计算复杂度理论与机器学习中的算法

湖南大学信息科学与工程学院

提 纲

15.1 图灵机的思想与模型简介

15.2 计算复杂性理论简介

15.3 常见NP完全问题

15.4 机器学习中的算法

15.1 图灵机的思想与模型简介

图灵是谁?　　图灵及其贡献

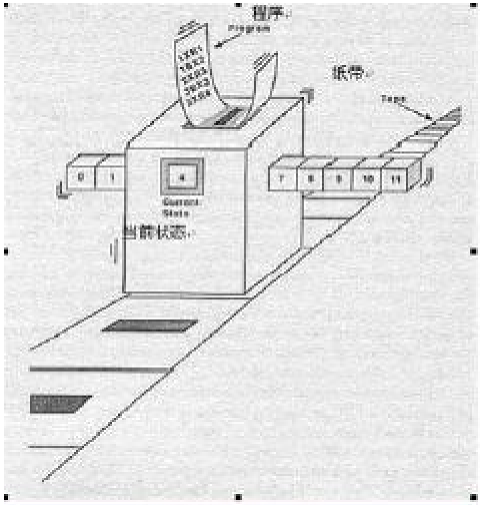
◆图灵(Alan Turing, 1912~1954)，出生于英国伦敦，19 岁入剑桥皇家学院，22 岁当选为皇家学会会员。

◆1937 年，发表了论文《论可计算数及其在判定问题中的应用》，提出了**图灵机模型**，后来，冯・诺依曼根据这个模型设计出历史上第一台电子计算机。

◆1950 年，发表了划时代的文章：《机器能思考吗?》,成为了人工智能的开山之作。

◆计算机界于1966年设立了最高荣誉奖：**ACM 图灵奖**。

你能查阅一下哪些人获得图灵奖了吗？
因为什么贡献而获奖呢？

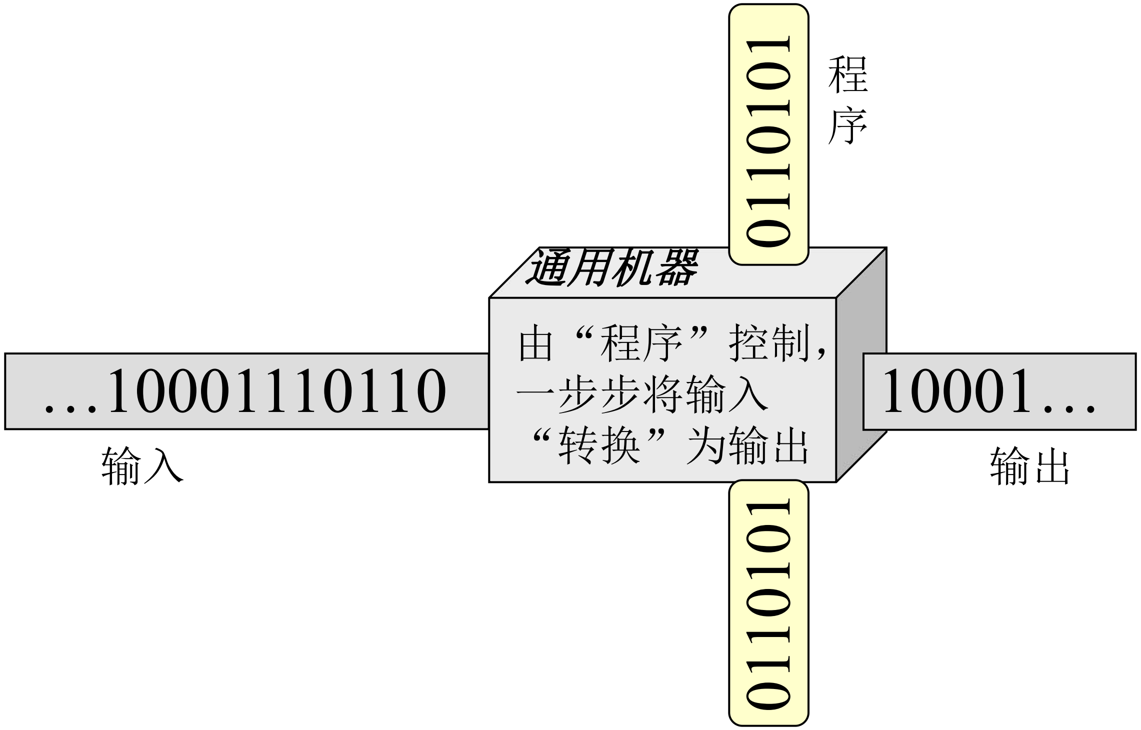


图灵机装置示意图

15.1 图灵机的思想与模型简介

图灵认为什么是计算？　　**计算**

◆所谓**计算**就是计算者(人或机器)对一条两端可无限延长的纸带上的一串0或1，执行指令一步一步地改变纸带上的0或1，经过有限步骤最后得到一个满足预先规定的符号串的**变换过程**。



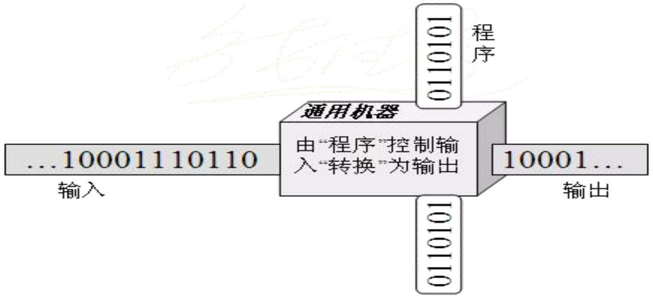
15.1 图灵机的思想与模型简介

图灵机的思想

是关于数据、指令、程序及程序/指令自动执行的基本思想。

- 输入被制成一串0和1的纸带，送入机器中----数据。如00010000100011…
- 机器可对输入纸带执行的基本动作包括：“翻转0为1”，或“翻转1为0”，“前移一位”，“停止”。
- 对基本动作的控制----指令，机器是按照指令的控制选择执行哪一个动作，指令也可以用0和1来表示：**01**表示“翻转0为1”(当输入为1时不变)，**10**表示“翻转1为0”(当输入0时不变), **11**表示“前移一位”, **00**表示“停止”。
- 输入如何变为输出的控制可以用指令编写一个程序来完成, 如: 011110110111011100…
- 机器能够读取程序，按程序中的指令顺序读取指令，

读一条指令执行一条指令。由此实现自动计算。



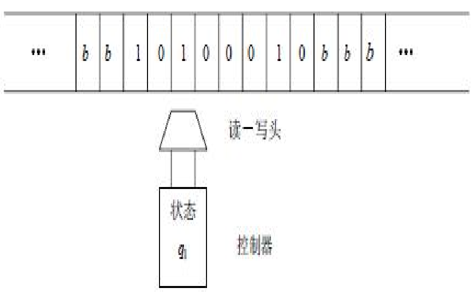
图灵机是什么？

图灵机模型

- 基本的**图灵机模型**为一个七元组,如右图示意
- **几点结论:**
- (1) 图灵机是一种思想模型，它由一个控制器(有限状态转换器)，一条可无限延伸的带子和一个在带子上左右移动的读写头构成。
- (2) **程序是五元组<q,X,Y,R(或L或N),p>形式的指令集**。其定义了机器在一个特定状态q下从方格中读入一个特定字符X时所采取的动作为在该方格中写入符号Y, 然后向右移一格R (或向左移一格L或不移动N), 同时将机器状态设为p供下一条指令使用。

$M=(Q,\Sigma,\Gamma,\delta,q_0,B,F)$

其中:



Q:状态的有穷集合

q_0:开始状态

F:终止状态集合

Γ:带符号表

B:空白符号

Σ:输入字母表

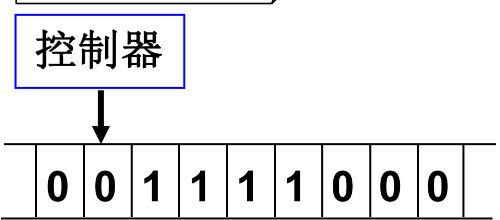
δ:移动函数,(1):$\delta(q,X)=(p,Y,R)$表示M在状态q读入符号X,将状态改为p,并在这个X所在的带方格中印刷符号Y,然后将读头向右移动一格.

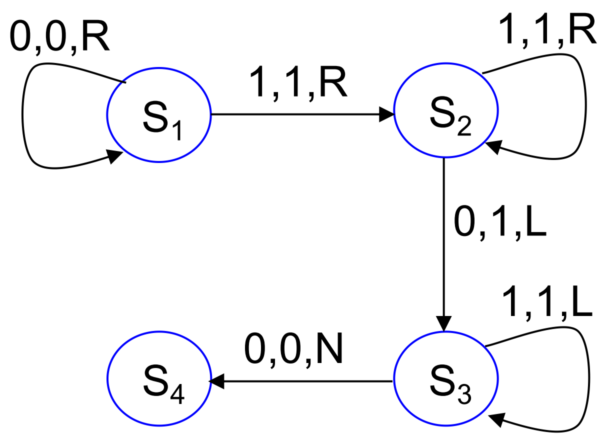
(2):$\delta(q,X)=(p,Y,L)$表示M在状态q读入符号X,将状态改为p,并在这个X所在的带方格中印刷符号Y,然后将读头向左移动一格.

15.1 图灵机的思想与模型简介

图灵机模型示例。 (注:圆圈内的是状态，箭线上的是<X,Y,R>，其含义见前页)

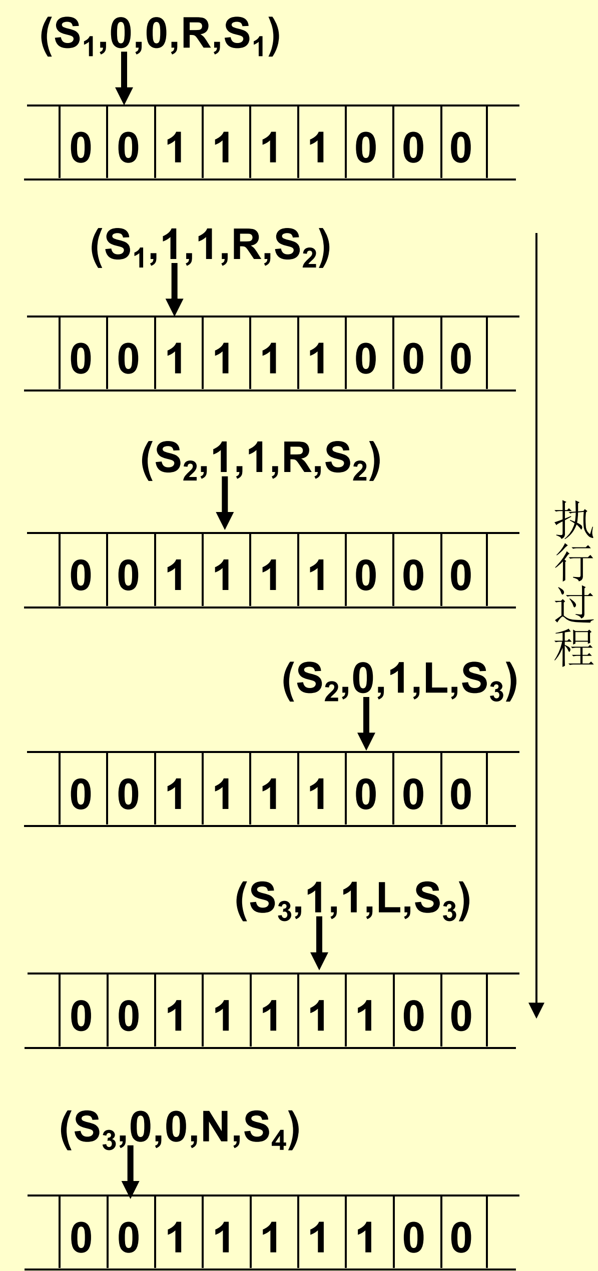
(S_1,0,0,R,S_1)
(S_1,1,1,R,S_2)
(S_2,1,1,R,S_2)
(S_2,0,1,L,S_3)
(S_3,1,1,L,S_3)
(S_3,0,0,N,S_4)





S_1：开始状态
S_2：右移状态
S_3：左移状态
S_4：停机状态

功能：将一串1的后面再加一位1



几点结论(续):

◆(3)**图灵机模型**被认为是计算机的基本理论模型

----计算机是使用相应的程序来完成任何设定好的任务。图灵机是一种离散的、有穷的、**构造性的**问题求解思路，**一个问题的求解可以通过构造其图灵机(即程序)来解决**。

◆(4)图灵认为：**凡是能用算法方法解决的问题也一定能用图灵机解决；凡是图灵机解决不了的问题任何算法也解决不了**----图灵可计算性问题。

提 纲

15.1 图灵机的思想与模型简介

15.2 计算复杂性理论简介

15.3 常见NP完全问题

15.4 机器学习中的算法

最优化问题 vs 判定问题

最优化问题：给定问题，找出所有满足条件的解中值最优的那个

判定问题：给定问题，判断是否有满足条件的解

判定问题的形式化描述简单，而且很多优化问题的难度与判定问题的难度相关

示例 -最短路径

- 最优化问题：给定一个带权图G=(V, E, W)，计算V中s到V中点t之间的最短路径
- 判定问题：给定一个带权图G=(V, E, W)，计算V中s到V中点t之间是否有一条路径
- 判定问题和最优化问题之间的关系：给定一个带权图G=(V, E, W)，计算V中s到V中点t之间是否有一条长度为k的路径

示例-整数序列

- 最优化形式：求一个整数序列中出现频率最高的数
- 判定形式：一个整数序列中是否存在出现频率为k的数。
- 最优化->判定：枚举k，返回判定有解的最大的一个。

示例-图着色

- 给定一个简单无向图，要给图的每一个顶点着色，要求相邻的顶点着不同的颜色。
- 最优化形式：最少需要多少种颜色
- 判定形式：是否存在最多只需要k种颜色的解
- 最优化->判定：枚举k，返回判定有解的最大的一个。

瓶颈生成树

一个无向图G上的瓶颈生成树是G上一种特殊的生成树。一个瓶颈生成树T上权重最大边的权重是G中所有生成树中最小的。T上最大权重的边的权重称为T的值。

求解算法： 1. 求出边权值的中位数（类似于求nth element一类问题）M，以此将图G的边按权值分成两部分，一部分小于等于M，另一部分大于M；

2. 利用b（P372）提出的方法判断图G瓶颈生成树的T值是否不超过M，也就是看这个T值位于大小哪半边；

3. 若位于小半边，则将大半边里的边删除，并回到步骤1；

4. 若位于大半边，则小半边组成的图必不连通，将其连通分量各收缩成一个点，再和大半边重新组成一个图G2，并回到步骤1。

P类、EXP类和R类问题

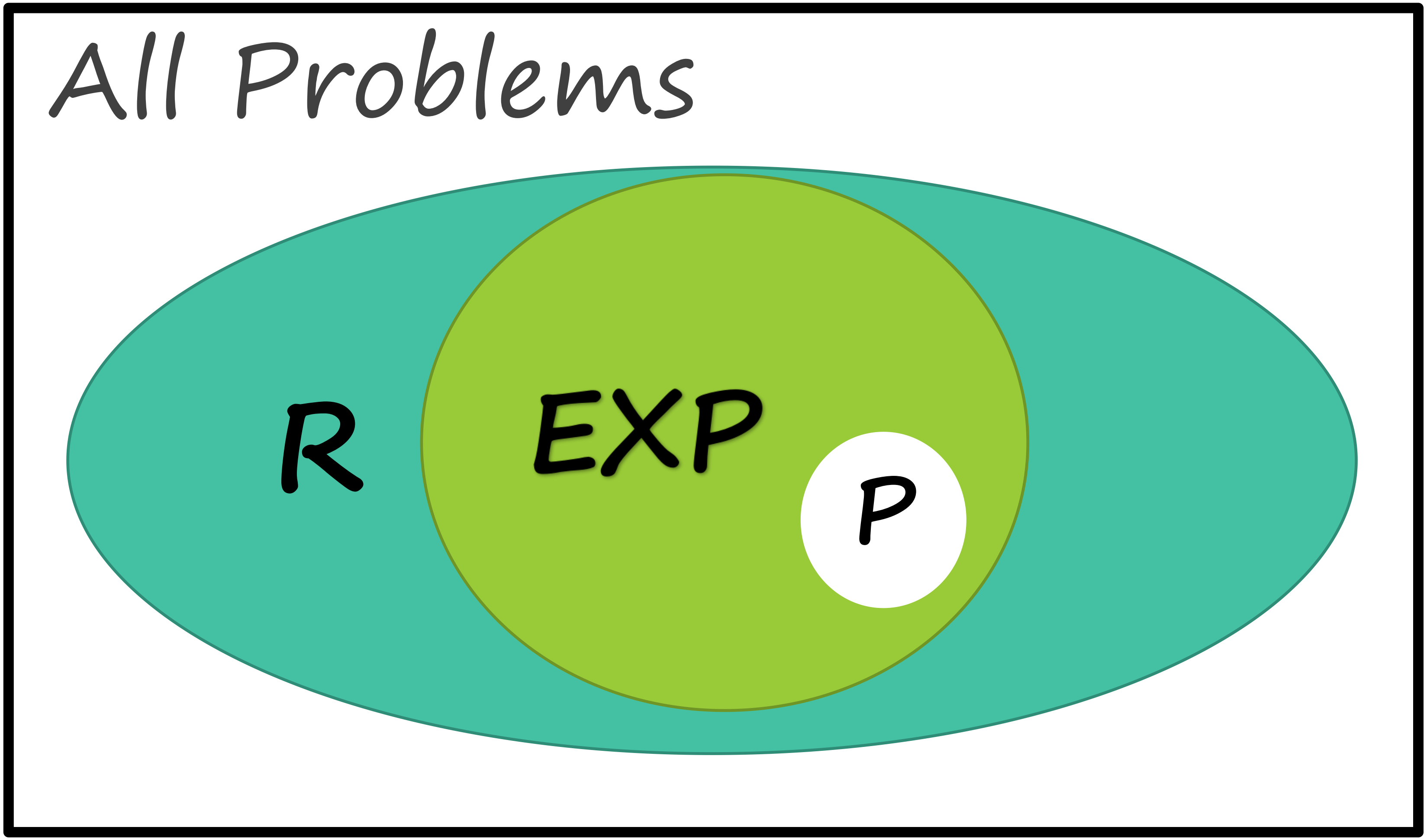
P类：在多项式时间可解的判定问题类（$O(n^k)$）

- 最短路径问题

EXP类：在指数级时间可解的判定问题类

- 围棋问题

R类：在有限的时间里可解的判定问题类，即计算机可解的问题


All Problems
R
EXP
P

NP类问题

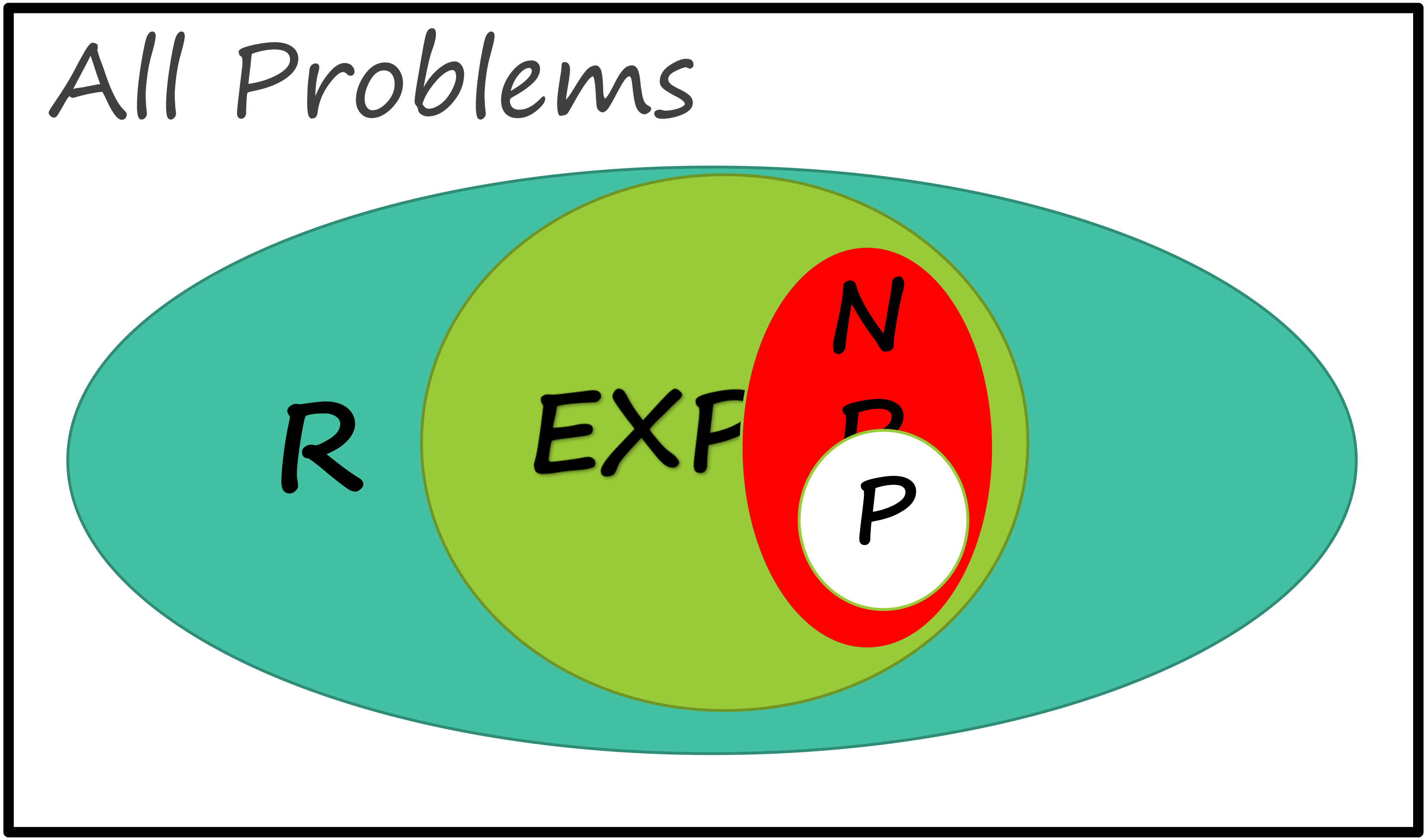
定义：每个解可以在多项式时间进行检查的判定问题类

到目前还没有找到多项式时间的确定型算法

是否为难解的问题（目前还不清楚），即P是否等于NP不确定

猜测：$P \neq NP$

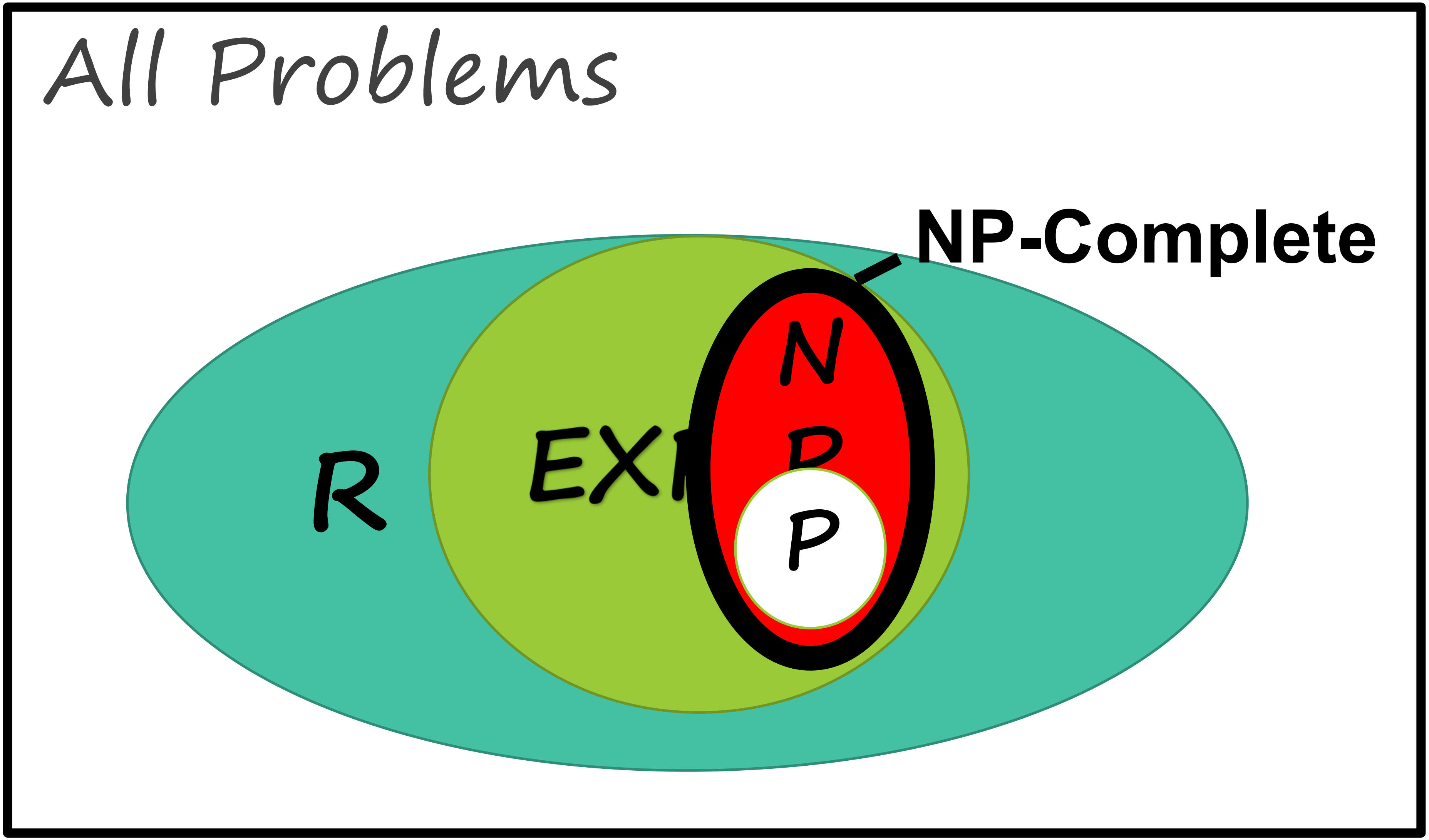
练习：NP问题是已经被证明地必须在指数时间内被解决（解决是求解的意思）？


All Problems
R
EXP
NP
P

NP-hard类和NP-complete类问题

NP-hard类：所有不比NP类问题容易的问题

NP-complete类：NP问题 $\cap NP - hard$


All Problems
NP-Complete
R
EXP
NP
P

多项式时间归约

- 多项式时间归约是比较两个问题的相对难度的重要手段。
- 对于两个问题X和Y，用T(X)和T(Y)表示它们的时间复杂度。如果T(Y)=f(T(X))，其中f是一个多项式函数，则写作$Y<=_pX$，即Y可以在多项式时间内归约到X。通俗地讲X至少和Y一样难。
- 定理1：设$Y<=_pX$。如果X存在多项式时间解法，则Y同样存在多项式时间解法。
- 定理2：设$Y<=_pX$。如果Y不存在多项式时间解法，则X同样不存在多项式时间解法。
- 定理3：设$Z<=_pY$，$Y<=_pX$，则$Z<=_pX$

0-1整数背包问题---NPC问题

动态规划算法时间复杂度分析

时间代价$O(n \times S)$，空间代价$O(n \times S)$

注意：这是伪多项式时间，因为S是作为一个整数输入

设S的位数是$L = \log_2 S$，那么相当于时间代价和空间代价是$O(n2^L)$

提 纲

15.1 图灵机的思想与模型简介

15.2 计算复杂性理论简介

15.3 常见NP完全问题

15.4 机器学习中的算法

NPC问题历史

- 1971年，斯蒂芬.库克（Stephen Cook） 发表Cook定理。
- 1972年，理查德.卡普（Richard Karp）提出并证明了21个NP完全问题。

卡普的21个NPC问题

布尔可满足性问题（Satisfiability）

0-1整数规划（0-1 integer programming）

分团问题（Clique，参考独立集）

集合配置问题（Set packing）

最小顶点覆盖问题（Vertex cover）

集合覆盖问题（Set covering）

反馈节点集问题（Feedback node set）

反馈弧集问题（Feedback arc set）

有向哈密顿回路问题（Directed Hamiltonian cycle）

无向哈密顿回路问题（Undirected Hamiltonian cycle）

卡普的21个NPC问题

三元布尔可满足性问题（3-SAT）

图着色问题（Chromatic number）

分团覆盖问题（Clique cover）

精确覆盖问题（Exact cover）

命中集问题（Hitting set）

斯坦纳树问题（Steiner tree）

三维匹配问题（3-dimensional matching）

背包问题（Knapsack）

作业排序（Job sequencing）

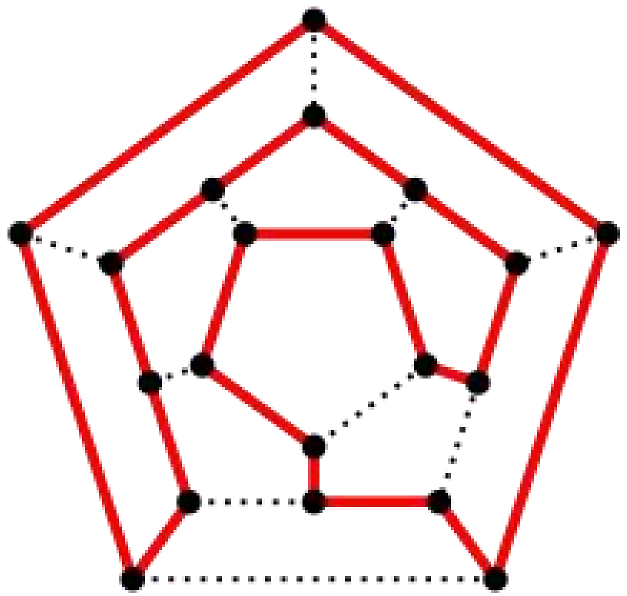
划分问题（Partition）

最大割问题（Max cut）

哈密顿回路问题

实例： 图$G=(V,E)$且$|V|=n$

问： G中是否包含一条哈密顿回路



提 纲

15.1 图灵机的思想与模型简介

15.2 计算复杂性理论简介

15.3 常见NP完全问题

15.4 机器学习中的算法

机器学习算法的基本问题

输入：给定一个数据集$D=\{x_1,x_2,\ldots,x_m\}$，

其中每个元素$x_i=\{x_{i1},x_{i2},\ldots,x_{id}\}$是一个d维

向量并被称为一个实例（instance）

输出：能对这些实例进行标记的一个模型

按照所输出的模型，每个示例x_i会得到一个

值y_i作为标记，所有的标记组成的集合Y成

为“标记空间”

机器学习算法的分类

分类：输入数据集中实例有标记

聚类：输入数据集中实例无标记

机器学习算法与贪心法关系

现有机器学习算法利用输入数据多轮迭代地生成模型，每轮迭代中都是贪心地选择当前最优模型来生成。

为了进一步降低计算空间进而提高效率，在贪心的基础上，很多机器学习算法在执行过程中还加上了随机的思想。它们随机地在下一步可能的最优模型中选择若干分支。

分类算法典型——决策树

决策树是一种树形结构，其中每个内部节点表示一个属性上的测试，每个分支代表一个测试输出，每个叶节点代表一种类别

示例数据（西瓜数据集2.0）

编号	色泽	根蒂	敲声	纹理	脐部	触感	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
2	乌黑	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
3	乌黑	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
4	青绿	蜷缩	沉闷	清晰	凹陷	硬滑	是
5	浅白	蜷缩	浊响	清晰	凹陷	硬滑	是
6	青绿	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	是
7	乌黑	稍蜷	浊响	稍糊	稍凹	软粘	是
8	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	硬滑	是
9	乌黑	稍蜷	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否
10	青绿	硬挺	清脆	清晰	平坦	软粘	否
11	浅白	硬挺	清脆	模糊	平坦	硬滑	否
12	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	软粘	否
13	青绿	稍蜷	浊响	稍糊	凹陷	硬滑	否
14	浅白	稍蜷	沉闷	稍糊	凹陷	硬滑	否
15	乌黑	稍蜷	浊响	清晰	稍凹	软粘	否
16	浅白	蜷缩	浊响	模糊	平坦	硬滑	否
17	青绿	蜷缩	沉闷	稍糊	稍凹	硬滑	否

决策树典型算法

Hunt算法

输入: 训练集 $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\ldots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$;
属性集 $A=\{a_1,a_2,\ldots,a_d\}$.

过程: 函数 TreeGenerate(D, A)

生成结点 node;
if D 中样本全属于同一类别 C **then**
　将 node 标记为 C 类叶结点; **return**　　递归返回, 情形(1).　　无需划分
end if
if $A=\varnothing$ **OR** D 中样本在 A 上取值相同 **then**
　将 node 标记为叶结点, 其类别标记为 D 中样本数最多的类; **return**　　递归返回, 情形(2).
end if　　无法划分
从 A 中选择最优划分属性 a_*;　　我们将在下一节讨论如何获得最优划分属性.
for a_* 的每一个值 a_*^v **do**
　为 node 生成一个分支; 令 D_v 表示 D 中在 a_* 上取值为 a_*^v 的样本子集;
　if D_v 为空 **then**
　　将分支结点标记为叶结点, 其类别标记为 D 中样本最多的类; **return**　　递归返回, 情形(3).
　else
　　以 TreeGenerate(D_v, $A\setminus\{a_*\}$)为分支结点　　从 A 中去掉 a_*.　　不能划分
　end if
end for

输出: 以 node 为根结点的一棵决策树

示例决策树

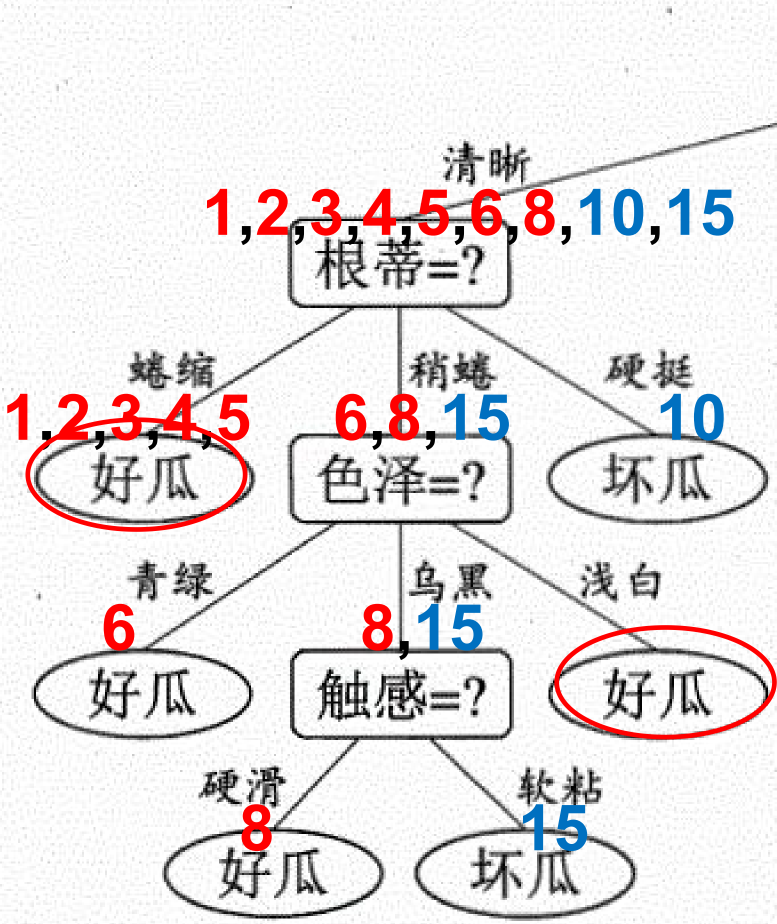


图 4.4 在西瓜数据集 2.0 上基于信息增益生成的决策树

第（2）种情形：设定为该结点所含样本最多的类别

利用当前结点的后验分布

第（3）种情形：设定为其父结点所含样本最多的类别

把父结点的样本分布作为当前结点的先验分布

决策树算法特点

决策树学习的关键是算法的第8行：**贪心地**选择最优划分属性

什么样的划分属性是最优的？

我们希望决策树的分支结点所包含的样本尽可能属于同一类别，即结点的“纯度”越来越高，可以高效地从根结点到达叶结点，得到决策结果。

信息熵与信息增益

“信息熵”(information entropy)是度量样本集合纯度最常用的一种指标. 假定当前样本集合 D 中第 k 类样本所占的比例为 p_k $(k=1,2,\ldots,|\mathcal{Y}|)$, 则 D 的信息熵定义为

$$\operatorname{Ent}(D)=-\sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} p_k \log_2 p_k . \tag{4.1}$$

$\operatorname{Ent}(D)$ 的值越小, 则 D 的纯度越高. 对于二分类任务 $|y|=2$

假定离散属性 a 有 V 个可能的取值 $\{a^1,a^2,\ldots,a^V\}$, 若使用 a 来对样本集 D 进行划分, 则会产生 V 个分支结点, 其中第 v 个分支结点包含了 D 中所有在属性 a 上取值为 a^v 的样本, 记为 D^v. 我们可根据式(4.1) 计算出 D^v 的信息熵, 再考虑到不同的分支结点所包含的样本数不同, 给分支结点赋予权重 $|D^v|/|D|$, 即样本数越多的分支结点的影响越大, 于是可计算出用属性 a 对样本集 D 进行划分所获得的“信息增益”(information gain)

$$\operatorname{Gain}(D,a)=\operatorname{Ent}(D)-\sum_{v=1}^{V}\frac{|D^v|}{|D|}\operatorname{Ent}(D^v) . \tag{4.2}$$

信息熵示例

举例：求解划分根结点的最优划分属性

数据集包含17个训练样例：

8个正例（好瓜）占 $p_1 = \frac{8}{17}$

对于二分类任务 $|y| = 2$

9个反例（坏瓜）占 $p_2 = \frac{9}{17}$

以属性“色泽”为例计算其信息增益

根结点的信息熵：

$$\mathrm{Ent}(D) = -\sum_{k=1}^{2} p_k \log_2 p_k = -\left(\frac{8}{17}\log_2\frac{8}{17} + \frac{9}{17}\log_2\frac{9}{17}\right) = 0.998 .$$

信息增益示例

用“色泽”将根结点划分后获得3个分支结点的信息熵分别为：

$$\mathrm{Ent}(D^1) = -\left(\frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6} + \frac{3}{6}\log_2\frac{3}{6}\right) = 1.000\ ,$$

$$\mathrm{Ent}(D^2) = -\left(\frac{4}{6}\log_2\frac{4}{6} + \frac{2}{6}\log_2\frac{2}{6}\right) = 0.918\ ,$$

$$\mathrm{Ent}(D^3) = -\left(\frac{1}{5}\log_2\frac{1}{5} + \frac{4}{5}\log_2\frac{4}{5}\right) = 0.722\ ,$$

属性“色泽”的信息增益为：

$$\begin{aligned}\mathrm{Gain}(D, \text{色泽}) &= \mathrm{Ent}(D) - \sum_{v=1}^{3}\frac{|D^v|}{|D|}\mathrm{Ent}(D^v) \\ &= 0.998 - \left(\frac{6}{17}\times 1.000 + \frac{6}{17}\times 0.918 + \frac{5}{17}\times 0.722\right) \\ &= 0.109\ .\end{aligned}$$

基于信息增益的决策树示例

类似的，我们可计算出其他属性的信息增益:

$$\mathrm{Gain}(D, \text{根蒂}) = 0.143; \quad \mathrm{Gain}(D, \text{敲声}) = 0.141;$$

$$\mathrm{Gain}(D, \text{纹理}) = 0.381; \quad \mathrm{Gain}(D, \text{脐部}) = 0.289;$$

$$\mathrm{Gain}(D, \text{触感}) = 0.006.$$

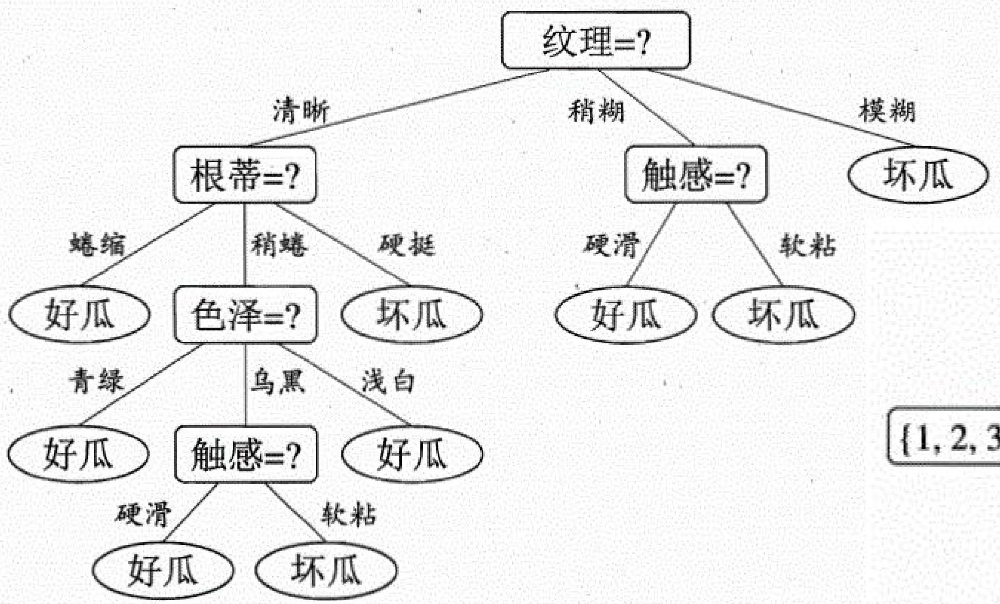


图 4.4 在西瓜数据集 2.0 上基于信息增益生成的决策树

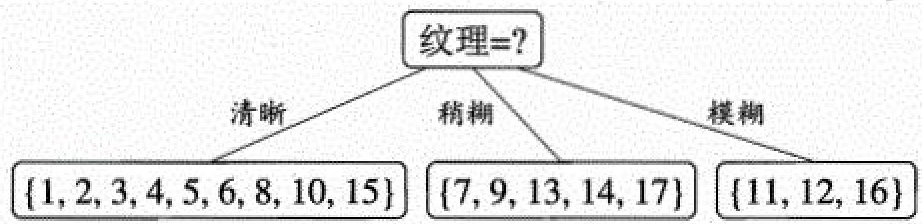


图 4.3 基于“纹理”属性对根结点划分

信息增益的不足

若把“编号”也作为一个候选划分属性，则属性“编号”的信息增益为：

根结点的信息熵仍为：$Ent(D)=0.998$

用“编号”将根结点划分后获得17个分支结点的信息熵均为：

$$Ent(D^1)=\cdots=Ent(D^{17})=-(\frac{1}{1}\log_2\frac{1}{1}+\frac{0}{1}\log_2\frac{0}{1})=0$$

则“编号”的信息增益为：

$$Gain(D,\text{编号})=Ent(D)-\sum_{v=1}^{17}\frac{1}{17}Ent(D^v)=0.998$$

远大于其他候选属性

信息增益准则对可取值数目较多的属性有所偏好

增益率

$$\text{Gain\_ratio}(D,a)=\frac{\text{Gain}(D,a)}{\text{IV}(a)}\ , \tag{4.3}$$

其中

$$\text{IV}(a)=-\sum_{v=1}^{V}\frac{|D^v|}{|D|}\log_2\frac{|D^v|}{|D|} \tag{4.4}$$

称为属性 a 的“固有值”(intrinsic value) [Quinlan, 1993]. 属性 a 的可能取值数目越多(即 V 越大), 则 $\text{IV}(a)$ 的值通常会越大.

增益率准则对可取值数目较少的属性有所偏好

著名的**C4.5**决策树算法综合了信息增益准则和信息率准则的特点：先从候选划分属性中找出信息增益高于平均水平的属性，再从中选择增益率最高的。

聚类算法典型——K均值算法

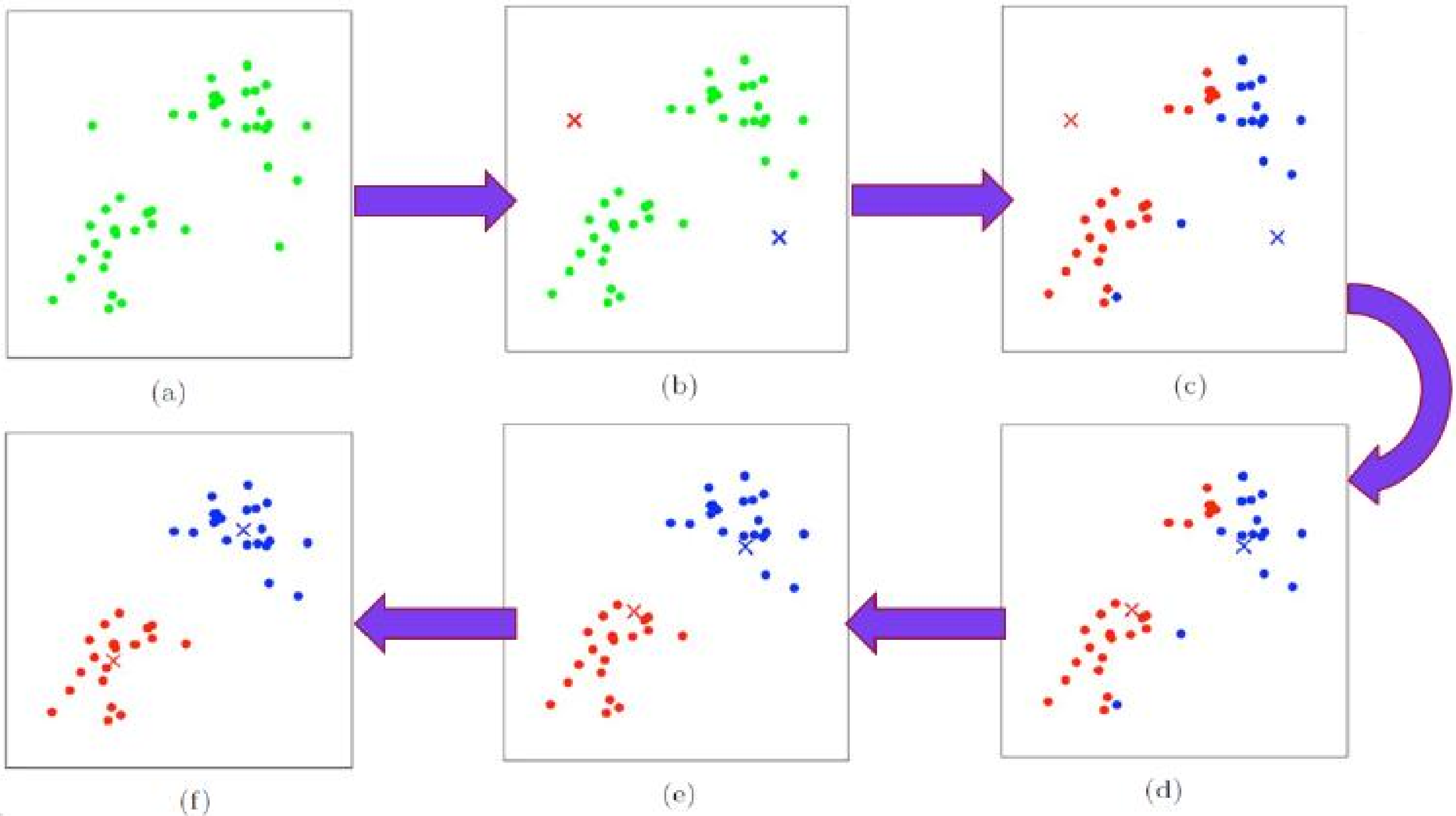
k-均值（k-means）算法，是一种得到最广泛使用的聚类算法

它将各个聚类子集内的所有数据样本的均值作为该聚类的代表点，其他点和其最近的代表点同一个类

K均值算法过程

1. 为每个聚类随机确定一个实例作为初始聚类中心，这样就有K个初始聚类中心
2. 将每个实例按照最小距离原则分配到最邻近聚类（即贪心选择）
3. 使用每个聚类中实例均值作为新聚类中心
4. 重复步骤2.3直到聚类中心不再变化
5. 结束，得到K个聚类

算法运行实例



K均值算法距离定义

距离定义：典型定义为欧式距离：

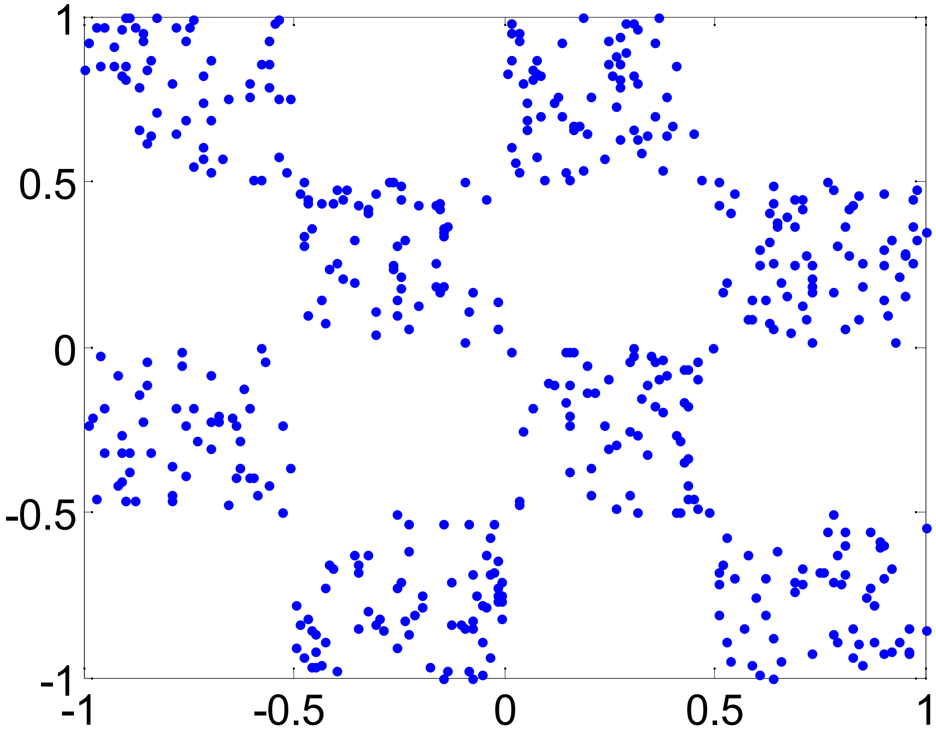
$$d\left(x_i, x_j\right) = \sqrt{\sum_{k=1}^{d}\left(x_{ik} - x_{jk}\right)^2}$$

K均值算法特点

- 必须事先给出k（要生成的簇的数目），而且对初值敏感；
- 对于“躁声”和孤立点数据是敏感的，少量的该类实例能够对结果产生极大的影响；
- 不能保证找到全局最优解，只能确保局部最优解

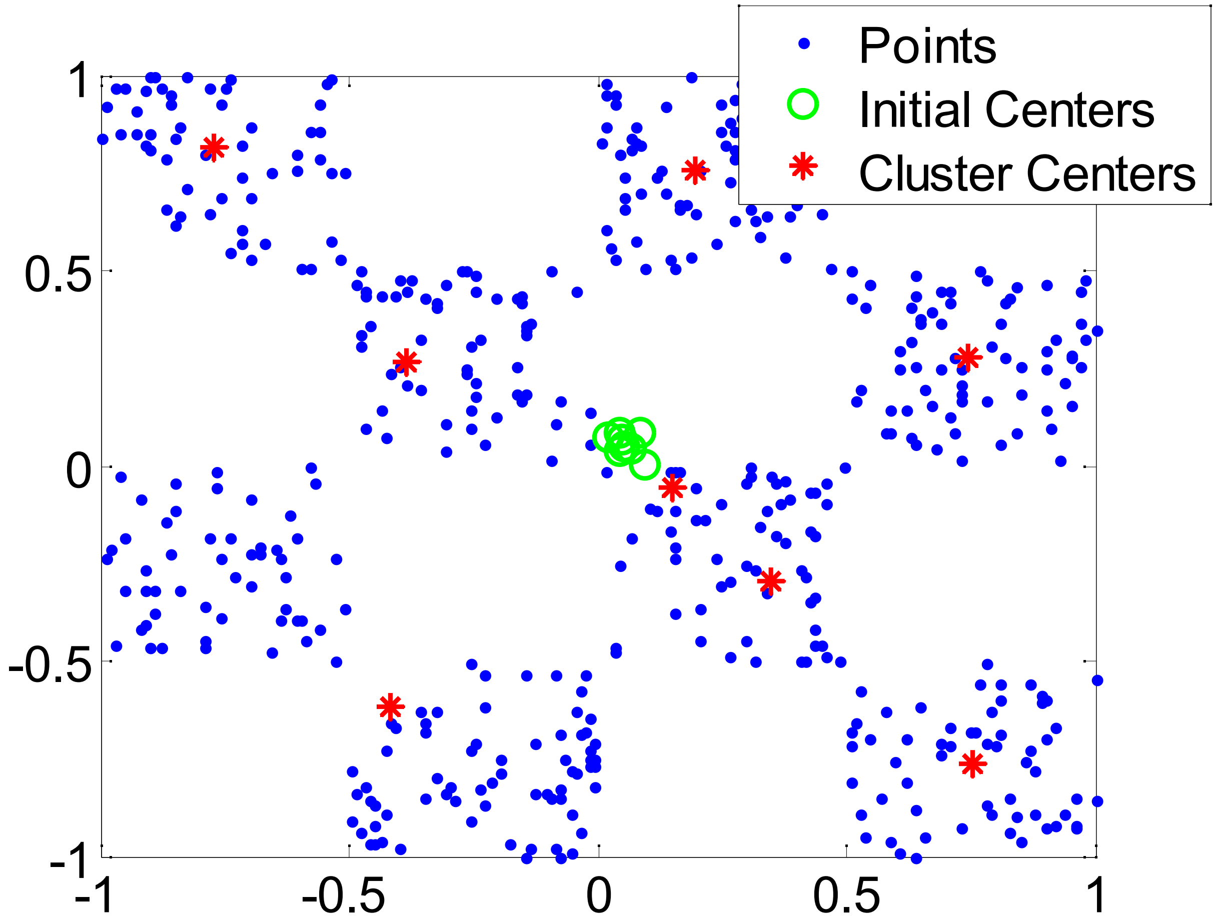
初始中心的选取对算法的影响

棋盘格数据集(Checkerboard data set)



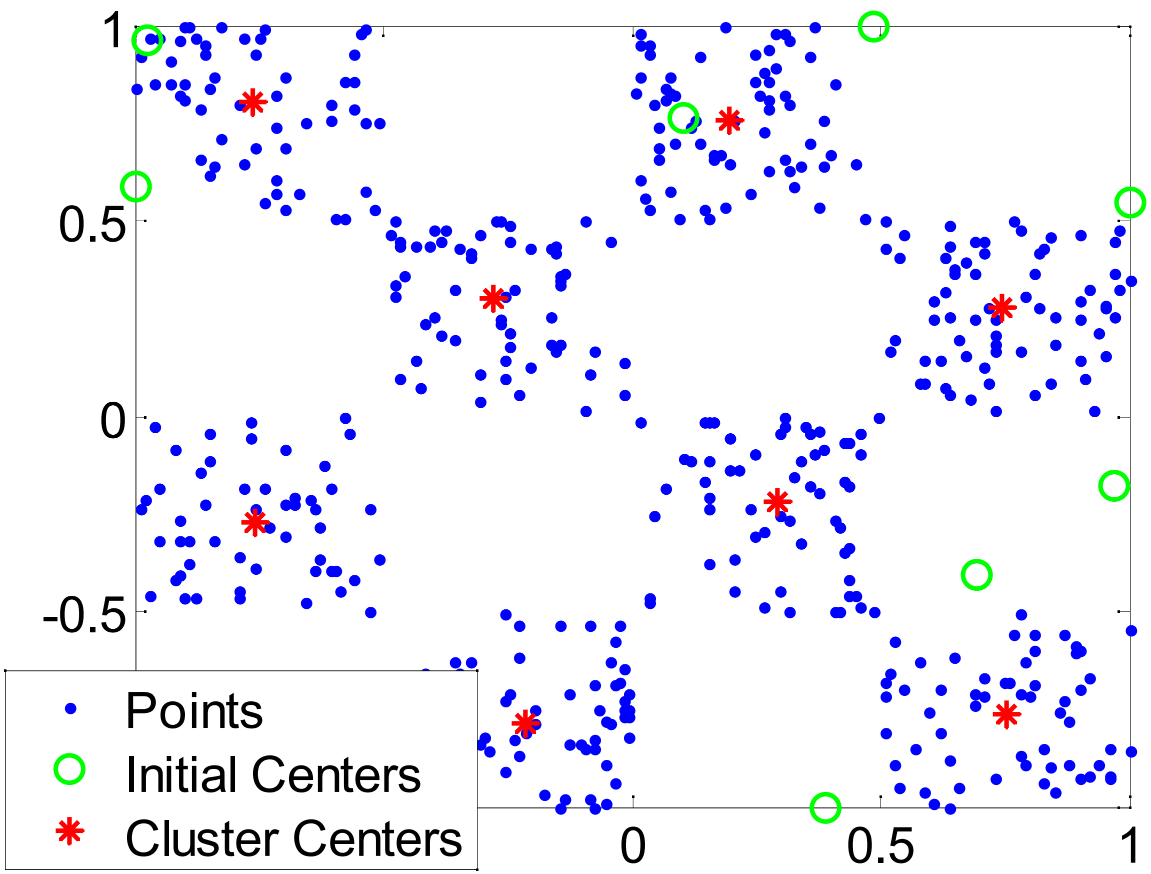
初始中心的选取对算法的影响

初始聚类中心均在中心附近



初始中心的选取对算法的影响

初始聚类中心在平面内随机选取



机器学习参考书目

《机器学习》，周志华著，清华大学出版社

《统计学习方法》，李航著，清华大学出版社