第二章

基础知识

机器学习概论

基于实例的系统
(Case-Based Systems, CBS)

实际情况中

可能对问题的了解非常少，或基本上没有有关求解的知识

- 给定一组输入和结果

$$\{(i_1, o_1), (i_2, o_2), \ldots, (i_n, o_n)\}$$

- 是一个问题的实例，则有一个简单的求解程序：

（x是输入）

```
if x is i1 then o1
elif x is i2 then o2
... ...
elif x is in then on
else "I can't handle it"
```

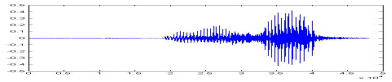
- 这里的实例 → 所有可能实例的一部分
- 为了更好“归纳”出规律，需要计算机进行自动推广
- 也就是“机器学习”

机器学习概论

- 机器学习概念与原理
- 机器学习方法分类
- 机器学习重要思想
- 机器学习与人工智能

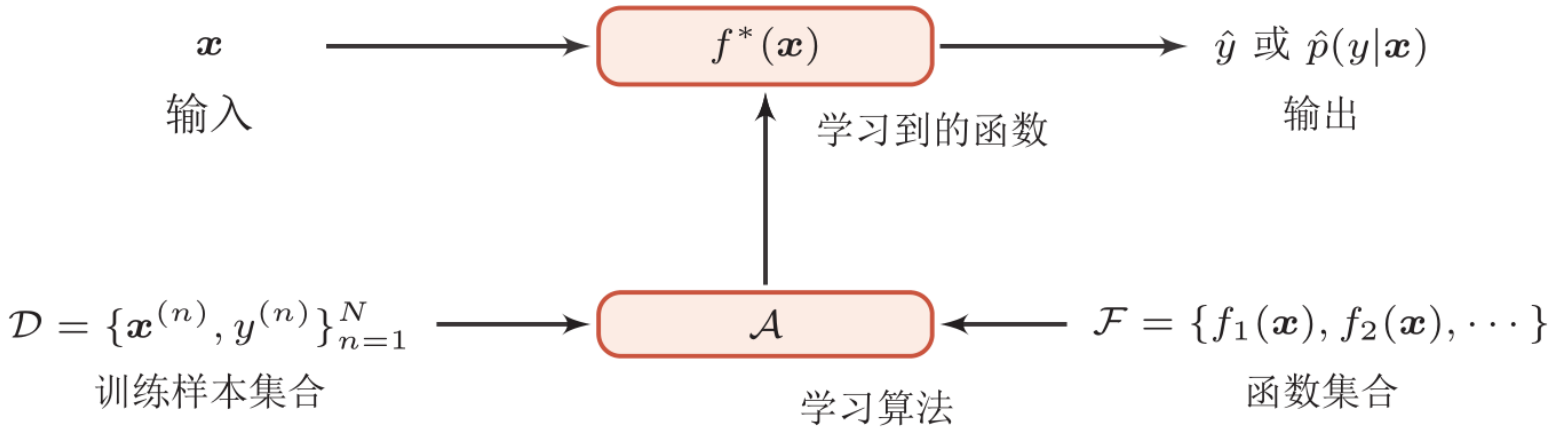
机器学习 ≈ 构建一个映射函数

不同模态数据

- 语音识别 • $f($  $)=$ “你好”
- 图像识别 • $f($  $)=$ “猫”
- 围棋 • $f($  $)=$ “5-5”（落子位置）
- 对话系统 • $f($ “你好” $)=$ “今天天气真不错”

什么是机器学习？

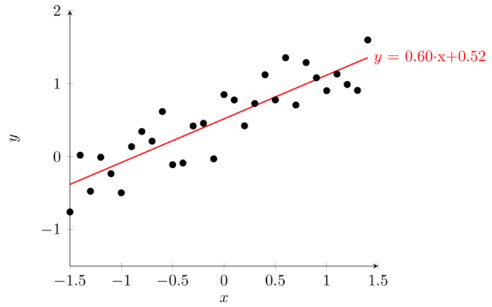
- 机器学习：通过算法使得机器能从大量数据中学习规律，从而对新的样本做决策。
- 规律：决策（预测）函数



挑西瓜为例

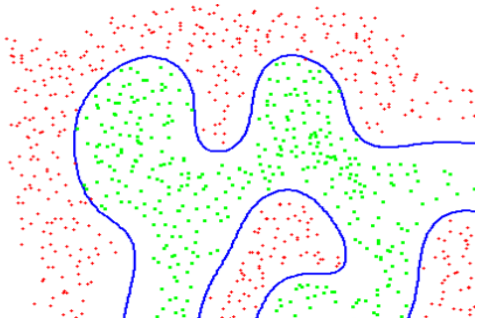
常见的机器学习问题

- 回归



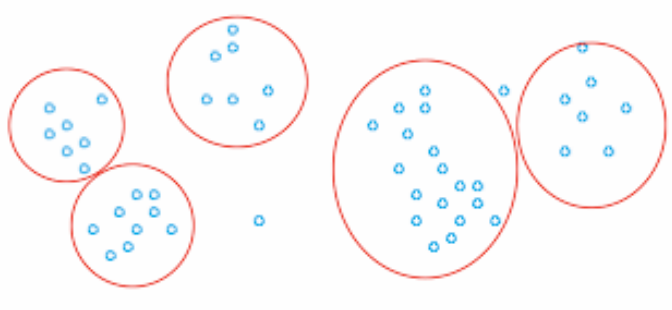
- 给西瓜打分

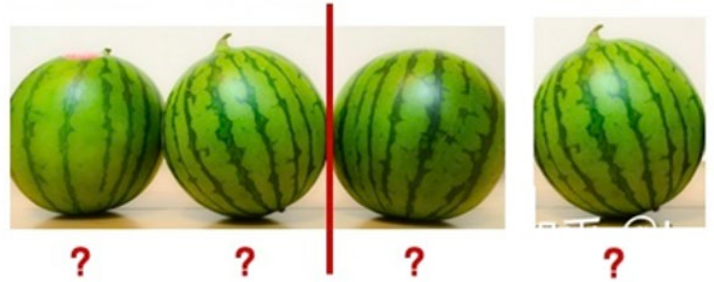
- 分类



- 看西瓜好坏

- 聚类





- 让相似西瓜抱团儿

机器学习基本概念

- 名词解释

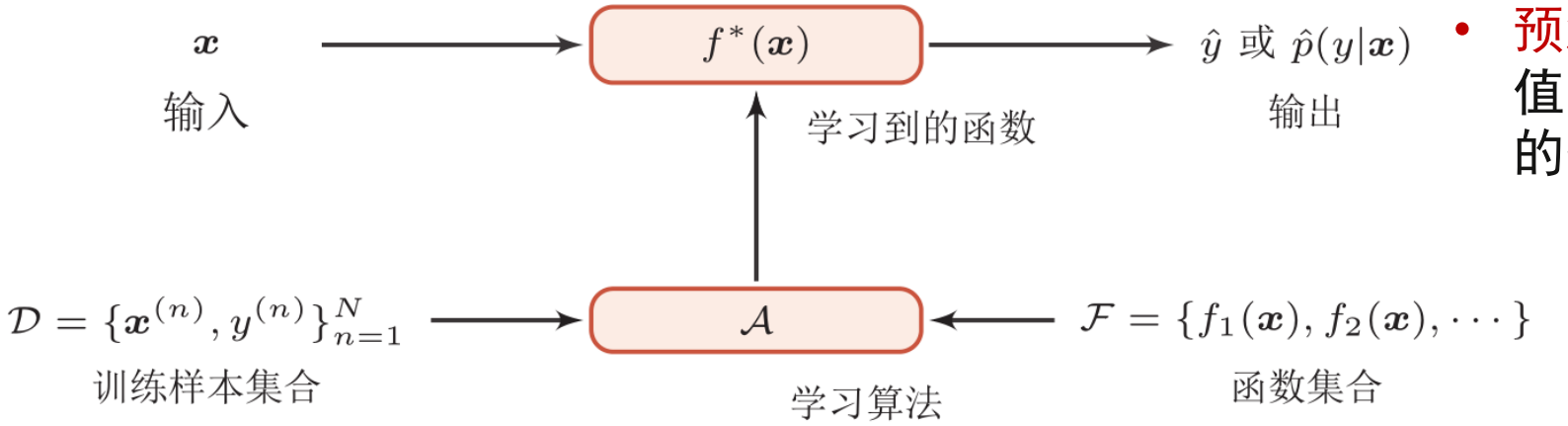
- 特征(Feature)：西瓜的颜色，大小，形状，产地，品牌等
- 标签(Label)： 连续值：西瓜的甜度、水分、成熟度的综合打分；离散值：西瓜的“好”“坏”标签

- 我们通常用一个 D 维向量$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_D]^{\mathrm{T}}$表示一个西瓜的所有特征构成的向量，称为特征向量(Feature Vector)，其中每一维表示一个特征
  - 标签通常用标量y来表示

- 我们可以将一个标记好特征以及标签的西瓜看作一个样本(Sample)，也经常称为示例(Instance)
- 数据集(Data Set)：一组样本构成的集合。一般将数据集分为两部分:
- 训练集(Training Set)：用来训练模型的样本（训练样本）的集合
- 测试集(Test Set)：用来检验模型好坏的样本（测试样本）的集合

机器学习基本概念

- 机器学习的内涵
  - 我们希望让计算机从一个函数集合$F = \{f1(\boldsymbol{x}), f2(\boldsymbol{x}), \cdots\}$中自动寻找一个“最优”的函数$f^*(\boldsymbol{x})$来近似每个样本的特征向量$\boldsymbol{x}$和标签$y$之间的真实映射关系



  - 预测标签的值或者标签的条件概率

  - 独立同分布 (IID)
样本独立地从相同的数据分布$p(\boldsymbol{x}, y)$中抽取

- 寻找最优函数$f^*(\boldsymbol{x})$是机器学习的关键任务
  - 通过学习算法(Learning Algorithm)$\mathcal{A}$来完成
- 这个寻找过程通常称为学习(Learning)或训练(Training)

机器学习的三要素

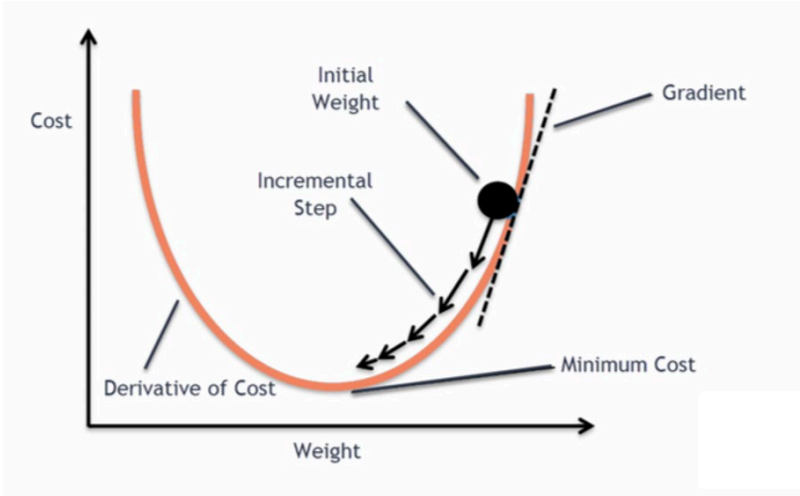
- 模型
  - 线性方法

    $f(\boldsymbol{x}, \theta) = \mathrm{w}^T \boldsymbol{x} + b$
  - 广义线性方法

    $f(\boldsymbol{x}, \theta) = \mathrm{w}^T \phi(\boldsymbol{x}) + b$
  - 解决学什么
- 学习准则
  - 期望风险

    $\mathcal{R}(f)$

    $= \mathbb{E}_{(x,y)\sim p_r(x,y)}[\mathcal{L}(f(\boldsymbol{x}), y)]$
  - 解决学成什么样
- 优化算法
  - 梯度下降



  - 解决怎么学

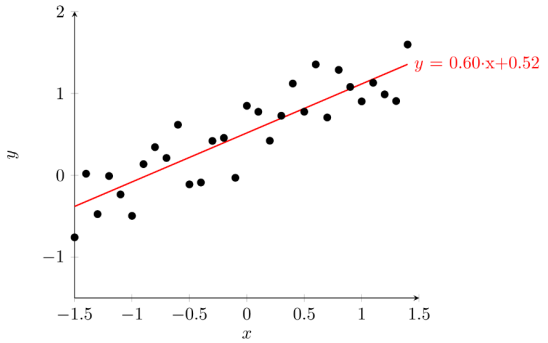
机器学习的三要素

- **模型**

- 输入空间 $\mathcal{X}$ 和输出空间 $\mathcal{Y}$ 构成了一个样本空间
- 样本空间中的样本 $(\boldsymbol{x}, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$，$\boldsymbol{x}$ 和 y 之间的关系可以描述为：
  - 未知的真实映射函数 $y = g(\boldsymbol{x})$，或
  - 真实条件概率分布 $p_r(y|\boldsymbol{x})$
- 模型是 $g(\boldsymbol{x})$ 或 $p_r(y|\boldsymbol{x})$ 的近似
- 我们不知道 $g(\boldsymbol{x})$ 或 $p_r(y|\boldsymbol{x})$ 的具体形式，因而只能根据经验来假设一个函数集合 $\mathcal{F}$，称为假设空间(Hypothesis Space)
  - 选择一个理想的假设(Hypothesis) $f^* \in \mathcal{F}$
- 假设空间 $\mathcal{F}$ 通常为一个参数化的函数族

$$\mathcal{F} = \{f(\boldsymbol{x}; \theta) | \theta \in \mathbb{R}^D\}$$

其中 $f(\boldsymbol{x}; \theta)$ 是参数为 θ 的函数，也称为模型(Model)，D 为参数的数量



- 以线性回归(Linear Regression)为例

模型：

$$f(\mathrm{x}, \theta) = \mathrm{w}^T \mathrm{x} + b$$

机器学习的三要素

- **学习准则**
  - 训练集 $\mathcal{D}=\{(\boldsymbol{x}^{(n)},y^{(n)})\}_{n=1}^{N}$ 应当由 N 个独立同分布(Independently and Identically Distributed，IID)的样本组成
    - 样本分布$p_r(\boldsymbol{x},y)$必须固定（可以未知）
    - 如果$p_r(\boldsymbol{x},y)$本身可变，无法通过这些数据学习

- 一个好的模型 $f(\boldsymbol{x},\theta^*)$应该在所有$(\boldsymbol{x},y)$的可能取值上都与真实映射函数$y=g(\boldsymbol{x})$ 一致
  - 衡量 $f(x,\theta)$ 与 y 分布相似性的常用方法：KL散度或交叉熵
  - 模型$f(\boldsymbol{x},\theta)$的好坏可以通过期望风险(Expected Risk) $\mathcal{R}(\theta)$来衡量

$$\mathcal{R}(f)=\mathbb{E}_{(\boldsymbol{x},y)\sim p_r(\boldsymbol{x},y)}[\mathcal{L}(f(\boldsymbol{x},\theta),y)]$$

真实的数据分布

$$\mathcal{L}(y,f(\boldsymbol{x};\theta))=\begin{cases}0 & \text{if } y=f(\boldsymbol{x};\theta)\\ 1 & \text{if } y\neq f(\boldsymbol{x};\theta)\end{cases}$$

例：

$$=I(y\neq f(\boldsymbol{x};\theta)),$$

$$\mathcal{L}(y,f(\boldsymbol{x};\theta))=\frac{1}{2}\left(y-f(\boldsymbol{x};\theta)\right)^2.$$

$\mathcal{L}(f(\boldsymbol{x},\theta^*),y)$表示损失函数，是一个非负实数函数，用来量化模型预测输出和真实标签之间的差异。

机器学习的三要素

- 风险最小化准则
  - 期望风险未知，通过经验风险近似
    - 给定一个训练集$\mathcal{D}=\{(\boldsymbol{x}^{(n)},y^{(n)})\}_{n=1}^{N}$，我们可以计算的是经验风险(Empirical Risk)，即在训练集上的平均损失：

$$\mathcal{R}_{\mathcal{D}}^{emp}(\theta)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}(y^{(n)},f(\boldsymbol{x}^{(n)};\theta)).$$

    - 实践：寻找一个参数θ^*，使得经验风险函数最小化

$$\theta^*=\arg\min_{\theta}\mathcal{R}_{\mathcal{D}}^{emp}(\theta),$$

    - 称为经验风险最小化 (Empirical Risk Minimization，ERM)准则

正则化：引入参数的先验，使其不要过度地最小化经验风险

结构风险最小化（Structure Risk Minimization，SRM）准则

- 经验风险最小化原则很容易导致模型在训练集上错误率很低，但是在未知数据上错误率很高
- 所谓的过拟合(Overfitting)

机器学习的三要素

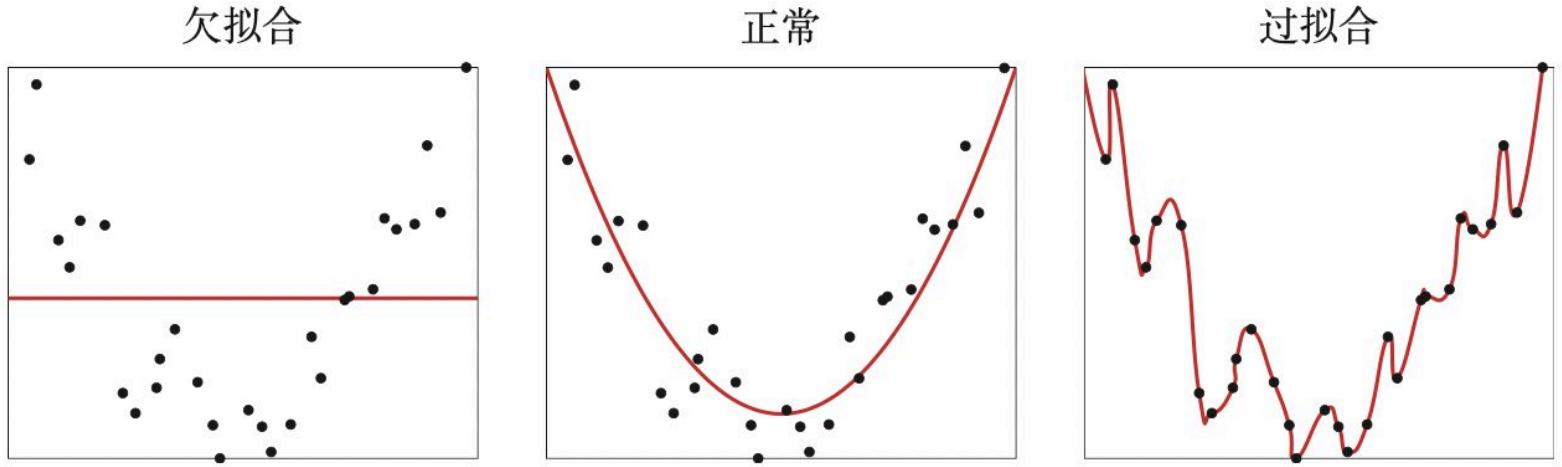
只会做见过的题目，无法举一反三！

• 过拟合与欠拟合

- 和过拟合相反的一个概念是欠拟合(Underfitting)
  - 模型不能很好拟合训练数据，训练集上错误率高
  - 模型能力不足造成

- 过拟合和欠拟合示例

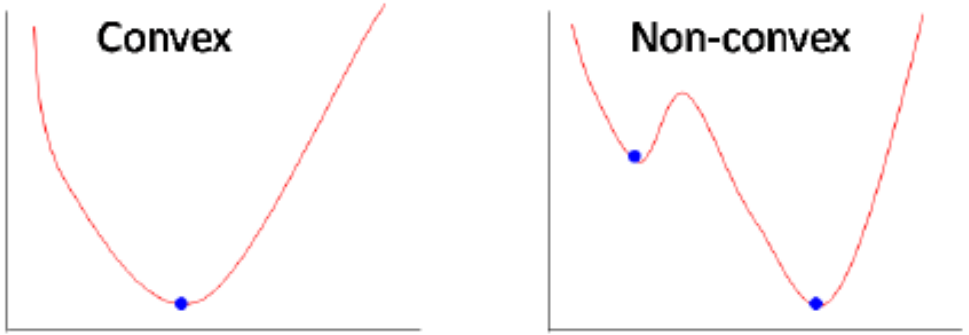
定义 2.1 – 过拟合： 给定一个假设空间 $\mathcal{F}$，一个假设 f 属于 $\mathcal{F}$，如果存在其他的假设 f' 也属于 $\mathcal{F}$，使得在训练集上 f 的损失比 f' 的损失小，但在整个样本空间上 f' 的损失比 f 的损失小，那么就说假设 f 过度拟合训练数据 [Mitchell, 1997].

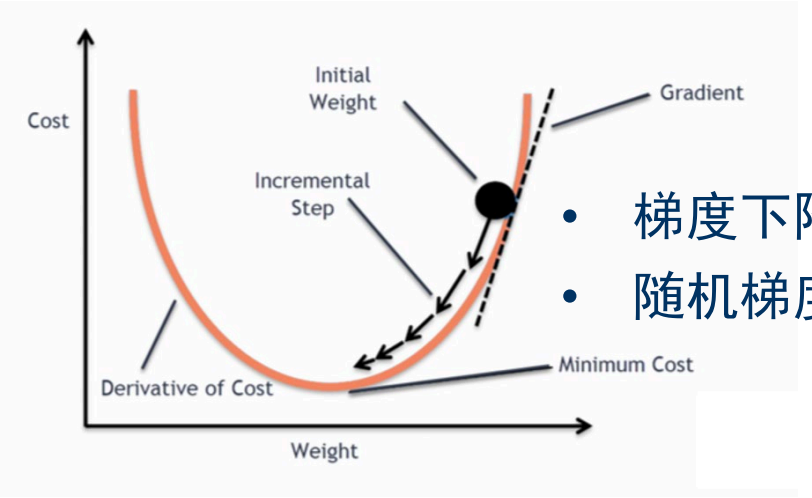


机器学习的三要素

- 优化算法
  - 在确定了训练集$\mathcal{D}$、假设空间$\mathcal{F}$以及学习准则后，如何找到最优的模型$f(\boldsymbol{x}, \theta*)$就成了一个最优化（Optimization）问题.

$$\min_{\mathbf{x}} \quad f(\mathbf{x})$$





- 梯度下降法
- 随机梯度下降法

- 机器学习中的优化又可以分为参数优化和超参数优化
  - 参数：模型$f(\boldsymbol{x}; \theta)$中的参数$\theta$
  - 超参数(Hyper-Parameter)：用来定义模型结构或优化策略的参数

- 机器学习≠优化！
  - 例：最优化不考虑过拟合问题

机器学习概论

- 机器学习原理与概念
- 机器学习方法分类
- 机器学习重要思想
- 机器学习与人工智能

常见的机器学习类型

机器学习三大范式

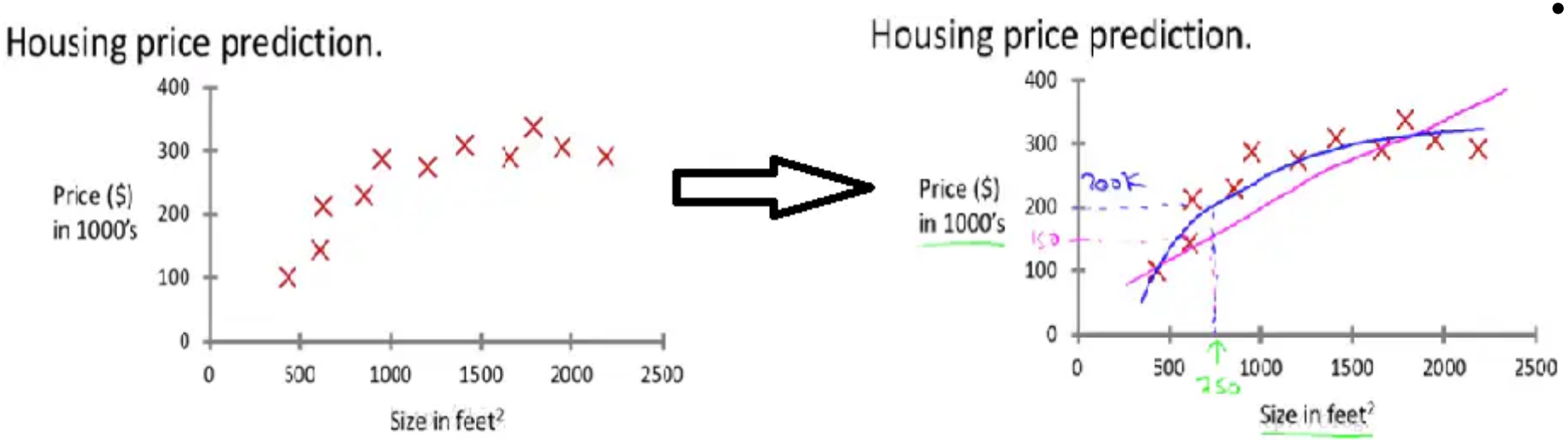
	监督学习	无监督学习	强化学习
训练样本	训练集 $\{(\boldsymbol{x}^{(n)}, y^{(n)})\}_{n=1}^{N}$	训练集 $\{\boldsymbol{x}^{n}\}_{n=1}^{N}$	智能体和环境交互的轨迹 τ 和累积奖励 G_τ
优化目标	$y = f(\boldsymbol{x})$ 或 $p(y\|\boldsymbol{x})$	$p(\boldsymbol{x})$ 或带隐变量 $\boldsymbol{z}$ 的 $p(\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{z})$	期望总回报 $\mathbb{E}_\tau[G_\tau]$
学习准则	期望风险最小化 最大似然估计	最大似然估计 最小重构错误	策略评估 策略改进

- 主流机器学习算法

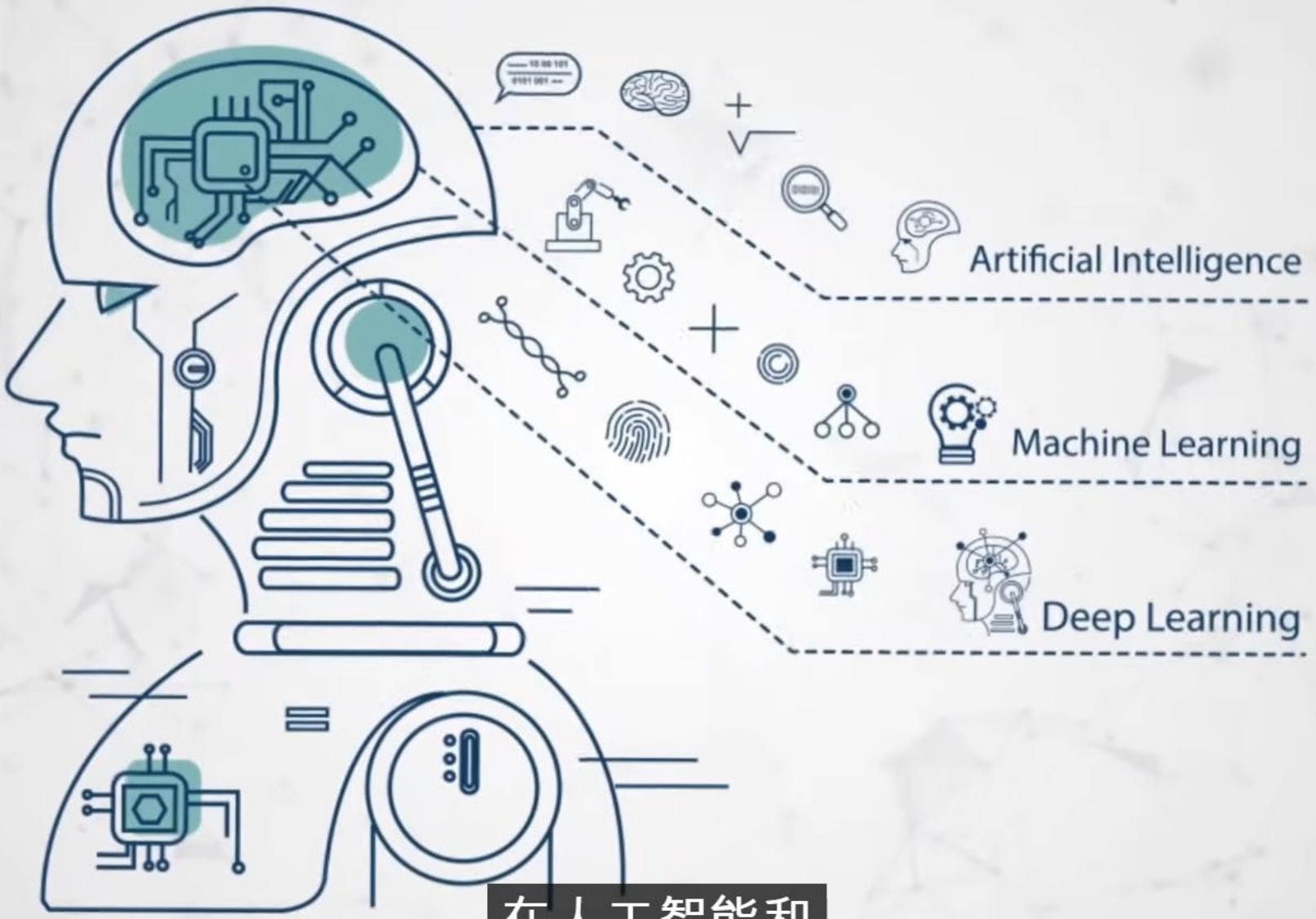
算法	类型	简介
朴素贝叶斯	分类	贝叶斯分类法是基于贝叶斯定定理的统计学分类方法。它通过预测一个给定的元组属于一个特定类的概率，来进行分类。朴素贝叶斯分类法假定一个属性值在给定类的影响独立于其他属性的 —— 类条件独立性。
决策树	分类	决策树是一种简单但广泛使用的分类器，它通过训练数据构建决策树，对未知的数据进行分类。
SVM	分类	支持向量机把分类问题转化为寻找分类平面的问题，并通过最大化分类边界点距离分类平面的距离来实现分类。
逻辑回归	分类	逻辑回归是用于处理因变量为分类变量的回归问题，常见的是二分类或二项分布问题，也可以处理多分类问题，它实际上是属于一种分类方法。
线性回归	回归	线性回归是处理回归任务最常用的算法之一。该算法的形式十分简单，它期望使用一个超平面拟合数据集（只有两个变量的时候就是一条直线）。
回归树	回归	回归树（决策树的一种）通过将数据集重复分割为不同的分支而实现分层学习，分割的标准是最大化每一次分离的信息增益。这种分支结构让回归树很自然地学习到非线性关系。
K邻近	分类+回归	通过搜索K个最相似的实例（邻居）的整个训练集并总结那些K个实例的输出变量，对新数据点进行预测。
Adaboosting	分类+回归	Adaboost目的就是从训练数据中学习一系列的弱分类器或基本分类器，然后将这些弱分类器组合成一个强分类器。
神经网络	分类+回归	它从信息处理角度对人脑神经元网络进行抽象， 建立某种简单模型，按不同的连接方式组成不同的网络。

监督学习
(Supervised Learning)

- 已知输入和输出的情况下训练出一个模型，将输入映射到输出 $g: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$
- 通过学习标记的训练样本来构建预测模型，并依此模型推测新的实例
- 输出可以是一个连续的值（称为回归分析），或是预测一个分类标签（称作分类）



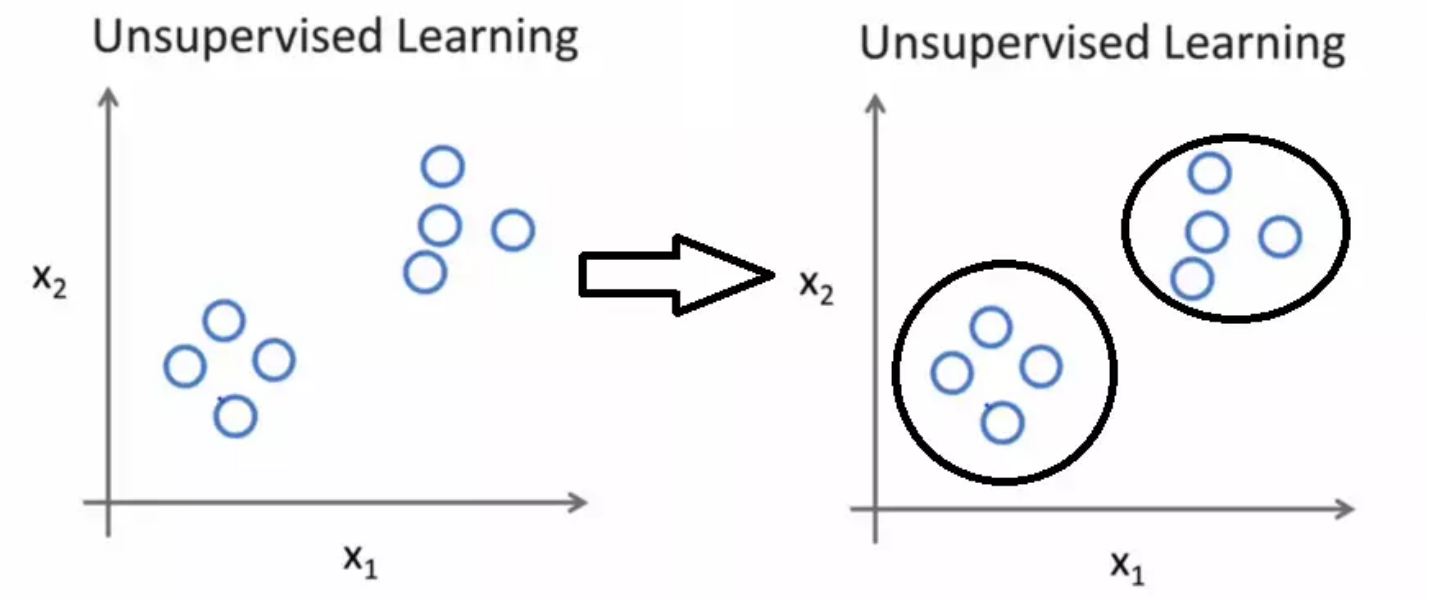
- 典型监督学习算法
  - 朴素贝叶斯
  - 决策树
  - 支持向量机
  - 线性回归
  - 神经网络
  - ……



在人工智能和
机器学习领域，不可避免地需要训练数据

无监督学习
(Unsupervised Learning)

- 不给定事先标记过的训练示例，自动对输入的数据进行分析
- 不需要数据标注，对大数据分析很重要，但在实际应用中性能受限
- 包括聚类、降维等



- 典型无监督学习算法
  - 聚类：K-均值
  - 降维：PCA
  - 自编码器
  - ……

K-means聚类

Goal: Structure documents by topic

Discover groups (*clusters*) of related articles

SPORTS

WORLD NEWS

K-means聚类

Clustering

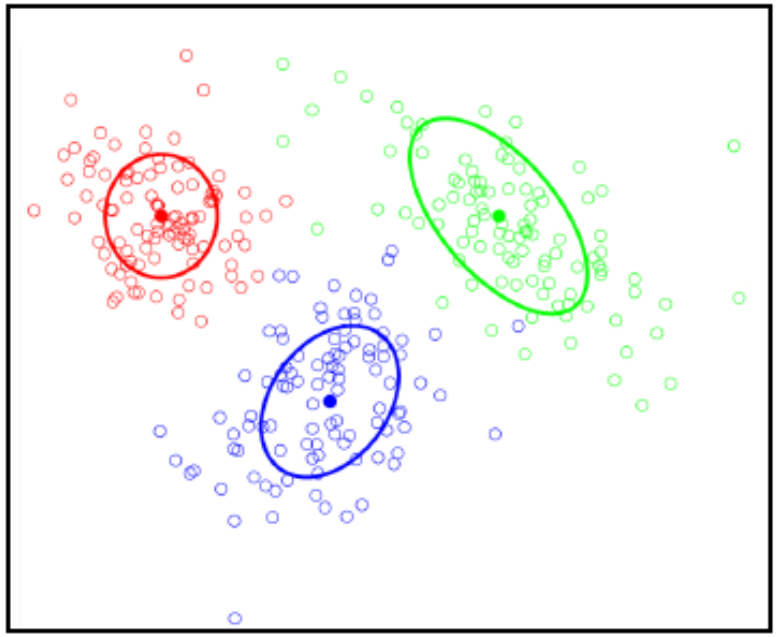
No labels provided

...uncover cluster structure from input alone

Input: docs as vectors $\mathbf{x}_i$

Output: cluster labels z_i

An **unsupervised learning** task



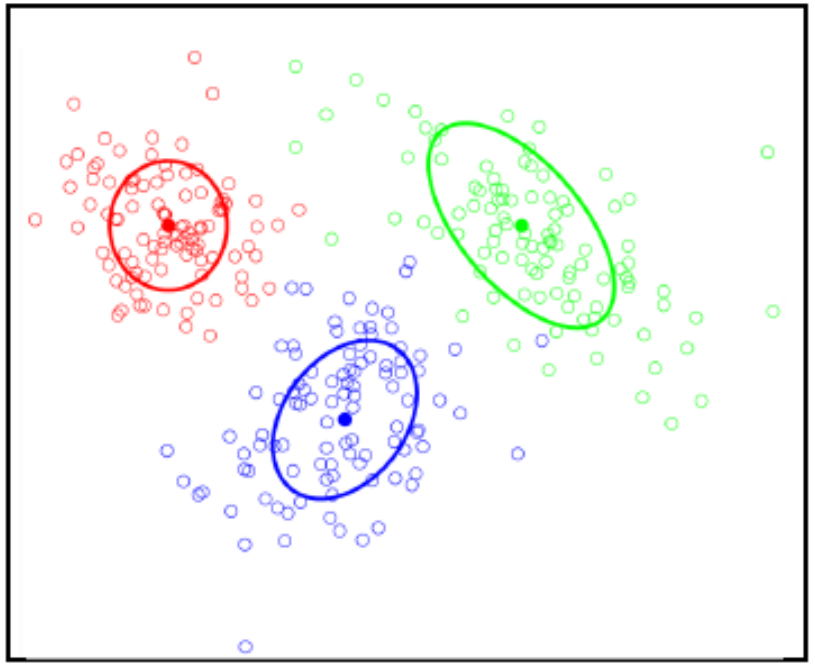
K-means聚类

What defines a cluster?

Cluster defined by center & shape/spread

Assign observation $\mathbf{x}_i$ (doc) to cluster k (topic label) if

- Score under cluster k is higher than under others
- For simplicity, often define score as distance to cluster center (ignoring shape)



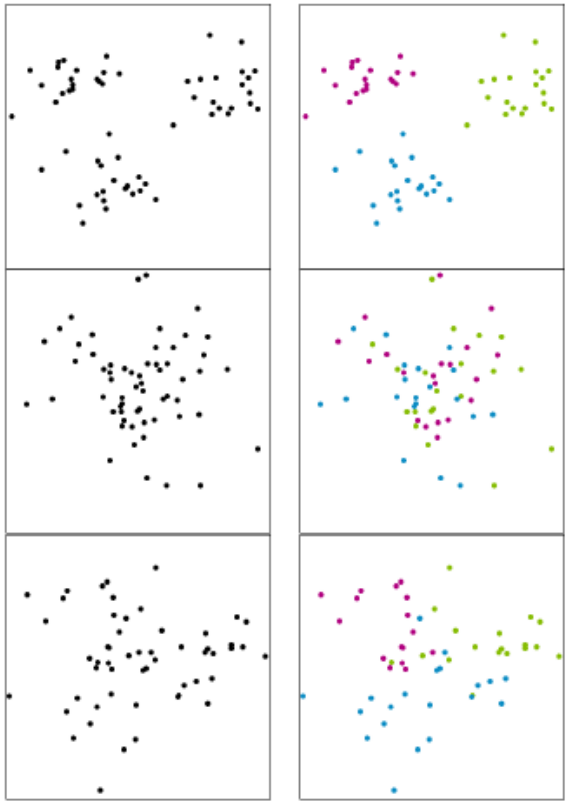
K-means聚类

Hope for unsupervised learning

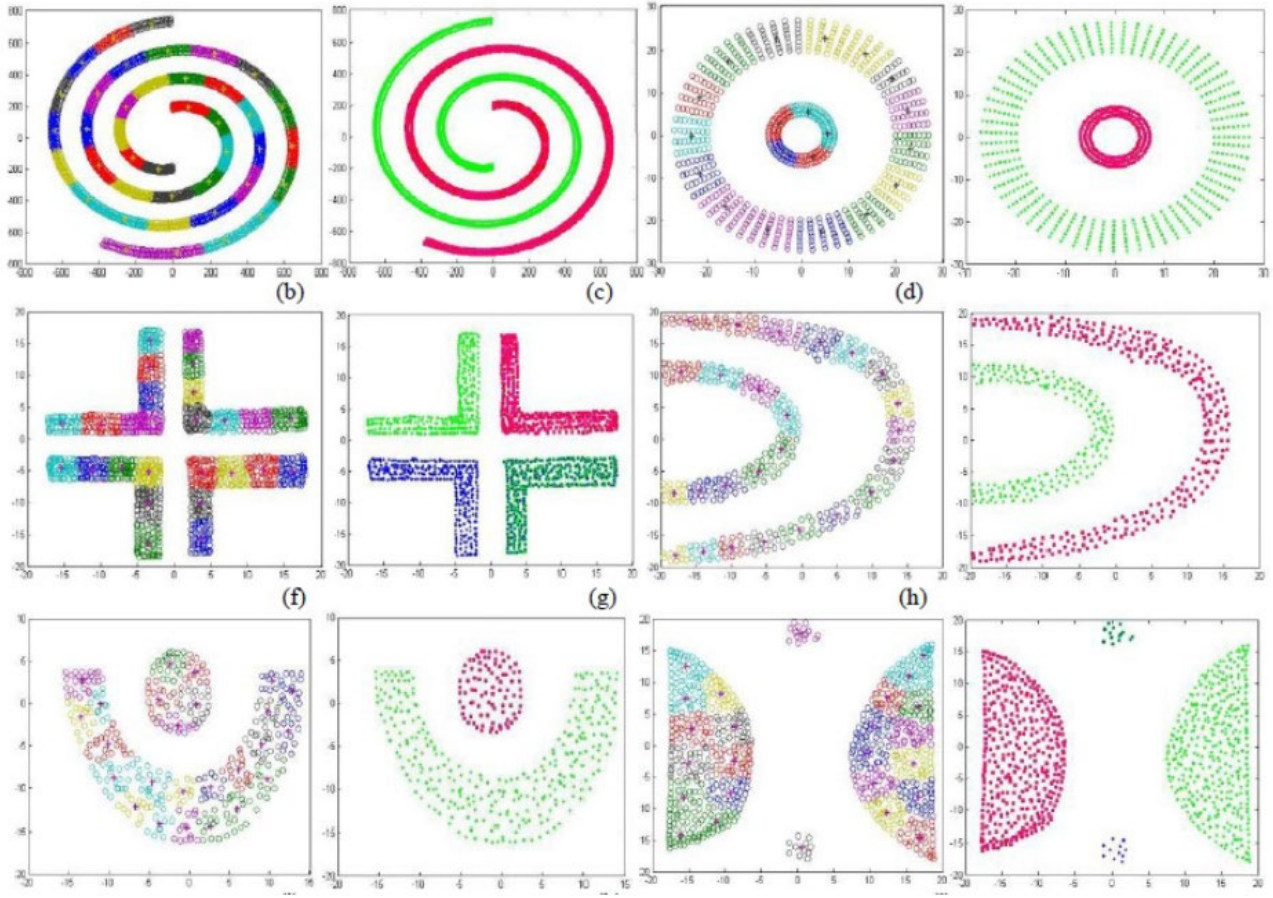
Easy

Impossible

In between



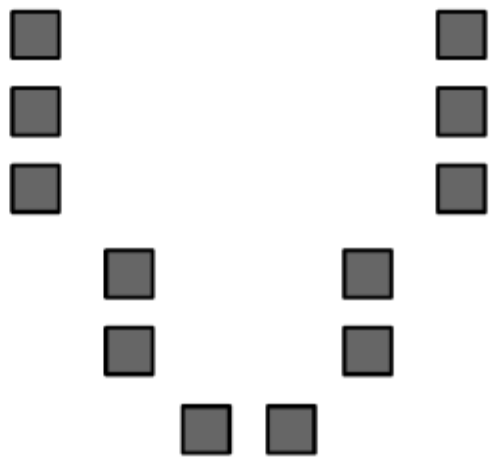
Oth



k-means

Assume

- Score= distance to cluster center (smaller better)

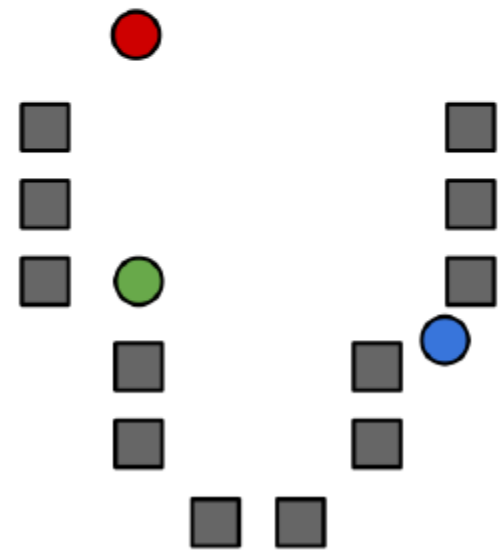


DATA
to
CLUSTER

k-means algorithm

0. Initialize cluster centers

$$\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_k$$

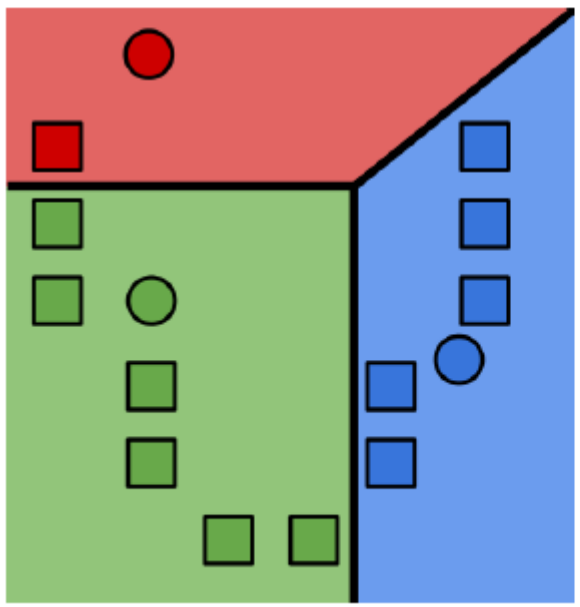


k-means algorithm

0. Initialize cluster centers
1. Assign observations to closest cluster center

$$z_i \leftarrow \arg\min_j ||\mu_j - \mathbf{x}_i||_2^2$$

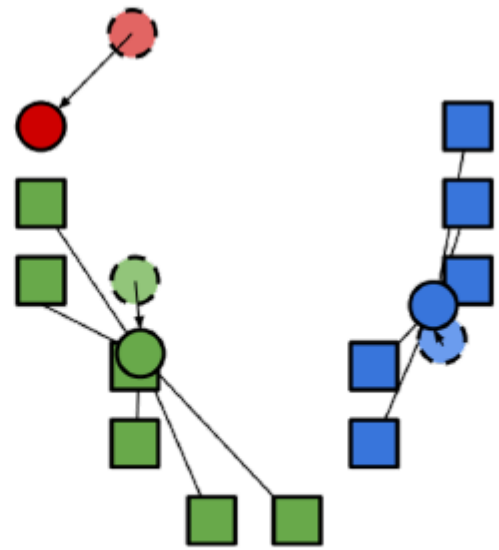
Inferred label for obs i, whereas supervised learning has given label y_i



k-means algorithm

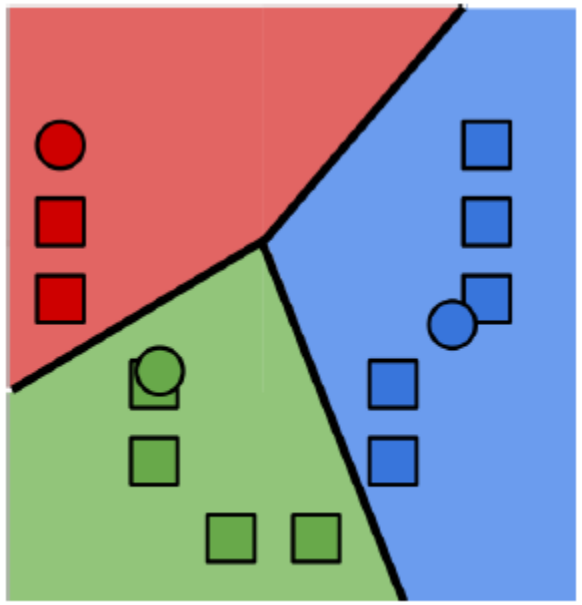
0. Initialize cluster centers
1. Assign observations to closest cluster center
2. Revise cluster centers as mean of assigned observations

$$\mu_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i:z_i=j} \mathbf{x}_i$$



k-means algorithm

0. Initialize cluster centers
1. Assign observations to closest cluster center
2. Revise cluster centers as mean of assigned observations
3. Repeat 1.+2. until convergence



Limitations of k-means

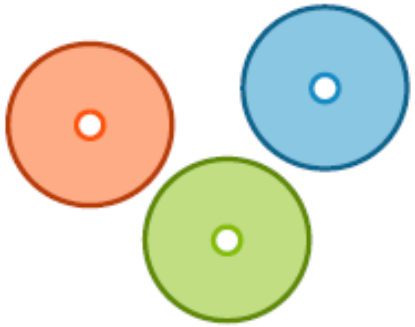
Assign observations to closest cluster center

$$z_i \leftarrow \arg\min_j ||\mu_j - \mathbf{x}_i||_2^2$$

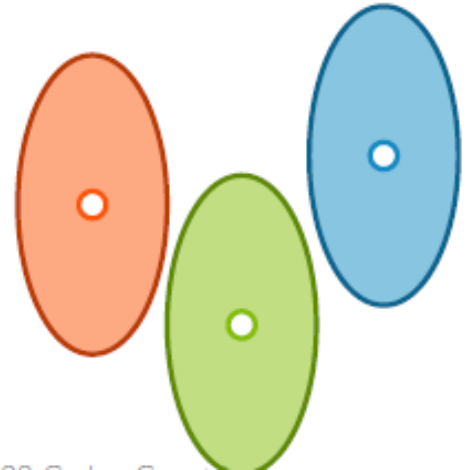
Only center matters

Can use weighted Euclidean, but requires *known* weights

Equivalent to assuming spherically symmetric clusters

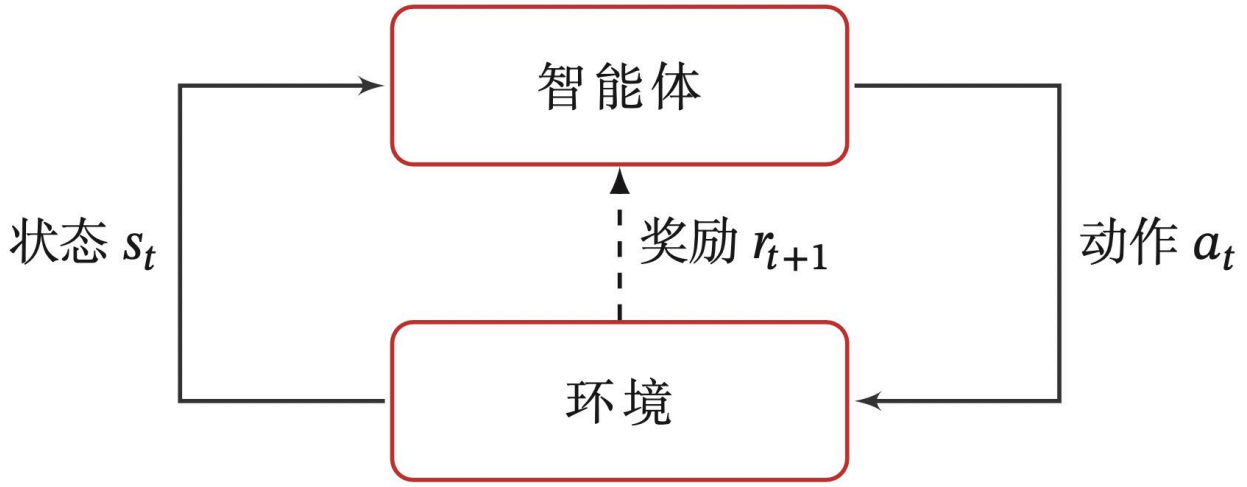


Still assumes all clusters have the same axis-aligned ellipses



强化学习
(Reinforcement Learning)

- 强化学习问题可以描述为一个智能体从与环境的交互(试错，Trial-and-Error)中不断学习以完成特定目标(比如取得最大奖励值)
- 强化学习就是智能体不断与环境进行交互，并根据经验调整其策略来最大化其长远的所有奖励的累积值



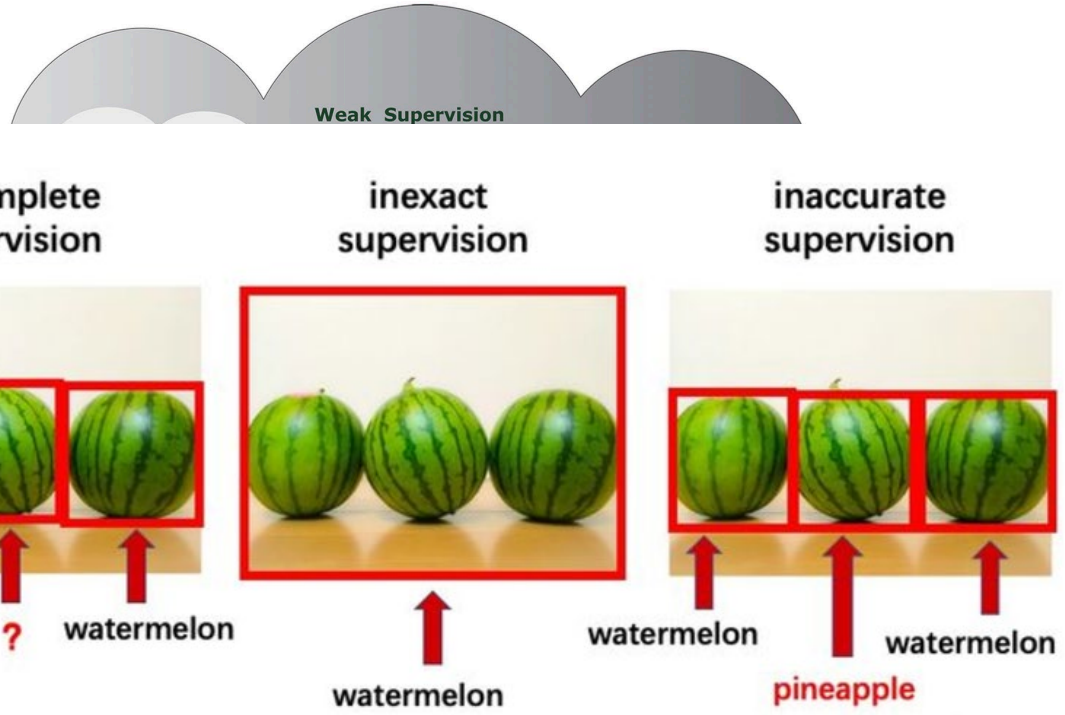
- 典型强化学习算法
  - 基于值函数
    - Q学习
    - 深度Q网络
  - 基于策略：
    - 策略梯度
    - 近端策略优化
  - ……

弱监督学习
(Weakly Supervised Learning)

监督学习 → 数据标注成本太高；
无监督学习 → 学习过程困难、发展缓慢
↓
弱监督学习
数据标签允许是不完全的、不确切、不精确的

- 不完全监督 (Incomplete supervision)
- 不确切监督 (Inexact supervision)
- 不精确监督 (Inaccurate supervision)

Weakly supervised learning is an umbrella term covering a variety of studies that attempt to construct predictive models by learning with weak supervision.



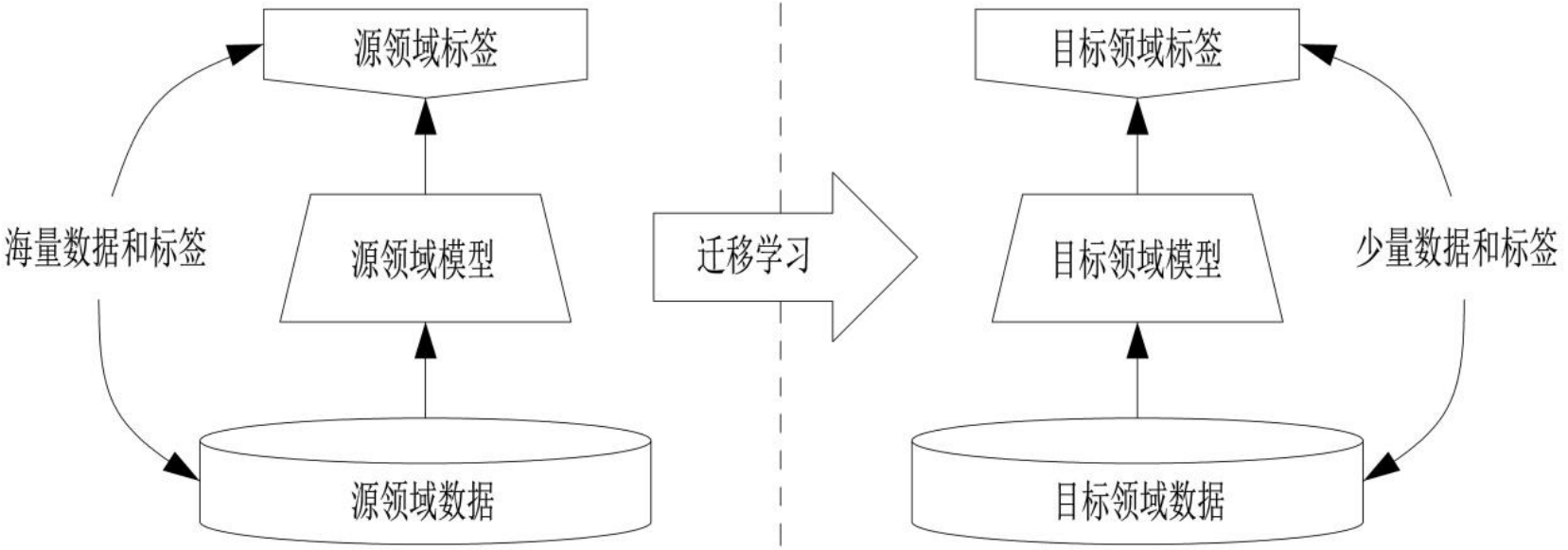
[1] Zhi-Hua Zhou, A brief introduction to weakly supervised learning, *National Science Review*, Volume 5, Issue 1, January 2018, Pages 44–53,

迁移学习
(Transfer Learning)

白天　夜晚

迁移

- 迁移学习(Transfer Learning)：将已经学习过的知识迁移应用到新的问题中
- 在数据独立同分布不成立的条件下



✧ 迁移学习的关键点

- 用什么迁移(What to transfer)
- 如何进行迁移(How to transfer)
- 何时适合迁移(When to transfer)

桥梁是什么？

基于实例的迁移

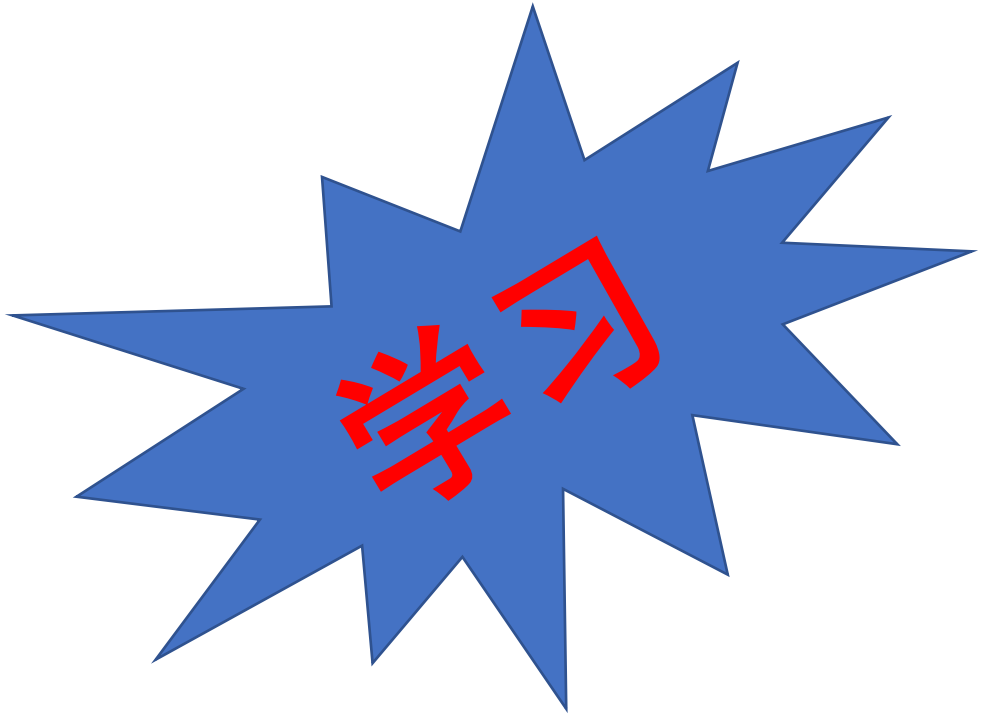
基于特征的迁移

基于共享参数的迁移

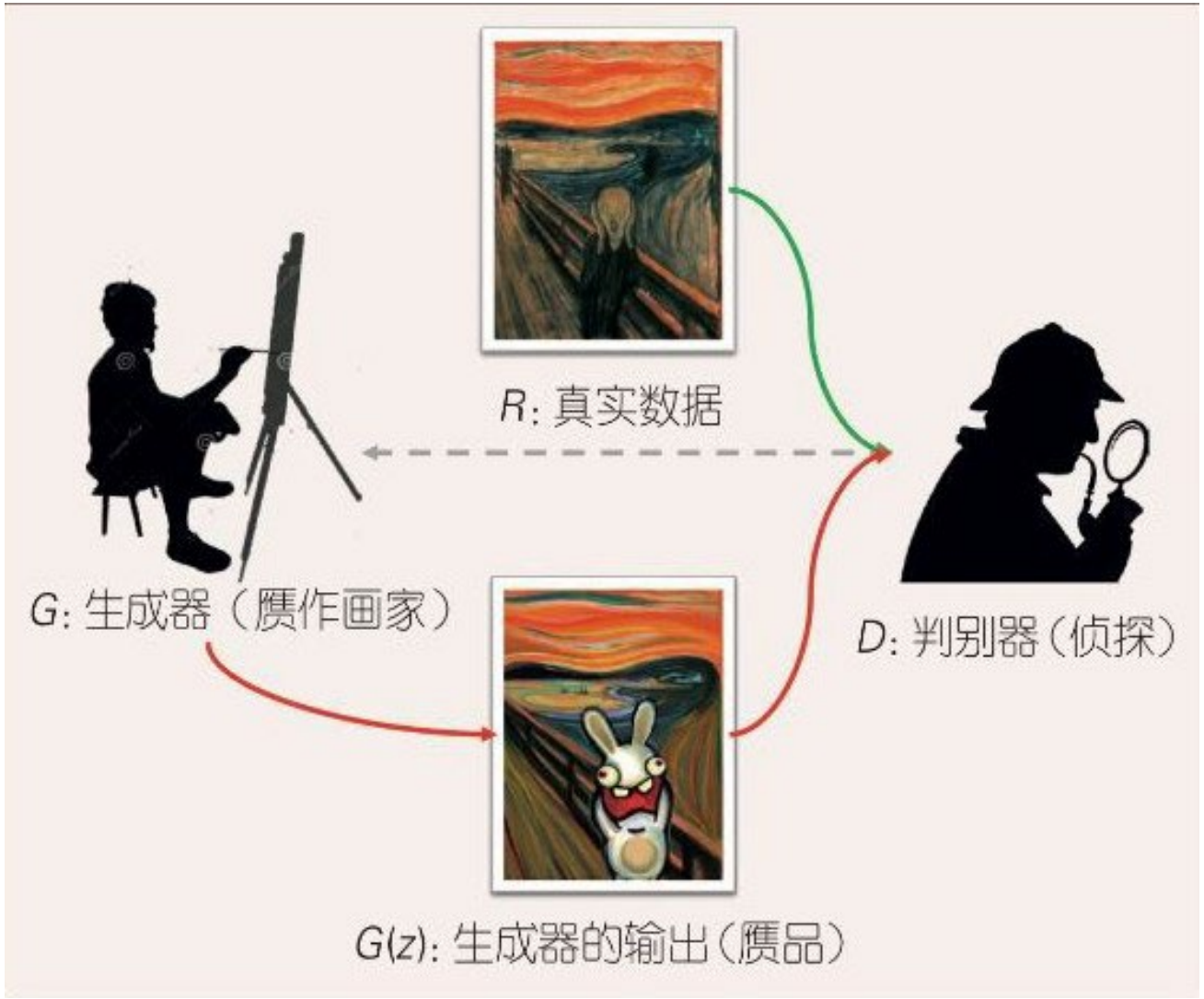
假设领域间具有公共知识结构

更多……学习

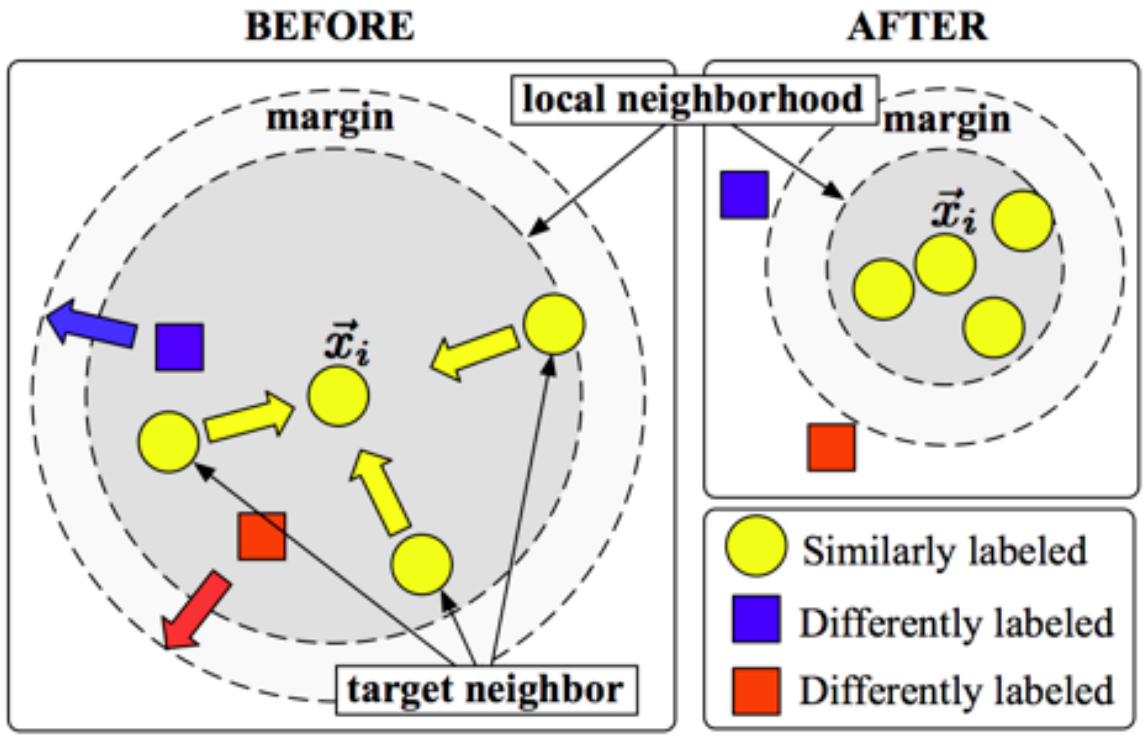
- Dictionary Learning 字典学习
- Representation Learning 表示学习
- Self-supervised Learning 自监督学习
- Metric Learning 度量学习
- Contrastive Learning 对比学习
- Adversarial Learning 对抗学习
- Meta Learning 元学习
- ……



对抗学习



对比学习


BEFORE
AFTER
margin
local neighborhood
margin
$\vec{x}_i$
$\vec{x}_i$
target neighbor
Similarly labeled
Differently labeled
Differently labeled

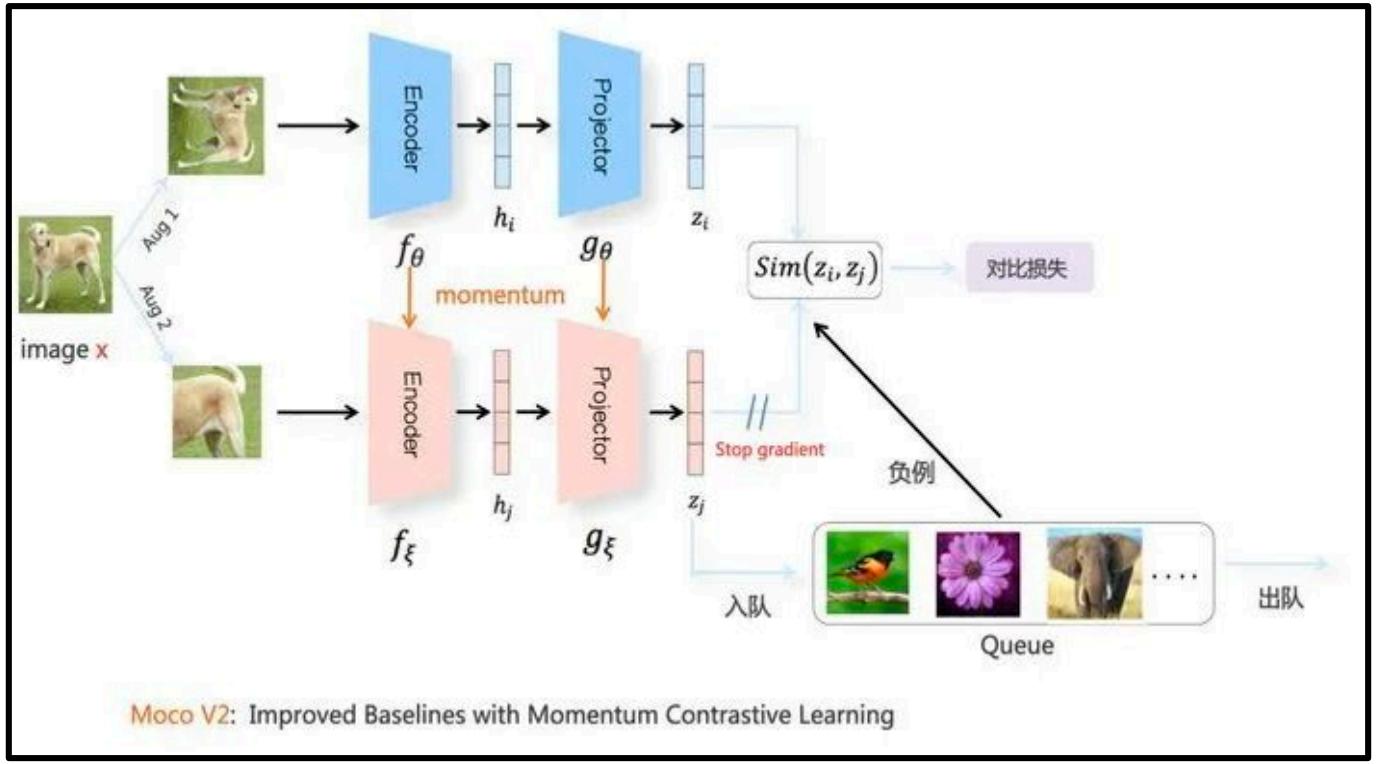


image x
Aug 1
Aug 2
Encoder
Projector
h_i
z_i
f_θ
g_θ
momentum
Encoder
Projector
h_j
z_j
f_ξ
g_ξ
$Sim(z_i, z_j)$
对比损失
Stop gradient
负例
入队
出队
Queue
Moco V2: Improved Baselines with Momentum Contrastive Learning

机器学习概论

- 机器学习原理与概念
- 机器学习方法分类
- **机器学习重要思想**
- 机器学习与人工智能

常用的定理

- 没有免费午餐定理(No Free Lunch Theorem，NFL)

- 对于基于迭代的最优化算法，不存在某种算法对所有问题（有限的搜索空间内）都有效。如果一个算法对某些问题有效，那么它一定在另外一些问题上比纯随机搜索算法更差

不存在一种机器学习算法适合于任何领域或任务

没有免费午餐定理（No Free Lunch Theorem，NFL）是由Wolpert 和Macerday在最优化理论中提出的

常用的定理

- 丑小鸭定理(Ugly Duckling Theorem)
  - 丑小鸭与白天鹅之间的区别

    和两只白天鹅之间的区别一样大

什么才是相似的？

分类结果取决于选择什么特征作为分类标准，
而特征的选择又依赖于任务的目的。

这里的“丑小鸭”是指白天鹅的幼雏，而不是“丑陋的小鸭子”

1969 年由渡边慧提出

常用的定理

- 奥卡姆剃刀原理(Occam's Razor)
  - 如无必要，勿增实体

机器学习中的正则化思想：简单的模型泛化能力更好。如果有两个性能相近的模型，我们应该选择更简单的模型

Entities should not be multiplied unnecessarily

由14世纪逻辑学家William of Occam提出的一个解决问题的法则：“如无必要，勿增实体”.

归纳偏置
(Inductive Bias)

归纳性偏好

- 很多学习算法经常会对学习的问题做一些假设，这些假设就称为归纳偏置

归纳偏置/偏好：在学习算法之初，就人为地认为某一种解决方案优先于其他，这种偏好既可以是在底层数据分布的假设上，也可以体现在模型设计上。
归纳偏置可以理解为人总结出的一些泛化性比较强的规则，然后把这个规则用于模型筛选和算法设计。

- 归纳偏置在贝叶斯学习中也经常称为先验 (Prior)。
- 在朴素贝叶斯分类器中，我们会假设每个特征的条件概率是互相独立的。
- 在最近邻分类器中，我们会假设在特征空间中，一个小的局部区域中的大部分样本都同属一类。
- 深度学习中的归纳偏置.....

一个典型的归纳偏置例子是奥卡姆剃刀，它假设最简单而又一致的假设是最佳的。

机器学习概论

- 机器学习原理与概念
- 机器学习方法分类
- 机器学习重要思想
- 机器学习与人工智能

机器学习与人工智能

- 机器学习
- 模式识别
- 人工智能
- 深度学习
- 数据挖掘
- ……

机器学习与人工智能

- 模式识别：自己建立模型刻画已有的特征，样本是用于估计模型中的参数。模式识别的落脚点是感知
- 机器学习：根据样本训练模型，如训练好的神经网络是一个针对特定分类问题的模型；重点在于“学习”，训练模型的过程就是学习；机器学习的落脚点是思考，是一种实现人工智能的方法
- 深度学习：深度学习本来并不是一种独立的学习方法，其本身也会用到有监督和无监督的学习方法来训练深度神经网络，是一种实现机器学习的技术。

扩展与思考（Optional）

- 调研与学习：初步了解机器学习三大范式下的典型算法、特点与应用；
- 调研与思考：假设你在应用机器学习算法解决问题的时候，如果实验的测试结果不理想，如何判断可能是过拟合还是欠拟合？有什么通用的解决思路吗？