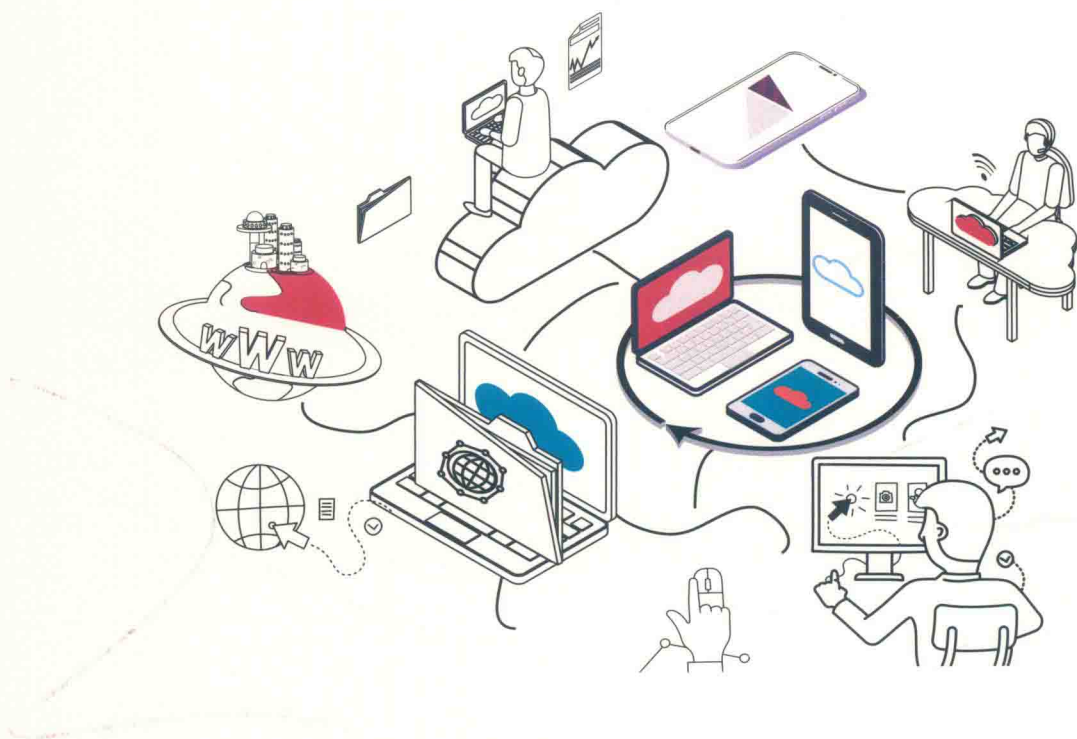


一书读懂机器学习算法的原理
学会训练自己的模型，编程实现自己的算法

微课版



机器学习

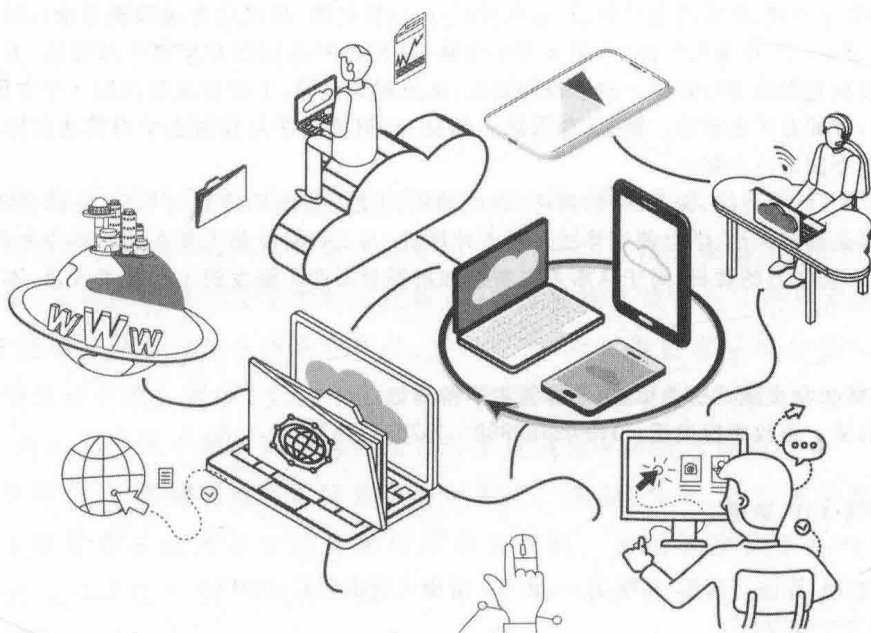
原理、算法与应用

雷明◎著

- ◎ 讲解**54**种算法，算法涵盖有监督学习、无监督学习和强化学习。
- ◎ 配有**20**个实验程序，包含**17**份源代码，帮助读者正确地掌握算法与开源库的使用。
- ◎ 配有**35**个讲解视频，对复杂、难以理解的知识点有清晰透彻的讲解。



清华大学出版社



机器学习

原理、算法与应用



雷明◎著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

机器学习是当前解决很多人工智能问题的核心技术,自2012年以来,深度学习的出现带来了人工智能复兴。本书是机器学习和深度学习领域的入门与提高教材,紧密结合工程实践与应用,系统、深入地讲述机器学习与深度学习的主流方法与理论。全书由23章组成,共分为三大部分。第1~3章为第一部分,介绍机器学习的基本原理、所需的数学知识(包括微积分、线性代数、最优化方法和概率论),以及机器学习中的核心概念。第4~22章为第二部分,是本书的主体,介绍各种常用的有监督学习算法、无监督学习算法、半监督学习算法和强化学习算法。对于每种算法,从原理与推导、工程实现和应用3个方面进行介绍,对于大多数算法,都配有实验程序。第23章为第三部分,介绍机器学习和深度学习算法实际应用时面临的问题,并给出典型的解决方案。

本书理论推导与证明详细、深入,结构清晰,详细地讲述主要算法的原理与细节,让读者不仅知其然,还知其所以然,真正理解算法、学会使用算法。对于计算机、人工智能及相关专业的本科生和研究生,这是一本适合入门与系统学习的教材;对于从事人工智能和机器学习产品研发的工程技术人员,本书也具有很强的参考价值。

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:原理、算法与应用/雷明著. —北京:清华大学出版社,2019
ISBN 978-7-302-53234-7

I. ①机… II. ①雷… III. ①机器学习 IV. ①TP181

中国版本图书馆CIP数据核字(2019)第129395号

责任编辑:白立军

封面设计:杨玉兰

责任校对:焦丽丽

责任印制:杨 艳

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:三河市龙大印装有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm

印 张:26

彩 插:6

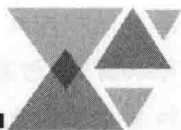
字 数:648千字

版 次:2019年9月第1版

印 次:2019年9月第1次印刷

定 价:88.00元

产品编号:083938-01



近年来,随着 IBM 沃森、谷歌 DeepMind AlphaGo 等新型人机系统的横空出世,人工智能日益受到全社会的关注,媒体报道热度空前。事实上,伴随大数据、深度学习、智能芯片等技术的成熟、政府的扶持以及资本的持续投入,一方面在前端催生了刷脸支付、智能音箱、以图搜图、智能翻译等新的商业场景和产品;另一方面,人工智能在后端也正深刻地改变着既有的技术模式和流程。例如,在端对端的深度神经网络中,一些传统的特征工程模块被弱化乃至取代;原本基于单步预测的个性化推荐引擎被强化学习技术改造。

放眼世界,人工智能正成为国际竞争的新焦点。英国、美国、新加坡等国家也各自提出了推动人工智能相关技术与产业发展的纲要与规划。美国国防部高级研究计划局则于 2018 年 9 月宣布将投入 20 亿美元开展一项名为 AI Next 的计划,其旨在加速人工智能研究。MIT 则计划斥资 10 亿美元,建设新的计算机学院,致力于将人工智能技术用于该校的所有研究领域。在国内,国务院于 2017 年 7 月发布了《国务院关于印发新一代人工智能发展规划的通知》。清华大学、上海交通大学、南京大学等国内顶级高校,也陆续成立了自己的人工智能研究院。在工业界,商汤、旷视、依图等人工智能独角兽企业,也带动了人工智能技术在国内的落地与发展。

从学术角度来看,以 1956 年达特茅斯会议作为人工智能学科公认的起点,60 多年的沉浮史见证了多次起伏,诞生了多个思想学派。近 30 年的人工智能发展,在作者看来,机器学习(包括深度学习)成为这期间的主流思想和技术。支持向量机、随机森林、决策树、卷积神经网络、循环神经网络、生成对抗网络和强化学习等方法层出不穷,构成了当代人工智能的华丽篇章。与此同时,大量机器学习开源框架和成型工具对用户日益“友好”。初学者往往不需要太多的数学基础和编程能力,简单调用接口即可完成一些人工智能任务。这些条件往往可以快速给予初学者信心,鼓励更多人才进入人工智能相关领域,推动了人工智能的应用。同时,一些从业者对开源软件或者框架的过度依赖,乃至抱着一种不求甚解的态度,不去理解和掌握主要算法和模型背后的原理和数学基础。如此一来,个体的技术发展潜力受限,而整个行业的持续发展也将缺乏高层次人才基础。事实上,尽管人工智能算法工具日益傻瓜化,甚至出现了 AutoML 这样的自动化机器学习技术,然而深刻理解算法背后的机理,可对具体问题选择合适模型、训练算法和超参数的能力,充分体现机器学习从业者的创新能力和解决问题的能力。

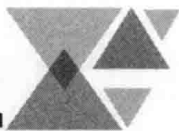
本人全面阅读了雷明老师的作品,在语言精确性和条理性、内容全面性和完整性、理论深度以及工程实践指导方面,不啻为集专业性与通俗性为一体的上乘之作。特别是在公式

步步推导的细节方面,有非常仔细的表述,给人一种踏实的感觉。我相信通过本书,读者将可以高效、细致、全面地掌握机器学习的主流知识点和整体脉络。在碰到具体问题时,本书的专业内容也方便读者进行快速查阅和巩固。

人工智能的车轮滚滚向前,从业人员都力图赶上趋势的发展。开卷有益,希望本书能够帮助读者打好机器学习的内功基础,缓解部分从业者内心的焦虑。相信翻看此书时的获得感和充实感,会为读者留下一段美好的回忆。

上海交通大学特别研究员 严骏驰

2018年11月于广州白云国际会议中心



自 2012 年以来,得益于深度学习技术的迅猛进步,人工智能在学术界与产业界都迎来了蓬勃发展。深度学习现阶段较好地解决了图像识别、声音识别等感知类问题。与之相对应的是优秀教材的缺乏,由于技术的快速进步,此前的经典书籍面临内容老化问题。本书旨在帮助人工智能相关方向的在校学生与工程技术人员更好地理解和掌握机器学习技术,本书的前身为 2019 年 1 月出版的《机器学习与应用》,笔者对该书做了大量优化,删除了开源库代码分析,增加了若干重要算法的讲解,将 C++ 版的示例程序改为 Python 版。

全书从原理与应用两个角度进行讲述。系统而深入地讲解了目前主要的机器学习与深度学习算法,包括有监督学习、无监督学习、半监督学习、强化学习 4 种类型。对于主要的算法,分为理论、实验程序、实际应用 3 部分进行讲解。对于核心的推导和证明,笔者都详细地给出。

学习本书需要读者具有数学(包括微积分、线性代数、概率论等本科数学知识,以及最优化方法)与程序设计(至少掌握一门编程语言)的基础知识。

本书对深度学习算法与理论做了重点与深入的讲解。对于卷积神经网络、循环神经网络等应用最为广泛的方法,详细地介绍了它们的原理与实现,并分析了截至 2017 年的主要学术论文,保证了本书内容能够反映学术界与工程界的新成果。

机器学习是范围极广、内容庞杂的一门学科,技术发展日新月异,由于笔者的水平与经验有限,书中难免有错误与理解不到位的地方,敬请读者指正!

雷 明

2019 年 6 月



第一部分 基本概念与数学知识

第 1 章 机器学习简介	3
1.1 机器学习是什么	3
1.1.1 一个简单的例子	3
1.1.2 为什么需要机器学习	5
1.2 典型应用	7
1.2.1 语音识别	7
1.2.2 人脸检测	8
1.2.3 人机对弈	9
1.2.4 机器翻译	10
1.2.5 自动驾驶	11
1.3 发展历程	11
1.3.1 历史成就	11
1.3.2 当前进展	12
1.4 关于本书	13
参考文献	13
第 2 章 数学知识	15
2.1 微积分和线性代数	15
2.1.1 导数	15
2.1.2 向量与矩阵	17
2.1.3 偏导数与梯度	19
2.1.4 雅可比矩阵	20
2.1.5 Hessian 矩阵	21
2.1.6 泰勒展开	22
2.1.7 行列式	22
2.1.8 特征值与特征向量	23
2.1.9 奇异值分解	24
2.1.10 二次型	24
2.1.11 向量与矩阵求导	24
2.2 最优化方法	25

2.2.1	梯度下降法	25
2.2.2	牛顿法	26
2.2.3	坐标下降法	27
2.2.4	拉格朗日乘数法	28
2.2.5	凸优化	28
2.2.6	拉格朗日对偶	32
2.2.7	KKT 条件	34
2.2.8	拟牛顿法	35
2.2.9	面临的问题	36
2.3	概率论	37
2.3.1	随机事件与概率	37
2.3.2	条件概率	37
2.3.3	随机变量	38
2.3.4	数学期望与方差	39
2.3.5	随机向量	39
2.3.6	最大似然估计	40
	参考文献	41
第3章	基本概念	42
3.1	算法分类	42
3.1.1	监督信号	42
3.1.2	分类问题与回归问题	43
3.1.3	判别模型与生成模型	45
3.1.4	强化学习	45
3.2	模型评价指标	46
3.2.1	精度与召回率	46
3.2.2	ROC 曲线	46
3.2.3	混淆矩阵	48
3.2.4	交叉验证	48
3.3	模型选择	48
3.3.1	过拟合与欠拟合	48
3.3.2	偏差与方差分解	49
3.3.3	正则化	50
	参考文献	52

第二部分 主要的机器学习算法与理论

第4章	贝叶斯分类器	55
4.1	贝叶斯决策	55

4.2 朴素贝叶斯分类器	56
4.2.1 离散型特征	56
4.2.2 连续型特征	57
4.3 正态贝叶斯分类器	57
4.3.1 训练算法	57
4.3.2 预测算法	58
4.4 实验程序	59
4.5 应用	61
参考文献	61
第5章 决策树	62
5.1 树形决策过程	62
5.2 分类与回归树	63
5.3 训练算法	64
5.3.1 递归分裂过程	64
5.3.2 寻找最佳分裂	64
5.3.3 叶子节点值的设定	67
5.3.4 属性缺失问题	67
5.3.5 剪枝算法	68
5.3.6 训练算法的流程	69
5.3.7 计算变量的重要性	70
5.4 实验程序	70
5.5 应用	71
参考文献	71
第6章 k 近邻算法	72
6.1 基本概念	72
6.2 预测算法	72
6.3 距离定义	73
6.3.1 常用距离定义	74
6.3.2 距离度量学习	74
6.4 实验程序	75
6.5 应用	76
参考文献	76
第7章 数据降维	78
7.1 主成分分析	78
7.1.1 数据降维问题	78
7.1.2 计算投影矩阵	78

7.1.3	向量降维	81
7.1.4	向量重构	81
7.2	流形学习	81
7.2.1	局部线性嵌入	82
7.2.2	拉普拉斯特征映射	83
7.2.3	局部保持投影	86
7.2.4	等距映射	87
7.2.5	随机近邻嵌入	88
7.2.6	t 分布随机近邻嵌入	89
7.3	实验程序	90
7.4	应用	91
	参考文献	91
第 8 章	线性判别分析	92
8.1	用投影进行分类	92
8.2	投影矩阵	92
8.2.1	一维的情况	92
8.2.2	推广到高维	94
8.3	实验程序	96
8.4	应用	96
	参考文献	97
第 9 章	人工神经网络	98
9.1	多层前馈型神经网络	98
9.1.1	神经元	98
9.1.2	网络结构	99
9.1.3	正向传播算法	100
9.2	反向传播算法	101
9.2.1	一个简单的例子	101
9.2.2	完整的算法	105
9.3	实验程序	109
9.4	理论解释	110
9.4.1	数学性质	110
9.4.2	与神经系统的关系	111
9.5	面临的问题	111
9.5.1	梯度消失	111
9.5.2	退化	111
9.5.3	局部极小值	111
9.5.4	鞍点	111

9.6	实现细节问题	112
9.6.1	输入值与输出值	112
9.6.2	网络规模	112
9.6.3	激活函数	112
9.6.4	损失函数	113
9.6.5	权重初始化	113
9.6.6	正则化	113
9.6.7	学习率的设定	114
9.6.8	动量项	114
9.7	应用	114
	参考文献	115
第 10 章	支持向量机	118
10.1	线性分类器	118
10.1.1	线性分类器概述	118
10.1.2	分类间隔	118
10.2	线性可分的问题	119
10.2.1	原问题	119
10.2.2	对偶问题	120
10.3	线性不可分的问题	123
10.3.1	原问题	123
10.3.2	对偶问题	123
10.4	核映射与核函数	126
10.5	SMO 算法	129
10.5.1	求解子问题	129
10.5.2	优化变量的选择	132
10.6	多分类问题	133
10.7	实验程序	134
10.8	libsvm 简介	136
10.8.1	求解算法	137
10.8.2	库的使用	140
10.9	应用	142
	参考文献	143
第 11 章	线性模型	145
11.1	logistic 回归	145
11.1.1	第一种表述	145
11.1.2	第二种表述	147
11.1.3	L2 正则化原问题	148

11.1.4	L2 正则化对偶问题	151
11.1.5	L1 正则化原问题	152
11.1.6	实验程序	154
11.2	线性支持向量机	156
11.2.1	L2 正则化 L1-loss SVC 原问题	156
11.2.2	L2 正则化 L2-loss SVC 原问题	156
11.2.3	L2 正则化 SVC 对偶问题	157
11.2.4	L1 正则化 L2-loss SVC 原问题	158
11.2.5	多类线性支持向量机	158
11.2.6	实验程序	160
11.3	liblinear 简介	160
11.3.1	求解的问题	161
11.3.2	库的使用	161
11.4	softmax 回归	162
11.5	应用	164
	参考文献	165
第 12 章	随机森林	166
12.1	集成学习	166
12.1.1	随机抽样	166
12.1.2	Bagging 算法	167
12.2	随机森林概述	167
12.3	训练算法	167
12.4	变量的重要性	168
12.5	实验程序	169
12.6	应用	169
	参考文献	169
第 13 章	Boosting 算法	171
13.1	AdaBoost 算法	171
13.1.1	强分类器与弱分类器	171
13.1.2	训练算法	172
13.1.3	训练误差分析	174
13.2	广义加法模型	176
13.3	各种 AdaBoost 算法	177
13.3.1	离散型 AdaBoost	177
13.3.2	实数型 AdaBoost	179
13.3.3	LogitBoost	180
13.3.4	Gentle 型 AdaBoost	181

13.4	实现细节问题	182
13.4.1	弱分类器	182
13.4.2	弱分类器的数量	182
13.4.3	样本权重削减	183
13.5	实验程序	183
13.6	梯度提升算法	183
13.6.1	梯度提升框架	184
13.6.2	回归问题	185
13.6.3	分类问题	185
13.6.4	XGBoost	187
13.7	应用——目标检测	189
13.7.1	VJ 框架的原理	190
13.7.2	模型训练	192
	参考文献	193
第 14 章	深度学习概论	195
14.1	机器学习面临的挑战	195
14.1.1	人工特征	196
14.1.2	机器学习算法	197
14.2	深度学习技术	197
14.3	进展与典型应用	199
14.3.1	计算机视觉	200
14.3.2	语音识别	202
14.3.3	自然语言处理	202
14.3.4	计算机图形学	203
14.3.5	推荐系统	203
14.3.6	深度强化学习	204
14.4	自动编码器	204
14.4.1	自动编码器简介	204
14.4.2	去噪自动编码器	205
14.4.3	稀疏自动编码器	205
14.4.4	收缩自动编码器	206
14.4.5	多层编码器	206
14.5	受限玻尔兹曼机	206
14.5.1	玻尔兹曼分布	206
14.5.2	受限玻尔兹曼机结构	207
14.5.3	训练算法	209
14.5.4	深度玻尔兹曼机	210
14.5.5	深度置信网	210

参考文献	210
第 15 章 卷积神经网络	218
15.1 网络结构	218
15.1.1 卷积层	219
15.1.2 池化层	222
15.1.3 全连接层	222
15.2 训练算法	223
15.2.1 卷积层	223
15.2.2 池化层	226
15.2.3 随机梯度下降法	227
15.2.4 迁移学习	228
15.3 典型网络	228
15.3.1 LeNet-5 网络	228
15.3.2 AlexNet 网络	229
15.3.3 VGG 网络	230
15.3.4 GoogLeNet 网络	231
15.4 理论分析	232
15.4.1 反卷积运算	232
15.4.2 卷积层可视化	233
15.4.3 理论解释	235
15.5 挑战与改进措施	236
15.5.1 卷积层	236
15.5.2 池化层	236
15.5.3 激活函数	237
15.5.4 损失函数	237
15.5.5 网络结构	237
15.5.6 批量归一化	241
15.6 实现细节	242
15.6.1 卷积层	242
15.6.2 激活函数	244
15.6.3 内积层	244
15.6.4 损失层	245
15.6.5 求解器	248
15.7 应用——计算机视觉	251
15.7.1 人脸检测	251
15.7.2 通用目标检测	254
15.7.3 人脸关键点定位	262
15.7.4 人脸识别	263

15.7.5 图像分割·····	265
参考文献·····	266
第 16 章 循环神经网络 ·····	270
16.1 网络结构·····	270
16.1.1 循环层·····	270
16.1.2 输出层·····	271
16.1.3 一个简单的例子·····	272
16.1.4 深层网络·····	272
16.2 网络的训练·····	273
16.2.1 一个简单的例子·····	273
16.2.2 完整的算法·····	275
16.3 挑战与改进措施·····	277
16.3.1 梯度消失·····	277
16.3.2 长短期记忆模型·····	278
16.3.3 门控循环单元·····	279
16.3.4 双向网络·····	279
16.4 序列预测问题·····	280
16.4.1 序列标注问题·····	280
16.4.2 连接主义时序分类·····	281
16.4.3 序列到序列学习·····	285
16.5 应用——语音识别·····	287
16.5.1 语音识别问题·····	287
16.5.2 GMM-HMM 框架·····	288
16.5.3 深度模型·····	288
16.6 应用——自然语言处理·····	291
16.6.1 中文分词·····	292
16.6.2 词性标注·····	293
16.6.3 命名实体识别·····	293
16.6.4 文本分类·····	294
16.6.5 自动摘要·····	296
16.6.6 机器翻译·····	296
参考文献·····	298
第 17 章 生成对抗网络 ·····	302
17.1 随机数据生成·····	302
17.2 生成对抗网络结构·····	303
17.2.1 生成模型·····	303
17.2.2 判别模型·····	304

17.3	模型的训练	304
17.3.1	目标函数	304
17.3.2	训练算法	305
17.3.3	理论分析	306
17.4	应用与改进	307
17.4.1	改进方案	308
17.4.2	典型应用	311
	参考文献	313
第 18 章	聚类算法	314
18.1	问题定义	314
18.2	层次聚类	315
18.3	基于质心的算法	315
18.4	基于概率分布的算法	316
18.4.1	高斯混合模型	316
18.4.2	EM 算法	317
18.5	基于密度的算法	322
18.5.1	DBSCAN 算法	322
18.5.2	OPTICS 算法	324
18.5.3	Mean Shift 算法	326
18.6	基于图的算法	328
18.7	算法评价指标	331
18.7.1	内部指标	331
18.7.2	外部指标	331
18.8	实验程序	332
18.9	应用	332
	参考文献	332
第 19 章	半监督学习	334
19.1	问题假设	334
19.1.1	连续性假设	334
19.1.2	聚类假设	334
19.1.3	流形假设	334
19.1.4	低密度分割假设	334
19.2	启发式算法	335
19.2.1	自训练	335
19.2.2	协同训练	335
19.3	生成模型	335
19.4	低密度分割	336

19.5	基于图的算法	336
19.6	半监督深度学习	337
	参考文献	338
第 20 章	隐马尔可夫模型	340
20.1	马尔可夫模型	340
20.2	隐马尔可夫模型简介	343
20.2.1	模型结构	343
20.2.2	中文分词	345
20.3	估值问题	345
20.4	解码问题	347
20.5	训练算法	349
20.6	应用	352
	参考文献	352
第 21 章	条件随机场	353
21.1	马尔可夫随机场	353
21.1.1	概率图模型	353
21.1.2	马尔可夫随机场	354
21.2	条件随机场概述	355
21.2.1	条件随机场简介	355
21.2.2	线性链条件随机场	355
21.3	推断算法	357
21.4	训练算法	359
21.5	应用	360
	参考文献	360
第 22 章	强化学习	361
22.1	强化学习简介	361
22.1.1	问题定义	361
22.1.2	马尔可夫决策过程	362
22.2	基于动态规划的算法	366
22.2.1	策略迭代算法	366
22.2.2	价值迭代算法	368
22.3	蒙特卡洛算法	369
22.3.1	算法简介	369
22.3.2	状态价值函数估计	370
22.3.3	动作价值函数估计	371
22.3.4	蒙特卡洛控制	371