

研究生教育书系
信息与电子学科

机器学习方法

Machine Learning Techniques

蒋艳凰
赵强利 编著



電子工業出版社

PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

<http://www.phei.com.cn>

研究生教育书系
信息与电子学科

机器学习方法

蒋艳凰 赵强利 编著

電子工業出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

内 容 简 介

本书比较全面系统地介绍了机器学习的方法和技术,不仅详细阐述了许多经典的学习方法,还讨论了一些有生命力的新理论、新方法。全书共分为 13 章,分别介绍了机器学习的基本概念、最近邻规则、贝叶斯学习、决策树、基于事例推理的学习、关联规则学习、神经网络、支持向量机、遗传算法、集成学习、纠错输出编码、聚类分析、强化学习。各章对原理的叙述力求概念清晰、表达准确,突出理论联系实际,富有启发性,易于理解。

本书可作为高等院校计算机、自动化、电子和通信等专业研究生和高年级本科生的教材和参考书。本书内容对从事人工智能、机器学习、数据挖掘、模式识别等相关领域研究的科技人员具有较好的参考价值。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

机器学习方法/蒋艳凰等编著. —北京:电子工业出版社,2009. 8
(研究生教育书系)
ISBN 978-7-121-09005-9

I. 机… II. 蒋… III. 机器学习 - 研究生 - 教材 IV. TP181

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 091795 号

策划编辑:马 岚

责任编辑:秦淑灵

印 刷:北京市天竺颖华印刷厂

装 订:三河市鑫金马印装有限公司

出版发行:电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编:100036

开 本: 787 × 980 1/16 印张: 18.5 字数: 384 千字

印 次: 2009 年 8 月第 1 次印刷

印 数: 4 000 册 定价: 39.00 元

凡所购买电子工业出版社的图书,如有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系,联系及邮购电话:(010) 88254888。

质量投诉请发邮件至 zlts@ phei. com. cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@ phei. com. cn。

服务热线:(010) 88258888。

反侵权盗版声明

电子工业出版社依法对本作品享有专有出版权。任何未经权利人书面许可，复制、销售或通过信息网络传播本作品的行为；歪曲、篡改、剽窃本作品的行为，均违反《中华人民共和国著作权法》，其行为人应承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。

为了维护市场秩序，保护权利人的合法权益，我社将依法查处和打击侵权盗版的单位和个人。欢迎社会各界人士积极举报侵权盗版行为，本社将奖励举报有功人员，并保证举报人的信息不被泄露。

举报电话：（010）88254396；（010）88258888

传 真：（010）88254397

E-mail : dbqq@phei.com.cn

通信地址：北京市万寿路173信箱

电子工业出版社总编办公室

邮 编：100036

前　　言

自从 1980 年在卡内基 - 梅隆大学举行了第一届机器学习学术研讨会以来,机器学习的研究工作发展很快,不但在计算机科学的众多领域中大显身手,而且成为一些交叉学科的重要支撑技术。目前,机器学习技术已广泛应用于各个方面,例如信息安全、搜索引擎、医学诊断、地质勘探、遥感图像识别、DNA 序列测序、语音和手写识别、战略游戏、机器人运用、证券市场分析等。当前的热点研究方向数据挖掘,正是利用机器学习技术从海量数据中发现有用的知识。可以说,机器学习已成为人工智能的一个核心研究领域,而且已发展为整个计算机学科中最活跃、应用潜力最明显的领域之一。

根据有无经验知识,机器学习方法可以分为三类:监督学习、非监督学习和强化学习。监督学习的过程实际上是在以往数据的基础上概括总结经验的过程,学习系统的输入是有类别标识的训练数据集,学到的经验集成在学习所得到的分类器中,然后利用这些经验去解决以后遇到的问题。非监督学习是一种无经验的学习,既可以直接受对无类别标识的数据进行识别,也可以利用聚类分析的结果预测新样本的类别。强化学习是从环境状态到行为映射的学习,以使系统行为从环境中获得的累积奖赏值最大,它是以环境反馈作为输入且适应环境的机器学习方法。

本书根据上述分类方式,比较全面系统地介绍了机器学习的方法与技术,其内容不仅包括经典的机器学习算法,如贝叶斯学习、决策树、神经网络、聚类分析等,而且涵盖了一些有生命力的新理论、新方法,如支持向量机、纠错输出编码、集成学习、强化学习等。作者在撰写本书时力图清楚地解释关键知识点,并避免冗长难懂的计算,并通过例题进一步加深读者对各种算法的理解。

书中作者的大部分研究工作是在杨学军教授的指导下完成的,在此对杨老师致以由衷的谢意!感谢殷建平教授、陈跃新教授、唐玉华教授、张拥军老师、詹浩博士、易勋博士等,他们为本书的编写和出版提供了许多帮助。感谢电子工业出版社的马岚编辑,她的建议大大提高了本书的质量。感谢国防科技大学计算机学院软件所和计算机所的同事们,在本书撰写期间,他们在工作和生活上给予我们许多关心与支持。

限于作者的水平,书中难免有不妥和谬误之处,敬请读者指正。

作　者
2009 年 7 月

· III ·

目 录

| | |
|------------------------------|----|
| 第1章 绪论 | 1 |
| 1.1 机器学习概念 | 1 |
| 1.2 机器学习系统 | 2 |
| 1.2.1 学习系统模型 | 2 |
| 1.2.2 机器学习系统结构 | 2 |
| 1.3 机器学习方法分类 | 3 |
| 1.3.1 监督学习 | 4 |
| 1.3.2 非监督学习 | 5 |
| 1.3.3 强化学习 | 6 |
| 1.4 一般性定理与规则 | 6 |
| 1.4.1 大多数原则 | 6 |
| 1.4.2 奥卡姆剃刀原理 | 7 |
| 1.4.3 无免费午餐定理 | 8 |
| 1.5 学习算法的评价 | 9 |
| 1.5.1 最短描述长度 | 9 |
| 1.5.2 预测精度分析 | 10 |
| 1.5.3 交叉验证法 | 11 |
| 1.6 本书各章概要 | 11 |
| 第2章 最近邻规则 | 14 |
| 2.1 最近邻分类 | 14 |
| 2.1.1 k -NN 规则的思想 | 14 |
| 2.1.2 k -NN 的距离度量 | 15 |
| 2.1.3 k -NN 算法应用示例 | 16 |
| 2.2 k -NN 算法的缺陷及其改进 | 17 |
| 2.2.1 k -NN 算法的计算复杂度 | 17 |
| 2.2.2 降维法 | 18 |
| 2.2.3 预建结构法 | 18 |
| 2.2.4 训练集裁减法 | 19 |
| 第3章 贝叶斯学习 | 20 |
| 3.1 概率论基础 | 20 |
| 3.1.1 随机事件 | 20 |

| | |
|-------------------------|-----------|
| 3.1.2 事件间的关系与运算 | 21 |
| 3.1.3 概率的定义与性质 | 22 |
| 3.1.4 统计概率 | 22 |
| 3.1.5 条件概率 | 23 |
| 3.1.6 概率密度 | 24 |
| 3.1.7 正态分布 | 24 |
| 3.2 贝叶斯定理 | 24 |
| 3.3 贝叶斯定理和概念学习 | 26 |
| 3.4 极大似然和最小误差平方假设 | 28 |
| 3.5 贝叶斯最优分类器 | 29 |
| 3.6 简单贝叶斯分类器 | 30 |
| 3.7 贝叶斯网络 | 31 |
| 3.7.1 贝叶斯网络基本概念 | 32 |
| 3.7.2 因果关系网 | 33 |
| 3.7.3 贝叶斯网络 | 33 |
| 3.7.4 联合概率 | 35 |
| 3.7.5 D 分离 | 35 |
| 3.7.6 贝叶斯网络的推理模式 | 38 |
| 3.8 主观贝叶斯方法 | 40 |
| 3.8.1 规则的不确定性 | 41 |
| 3.8.2 证据的不确定性 | 43 |
| 3.8.3 推理计算 | 44 |
| 3.9 贝叶斯学习的优缺点 | 47 |
| 第4章 决策树 | 49 |
| 4.1 决策树的创建 | 49 |
| 4.1.1 分而治之的思想 | 49 |
| 4.1.2 决策树生成算法 | 50 |
| 4.2 分枝划分标准 | 51 |
| 4.2.1 测试条件 | 51 |
| 4.2.2 直接划分法 | 52 |
| 4.2.3 信息熵增益 | 53 |
| 4.2.4 增益比 | 57 |
| 4.2.5 Gini 系数 | 59 |
| 4.2.6 最短距离划分 | 60 |
| 4.2.7 最短描述长度 | 62 |
| 4.3 连续属性离散化 | 65 |

| | |
|----------------------|-----|
| 4.3.1 离散化问题描述 | 66 |
| 4.3.2 离散化方法分类 | 67 |
| 4.3.3 典型离散化处理过程 | 67 |
| 4.3.4 常用离散化方法介绍 | 68 |
| 4.3.5 离散化方法的一种归类模式 | 71 |
| 4.4 决策树剪枝 | 72 |
| 4.4.1 剪枝问题描述 | 72 |
| 4.4.2 预剪枝技术 | 73 |
| 4.4.3 后剪枝技术 | 74 |
| 4.5 动态离散化方法 RCAT | 78 |
| 4.5.1 RCAT 算法思想 | 78 |
| 4.5.2 属性变换 | 79 |
| 4.5.3 区间离散化 | 80 |
| 4.5.4 区间边缘优化 | 81 |
| 4.6 二分决策树系统 Btrees | 84 |
| 4.6.1 二分树林结构 | 84 |
| 4.6.2 多类问题扩展 | 85 |
| 4.6.3 决策树剪枝 | 86 |
| 4.6.4 实验结果 | 87 |
| 4.7 决策树规则化 | 94 |
| 4.7.1 问题提出 | 94 |
| 4.7.2 单个规则的泛化 | 96 |
| 4.7.3 规则集的分类行为 | 100 |
| 第5章 基于事例推理的学习 | 105 |
| 5.1 CBR 概念的引入 | 105 |
| 5.1.1 基于规则推理系统的缺陷 | 105 |
| 5.1.2 CBR 的概念 | 106 |
| 5.1.3 CBR 系统的特点 | 107 |
| 5.2 CBR 的描述性框架 | 108 |
| 5.2.1 CBR 循环 | 108 |
| 5.2.2 CBR 任务层次 | 109 |
| 5.3 CBR 方法描述 | 110 |
| 5.3.1 事例表示 | 110 |
| 5.3.2 事例检索 | 113 |
| 5.3.3 事例重用 | 114 |
| 5.3.4 事例修订 | 115 |

| | |
|--------------------------|------------|
| 5.3.5 事例再生 | 116 |
| 5.4 演绎检索 | 116 |
| 5.4.1 基于决策树的事例表示 | 117 |
| 5.4.2 计算新事例索引值 | 118 |
| 5.4.3 选择事例 | 118 |
| 5.5 最近邻检索 | 120 |
| 5.5.1 基于加权的事例表示 | 120 |
| 5.5.2 相似度计算 | 120 |
| 第6章 关联规则学习 | 123 |
| 6.1 相关概念介绍 | 123 |
| 6.1.1 关联规则的基本概念 | 123 |
| 6.1.2 关联规则的分类 | 125 |
| 6.2 关联规则学习 | 125 |
| 6.2.1 Apriori 算法 | 126 |
| 6.2.2 FP-Growth 算法 | 130 |
| 6.3 多层关联规则学习 | 134 |
| 6.3.1 多层关联规则概念 | 134 |
| 6.3.2 多层关联规则学习 | 135 |
| 6.4 关联规则与相关性分析 | 138 |
| 6.4.1 问题的提出 | 138 |
| 6.4.2 相关性分析 | 139 |
| 6.4.3 相关规则学习 | 140 |
| 6.5 关联学习中的约束 | 140 |
| 第7章 神经网络 | 142 |
| 7.1 神经网络概述 | 142 |
| 7.1.1 神经网络基本模型 | 142 |
| 7.1.2 神经网络学习方法分类 | 144 |
| 7.2 常用神经网络介绍 | 145 |
| 7.2.1 感知机 | 145 |
| 7.2.2 BP 神经网络 | 146 |
| 7.2.3 径向基函数网络 | 147 |
| 7.2.4 Hopfield 网络 | 149 |
| 7.2.5 玻尔兹曼机 | 151 |
| 7.2.6 自组织特征映射网络 | 153 |
| 7.3 BPNN 的快速学习算法 | 155 |
| 7.3.1 动量项学习算法 | 155 |

| | |
|-------------------|------------|
| 7.3.2 RPROP 学习算法 | 156 |
| 7.4 BPNN 的结构化扩展 | 157 |
| 7.4.1 结构化神经网络 SNN | 158 |
| 7.4.2 网络行为解释 | 159 |
| 第8章 支持向量机 | 163 |
| 8.1 核函数和特征空间 | 163 |
| 8.1.1 特征空间中的学习 | 163 |
| 8.1.2 核函数的定义 | 165 |
| 8.1.3 核函数的性质 | 166 |
| 8.2 构造核函数 | 168 |
| 8.2.1 由核函数构造核函数 | 168 |
| 8.2.2 由特征构造核函数 | 168 |
| 8.3 常用的核函数 | 169 |
| 8.4 VC 理论 | 170 |
| 8.4.1 PAC 学习模型 | 170 |
| 8.4.2 VC 理论简介 | 171 |
| 8.5 SVM 基本原理 | 172 |
| 8.5.1 SVM 方法的特点 | 173 |
| 8.5.2 线性情况 | 173 |
| 8.5.3 非线性情况 | 176 |
| 8.6 支持向量机算法扩展 | 177 |
| 8.6.1 多类别问题的扩展 | 177 |
| 8.6.2 海量样本数据的处理 | 178 |
| 8.7 支持向量机应用示例 | 179 |
| 第9章 遗传算法 | 182 |
| 9.1 基本遗传算法 | 182 |
| 9.1.1 编码 | 182 |
| 9.1.2 适应度函数 | 183 |
| 9.1.3 遗传算子 | 183 |
| 9.1.4 运行参数 | 187 |
| 9.2 执行过程及应用示例 | 187 |
| 9.2.1 遗传算法的执行过程 | 187 |
| 9.2.2 应用示例 | 188 |
| 9.3 遗传算法的数学基础 | 189 |
| 9.3.1 模式定理 | 189 |
| 9.3.2 建筑块假说 | 193 |

| | |
|---------------------------------|------------|
| 9.3.3 内在并行性 | 194 |
| 9.4 遗传算法的收敛性分析 | 195 |
| 9.5 遗传算法的局限性及其改进措施 | 195 |
| 9.5.1 遗传算法的局限性 | 195 |
| 9.5.2 遗传算法的改进措施 | 197 |
| 9.6 遗传算法的特点 | 199 |
| 9.7 遗传规划 | 200 |
| 9.7.1 遗传规划概念 | 200 |
| 9.7.2 遗传规划的特点 | 201 |
| 9.7.3 遗传规划的发展动向 | 202 |
| 9.8 基于遗传算法的机器分类 | 203 |
| 9.8.1 遗传进化与机器分类 | 203 |
| 9.8.2 遗传算法应用示例 | 204 |
| 9.8.3 遗传规划应用示例 | 205 |
| 第 10 章 集成学习 | 207 |
| 10.1 集成学习的概念 | 207 |
| 10.2 基本分类器的构造 | 208 |
| 10.2.1 Bagging | 208 |
| 10.2.2 Adaboost | 210 |
| 10.2.3 纠错输出编码 | 211 |
| 10.2.4 随机因素法 | 211 |
| 10.2.5 异构的学习方法 | 211 |
| 10.3 分类器集成方法 | 212 |
| 10.3.1 投票法 | 212 |
| 10.3.2 栈式集成法 | 213 |
| 10.3.3 级联组合法 | 214 |
| 10.3.4 算法相关法 | 215 |
| 10.4 选择性集成 | 215 |
| 10.4.1 选择性集成理论 | 216 |
| 10.4.2 GASEN 算法 | 217 |
| 10.4.3 前向选择算法 | 218 |
| 10.5 集成学习的性能 | 220 |
| 第 11 章 基于纠错编码的机器学习 | 222 |
| 11.1 纠错输出编码 | 222 |
| 11.1.1 纠错输出编码的思想 | 222 |
| 11.1.2 纠错输出码的特性分析 | 224 |

| | |
|-------------------------------------|------------|
| 11.1.3 常用的编码方法及其特点 | 225 |
| 11.2 BCH 编码算法 | 227 |
| 11.2.1 相关定义 | 227 |
| 11.2.2 循环码及其构造方法 | 228 |
| 11.2.3 BCH 码的设计 | 229 |
| 11.3 搜索编码算法 | 231 |
| 11.3.1 搜索编码算法描述 | 231 |
| 11.3.2 搜索输出码的性质 | 232 |
| 11.4 基于纠错输出编码的监督分类技术 | 237 |
| 11.4.1 纠错输出编码与分类精度 | 237 |
| 11.4.2 基于搜索编码的监督分类技术 | 238 |
| 11.4.3 决策方法 | 239 |
| 11.5 应用示例 | 240 |
| 11.5.1 搜索编码法在简单贝叶斯分类中的应用 | 241 |
| 11.5.2 搜索编码法在 BP 神经网络中的应用 | 244 |
| 第 12 章 聚类分析 | 246 |
| 12.1 聚类分析概述 | 246 |
| 12.1.1 聚类分析的基本概念 | 246 |
| 12.1.2 相似性测量 | 246 |
| 12.1.3 聚类评价准则 | 248 |
| 12.2 类别数目未知时的聚类方法 | 249 |
| 12.2.1 自适应样本集构造法 | 250 |
| 12.2.2 Batchelor 和 Wilkins 算法 | 251 |
| 12.3 类别数目已知时的聚类方法 | 252 |
| 12.3.1 层次聚类法 | 252 |
| 12.3.2 k -均值聚类算法 | 253 |
| 12.3.3 ISODATA 算法 | 255 |
| 12.4 基于核构造的聚类法 | 257 |
| 12.5 模糊聚类 | 258 |
| 12.5.1 隶属度函数 | 258 |
| 12.5.2 普通的等价关系 | 259 |
| 12.5.3 基于隶属度的 FCM 算法 | 260 |
| 12.5.4 基于模糊等价关系的聚类算法 | 261 |
| 12.5.5 基于最大模糊支撑树的聚类算法 | 264 |
| 第 13 章 强化学习 | 266 |
| 13.1 强化学习的概念 | 266 |

| | |
|----------------|-----|
| 13.2 强化学习的基本知识 | 266 |
| 13.2.1 问题假设 | 266 |
| 13.2.2 目标函数 | 267 |
| 13.2.3 问题类型 | 268 |
| 13.2.4 强化信号 | 269 |
| 13.2.5 状态值函数 | 269 |
| 13.3 TD 算法 | 270 |
| 13.4 Q-学习 | 271 |
| 13.4.1 Q-学习算法 | 271 |
| 13.4.2 应用示例 | 272 |
| 13.5 强化学习的局限性 | 274 |
| 附录 A 数据集描述 | 275 |
| 参考文献 | 278 |

第1章 緒論

机器学习最初的研究动机是让计算机系统具有人的学习能力,以便实现人工智能。随着计算机技术的日益发展,人类收集数据、存储数据的能力有了极大提高,无论科学研究还是社会生活,各个领域都积累了大量的数据。如何对这些数据进行分析,从中发现蕴涵的规律,几乎成为所有领域的共同需求,这使得机器学习技术受到日益广泛的关注。目前,机器学习成为继专家系统之后人工智能应用的又一重要研究领域,且已发展为计算机学科中最活跃、应用潜力最明显的领域之一。

1.1 机器学习概念

一个人从婴幼儿开始就逐渐发展语言能力,这个过程包含了各种学习过程:记忆、模仿、归纳、类比和发现等。我们能够轻而易举地识别人脸,分辨语音,阅读文字,判定水果的成熟,这都是人类学习行为在起作用。

我们以一个例子来简单形象地描述一个学习过程。考虑一个孩子学习一种语言模式,首先,孩子听见妈妈说了一句话“爷爷已经吃完了”,这句话引起了他的注意;然后他逐渐发现大人说“…听完了”、“…说完了”、“…写完了”、“…算完了”等,过不了多久,小孩自己就能够说出“…看完了”、“…画完了”之类的话,这说明小孩已经会用“…<动词>完了”的语言模式来表示某一动作的结束。

图 1.1 给出了学习这一语言模式的过程。

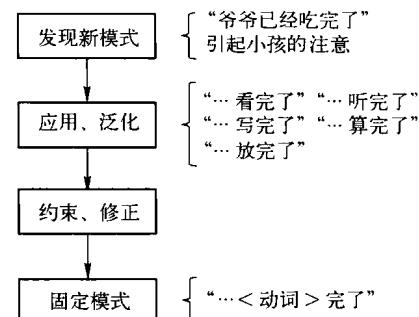


图 1.1 学习新语言模式的过程

学习是人类具有的一种重要智能行为,我们可以列出很多学习的例子,但是关于学习的明确定义,长期以来却众说纷纭,社会学家、逻辑学家和心理学家各有不同的看法。按照人工智能大师 H. A. Simon 的观点,“学习”就是系统在不断重复的工作中对本身能力的增强或者改进,结果是系统在下一次执行同样任务或类似任务时,比现在做得更好或效率更高。简而言之,“学习”指系统改进其性能的任何过程。

正是由于人类具有强大的学习能力,人们才会很自然地想到去设计和制造一台具有这种能力的机器,然而,貌似简单的识别行为背后却是非常复杂的处理机制,这种处理机制就是机器学习理论。

什么叫做机器学习？这一概念至今也没有统一的定义。一种广义的定义是：机器学习是研究如何使用机器来模拟人类学习活动的一门学科。稍微严格的定义是：机器学习是一门研究机器获取新知识和新技能，并识别现有知识的学问。

1.2 机器学习系统

1.2.1 学习系统模型

一个问题求解系统可以定义为三元组的形式： (I, T, O) ，其中， I 为问题的输入空间； O 为任务的求解空间； T 为问题的求解机制，从某种意义上讲，它是一个 $I \rightarrow O$ 的函数。

按照 Tom M. Mitchell 的观点，给定某类任务 T 、与 T 相关的性能 P 和经验 E ，计算机程序从经验 E 中学习，用学习的结果改善性能 P ，从而实现自我完善，则称该程序具有学习能力。因此，一个机器学习系统就是一个问题求解系统，但是又有自身的特殊性，机器学习系统可描述为四元组的形式：

$$(E_m, T_m, O_m, V)$$

其中，

- E_m ：训练经验，是学习系统的输入，可表示为 (I, O) ， I 为问题求解系统的输入， O 为其输出；
- T_m ：学习任务，与问题求解任务密切相关，如学习问题求解系统的控制参数、问题求解策略、分类规则和一般假设等。
- O_m ：学习系统的输出，问题求解执行部件所使用的假设。
- V ：关于问题求解系统性能 P 的评估， P 可以是全局的或局部的。学习系统的目标是将 O_m 用于问题求解系统时，性能 P 得到改善。

例如，对于西洋跳棋学习问题， T 为西洋跳棋的走子策略， E 为对弈时的走子序列及输赢结果， P 为比赛中击败对手的百分比。对于手写字符识别的学习问题， T 为图像与字符集的映射（分类规则）， E 为已知分类的手写字符图像的数据库， P 为分类的正确率。

1.2.2 机器学习系统结构

图 1.2 给出了机器学习系统的基本结构。环境向系统的学习部分提供某些信息作为训练数据，学习部分利用选取的学习算法对获得的信息进行学习，学习过程中可能对环境产生影响，并从环境中获得新的训练数据。学习结束后，获得的知识根据不同的学习算法表示成不同的形式，如规则库、表达式、表格或神经网络等，我们统称其

为知识库。执行部分主要是利用学习的结果对待识别数据进行处理,获得相应的识别结果,同时把执行结果反馈给学习部分,以便进一步学习,改进系统性能。

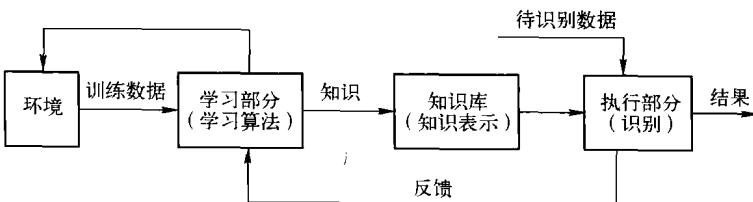


图 1.2 机器学习系统的基本结构

影响学习系统设计的最重要因素是环境向系统提供的信息,即学习模型中的 E_m , E_m 的质量直接影响学习结果。知识库里存放的是指导执行部分动作的一般原则,但环境向学习系统提供的信息却是各种各样的。如果信息的质量比较高,与一般原则的差别比较小,则学习部分比较容易处理;如果向学习系统提供的是杂乱无章的指导执行动作的具体信息,则学习系统需要在获得足够数据之后,删除不必要的细节,进行总结推广,形成指导动作的一般原则,这样学习部分的任务就比较繁重,设计起来也较为困难。

由于学习系统获得的知识往往是不完全的,它总结出来的规律可能正确,也可能不正确,这要通过执行效果加以检验。正确的学习结果能使系统的效能提高,应予保留;不正确的学习结果应予修改或从知识库中删除。

知识库是影响学习系统设计的第二个因素。知识的表示有多种形式,这些表示各有各的特点,在选择表示方式时要兼顾以下 4 个方面:①表达能力强;②易于推理;③容易修改知识库;④知识表示易于扩展。知识库的表示与具体学习算法相关。

执行部分是整个学习系统的核心,它除了包括学习结果的具体应用外,还涵盖了对学习结果 O_m 的评价 V 。与执行部分有关的问题有 3 个:复杂性、反馈能力和透明性。复杂性是指执行部分的复杂度,例如,一个简单的任务可能是按照单一的概念或规则进行预测,比较复杂的任务可能涉及多个概念和上百条规则。反馈能力是指如何评价学习部分获取的假设,通常是由教师(见第 1.3.1 节)提出外部执行标准,观察执行部分的结果与该标准的差异,并将相应结果返回给学习部分,以便进一步完善学习假设。透明性即要求根据执行部分的结果可以很容易地对知识库进行评价,例如,下完一盘棋后根据最后的输赢来判断每一步棋的优劣是很困难的,但若记录了下每一步棋后的局势,根据局势来判断每一步棋的优劣则相对容易和直观。

1.3 机器学习方法分类

根据输入的训练数据中包含的经验情况,可以将机器学习方法分为以下三类:监督学习(supervised learning)、非监督学习(unsupervised learning)和强化学习(reinforcement learning)。

forcement learning)。监督学习的训练数据中包括样本的真实输出,因此可以利用真实输出来评价学习结果的优劣,如医学诊断问题中已知训练样本的疾病类别,市场价格预测问题中已知训练样本的真实价格等。非监督学习的训练数据中没有经验知识,学习过程中需要建立对输出的评价方法。强化学习的经验知识来自学习过程中环境的反馈,有时有一定的延时。下面对这三种学习方法进行简单描述。

1.3.1 监督学习

监督学习又称为有教师学习,所谓“教师”即对一组给定的输入提供应有的输出结果,也就是对训练样本集中的每个样本都能提供其真实输出,有时还提供预测错误的代价。监督学习是最重要的机器学习方法,已经产生了许多经典的学习算法,如决策树、人工神经网络、贝叶斯网络和支持向量机等。

我们将样本 X 表示为属性向量的形式,即

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_l)$$

其中,元素 x_j ($1 \leq j \leq l$) 为样本 X 在第 j 个属性上的值; l 为属性的个数,各属性可以是离散或连续属性。另外,定义样本的属性空间为 \mathbf{X} ,监督学习的求解空间为 \mathbf{Y}, \mathbf{N} 为自然数集合。根据上述符号定义,可将监督学习问题描述为:给定一个已知类别的样本集合 $LS = \{(X_i, y_i) | X_i \in \mathbf{X}, y_i \in \mathbf{Y}, i \in \mathbf{N}\}$, LS 确定了属性向量 X 与其输出 y 之间的某种未知函数关系 $y = f(X)$,利用监督学习算法 \mathfrak{F} 对 LS 中的样本进行学习,得到学习器 $\tilde{f} = \tilde{f}(LS)$,用于近似表示该未知函数。

监督学习可以用于分类问题和回归问题。对于分类问题,输出空间 \mathbf{Y} 是一个类别的集合 $CS = \{c_1, c_2, \dots, c_m\}$, m 表示类别的个数,每个元素 c_i 对应样本可能所属的某个类别,例如,医学诊断问题就是一个分类问题;对于回归问题,输出空间 \mathbf{Y} 中的元素一般是一个实数值,如市场价格预测问题。由于这两类问题的求解方法基本相同,在本书的讨论中,对各种监督学习算法的描述主要针对分类问题展开,并将其学习结果称为分类器(classifier)。监督学习结束后,可利用该分类器对未知类别的样本进行类别预测。

监督学习系统通常涉及如下几个步骤:数据采集、属性选择和提取、模型选择、监督训练、分类器评价,如图 1.3 所示。由于每个步骤都会影响到监督学习的性能,故这些步骤可能需要重复,以便获得更好的学习结果。

对于一个学习系统而言,为了保证系统工作时具有良好的性能,必须采集足够多的原始样本数据。数据采集与具体的应用领域相关,它整个系统总费用中占的比重是相当惊人的。

根据监督学习问题领域的性质,选择具有明显区分意义的属性,是系统设计过程中非常关键的问题。在属性选择和提取过程中,我们总是希望发现那些容易提取,对不相关变形保持不变,对噪声不敏感,以及对区分不同类别的样本很有效的属性集。