

1 机器学习

1.1 机器学习的定义

通俗而言,机器学习是告诉机器一些已知的信息,机器通过一定方式寻找其内在的规律,然后对另一些未知的情形给出预测的过程.严格一些的定义可以参考如下:

定义 1.1 机器学习的定义 这里给出两种比较通用的定义.

1. Herbert Simon的定义: 如果一个系统,能够通过执行某个过程,就此改进了它的性能,那么这个过程就是学习.
2. Tom Mitchell的定义: A computer program is said to learn from experience **E** with respect to some task **T** and some performance measure **P**, if its performance on **T**, as measured by **P**, improves with experience **E**.

适合用机器学习去解决的问题,一般满足如下条件:有内在规律可以学习;规律复杂,很难通过解析或穷举的方法列清楚规则;有足够多能够学习到规律的数据.它尤其适用于那种机制不清(如图像识别),或者机制清但计算量太大(如围棋,量子力学计算),能够接受近似(误差)以换取速度的问题.

1.2 机器学习的分类

机器学习大致可以分成三大类: 监督学习(supervised learning), 无监督学习(unsupervised learning), 强化学习(reinforcement learning).我们现在分别给出其定义和示例.

1.2.1 监督学习

定义 1.2 监督学习 监督学习是根据已经标注的数据集建立模型(或函数),并以此模式推测新的实例的学习过程.

记号 1.3 数据集 通常将监督学习的数据集记作 $\{\mathbf{x}_n, y_n\} (n = 1, \dots, N)$,其中输入量 \mathbf{x}_i 是具有 d 个维度的矢量,即

$$\mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} x_{i1} \\ \vdots \\ x_{id} \end{bmatrix}$$

y_i 则为 \mathbf{x}_i 对应的输出量.输出有时也是一个向量,此时也应当采取相应的表示.

根据数据输出的不同,可以将监督学习分成两类: 回归(Regression), 分类(Classification).

定义 1.4 回归 如果数据集的输出 y 是连续的,那么这一监督学习被称作回归.

回归的典型例子就是直线或曲线的拟合.在下一讲中就主要讨论线性回归.

定义 1.5 分类 如果数据集的输出 y 是离散的,那么这一监督学习被称作分类.

分类的典型例子就是数字的识别.

为了让机器能正确分析并处理样本,我们需要将样本的性质进行量化,即**特征**.

定义 1.6 特征 特征是样本在特征空间中的坐标分量,是输入向量的基本组成部分,每个特征对应样本的一项可观测或可计算的属性.

例如,在预测反应的选择性时,样本为反应体系,特征则为底物的取代基,溶剂,温度,反应时间等数据.不同特征在模型中可能具有不同的重要性;特征的质量和选择往往决定模型性能的上限.

1.2.2 无监督学习

定义 1.7 无监督学习 无监督学习是给定未标记的数据集 $\{\mathbf{x}_n\}$,建立描述其内在关系的模型的学习过程.

无监督学习的常见例子包括聚类分析,关联规则等.