



第2章 归类理论

伯牙鼓琴，钟子期听之，方鼓琴而志在泰山，钟子期曰：‘善哉乎鼓琴！巍巍乎若泰山’。少时而志在流水。钟子期曰：‘善哉乎鼓琴，汤汤乎若流水’。钟子期死，伯牙摔琴绝弦，终身不复鼓琴，以为世无足复为鼓琴者。

——《吕氏春秋·本味》

北京交通大学《机器学习》课程组





为何要公理化?

- 1、阿尔伯特 爱因斯坦说过：所有科学中最重要的目标就是，从最少数量的假设和公理出发，用逻辑演绎推理的方法解释最大量的经验事实。
- 2、从1956年达特茅斯会议以来，AI已经取得了巨大的进展，并改善了人们的现实生活。
- 3、2017年10月26日丘成桐在中国计算机大会上作大会报告，明确指出：“我是很鼓励我们做人工智能的也能重复这个做法--从现在复杂多样的网络中找到它简单的公理”

Scientists、Mathematicians



2015年, Pedro Domingos 出版了The master algorithm (终极算法) 将机器学习分为5大流派:

- 符号学派: 决策树
- 连接学派: 深度学习
- 进化学派: 进化算法
- 贝叶斯学派: 概率图, 朴素贝叶斯
- 类推学派: K近邻, K-means等



机器学习的假设

早在2004年，周志华就在基金委做的报告中明确指出，机器学习“以 Tom Mitchell 的经典教科书为例，很难看到基础学科（例如数学、物理学）教科书中那种贯穿始终的体系，也许会让人感到这不过是不同方法和技术的堆砌”。

- 问题：机器学习是否存在共同的假设，更加明确的说法是，机器学习算法有共同的假设吗？
- 一个学科的特定假设，就是其公理。现在的问题是：机器学习是否可以公理化？

Data Scientists vs Data Analyst



机器学习能否公理化?

- 已有学习理论
 - PAC学习理论, 统计学习理论, 概率图理论
- 人类的学习机理
 - 六七岁的儿童学习能力已经很强了, 但并不懂机器学习理论和算法
- 机器学习是否可以公理化
 - 能够统管所有机器、生物和人的学习理论 [M.I. Jordan & T.M. Mitchell, Science 2015]

Psychologist 、 Data Scientists



- 1、引言
- 2、类表示与类表示公理
- 3、归类公理
- 4、归类结果分类
- 5、归类方法设计准则



机器学习的共同目标

- 无论机器学习还是人的学习，其共同目标是学习知识。
- 知识的基本单位是概念，知识自身也是一个概念。

因此，学习知识就是学习概念

- 学习概念就是会使用概念，概念的使用称为归类。

因此，学习与归类问题等价



什么是概念？

1、经典理论（亚里士多德）

- 概念有一个命题表示



什么是概念？

1、经典理论（亚里士多德）

概念的两种表示：

- 内涵表示 (intension)

- ✓ 反映和揭示概念的本质属性，是人类主观世界对概念的认知，可存在于人的心智之中，用命题来表示

e.g. 素数：只能被1和其自身整除的自然数

- 外延表示

- ✓ 包含了与概念对应的各种具体实例，是一个由具有概念本质属性的对象构成的集合
- ✓ 外部可测的，可度量的

e.g. 素数集合{2,3,5,7,11,13,17,19,23,29,31,}



什么是概念？

1、经典理论（亚里士多德）

- 概念有一个命题表示

2、原型理论（Rosch, 1978）

- 概念有一个原型表示

3、样例理论（Medin & Schaffer, 1978）

- 概念有多个样例表示

4、知识理论（Murphy & Medin, 1985）

- 概念是一个知识框架的组成部分

本书假设概念在人心智中是存在的。

概念在人心智中的表示称为认知表示。



归类

- 概念的使用问题称为归类
- 人接触世界，会将各种对象自动表示为心智中的各种概念，即人具有归类能力。
- 归类是人类一项最重要&最基本的认知能力，归类正确与否明确显示了人是否掌握了该类对应的概念
- 自然希望计算机也具有这种能力。为此，机器学习作为一门学科应运而生。
- 语义上，概念 \leq >类
- 综上所述，类的表示：内蕴表示+外部表示



典型的归类问题——例1





1、为什么黑板前的小孩将黑板下的小孩的手势认作为OK呢？

- 一个最简单的解释是相似性（像OK， 归为OK）

2、黑板下的小孩又为什么将自己的手势认作为3呢？

- 同样地，最简单的解释也是相似性。（归为3， 像3）

3、观察到的事实：输入：对象像归于的类，输出：对象归为最像的类。（人接触世界，会将各种对象自动根据相似性分门别类，即人具有归类能力。）



归类的认知假设

■ 最直观的假设

- 每个对象应该最相似于其归于的类。
- 每个对象应该归为与其最相似的类。

■ 更简单的归纳为：

- 归哪类，像哪类。像哪类，归哪类。



“归哪类，像哪类；像哪类，归哪类。”之语义分析

■ 复句分析：

- “归哪类，像哪类” 表示的是**信息输入者**的归类准则。
- “像哪类，归哪类” 表示的是**信息接受者**的归类准则。

■ 单句分析：

- 归哪类：对外可见，是类的外显表示；
- 像哪类：主观内在，不一定外显，属于类的内部表示。



“归哪类，像哪类；像哪类，归哪类。”之语义分析

■ 词分析：

- 归：对对象归类的外显指称，是人使用类外延表示的方式。
- 像：对对象归类的内在指称，是人使用类认知表示的方式。

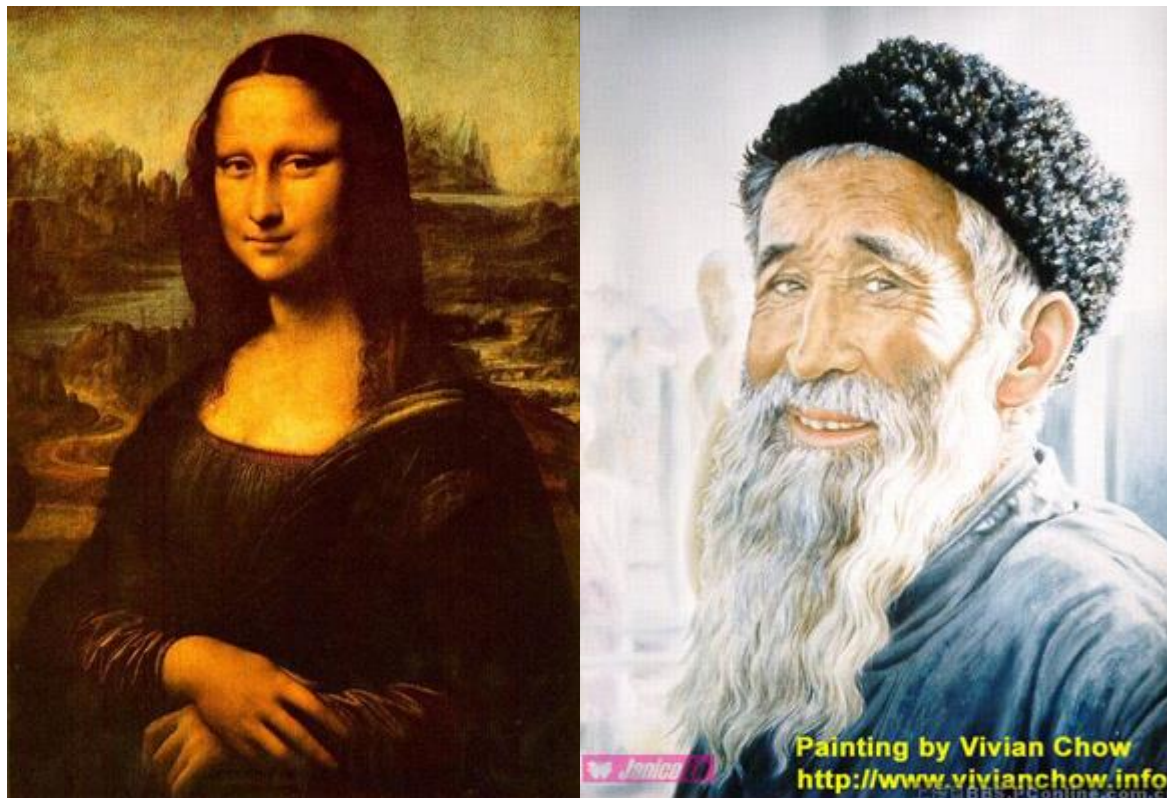


- 1、引言
- 2、类表示与类表示公理
- 3、归类公理
- 4、归类结果分类
- 5、归类方法设计准则



机器学习的简化定义

只给予某些概念的一个**有限外延子集**，希望得到这些概念的**内涵表示**。





■ 类表示八元组

$$(X, U, \underline{X}, Sim_X)$$
$$(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$$



1、归类输入的外部表示

- 由一个有限抽样对象集合 $O=\{o_1, o_2, \dots, o_N\}$ 的归类输入外部信息组成，包括：
 - ✓ 对象的特性输入表示：X
 - ✓ 对应的类外延表示：U

2、归类输出的外部表示

- ✓ 对象特性输出表示：Y
- ✓ 对应的类外延表示：V



归类输入的外部表示—对象特性输入表示 X

- 特征矩阵: $[x_{k\tau}]_{n \times p}$
- 相异性矩阵: $[d_{kl}]_{n \times n}$
- 相似性矩阵: $[s_{kl}]_{n \times n}$
- 图像、声音、文字、手势等



归类输入的外部表示—类外延表示 U

每个对象的归类情况由划分矩阵表示

划分矩阵: $U = [u_{ik}]_{c \times n}, u_{ik} \geq 0$

• 硬划分: $\sum_{i=1}^c u_{ik} = 1, u_{ik} \in \{0,1\}, \sum_{k=1}^n u_{ik} > 1,$

• 软划分: $\sum_{i=1}^c u_{ik} = 1, u_{ik} \geq 0, \sum_{k=1}^n u_{ik} > 0,$

• 可能性划分: $\sum_{i=1}^c u_{ik} > 0, u_{ik} \geq 0, \sum_{k=1}^n u_{ik} > 0$

(模糊划分/概率划分)



归类输出的外部表示—对象特性输出表示 Y

- 特征矩阵: $Y = [y_{k\tau}]_{n \times d}$
- 相异性矩阵: $[d_{kl}]_{n \times n}$
- 相似性矩阵: $[s_{kl}]_{n \times n}$
- 图像、语音、文本、手语等



每个对象的归类情况由划分矩阵表示

划分矩阵: $V = [v_{ik}]_{c \times n}, v_{ik} \geq 0$

- 硬划分: $\sum_{i=1}^c v_{ik} = 1, v_{ik} \in \{0, 1\}, \sum_{k=1}^n v_{ik} > 1,$
- 软划分: $\sum_{i=1}^c v_{ik} = 1, v_{ik} \geq 0, \sum_{k=1}^n v_{ik} > 0,$
- 可能性划分: $\sum_{i=1}^c v_{ik} > 0, v_{ik} \geq 0, \sum_{k=1}^n v_{ik} > 0$

(模糊划分/概率划分)



归类算法的外部表示

- 归类输入的外部表示:

$$(X, U), \text{其中 } X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$$

- 归类输出的外部表示:

$$(Y, V), \text{其中 } Y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$$



指派算子 (归) (assignment operator)

■ 归类输入

$$\vec{X} = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\},$$

其中, $\vec{x}_k = \arg \max_i u_{ik}$

■ 归类输出

$$\vec{Y} = \{\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_n\},$$

其中, $\vec{y}_k = \arg \max_i v_{ik}$

内部表示：类的认知表示

经典理论（亚里士多德）：

类有一个命题表示

原型理论（Rosch, 1978）

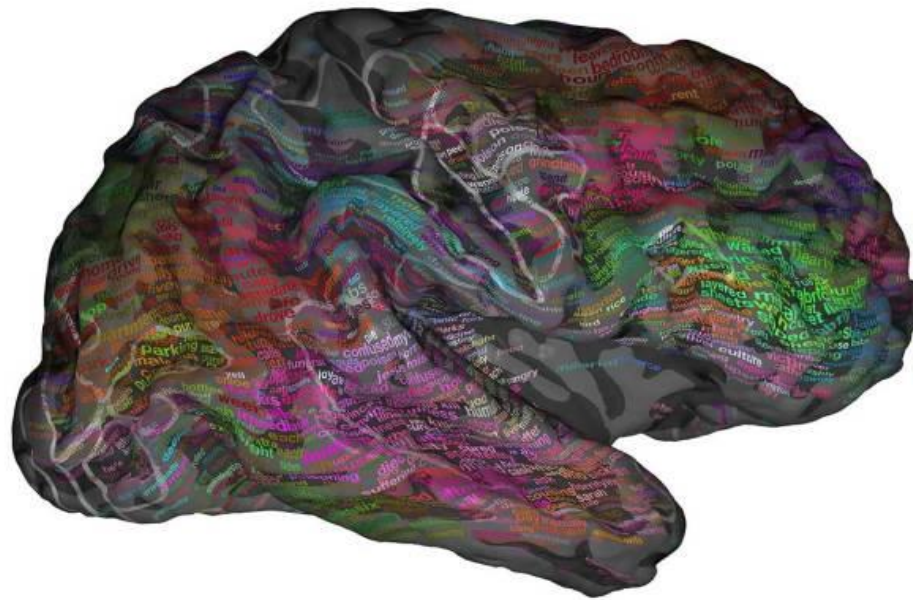
类有一个原型表示

样例理论 (Medin & Schaffer, 1978)

类有多个样本表示

知识理论 (Murphy & Medin, 1985)

类是一个知识框架的组成部分



Huth A G, et al, Natural speech reveals the semantic maps that tile human cerebral cortex.
Nature, 532(7600):453-458, 2016



归类算法的内部表示

- 归类输入的内部表示

$$(\underline{X}, Sim_X)$$

- 归类输出的内部表示

$$(\underline{Y}, Sim_Y)$$



类的认知表示 (主观内在) X 和 Y

■ 输入认知表示

$$\underline{X} = \{\underline{X}_1, \underline{X}_2, \dots, \underline{X}_c\}$$

■ 输出认知表示

$$\underline{Y} = \{\underline{Y}_1, \underline{Y}_2, \dots, \underline{Y}_c\}$$



- 类的认知表示也具有归类能力。
 - 可以根据与类的相似度将对象归类
- 输入类相似性映射

函数 $Sim_X: X \times \{\underline{X}_1, \underline{X}_2, \dots, \underline{X}_c\} \mapsto R_+$ 是输入类相似性映射, 满足条件:

$Sim_X(x_k, \underline{X}_i)$ 值增加表示 x_k 和 \underline{X}_i 的相似性增大, 函数 $Sim_X(x_k, \underline{X}_i)$ 值减小表示 x_k 和 \underline{X}_i 的相似性减小。



- 类的认知表示也具有归类能力.
 - 可以根据与类的相似度将对象归类
- 输出类相似性映射

函数 $Sim_Y: Y \times \{\underline{Y}_1, \underline{Y}_2, \dots, \underline{Y}_C\} \mapsto R_+$ 是 输出类相似性映射, 满足条件:

$Sim_Y(y_k, \underline{Y}_i)$ 值增加表示 y_k 和 \underline{Y}_i 的相似性增大, 函数 $Sim_Y(y_k, \underline{Y}_i)$ 值减小表示 y_k 和 \underline{Y}_i 的相似性减小。



相似算子（像）(similarity operator)

■ 输入相似指称: $\tilde{X} = \{\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n\},$

其中, $\tilde{x}_k = \operatorname{argmax}_i \operatorname{Sim}_X(x_k, \underline{X}_i)$

■ 输出相似指称: $\tilde{Y} = \{\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_n\},$

其中, $\tilde{y}_k = \operatorname{argmax}_i \operatorname{Sim}_Y(y_k, \underline{Y}_i)$



归类输入

- 一个归类算法，如果其外部输入表示是 (X, U) ，对应的输入类内部表示为 (\underline{X}, Sim_X) ，则归类输入四元组为 $\{X, U, \underline{X}, Sim_X\}$ 。



归类结果

- 一个归类算法，如果其外部输出表示是 (Y, V) ，对应的输出类内部表示为 (\underline{Y}, Sim_Y) ，则归类结果四元组为 $\{Y, V, \underline{Y}, Sim_Y\}$ 。



类表示存在公理(Existence Axiom of Category Representation)

- 如果一个归类算法的归类外显输入输出给定，则其对应的类内部表示存在。
- 一个归类算法，如果其归类外显输入是 (X, U) ，归类外显输出是 (Y, V) ，则存在其对应的归类内在输入为 (\underline{X}, Sim_X) 和对应的归类内在输出 (\underline{Y}, Sim_Y) 。



类内在表示

■ 输入类内在表示

$$(\underline{X}, Sim_X)$$

■ 输出类内在表示

$$(\underline{Y}, Sim_Y)$$



白箱算法与黑箱算法

- 如果 Y 被归类算法显式输出，则算法称为白箱算法。在白箱算法中， Y 对于使用者和设计者都是可见的。
- 如果 Y 不被归类算法显式输出，则算法称为黑箱算法。在黑箱算法中， Y 对于使用者是不可见的，但对于设计者可见。



类表示唯一公理(Uniqueness Axiom of Category Representation)

- 对一个归类算法，其输入输出对应的类表示（语义）应该相同。
- 如果归类算法的归类输入 $(X, U, \underline{X}, Sim_X)$ ，其对应归类结果为 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ ，则有 $\vec{X} = \vec{Y}, \underline{X} = \underline{Y}, \tilde{X} = \tilde{Y}$.



归类的最高理想：高山流水遇知音

伯牙鼓琴，钟子期听之，方鼓琴而志在泰山，钟子期曰：‘善哉乎鼓琴！巍巍乎若泰山’。少时而志在流水。钟子期曰：‘善哉鼓琴，汤汤乎若流水’。钟子期死，伯牙摔琴绝弦，终身不复鼓琴，以为世无足复为鼓琴者。





类表示唯一公理的讨论

- 类表示唯一公理是学习算法能够成功学习的先验假设。
- 类表示唯一公理要求太高，即使人也很难达到。

对一个归类算法，其输入输出对应的类表示（语义）应该相同

如果归类算法的归类输入 $(X, U, \underline{X}, Sim_X)$,

其对应归类结果为 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ ，则有

$$\tilde{X} = \tilde{Y}, \underline{X} = \underline{Y}, \tilde{\tilde{X}} = \tilde{\tilde{Y}}$$

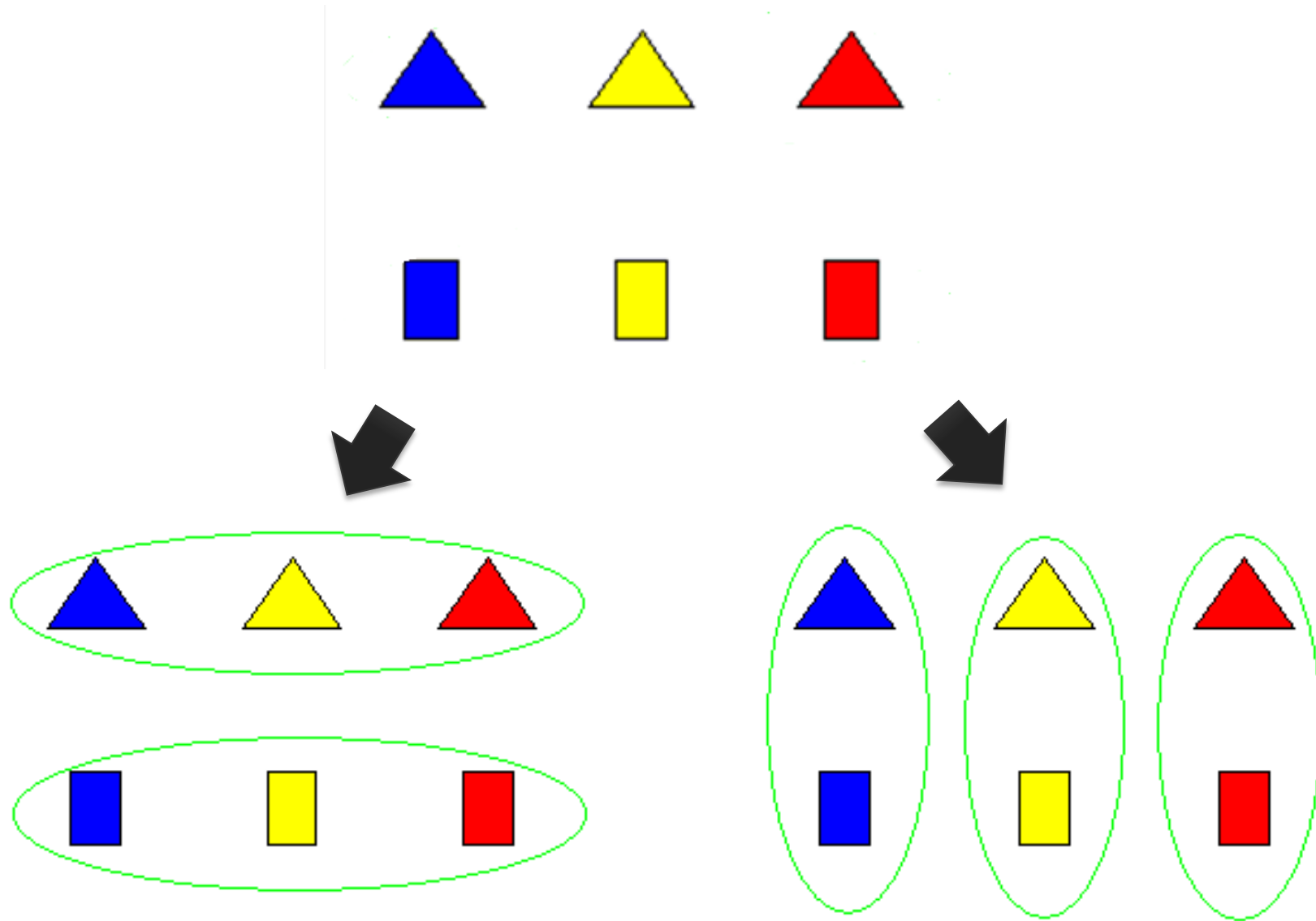


知音难得





类相似性映射是任务依赖的、主观的



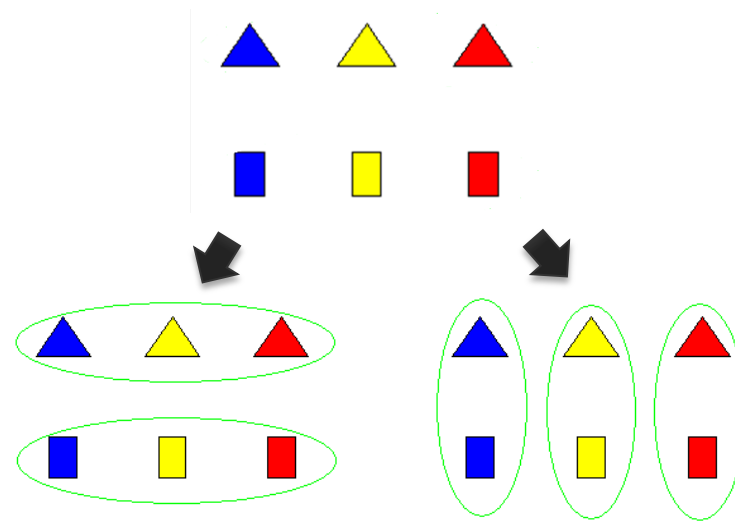


■ 相似性悖论：

- 输入类相似性映射与输出类相似性映射在归类意义下不等价。即：

$$Sim_X \not\equiv Sim_Y$$

- 在图像检索中也经常发生此类情形



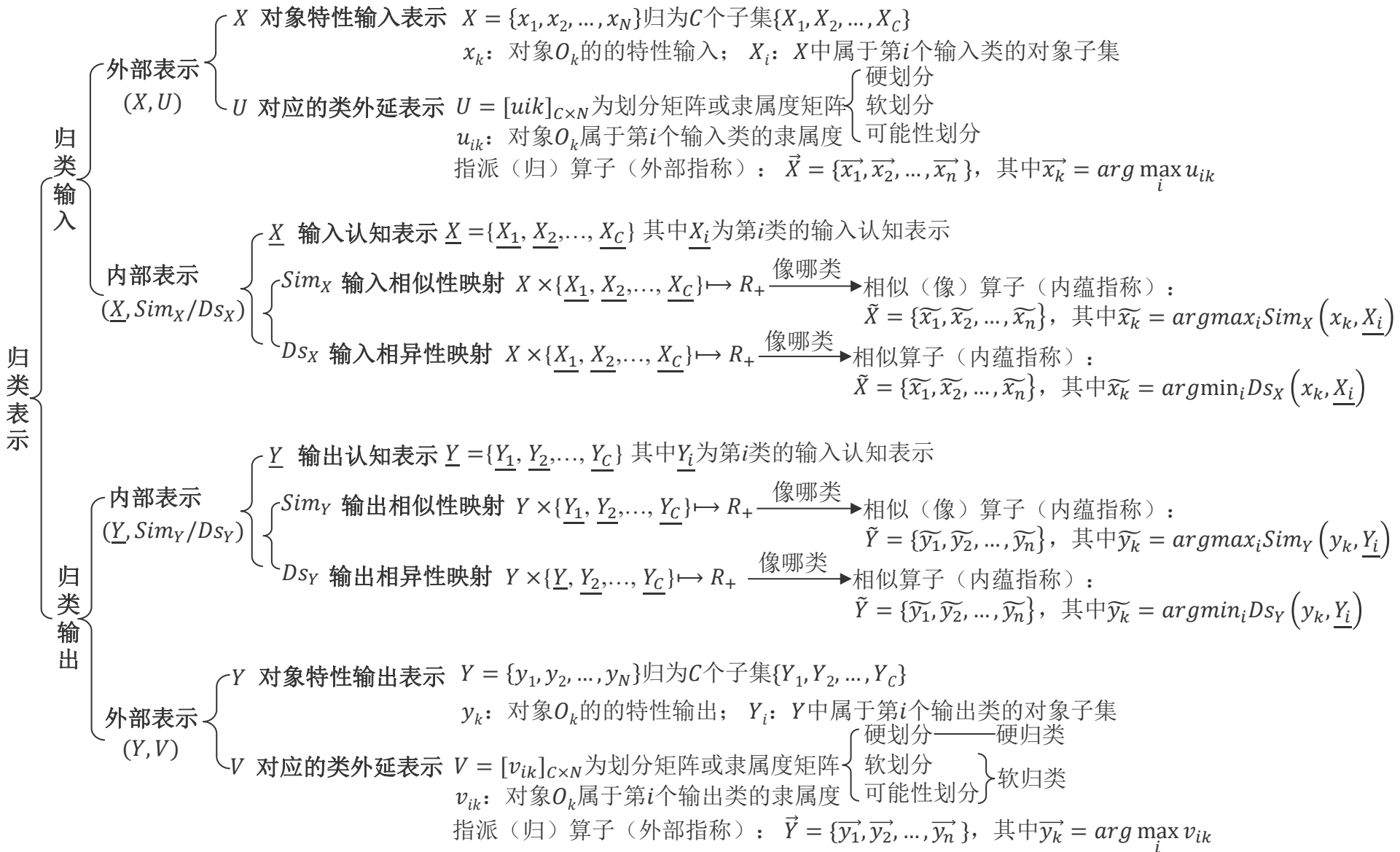


美女与野兽





回顾 - 类表示





- 如果一个归类算法的归类外显输入输出给定，则其对应的类内部表示存在。
- 一个归类算法，如果其归类外显输入是 (X, U) ，归类外显输出是 (Y, V) ，则存在其对应的归类内在输入为 (\underline{X}, Sim_X) 和对应的归类内在输出 (\underline{Y}, Sim_Y) 。



回顾——类表示唯一公理

- 对一个归类算法，其输入输出对应的类表示（语义）应该相同。
- 如果归类算法的归类输入 $(X, U, \underline{X}, Sim_X)$ ，其对应归类结果为 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ ，则有 $\vec{X} = \vec{Y}, \underline{X} = \underline{Y}, \tilde{X} = \tilde{Y}$.



- 1、引言
- 2、类表示与类表示公理
- 3、归类公理
- 4、归类结果分类
- 5、归类方法设计准则



三大归类公理

- 1、样本可分性公理 (Sample Separation Axiom, SS)
 - 一个对象总有唯一一个类与其最相似。
- 2、类可分性公理 (Categorization Separation Axiom, CS)
 - 一个类至少有一个对象与其最相似。
- 3、归类等价公理 (Categorization Equivalency Axiom, CE)
 - 对于任意一个类，其认知表示与外延表示的归类能力等价。



样本可分性公理 (SS)

■ 归类不重

- 一个对象总有唯一——一个类与其最相似。
- 归类结果 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ 应满足 $\forall k \exists i (y_k = i)$



各得其所



■ 类内非空

- 一个类至少有一个对象与其最相似。
- 归类结果 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ 应满足 $\forall i \exists k (y_k = i)$



空类



如果违反样本可分公理，则





■ 定理2.1

如果一个归类结果有 c 个类，并满足类可分性公理，则有：

- (1) 每个类的内部表示都不同。
- (2) 至少存在 c 个不同的对象。



■ 定理2.2

如果 $\forall k \forall i \forall j \left((j \neq i) \rightarrow (\text{Sim}_Y(yk, \underline{Y_i}) \neq \text{Sim}_Y(yk, \underline{Y_j})) \right)$, 则样本可分性公理成立。



■ 定理2.3

如果一个归类结果 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ 满足归类公理, 则有:

$$(1) \quad \forall k \exists i (i = \overrightarrow{y_k})$$

$$(2) \quad \forall i \exists k (i = \overrightarrow{y_k})$$

证明思路: 样本可分公理/类可分公理 + 归类等价公理。

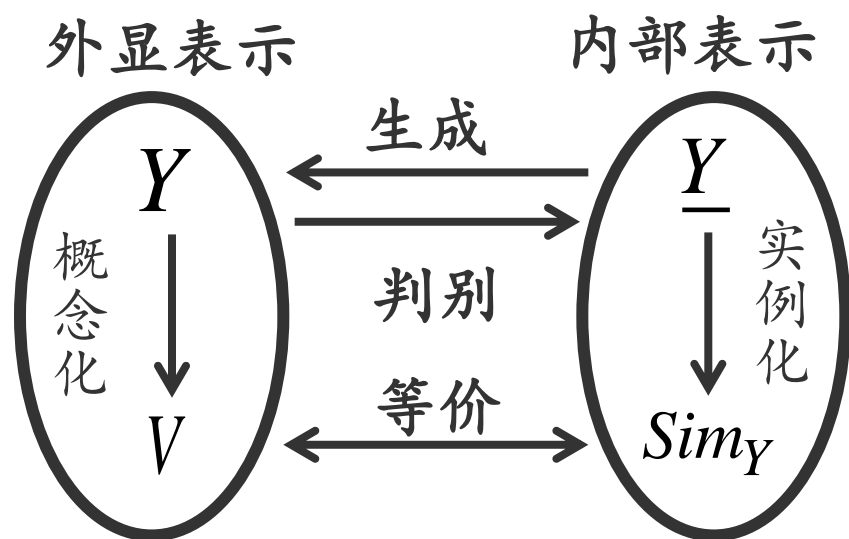


■ 定理2.4

如果一个归类输入 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ 及其对应的归类输出 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ 满足归类等价公理, 则 $\vec{X} = \vec{Y}$ 等价于 $\tilde{X} = \tilde{Y}$ 。

■ 归类等价

- 对于任意一个类, 其认知表示与外延表示的归类能力等价。
- 归类结果 $(Y, V, \underline{Y}, Sim_Y)$ 应满足 $\vec{Y} = \tilde{Y}$



直心是道场；知行合一

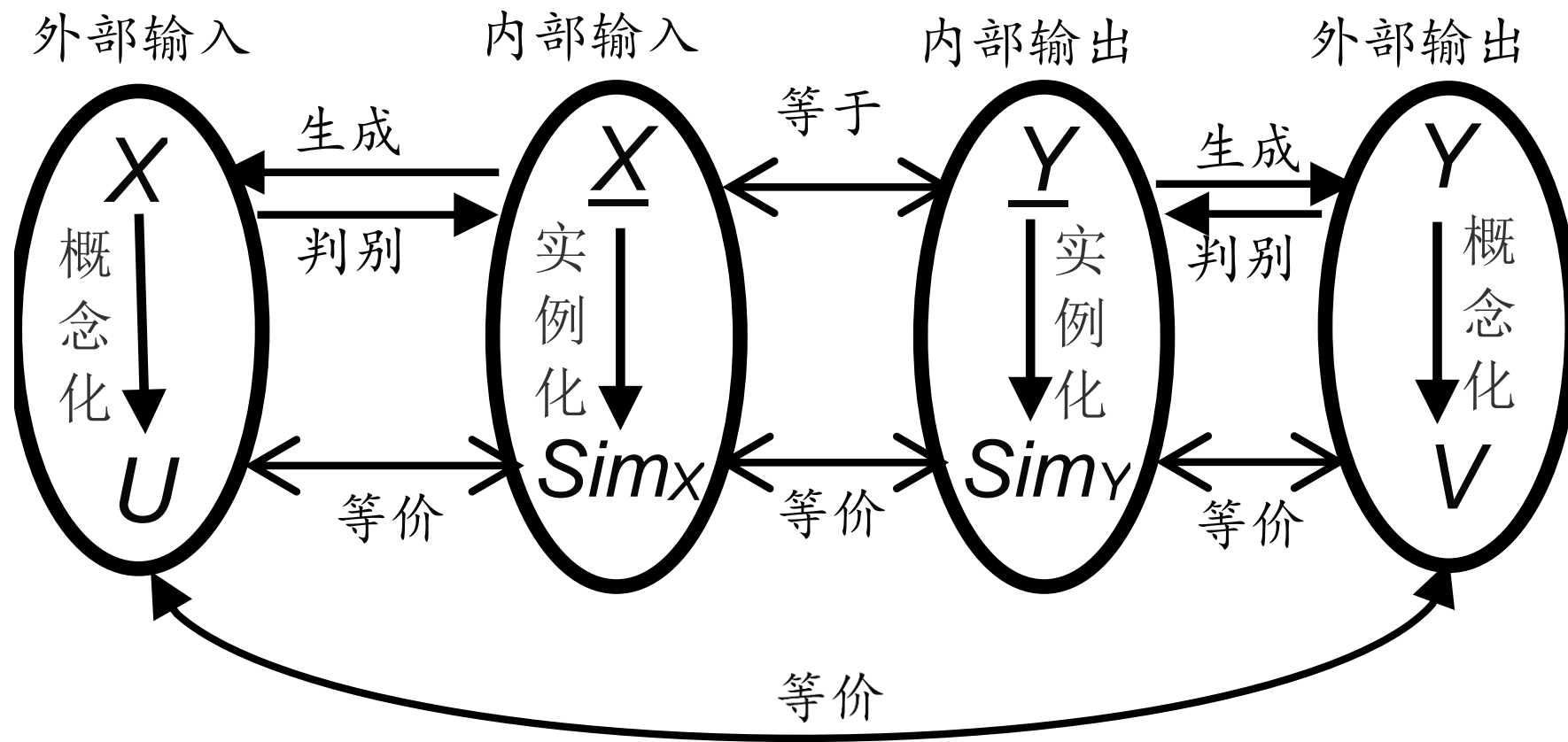


■ 一个归类结果 $(Y, V, \underline{Y}, Ds_Y)$ 应满足：

- 类可分 (CS) : $\forall i \exists k (i = \tilde{y}_k)$
- 样本可分 (SS) : $\forall k \exists i (i = \tilde{y}_k)$
- 归类等价 (CE) : $\vec{Y} = \tilde{Y}$



类表示公理和归类公理





样本可分性公理与其他归类理论

1、原型理论

- 一个对象归为A类而不是其他类，仅仅因为该对象更像A类的原型表示而不是其他类的原型表示。

2、样例理论

- 一个对象归为A类而不是其他类，仅仅因为该对象更像A类的样例表示而不是其他类的样例表示。

上述归类理论与样本可分性公理完全一致。



- 1、引言
- 2、类表示与类表示公理
- 3、归类公理
- 4、归类结果分类（自学）
- 5、归类方法设计准则



- 1、引言
- 2、类表示与类表示公理
- 3、归类公理
- 4、归类结果分类
- 5、归类方法设计准则



类表示存在公理和归类等价公理要求

- **类表示存在公理**仅仅要求输入输出有对应的类内部表示，是归类算法能够设计的基础。
- **归类等价公理**要求一个归类算法的外显指称与内蕴指称一致（表里如一），是实现学习目的必要条件。
- 因此，类表示存在公理和归类等价公理在归类算法设计中不需考虑。

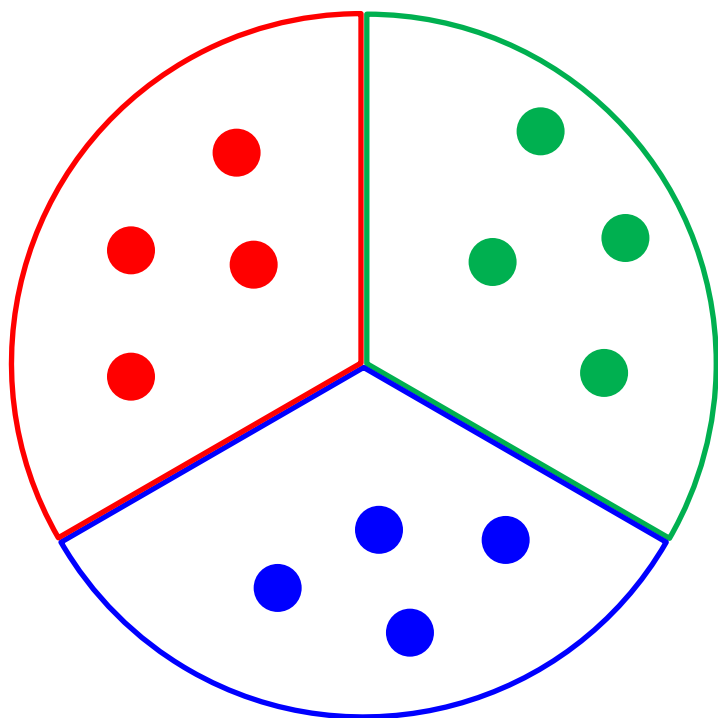


类表示唯一公理要求

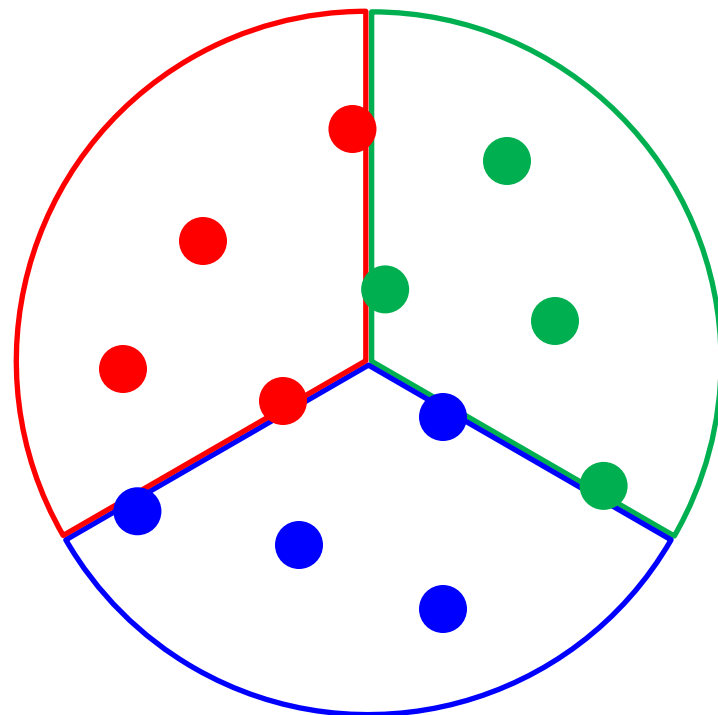
- 类表示唯一公理要求信息提供者（言者）与信息接收者（听者）之间完全心意相通、完美匹配。
- 如果类表示唯一公理成立，则归类错误率为零。
- 因此，类表示唯一公理要求太高，在归类算法设计过程中需要适当放低要求。



样本可分性公理要求



理想情况



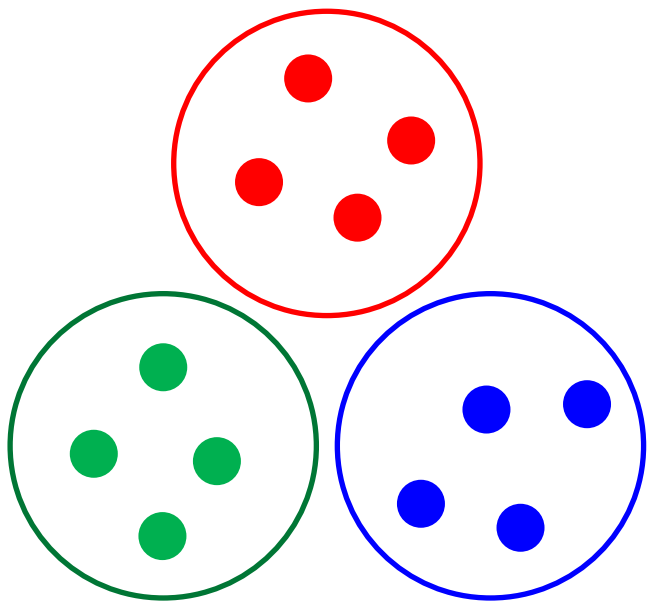
极端情况

样本可分性公理要求太低！

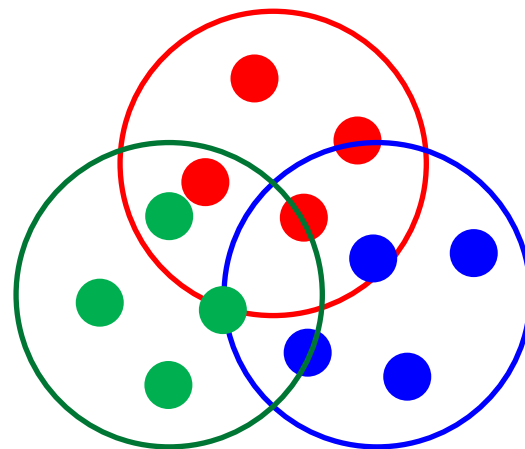
期望类内样本越紧密越好。



类可分性公理要求



理想情况



极端情况

类可分性公理要求太低！

期望类间距离越远越好。



归类方法设计原则

■ 类表示唯一公理要求太高，设计归类算法时应使得归类结果尽量接近类表示唯一公理。由此得出一个设计原则：

- **类一致性原则**

■ 可分性公理要求太低，设计归类算法时应使得归类结果尽量远离违反可分性公理的情形。由此得出两个设计原则：

- **类紧致性原则**

- **类分离性原则**



■ 类一致性准则

一个好的归类结果应该使得类表示唯一性公理尽可能成立，即使输入类表示与输出类表示尽量一致。

■ 类一致性判据

$J_E : \{X, \vec{X}, \underline{X}, \tilde{X}\} \times \{Y, \vec{Y}, \underline{Y}, \tilde{Y}\} \mapsto R_+$ 是类表示一致性判据，如果 J_E 的最优值对应着 $\{\vec{X}, \underline{X}, \tilde{X}\}$ 与 $\{\vec{Y}, \underline{Y}, \tilde{Y}\}$ 之间具有最小误差的归类结果，类一致性判据可以用来判定归类结果是否遵守类表示唯一公理，甚至可以设计归类算法。



■ 类紧致性原则

每个对象与最相似类和其次相似类的相似程度差别要大。由此可知：

- 类内相似度最大
- 类内方差最小

■ 类紧致判据

对于归类输入, $J_C: \{X, U, \underline{X}, Ds_X\} \mapsto R_+$ 称为类紧致判据, 如果 $J_C\{X, U, \underline{X}, Ds_X\}$ 的最优值对应的归类输入有最大的紧致性, 类紧致性判据可以用来判定归类结果是否遵守类表示唯一公理, 甚至可以设计归类算法。



■ 类分离性原则

一个好的分类结果应该使得类间的距离最大。

• 类分离性判据

$J_s : \{Y, V\} \times \left\{ \{ \underline{Y}_1, \underline{Y}_2, \dots, \underline{Y}_c \} \mid \forall i, \underline{Y}_i \text{ represents } Y_i \right\} \mapsto R_+$ 是类分离判据, 如果 $J_s\{Y, V, \underline{Y}\}$ 的最优值对应着具有最大类间距离的归类结果, 类分离性判据可以用来判定归类结果是否遵守类可分性公理, 甚至可以设计归类算法。



奥卡姆剃刀原则

- “如无必要，勿增实体”。
- 简单就是美。
- 对于归类算法来说，如果很多类表示都可行，则选择简单的类表示。
- 何为简单的类表示？如何度量？
 - 一般情况下，归类算法的输入输出有8元组
 - 单类问题比多类问题简单
 - 特性输入表示与特性输出表示相同时比不同简单
 - 单源数据比多源数据简单
- 对于性能相同或者相近的模型或理论，选择简单的。



BJTU “Machine Learning” Group

于 剑: jianyu@bjtu.edu.cn;

景丽萍: lpjing@bjtu.edu.cn;

田丽霞: lxtian@bjtu.edu.cn;

黄惠芳: hfhuang@bjtu.edu.cn;

李晓龙: hlli@bjtu.edu.cn;

吴 丹: wudan@bjtu.edu.cn;

万怀宇: hywan@bjtu.edu.cn;

王 晶: wj@bjtu.edu.cn.

