 1995)。这一系统现在被用于自动分类太空观察中的所有天体,其中包含了 3T 字节的图像数据

- 学习以世界级的水平对弈西洋双陆棋

最成功的博弈类(如西洋双陆棋)计算机程序是基于机器学习算法的。例如,世界最好的西洋双陆棋程序 TD-GAMMON(Tesauro 1992, 1995)是通过一百万次以上与自己对弈来学习其策略的,现在它的水平能与人类的世界冠军相比。类似的技术已被应用于许多实际问题,在这些领域中,都需要高效地搜索庞大的搜索空间

本书针对机器学习这个领域,描述了多种学习范型、算法、理论以及应用。机器学习从本质上讲是一个多学科的领域。它吸取了人工智能、概率统计、计算复杂性理论、控制论、信息论、哲学、生理学、神经生物学等学科的成果。表 1-2 归纳了来自这些学科的影响机器学习的关键思想。本书的素材基于不同学科的成果,然而,读者不必精通每一个学科。来自这些学科的关键理论将使用非专业的词汇讲解,其中不熟悉的术语和概念会在必要时加以介绍。

表 1-2 一些学科和它们对机器学习的影响

- 人工智能

学习概念的符号表示。作为搜索问题的机器学习。作为提高问题求解能力的学习。利用先验的知识和训练数据一起引导学习

- 贝叶斯方法

作为计算假设概率基础的贝叶斯法则。朴素贝叶斯分类器。未观测到变量估计值的算法

- 计算复杂性理论

不同学习任务中固有的复杂性的理论边界,以计算量、训练样例数量、出错数量等衡量

- 控制论

为了优化预定目标,学习对各种处理过程进行控制,学习预测被控制的过程的下一个状态

- 信息论

熵和信息内容的度量。学习最小描述长度方法。编码假设时,对最佳训练序列的最佳编码及其关系

- 哲学

“奥坎姆的剃刀”(Occam's razor)^①:最简单的假设是最好的。将观察到的数据泛化的理由分析

- 心理学和神经生物学

实践的幂定律(power law of practice),该定律指出对于很大范围内的学习问题,人们的反应速度随着实践次数的幂级提高。激发神经网络学习模式的神经生物学研究

- 统计学

根据有限数据样本,对估计假设精度时出现的误差(例如,偏差和方差)的刻画。置信区间,统计检验

^① 也称“吝啬律”(Law of Parsimony)或“节约律”(Law of Economy),主要思想为简单的理论(或假设)优于复杂的,因英国哲学家奥坎姆(1285 ~ 1349)频繁使用这一原则,故称为“奥坎姆剃刀”。——译者注

1.1 学习问题的标准描述

让我们从几个学习任务开始研究机器学习。根据本书的目的,我们给学习下一个宽广的

定义,以使其包括任何计算机程序通过经验来提高某任务处理性能的行为。更准确的定义如下。

定义:如果一个计算机程序针对某类任务 T 的用 P 衡量的性能根据经验 E 来自我完善,那么我们称这个计算机程序在从经验 E 中学习,针对某类任务 T ,它的性能用 P 来衡量。

例如,对于学习下西洋跳棋^①的计算机程序,它可以通过和自己下棋获取经验;它的任务是参与西洋跳棋对弈;它的性能用它赢棋的能力来衡量。通常,为了很好地定义一个学习问题,我们必须明确这样三个特征:任务的种类,衡量任务提高的标准,经验的来源。

西洋跳棋学习问题:

- 任务 T : 下西洋跳棋
- 性能标准 P : 比赛中击败对手的百分比
- 训练经验 E : 和自己进行对弈

我们可以用以上方法定义很多学习问题,例如,学习手写识别、学习自动驾驶汽车。

手写识别学习问题:

- 任务 T : 识别和分类图像中的手写文字
- 性能标准 P : 分类的正确率
- 训练经验 E : 已知分类的手写文字数据库

机器人驾驶学习问题:

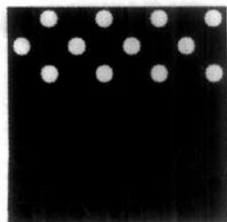
- 任务 T : 通过视觉传感器在四车道高速公路上驾驶
- 性能标准 P : 平均无差错行驶里程(差错由人监督裁定)
- 训练经验 E : 注视人类驾驶时录制的一系列图像和驾驶指令

这里对学习的定义宽广到足以包括大多数惯于被称为“学习”的任务,就像我们日常使用这个词一样。同时,它甚至包括了以非常直接的方式通过经验自我提高的计算机程序。例如,一个允许用户更新数据条目的数据库系统,也符合我们对学习系统的定义:它根据从数据库更新得到的经验提高它响应数据查询的能力。与其担心这种行为与日常谈论的“学习”这个词非正式含义相混淆,我们索性简单地采用我们的科技型定义——通过经验提高性能的某类程序。在这个范畴内,我们会发现很多问题或多或少需要较复杂的解决办法。这里我们并非要分析“学习”这个单词的日常含义,而是要精确地定义一类问题,其中囊括了有趣的学习形式,探索解决这类问题的方法,并理解学习问题的基本结构和过程。

1.2 设计一个学习系统

为了说明一些机器学习的基本设计方法和学习途径,让我们考虑设计一个学习下西洋跳棋的程序。我们的目标是让它进入西洋跳棋世界锦标赛。我们采用最显而易见的标准衡量它的性能:在世界锦标赛中的获胜百分比。

① 为了更好地理解本例,下面简要介绍一下这种跳棋。棋盘为 8×8 方格,深色棋格不可着子。可单步行走,亦可每步跨对方一子单跳或连跳,被跨越的子被杀出局。到达对方底线的子成为王,可回向行走(成为王前只可前行),又可隔空格飞行。右图为西洋跳棋棋盘示例(起始状态)。——译者注



1.2.1 选择训练经验

我们面临的第一个设计问题是选择训练经验的类型,使系统从中进行学习。给学习器提供的训练经验对它的成败有重大的影响。一个关键属性是训练经验能否为系统的决策提供直接或间接的反馈。例如,对于学习下西洋跳棋,系统可以从直接(direct)的训练样例,即各种棋盘状态和相应的正确走子中学习。另一种情况,它可能仅有间接(indirect)的信息,包含很多过去对弈的走子序列和最终结局。对于后一种情况,对弈中较早走子的正确性必须从对弈最终的输赢来推断。这时学习器又面临一个信用分配(credit assignment)问题,也就是考虑每一次走子对最终结果的贡献程度。信用分配可能是一个非常难以解决的问题,因为如果后面下得很差,那么即使起初的走子是最佳的,这盘棋也会输掉。所以,从直接的训练反馈学习要比从间接反馈学习容易。

训练经验的第二个重要属性是学习器可以在多大程度上控制训练样例序列。例如,学习器可能依赖施教者选取的棋盘状态和所提供的每一次正确移动;或者,学习器可能自己提出它发现的特别困惑的棋局并向施教者询问正确的走子;或者,学习器可以完全控制棋局和(间接的)训练分类,就像没有施教者时它和自己对弈进行学习一样。注意,对于最后一种情况,学习器可能选择以下两种情况中的一种:第一,试验它还未考虑过的全新棋局;第二,在它目前发现的最有效的路线的微小变化上对弈,以磨砺它的技能。后续的章节考虑一些学习框架,包括了训练经验是以超乎学习器控制的随机过程提供的;学习器可向施教者提出不同类型的查询;以及学习器通过自动探索环境来搜集训练样例的情况。

训练经验的第三个重要属性是,训练样例的分布能多好地表示实例分布,通过样例来衡量最终系统的性能 P 。一般而言,当训练样例的分布和将来的测试样例的分布相似时,学习具有最大的可信度。对于我们的西洋跳棋学习,性能指标 P 是该系统在世界锦标赛上获胜的百分比。如果它的训练经验 E 仅由和它自己对弈的训练组成,便存在一个明显的危险:这个训练可能不能充分地代表该系统以后被测试时的情形。例如,学习器可能在训练中从未遇到过某些致命的棋局,而它们又非常可能被人类世界冠军采用。实际上,学习的样例通常与最终系统被评估时的样例有一定差异,学习器必须能从中进行学习(举例来说,世界级的西洋跳棋冠军可能不会有兴趣教一个程序下棋)。这的确是一个问题,因为掌握了样例的一种分布,不一定会使它对其他的分布也有好的性能。可以看到很多最新的机器学习理论都是基于训练样例与测试样例分布一致这一假设。尽管我们需要这样的假设以便得到理论结果,但同样必须记住在实践中这个假设经常是不成立的。

下面继续进行算法设计,我们决定系统将通过和自己对弈来训练。这样的好处是不需要外界的训练者,只要时间允许,可以让系统产生无限多的训练数据。现在有了一个完整的学习任务。

西洋跳棋学习问题:

- 任务 T : 下西洋跳棋
- 性能标准 P : 世界锦标赛上击败对手的百分比
- 训练经验 E : 和自己进行训练对弈

为了完成这个学习系统的设计,现在需要选择:

- 1) 要学习的知识的确切类型
- 2) 对于这个目标知识的表示
- 3) 一种学习机制

1.2.2 选择目标函数

下一个设计选择是决定要学习的知识的确切类型以及执行程序怎样使用这些知识。我们从一个对于任何棋局都能产生合法(legal)走子的西洋跳棋博弈程序开始。那么,最终的程序仅须学会从这些合法的走子中选择最佳走子。这个学习任务代表了一类任务:合法走子定义了某个已知的巨大搜索空间,但最佳的搜索策略未知。很多最优化问题都可归于此,例如,对于生产过程的调度和控制问题。生产中的每一步都很清楚,但调度这些步骤的最佳策略未知。

学习从合法走子中做出选择,很明显,要学习的信息类型就是一个程序或函数,它对任何给定的棋局能选出最好的走法,可称此函数为 *ChooseMove*,并用记法 $ChooseMove: B \rightarrow M$ 来表示这个函数接收合法棋局集合中的棋盘状态作为输入,并从合法走子集合中产生某个走子作为输出。在关于机器学习的所有讨论中,我们发现把提高任务 T 的性能 P 的问题简化为学习像 *ChooseMove* 这样某个特定的目标函数(target function)的问题是很有益的。所以目标函数的选择是一个关键的设计问题。

尽管在例子中很明显应把 *ChooseMove* 作为目标函数,但我们会发现学习这个目标函数是非常困难的,原因是提供给系统的是间接的训练经验。另外一个可供选择的目标函数是一个评估函数,它为任何给定棋局赋予一个数字评分。可以发现,对于本例,学习这个目标函数更简单。这个目标函数为 V ,并用 $V: B \rightarrow \mathcal{R}$ 来表示 V 把任何合法的棋局从集合 B 映射到某一个实数值(用 \mathcal{R} 来表示实数集合)。我们让这个目标函数 V 给好的棋局赋予较高的评分。如果系统能够成功地学会这个目标函数 V ,那么它便能使用此函数轻松地找到当前棋局的最佳走法。实现的方法是,先产生每一个合法走子的所有后续棋局,然后使用 V 来选取其中最佳的后继棋局,从而选择最佳走子。

对于任意棋局,目标函数 V 的准确值应该是多少呢?当然任何对较好的棋局赋予较高分数的评估函数都适用。然而,最好在那些产生最佳对弈的众多方法中定义一个特定的目标函数 V 。可以看到,这将使得设计一个训练算法变得简单。因此,对于集合 B 中的任意的棋局状态 b ,我们如下定义目标函数 $V(b)$:

- 1) 如果 b 是一最终的胜局,那么 $V(b) = 100$
- 2) 如果 b 是一最终的负局,那么 $V(b) = -100$
- 3) 如果 b 是一最终的和局,那么 $V(b) = 0$
- 4) 如果 b 不是最终棋局,那么 $V(b) = V(b')$,其中 b' 是从 b 开始双方都采取最优对弈后可达到的终局。

然而,由于这个定义的递归性,它的运算效率不高,所以这个定义对于西洋跳棋比赛者不可用。除了无关紧要的前三种终局的情况,对于某一个棋盘状态(情况4), b 要决定它的值 $V(b)$ 需要向前搜索到达终局的所有路线!由于这个定义不能由西洋跳棋程序高效地运算,这个定义被称为不可操作的定义。当前的学习目标是发现一个可操作的定义 V ,它能够被西洋跳棋程序用来在实际的时间限制内评估棋局并选取走法。