

北京理工大学“双一流”建设精品出版工程



人工智能

机器学习与神经网络

刘峡壁 马霄虹 高一轩 著



北京理工大学出版社

BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

北京理工大学“双一流”建设精品出版工程

人工智能

机器学习与神经网络

刘峡壁 马霄虹 高一轩 著



北京理工大学出版社

BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

版权专有 侵权必究

图书在版编目(CIP)数据

人工智能：机器学习与神经网络 / 刘峡壁，马霄虹，高一轩著. -- 北京：北京理工大学出版社，2023.1
ISBN 978-7-5763-2068-8

I. ①人… II. ①刘… ②马… ③高… III. ①人工智能 IV. ①TP18

中国国家版本馆 CIP 数据核字(2023)第 010723 号

出版发行 / 北京理工大学出版社有限责任公司

社 址 / 北京市海淀区中关村南大街 5 号

邮 编 / 100081

电 话 / (010) 68914775 (总编室)

(010) 82562903 (教材售后服务热线)

(010) 68944723 (其他图书服务热线)

网 址 / <http://www.bitpress.com.cn>

经 销 / 全国各地新华书店

印 刷 / 三河市华骏印务包装有限公司

开 本 / 710 毫米 × 1000 毫米 1/16

印 张 / 25.75

彩 插 / 1

字 数 / 422 千字

版 次 / 2023 年 1 月第 1 版 2023 年 1 月第 1 次印刷

定 价 / 88.00 元

责任编辑 / 钟 博

文案编辑 / 钟 博

责任校对 / 刘亚男

责任印制 / 李志强

图书出现印装质量问题，请拨打售后服务热线，本社负责调换

前 言

随着深度学习技术的兴起及其在阿尔法围棋程序（AlphaGo）等实际应用中的精彩表现，人工智能（Artificial Intelligence，AI）再次成为公众热议的话题，AI 迅速成为流行词汇，而深度学习也因此成为 AI 的代名词，为许多专业及非专业人士所关注，他们希望了解这项看似神奇的技术。对此，我们的建议始终是要在机器学习与人工神经网络这两大人工智能实现途径的大背景下学习和研究深度学习。人工神经网络是深度学习之母，机器学习是深度学习之父。待有了机器学习与人工神经网络的基础后，再探索深度学习的理论与方法，才能建构稳固的知识体系，否则终将是没有地基的棚屋，摇摇欲坠，一遇到深层次的问题，便会土崩瓦解。事实上，深度学习只是机器学习与人工神经网络中的一小部分，而机器学习与人工神经网络也只是人工智能诸多拼图中的两块，其他笔者已知拼图还有符号智能、进化计算、计算群智能和行为智能。唯有知晓人工智能之全豹，才可能洞见深度学习这一斑。这自然并非易事，因为人工智能作为人类“认识自身”的学问，其困难程度本身不亚于上九天揽月、下深海擒龙。以深度学习为代表，人类已在探索人工智能的道路上取得诸多辉煌的成就，但即便如此，我们现在也还不过处在人工智能发展的婴儿期，对于人类智能的本质我们还一无所知，对于其外在表现也还不过初窥堂奥，未来还有很长的路要走。对此，真正有志于人工智能学习和研究的人应有清醒的认识和足够的敬畏，方能在人类实现人工智能的伟大事业中保持激情，不因未来必然到来的挫折而沮丧。

本书正是上述认识的产物，在人工智能总体知识的大背景下，阐述我们对于机器学习与人工神经网络技术的理解，主要从算法实现的角度，探讨当前机器学习与人工神经网络领域中的主要问题与解决方案，希冀针对这两个人工智能中紧密联系的分支建构系统完整的知识体系，为读者也为我们自己在认识人类自身的道路上炳一缕烛火、投射一丝中国的智慧，如能达此目标，则创作此书的心血便不算白费。全书内容共分为十二章，具体如下。

第 1 章为绪论，在对人工智能的总认识下，说明本书拟讨论的机器学习与人工神经网络问题，相应介绍这两项技术的发展简史，为全书内容奠基。

第2章介绍机器学习的基础知识：定义机器学习问题，总结归纳学习的主要类型和常见的特定学习概念，分析机器学习算法应解决的主要问题。

第3~8章分别围绕监督学习、非监督学习、半监督学习、强化学习这四种归纳学习类型，探讨相应的解决方案。在监督学习部分，以该学习方式目前本质上是函数学习这一点出发，按数据点函数表示形式、离散函数形式、连续函数形式、随机函数形式，围绕优化目标与优化算法这两个关键问题的解决进行阐述。在非监督学习部分，探讨了学习数据分布规律的聚类问题及其算法，以及学习数据之间相互关系的关联规则挖掘问题及其算法，并专门阐述了作为非监督学习基础的相似性计算问题及其解决方法。在半监督学习部分，分析了面向监督任务的半监督学习与面向非监督任务的半监督学习，分别介绍了相应算法。在强化学习部分，围绕学习最优行动策略这一强化学习的根本目标，按照策略、 V 值、 Q 值这三个关键因素之间的相互关系，阐述了主要的强化学习算法，包括强化学习与深度网络相结合所产生的深度强化学习算法。

第9章介绍人工神经网络的基础知识：介绍人工神经网络的源起与定义，说明作为人工神经网络基本构成元素的人工神经元模型，阐述网络结构与学习算法这两个人工神经网络技术中的根本问题。

第10章和11章分别从前馈网络结构和反馈网络结构两种不同网络结构类型出发，阐述包括深度网络在内的各种主要网络结构模型以及建构在模型之上的学习算法。在前馈网络部分，主要从感知器到多层感知器再到深度网络这样一个发展脉络，探讨感知器、Adaline网络、反向传播（BP）网络、卷积神经网络、全卷积网络、U形网络、残差网络、深度信念网络与自编码器网络。此外，还分析了与此技术路线不同但另有特色的另外两种前馈网络：径向基函数网络与自组织映射网。在反馈网络部分，将主要模型总结为稳定型反馈网络与时序型反馈网络两类，在此基础上，阐述霍普费尔德网络与玻耳兹曼机这两种稳定型反馈网络，以及乔丹网络、艾尔曼网络、长短时记忆（LSTM）网络、双向反馈（BRNN）网络等时序型反馈网络。

第12章为结语，总结全书内容，给出对未来问题与技术的展望，包括小样本学习、相似度计算、网络结构学习、网络可视化，以及传统方法与神经网络的合流。

本书是以一种近乎矛盾的心态写成的，一种心理是进行知识的整理，这使本书有教材的性质；另一种心理是进行全面独立的思考，对相关技术的现状和未来给出自己的把握，这使本书有著作的性质。这两种思路是需要互补

的，没有有序的整理便没有有益的思考，没有有益的思考也就没有有序的整理。因此，请读者也带着这种矛盾的心情阅读本书，或许能因此有更多收获。

我们已尽力确保本书内容的完整性和正确性，但错漏之处仍然难以避免，尤其对于人工智能这样一门年轻的、还很不成熟的学科来说更是如此，为此我们建立了与本书配套的网站以随时纠错补遗，相应网址是 www.knowyourself.xyz，请亲爱的读者们关注。我们热切盼望您对于本书内容的意见和建议，您可以通过上述网址反馈，或将意见和建议发送到以下电子邮箱：liuxiabi@bit.edu.cn。您的关注和反馈是我们进一步完善本书的动力，诚致谢意！

感谢北京理工大学出版社在本书出版过程中给予的大力支持和帮助。

感谢我们的家人和亲友们给予我们的爱，谨以此书献给你们！

作者

2022年7月于北京

目 录

第1章 绪论	1
1.1 人工智能及其实现途径	1
1.1.1 智能的外在表现与模拟	1
1.1.2 机器学习	3
1.1.3 人工神经网络	4
1.2 机器学习简史	5
1.3 人工神经网络简史	8
1.4 本书内容与组织	12
参考文献	14
第2章 机器学习基础	15
2.1 机器学习是什么	15
2.2 机器学习方式	17
2.3 归纳学习类型	18
2.3.1 监督学习	18
2.3.2 非监督学习	19
2.3.3 半监督学习	20
2.3.4 强化学习	21
2.3.5 各学习类型的特点与共性	22
2.4 特定学习概念	23
2.4.1 生成学习与判别学习	23
2.4.2 度量学习	23
2.4.3 在线学习与递增学习	24
2.4.4 反馈学习	25
2.4.5 多任务学习	25
2.4.6 深度学习	25
2.4.7 迁移学习	26
2.4.8 流形学习	26

2.4.9	多示例学习	27
2.5	对学习算法的评价	28
2.5.1	过学习与泛化	28
2.5.2	偏置	30
2.5.3	数据鲁棒性	31
2.5.4	计算复杂性	32
2.5.5	透明性	33
	小结	34
	参考文献	35
第3章	监督学习	37
3.1	函数形式	38
3.1.1	显式表示形式	38
3.1.2	隐式表示形式	38
3.1.3	数据点表示形式	39
3.2	优化目标	40
3.2.1	最小平方误差	42
3.2.2	最小化熵	42
3.2.3	极大似然估计	44
3.2.4	极大后验概率估计	44
3.2.5	最小描述长度	45
3.3	记忆学习	45
3.4	决策树学习	51
3.4.1	决策树	52
3.4.2	基于信息增益的决策树生成算法 (ID3 算法)	54
3.4.3	ID3 算法的过学习问题与对策	57
3.4.4	基于最小描述长度准则的决策树学习算法	60
3.5	支持向量机	62
3.5.1	基本 SVM 学习目标	63
3.5.2	松弛变量的引入	65
3.5.3	核函数的引入	66
3.5.4	优化方法	68
3.6	贝叶斯学习	69
3.6.1	贝叶斯法则	70

3.6.2 贝叶斯学习的形式	72
3.7 朴素贝叶斯分类器	73
3.8 贝叶斯信念网	75
3.8.1 贝叶斯信念网的形式	75
3.8.2 基于贝叶斯信念网的推理	77
3.8.3 贝叶斯信念网的学习	79
3.9 基于高斯混合模型的贝叶斯分类器	82
3.9.1 高斯混合模型	82
3.9.2 EM 算法	83
3.9.3 MMP 算法	86
3.10 基于极大后验概率估计的学习	89
小结	91
参考文献	93
附录 有关公式的推导过程	96
第4章 相似性度量	101
4.1 数据类型	102
4.1.1 数据向量	102
4.1.2 数据集	103
4.2 度量学习	104
4.3 连续型数据向量	106
4.3.1 距离	106
4.3.2 相关系数	111
4.3.3 局部性度量	112
4.4 离散型数据向量	115
4.4.1 二值数据	115
4.4.2 类别数据	118
4.4.3 序列数据	118
4.4.4 混合型数据	118
4.5 简单数据集	119
4.5.1 分散性度量	119
4.5.2 整体性度量	120
4.6 有序数据集	121
4.6.1 基于变换系数的度量	121

4.6.2	弹性配准度量与编辑距离	122
4.6.3	动态时间弯曲	125
4.6.4	时间弯曲的编辑距离	126
4.6.5	堆土机距离	128
4.6.6	最长公共子序列长度	130
4.7	结构数据集合	130
4.7.1	树型结构数据	131
4.7.2	图型结构数据	133
4.8	模糊集合	136
4.8.1	模糊集合基础	136
4.8.2	数据向量相似度的推广	138
4.8.3	简单数据集合相似度的推广	139
	小结	139
	参考文献	141
第5章	聚类方法	146
5.1	聚类基础	146
5.1.1	何为聚类	146
5.1.2	聚类的基本问题	147
5.2	划分聚类方法	150
5.2.1	k -均值聚类	150
5.2.2	k -中心点聚类算法	154
5.2.3	均值迁移算法	157
5.3	层次聚类方法	158
5.3.1	BIRCH 算法	159
5.3.2	CURE 算法	161
5.3.3	CHAMELEON 算法	163
5.4	基于数据密度的聚类方法	164
5.4.1	DBSCAN 算法	165
5.4.2	DENCLUE 算法	166
5.4.3	基于密度峰值的聚类方法	168
5.5	基于空间网格的聚类方法	168
5.5.1	STING 算法	169
5.5.2	CLIQUE 算法	170

5.5.3 WaveCluster 算法	172
5.6 基于统计模型的聚类方法	173
5.6.1 GMMCluster 算法	173
5.6.2 AutoClass 算法	173
5.7 基于图的聚类方法	174
5.8 核聚类方法	175
5.9 递增聚类方法	176
5.9.1 递增划分聚类方法	177
5.9.2 递增层次聚类方法	177
5.9.3 基于密度的递增聚类方法	178
5.9.4 基于网格的递增聚类方法	178
5.9.5 基于模型的递增聚类方法	179
5.9.6 基于图的递增聚类方法	179
5.9.7 其他递增聚类方法	179
5.9.8 进化聚类方法	180
小结	180
参考文献	182
附录 有关公式的推导	186
第6章 关联规则挖掘方法	189
6.1 问题定义	189
6.1.1 项集与关联规则	189
6.1.2 “支持度-可信度”框架	191
6.1.3 其他定义	192
6.1.4 数据类型	193
6.2 用于挖掘的基本过程与信息	193
6.2.1 项集网格与支持度的反单调性	193
6.2.2 规则网格与可信度的单调性	195
6.2.3 提高计算效率的基本策略	196
6.3 Apriori 算法	197
6.3.1 频繁项集生成	197
6.3.2 规则生成	198
6.3.3 AprioriTid 算法与 AprioriHybrid 算法	199
6.4 ECLAT 算法	199

6.4.1	等价类	200
6.4.2	频繁项集生成	202
6.5	FP-growth 算法	203
6.5.1	FP-树	203
6.5.2	频繁项集生成	205
6.6	封闭频繁项集挖掘	207
6.6.1	封闭频繁项集的定义	207
6.6.2	A-Close 算法	208
6.6.3	CHARM 算法	209
6.6.4	FPclose 算法	209
6.7	最大频繁项集挖掘	212
6.7.1	FPmax * 算法	213
6.7.2	Max-Miner 算法	214
6.8	规则兴趣度评价方法	215
6.9	量化关联规则挖掘	218
6.9.1	区间离散化	218
6.9.2	统计量方法	218
6.9.3	模糊化方法	219
6.10	序列数据挖掘	219
6.10.1	Apriori 类算法	219
6.10.2	FP-growth 类算法	219
6.11	结构数据挖掘	220
6.11.1	用于运算的信息	220
6.11.2	Apriori 类方法	221
6.11.3	FP-growth 类方法	222
	小结	222
	参考文献	224
第7章	半监督学习方法	227
7.1	半监督学习的意义	227
7.2	自学习与互学习	228
7.2.1	自学习	228
7.2.2	互学习	228
7.3	基于图的方法	230

7.3.1 最小割算法	231
7.3.2 谐函数算法	233
7.4 基于生成模型的方法	234
7.4.1 高斯混合模型方法	235
7.4.2 朴素贝叶斯混合模型方法	237
7.5 转导 SVM	239
7.6 半监督聚类方法	241
7.6.1 基于部分标注的 k -均值算法	242
7.6.2 基于两两约束的 k -均值算法	243
7.6.3 基于两两约束的层次聚类方法	243
小结	244
参考文献	246
第8章 强化学习	248
8.1 强化学习任务与模型	248
8.1.1 马尔可夫决策过程	249
8.1.2 学习目标	250
8.2 策略、 V 值与 Q 值	251
8.3 V 值及策略迭代算法	253
8.4 Q 学习算法	257
8.4.1 Q 函数及其学习	257
8.4.2 应用示例：三阶梵塔问题	258
8.4.3 Dyna- Q 学习算法	260
8.5 TD(λ)算法	261
8.5.1 算法原理	262
8.5.2 应用示例：TD-Gammon	263
8.5.3 Sarsa(λ)算法	265
8.6 REINFORCE 算法	266
8.6.1 算法原理	266
8.6.2 应用示例：AlphaGo	266
8.7 深度强化学习算法	270
8.7.1 深度 Q 网络 (Deep Q -Network, DQN)	270
8.7.2 A3C 算法	271
8.7.3 DDPG 算法	273

8.7.4	V 值迭代网络	274
	小结	275
	参考文献	277
第 9 章	人工神经网络基础	279
9.1	生物神经系统	280
9.1.1	生物神经元的结构	280
9.1.2	生物神经元的功能	281
9.2	人工神经元模型	282
9.2.1	常用整合函数	283
9.2.2	常用激活函数	284
9.3	人工神经网络的结构类型	286
9.3.1	前馈型神经网络	286
9.3.2	反馈型神经网络	287
9.4	人工神经网络的学习方式	288
9.4.1	赫伯学习	288
9.4.2	竞争学习	288
	小结	289
	参考文献	290
第 10 章	前馈型神经网络	291
10.1	感知器	291
10.1.1	感知器结构与学习算法	291
10.1.2	感知器应用示例	293
10.1.3	感知器的局限性	293
10.2	ADALN	294
10.3	BP 网络	295
10.3.1	BP 网络结构	296
10.3.2	BP 权值更新规则	297
10.3.3	BP 学习过程	299
10.3.4	BP 网络应用示例	300
10.4	CNN	302
10.4.1	何谓卷积	302
10.4.2	CNN 结构上的其他主要特点	303
10.4.3	CNN 的学习	304

10.5 全卷积网络与 U 形网络	304
10.5.1 网络结构	305
10.5.2 学习方式	307
10.6 深度残差网络	307
10.7 DBN	310
10.7.1 DBN 结构	310
10.7.2 RBM 学习算法	311
10.7.3 逐层贪婪学习	315
10.7.4 反向精调	316
10.7.5 DBN 应用示例	317
10.8 自编码器深度网络	318
10.9 径向基函数网络	320
10.9.1 网络结构	321
10.9.2 学习方法	322
10.9.3 RBF 网络应用示例	323
10.10 自组织映射网	324
小结	327
参考文献	328
第 11 章 反馈型神经网络	331
11.1 霍普菲尔德网络	332
11.1.1 网络结构	333
11.1.2 网络工作原理与稳定性问题	334
11.1.3 能量函数与网络稳定性分析	334
11.1.4 联想记忆	337
11.1.5 优化计算	339
11.2 玻耳兹曼机	342
11.2.1 玻耳兹曼 - 吉布斯分布	342
11.2.2 模拟退火算法	343
11.2.3 玻耳兹曼机的工作原理	344
11.2.4 RBM	346
11.3 乔丹网络与艾尔曼网络	346
11.3.1 学习方法	347
11.3.2 应用示例：“异或”运算	348

11.3.3 梯度计算问题	349
11.4 LSTM 网络	350
11.4.1 记忆神经元	350
11.4.2 网络结构	353
11.4.3 应用示例：自然语言翻译	354
11.5 BRNN	356
11.5.1 网络结构	357
11.5.2 学习方法	357
11.5.3 双向 LSTM 网络	358
小结	358
参考文献	360
第 12 章 结语	362
12.1 小样本学习	363
12.1.1 相似性学习	366
12.1.2 元学习	368
12.2 相似度计算	371
12.2.1 基于参照系的相似度度量	372
12.2.2 反映层级关系的相似度度量	374
12.3 网络结构学习	375
12.3.1 权值量化	376
12.3.2 网络剪枝	377
12.3.3 权值矩阵分解与转换	378
12.3.4 知识蒸馏	380
12.3.5 直接优化	380
12.4 人工神经网络可视化	381
12.4.1 直接方法	382
12.4.2 基于反向传播的方法	383
12.4.3 基于决策重要性的方法	384
12.4.4 基于模型的方法	385
12.5 传统方法与人工神经网络方法的合流	386
参考文献	390

第1章 绪 论

人工智能 (Artificial Intelligence, AI) 似乎快成为一门显学了, 在政府的大力推动下, 老的少的、懂的不懂的, 一夜之间都成了人工智能的摇旗呐喊者。但人工智能目前所处的发展阶段及其发展的历史经验告诉我们: 距离人类真正理解人类智能进而完成人工智能还有漫漫长路要走, 高潮过后会有低潮。正如所有事物都要经历波浪式的前进历程一样, 人工智能自 1956 年成为一门独立学科以来, 同样几经起伏, 但始终向前, 因为它承载着人类认识自身、探索自身的梦想, 正如刻在希腊帕台农神庙上的那句箴言——认识你自己 (know yourself), 这一过程永远不会停止。

人工智能技术目前还主要停留在算法实现阶段, 各种思想和方法最终都是通过计算手段, 依托计算平台来实现的, 具体表现为计算平台上的人工智能算法程序。本书从算法的视角, 阐述机器学习与人工神经网络这两个彼此紧密联系的人工智能技术分支中的问题、思路与方法, 希冀在人类探索人工智能的过程中发一点微光, 照亮前行的路, 如更能因此惠及读者, 则福莫大焉。

1.1 人工智能及其实现途径

人工智能是对生物智能, 特别是人类智能的模拟。目前, 人们对生物智能本身还知之甚少, 智能的本质究竟是什么? 起源在哪里? 对此, 人们还缺乏基本的认识。我们只能看到智能的表现, 看到人类或其他生物智能体区别于非智能体的能力, 而看不到智能本身, 就像柏拉图的“洞穴比喻”^[1], 人们还只能在洞中观察智能投射在墙壁上的影子, 而不知道洞穴外那个真正的智能的样子。终有一天, 有人会蓦然回首, 转身瞥见洞穴外的真相, 到那时或许会推翻今天人们对人工智能的所有认识。

1.1.1 智能的外在表现与模拟

目前, 对于智能, 我们认为其外在表现主要体现为以下能力。

(1) 感知能力。感知能力是指人们通过视觉、听觉、嗅觉、味觉、触觉