人工智能笔记

陈鸿峥

2020.01*

目录

1 简介 **2**

1.1 概述 2

1.2 历史 2

2 搜索 **3**

2.1 无信息搜索 3

2.2 有信息搜索 6

2.3 博弈树搜索 8

3 限制可满足性问题 **11**

3.1 回溯(backtracking)搜索 11

3.2 向前检测 12

3.3 泛化边一致性(GAC) 13

4 知识表示与推理 **14**

4.1 基本概念 14

4.2 推理 16

5 确定性规划 **20**

5.1 情景演算 20

5.2 STRIPS 21

5.3 松弛问题 21

6 不确定性规划 **23**

6.1 基础知识 23

6.2 贝叶斯网络 24

*Build 20200103

7 机器学习 **28**
7.1 决策树 28
7.2 贝叶斯学习 28
7.3 聚类算法 29
7.4 神经网络 29
7.5 强化学习 30

1 简介

1.1 概述

- 1997 Deep Blue
- 2011 IBM Watson
- 2016 Google DeepMind

什么是AI?

- 像人类一样思考(thinking humanly)：中文屋子
- 理智思考(thinking rationally)
- 像人类一样行为(acting humanly)：图灵测试(1950)
- 理智行为(acting rationally)

常见术语

- 强AI：机器像人类一样思考
- 弱AI：机器有智能的行为
- 通用AI(AGI)：能够解决任何问题
- 窄AI：专注于某一特定任务

不以模拟人类作为实现人工智能的最好方法

- 计算机和人类的体系结构不同：数值计算、视觉、并行处理
- 对人类大脑的了解太少了！

1.2 历史

- 1950-70: Early excitement, great expections
  - Samuel(1952)跳棋程序
  - Newell(1955)逻辑理论家
  - Dartmouth会议(1956)：AI诞生

- 1970-90: Knowledge is power
- 1990-: rise of machine learning "AI Spring"
- 2010-: Deep learning

2 搜索

搜索主要包括无信息(uninformed)搜索和有信息搜索。

- 状态空间(state space)
  - 传统搜索：状态空间可见、动作确定性
  - 非传统搜索：局部搜索、模拟退火、爬坡
- 动作(action)：不同状态之间的转换
- 初始状态(initial state)
- 目标/期望(goal)

树搜索，边界集(frontier)是未探索的状态集合

Algorithm 1 Tree Search

```
procedure TREESEARCH((Frontier, Successors, Goal?))
    if Frontier is empty then
        return failure
    Curr = select state from Frontier
    if Goal?(Curr) then
        return Curr
    Frontier' = (Frontier − {Curr}) ∪ Successors(Curr)
    return TreeSearch(Frontier',Successors,Goal?)
```

搜索需要关注的几个特性：

- 完备性：若解存在，搜索是否总能找到解
- 最优性：是否总能找到最小代价的解
- 时间复杂性：最大需要被**生成或展开**[1]的结点数
- 空间复杂性：最大需要被存储在内存中的结点数

2.1 无信息搜索

无信息搜索并不考虑关于特定搜索问题的领域特定的信息，主要包括宽度优先、一致代价、深度优先、深度受限、迭代加深五种算法。

[1]而不是探索的结点数目

2.1.1 宽度优先搜索(BFS)

将后继加入边界集的**后面**，b为最大状态后继数目/分支因子(branching factor)，d为最短距离解的行动数（注意是**边数**，而不是层数!）

- 完备性与最优性：所有短路总在长路前被探索，某一长度只有有限多条路径，最终可以检测所有长度为d的路径，从而找到最优解
- 时间复杂度：$1+b+b^2+\cdots+b^d+(b^d-1)b=O(b^{d+1})$，最差情况在最后一层的最后一个节点才探索到最优解，从而前面b个节点都要展开第$d+1$层
- 空间复杂度：$b(b^d-1)=O(b^{d+1})$，需要将边界集都存储下来，同上最后一层

2.1.2 深度优先搜索(DFS)

将后继加入边界集的**前面**，即总是展开边界集中最深的节点

- 完备性
  - 无限状态空间：不能保证
  - 有限状态空间无限路径：不能保证（可能有环）
  - 有限状态空间+路径/重复状态剪枝：可以保证
- 最优性：因完备性不能保证，故最优性也不能保证
- 时间复杂性：$O(b^m)$，其中m为状态空间的最长路的长度（若$m>>d$，则非常糟糕；但如果有大量解路径，则会快于BFS）
- 空间复杂性：$O(bm)$，**线性空间复杂性**是DFS最大的优点。边界集只包含当前路径的最深节点以及回溯节点（backtrack points为当前路径上节点的未探索的兄弟sibling）。注意这里需要记录路径上每个结点的孩子，因已被扩展。

2.1.3 一致代价(Uniform-cost)

一致代价搜索(Uniform cost search, UCS)[2]的边界集以路径开销升序排序，总是先展开最低开销的路径。如果每一个动作都是一样的代价，则一致代价等价于BFS。

- 完备性与最优性：假设所有转移都有代价$\geq\varepsilon>0$，所有更低代价的路径都在高代价路径之前被展开，只有有限多的路径开销小于最优解的开销，故最终一定会到达最优解
- 时间复杂性：$O(b^{\lfloor C^\star/\varepsilon\rfloor+1})$，对应着BFS中$d=C^\star/\varepsilon$，其中$C^\star$为最优解的开销，最坏情况就是每一层开销都很小为$\varepsilon$，那么需要$\lfloor C^\star/\varepsilon\rfloor$层
- 空间复杂性：$O(b^{\lfloor C^\star/\varepsilon\rfloor+1})$

[2]至于为什么叫Uniform，可以看https://math.stackexchange.com/questions/112734/in-what-sense-is-uniform-cost-search-uniform和https://cs.stackexchange.com/questions/6072/why-is-uniform-cost-search-called-uniform-cost-search，比较合理的解释是到达同一结点的cost都被认为是相同的（寻找最优解时）。一致的算法总是选择边界集中第一个元素。

2.1.4 深度受限搜索(Depth-limited)

只在最大深度执行DFS，因此无穷路径长不会存在问题

- 完备性与最优性：不能保证，若解的深度大于L
- 时间复杂度：$O(b^L)$
- 空间复杂度：$O(bL)$

2.1.5 迭代加深搜索(Iterative Deepening)

IDS逐渐增加最大深度L，对每一个L做深度受限搜索

- 完备性：可以保证
- 最优性：如果开销一致[3]，则可以保证
- 时间复杂性：$(d+1)b^0+db+(d-1)b^2+\cdots+b^d=O(b^d)$，第0层搜了$(d+1)$次，以此类推。可以看到时间复杂度是**比BFS优**的，因为最后一层的结点并未进行展开。
- 空间复杂性：$O(bd)$，同DFS

2.1.6 双向搜索(Bidirectional)

从源结点和汇结点同时采用BFS，直到两个方向的搜索汇聚到中间。

- 完备性：由BFS保证
- 最优性：若一致代价则可保证
- 时间复杂性：$O(b^{d/2})$
- 空间复杂性：$O(b^{d/2})$

2.1.7 环路/路径检测

所有检测都是在**扩展时**进行：

- 环路(cycle)检测：检测当前状态是否与所有已探索的状态重复(BFS)
- 路径(path)检测：只检测当前状态是否与该路径上的状态重复(DFS)

注意不能将环路检测运用在BFS上，因为这会破坏其空间复杂度的优势。

环路检测运用到UCS上依然**可以保证最优性**[4]。因为UCS第一次探索到某一状态的时候已经发现最小代价路径，因而再次探索该状态不会发现路径比原有的更小。

---

[3]若开销不一致，则可以采用代价界(cost bound)来代替：仅仅展开那些路径开销小于代价界的路径，同时要记录每一层深搜的最小代价。这种方式的搜索开销会非常大，有多少种不同路径开销就需要多少次迭代循环。

[4]注意这在启发式搜索中不一定成立

2.1.8 总结

	BFS	UCS	DFS	Depth-limited	IDS	Bidirectional
完备性	✓	✓	✗	✗	✓	✓
时间复杂度	$O(b^d)$	$O(b^{\lfloor C^\star/\varepsilon \rfloor+1})$	$O(b^m)$	$O(b^l)$	$O(b^d)$	$O(b^{d/2})$
空间复杂度	$O(b^d)$	$O(b^{\lfloor C^\star/\varepsilon \rfloor+1})$	$O(bm)$	$O(bl)$	$O(bd)$	$O(b^{d/2})$
最优性	✓	✓	✗	✗	✓	✓

例 1. *N个传教士和N个食人族要过河，他们都在河的左岸。现在只有一条船能够运载K个人，要把他们都运往右岸。要满足无论何时何地，传教士的数目都得大于等于食人族的数目，或者传教士数目为0。*

分析. *考虑对问题形式化为搜索问题*

- *状态(M, C, B)，其中M为左岸传教士数目，C为左岸食人族数目，$B = 1$指船在左岸*
- *动作(m, c)指运m个传教士和c个食人族到对岸*
- *先决条件：传教士数目和食人族数目满足限制*
- *效果：$(M, C, 1) \overset{(m,c)}{\Longrightarrow} (M - m, C - c, 0)$*
  $(M, C, 0) \overset{(m,c)}{\Longrightarrow} (M + m, C + c, 1)$

2.2 有信息搜索

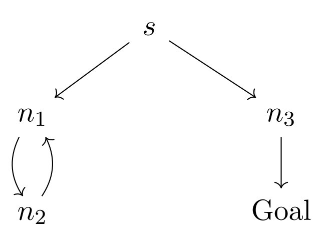
在无信息搜索中，我们从不估计边界集中最有期望(promising)获得最优解的结点，而是无区别地选择当前边界集中第一个结点。然而事实上，针对不同问题我们是有对结点的先验知识(apriori knowledge)的，即从当前结点到目标结点的开销有多大。而这就是有信息搜索(informed)，或者称为启发式搜索(heuristics)。

关键在于领域特定启发式函数$h(n)$的设计，它估计了**从结点n到目标结点的开销(cost)**。注意满足目标状态的结点$h(n) = 0$。

2.2.1 贪心最优搜索(Greedy Best-First Search)

直接使用$h(n)$对边界集进行排序，但这会导致贪心地选择**看上去**离目标结点开销最小的路径。

如果存在环路，贪心最优搜索是不完备的，会陷入死循环。



2.2.2 A*搜索

综合考虑当前已走的开销和未来估计的开销。定义一个估值函数

$$f(n) = g(n) + h(n)$$

其中$g(n)$为路径到节点n的代价，$h(n)$为从n到目标节点的代价，采用$f(n)$对边界集内的节点进行排序。

$f(n)$需要满足下列两个性质。

定义 1 (可采纳的(admissibility)). 假设所有代价$c(n1 \to n2) \geq \varepsilon > 0$，令$h^\star(n)$为从节点$n$到目标节点$\infty$的最优解代价[5]，若

$$\forall n: \ h(n) \leq h^\star(n)$$

则称$h(n)$是可采纳的。即一个可采纳的启发式函数总是低估了当前结点到目标结点的真实开销（这样才能保证最优解不被排除）。因此对于任何目标结点g都有$h(g) = 0$。

定义 2 (一致性(consistency)/单调性(monotonicity)). 若对于所有的结点n_1和n_2，$h(n)$满足（三角不等式）

$$h(n_1) \leq c(n_1 \to n_2) + h(n_2)$$

则称$h(n)$是单调的。

定理 1. 一致性蕴含可采纳性

分析. 分类讨论

- 当结点n没有到目标结点的路径，则$h(n) \leq h^\star(n) = \infty$恒成立
- 令$n = n_1 \to n_2 \to \cdots \to n_k$为从结点$n$到目标结点的最优路径，则可以用数学归纳法证明$\forall i$: $h(n_i) \leq h^\star(n_i)$，如下从后往前推

$$h(n_i) \leq c(n_i \to n_{i+1}) + h(n_{i+1}) \leq c(n_i \to n_{i+1}) + h^\star(n_{i+1}) = h^\star(n_i)$$

定理 2. 可采纳性蕴含最优性

分析. 假设最优解有开销$C^\star$，则任何最优解一定会在开销大于$C^\star$的路径之前被展开（有限条路径）。

反证若路径p的代价$c(p)$大于最优解路径代价$c(p^\star)$且p在$p^\star$之前被扩展，则一定存在一个节点n在$p^\star$上且仍在边界集中，因此

$$c(p) \leq f(p) \leq f(n) = g(n) + h(n) \leq g(n) + h^\star(n) = c(p^\star)$$

矛盾。故在最优解展开之前的路径一定有开销$\leq C^\star$，最终我们一定会检测到最优解，而且次优解不会在最优解之前被检测。

做环检测可能导致找不到最优解。可采纳性不能保证最优解，但单调性环检测保证最优解。

单调性有以下几个性质

命题 1. 路径上的f一定是非递减的

[5]如果没有路径则$h^\star(n) = \infty$

分析.

$$\begin{aligned} f(n) &= g(n) + h(n) \\ &\le g(n) + c(n \to n') + h(n') \\ &= g(n') + h(n') \\ &= f(n') \end{aligned}$$

命题 2. 如果n_2在n_1之后被扩展，则$f(n_1) \le f(n_2)$

命题 3. 当n在任何小于f值得路径之前被展开

命题 4. $A^\star$算法第一次展开某个状态时，它已经找到了到达那个状态的最小开销路径。

2.2.3 迭代加深A*(IDA)算法

$A^\star$算法有和BFS或UCS同样的空间复杂性问题，而迭代加深$A^\star$算法同样解决空间复杂度的问题。与迭代加深类似，但IDA*则用$f = g + h$作为截断阈值。每一轮迭代中选择上一轮中超过截断阈值最小的f。

2.2.4 构造启发式函数

常常需要考虑一个更加简单的问题（松弛问题），然后让$h(n)$为到达一个简单问题解的开销。比如考虑A和B之间没有屏障，A和B相邻等。

例 2. 现有积木若干，积木可以放在桌子上，也可以放在另一块积木上面。有两种操作：

1. `move(x,y)`：把积木x放到积木y上面，前提是积木x和积木y上面都没有其他积木
2. `moveToTable(x)`：把积木x放到桌子上，前提是积木x上面无其他积木，且积木x不在桌子上

设计一个可采纳的启发式函数$h(n)$

分析. $h(n) = h_1(n) + h_2(n)$，其中$h_1(n)$为在目标状态积木的数目，$h_2(n)$为符合上下关系的积木数目（A在B下，且A在目标状态）

定理 3. 在松弛问题中的最优解也是原问题中的一个可满足的启发式函数。

定义 3 (支配)**.** 如果h_2支配*(dominate)*h_1且除了目标结点都可满足，则$h_1(n) \le h_2(n)$

2.3 博弈树搜索

博弈的一些前提

- 两个博弈玩家
- 离散值：游戏和决策都可以映射到离散空间
- 有限的：只有有限的状态和可能的决策
- 零和博弈：完全竞争，即如果一个玩家胜利，则另外一个失去同样数量的收益
- 确定性的：没有牵涉到概率性事件，如色子、抛硬币等
- 完美信息博弈：状态的所有方面都可以被完全观察，即没有隐藏的卡牌

剪刀石头布是简单的一次性(one-shot)博弈

- 一次移动
- 在博弈论中称为策略或范式博弈(strategic/normal form)

但很多游戏是牵涉到多步操作的

- 轮回(turn-taking)游戏，如棋类
- 在博弈论中称为扩展形式博弈(extensive form)

两个玩家A（最大化己方收益）和B（最小化对方收益）

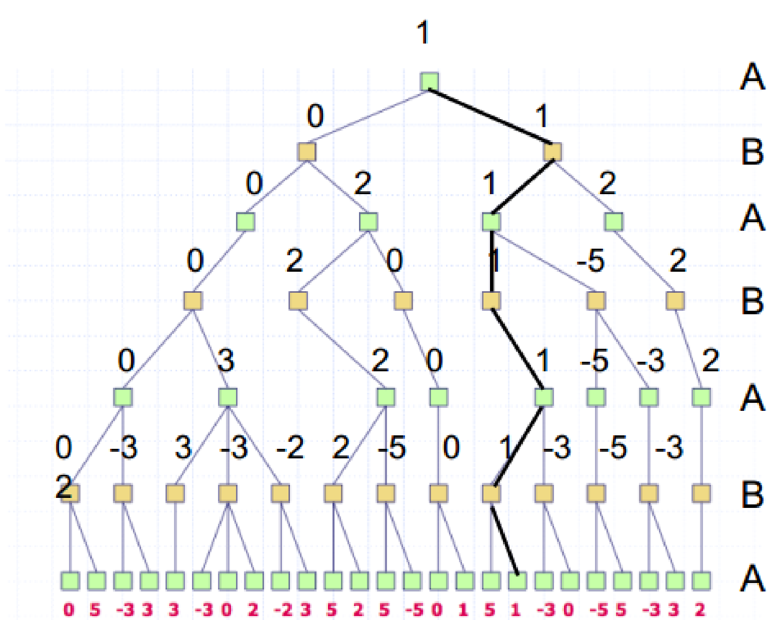
- 状态集合$\mathcal{S}$
- 初始状态$I \in \mathcal{S}$
- 终止位置$T \subset \mathcal{S}$
- 后继：下一可能状态的集合
- 效益(utility)/收益(payoff)函数$V: T \mapsto \mathbb{R}$，表明终止状态对A玩家有多好，对B玩家有多坏（都站在A角度给出）

2.3.1 Minimax策略

自己选**max**，对方选**min**

- 构建整棵博弈树，然后将终止/叶子结点标上收益
- 回溯整棵树，然后将每个结点都标记上收益

$$U(n) = \begin{cases} \min\{U(c): \ c \text{ is a child of } n\} & n \text{ is a Min node} \\ \max\{U(c): \ c \text{ is a child of } n\} & n \text{ is a Max node} \end{cases}$$



用DFS可以遍历整棵树，同时保持线性的空间复杂度，每次回溯时更新结点为min/max即可

2.3.2 Alpha-Beta剪枝

注意α-β剪枝只要有一祖先大于/小于后代节点的值就可以进行剪枝。

- 只要当前Max结点的值$\geq$祖先某一Min结点的值，就可以在该Max结点上做α剪枝
- 只要当前Min结点的值$\leq$祖先某一Max结点的值，就可以在该Min结点上做β剪枝

Algorithm 2 Alpha-Beta Pruning

```
procedure ALPHABETA(n,Player,alpha,beta)
    if n is TERMINAL then
        return V(n)                                  ▷ Return terminal states utility
    ChildList = n.Successors(Player)
    if Player == MAX then
        for c in ChildList do
            alpha = max(alpha, AlphaBeta(c,MIN,alpha,beta))
            if beta ¡= alpha then
                break
        return alpha
    else                                             ▷ Player == MIN
        for c in ChildList do
            beta = min(beta, AlphaBeta(c,MAX,alpha,beta))
            if beta ¡= alpha then
                break
        return beta
                          ▷ Initial call: AlphaBeta(START-NODE,Player,−∞,+∞)
```

可以证明，如果原始情况需要访问$O(b^D)$个结点，则经过α-β剪枝后只需访问$O(b^{D/2})$个结点。

2.3.3 其他补充

但在现实生活的游戏中，即使采用了α-β剪枝，博弈树也太过庞大。如棋类的分支因子大致是35，深度为10的树已经到2.7×10^{14}个结点。因此不能将整棵博弈树展开，需要采用一些启发式方式进行估计。

评价函数(evaluation)的一些需求：

- 对于终止状态，评价函数的序应与真实的收益函数相同
- 对于非终止状态，评价函数则应该与真实的胜率相关联
- 计算时间不能花太长
- 通常取多个特征，然后进行加权求和（先验知识）

在线(online)/实时(real-time)搜索

- 没有办法展开全部的边界集，因此限制展开的大小（在没找到去目标的真实路径就做出决定/直接选一条路就开始走）
- 在这种情况下，评价函数不仅仅引导搜索，更是提交真实的动作
- 虽然找不到最优解，但是求解时间大大缩减

3 限制可满足性问题

在搜索问题中，状态表示是个黑箱，可以有多种多样的方法来表达。但实际上我们可以有特定的状态表示方法来解决大量不同的问题，在这种情况下的搜索算法可以变得很高效。

限制可满足性问题(Constraint Satisfaction Problem, CSP)指每一个状态都可以用一组特征值向量表示的问题。

- k个特征/变量的集合$V_1, \ldots, V_n$
- 每一个变量都有一个包含有限值的论域dom$[V_i]$，如

$$\text{height} = \{\text{short}, \text{average}, \text{tall}\}$$

- 一组限制条件$C_1, \ldots, C_m$
  - 每个限制条件都有一个作用域(scope)，表示作用在什么变量上，如$C(V_1, V_2, V_4)$
  - 相当于一个布尔函数，从变量赋值到布尔值的映射，如

$$C(V_1 = a, V_2 = b, V_4 = c) = True$$

  - 布尔函数可以以表形式给出，或以表达式形式给出，如$C(V_1, V_2, V_4) = (V_1 = V_2 + V_4)$
- 一个状态可以通过给每一个变量赋值得到

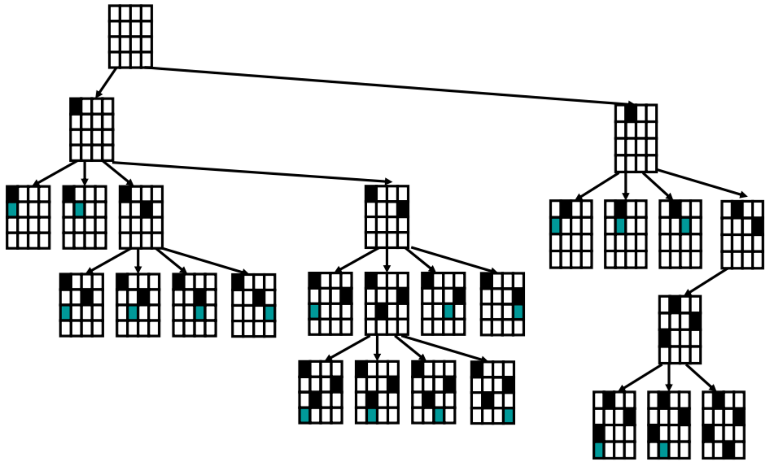
CSP不关心到目标状态的移动步骤，而只关心是否存在这样一组变量满足目标。

3.1 回溯(backtracking)搜索

对每一个变量分别赋值，深搜方式，同时结合启发式函数，用于在每一步选择不同的赋值变量。

```
BT(Level)
  If all variables assigned
        PRINT Value of each Variable
        RETURN or EXIT (RETURN for more solutions)
                       (EXIT for only one solution)
  V := PickUnassignedVariable()
  Assigned[V] := TRUE
  for d := each member of Domain(V) (the domain values of V)
        Value[V] := d
        ConstraintsOK = TRUE
        for each constraint C such that
                a) V is a variable of C and
                b) all other variables of C are assigned:
                   ;(rarely the case initially high in the search tree)
             IF C is not satisfied by the set of current
                assignments:
                ConstraintsOK = FALSE
        If ConstraintsOk == TRUE:
             BT(Level+1)

  Assigned[V] := FALSE //UNDO as we have tried all of V's values
  return
```



回溯的问题在于不能提前探测到某一变量已经没有可以赋值了，导致依然要进入一层进行搜索。因此考虑前瞻式算法，即限制传播(propagation)。

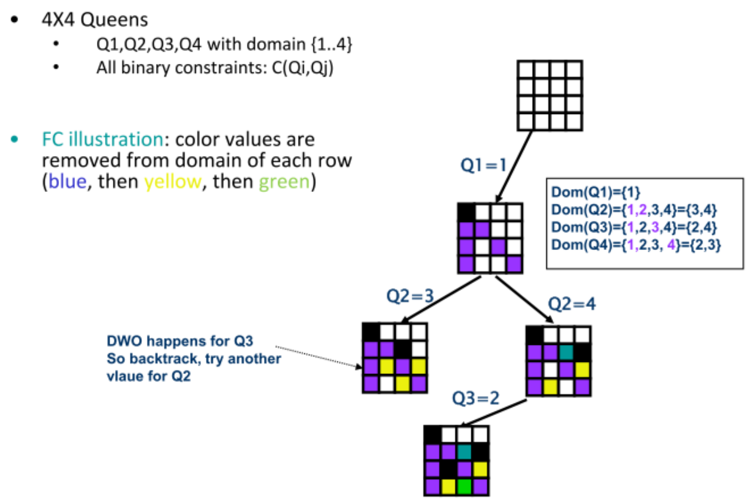
- 甚至可以在还未进行搜索之前就采用
- 传播本身需要耗费资源，因此这里存在一个权衡

进而有下列两种传播算法：前向传播和GAC算法。

3.2 向前检测

1. 选择一个未被赋值的变量V。这里可以采用最小剩余值(Minimum Remaining Values, MRV)作为启发式函数，即先选论域小的变量。
2. 选择论域dom$[V]$中的值对V进行赋值d
3. 将d向前传递给含有V的限制C，主要考察那些**只剩一个未赋值变量**X的限制
4. 检测`FCCheck(C,X)`是否出现论域清空(Domain Wipe Out, DWO)，即X没得选值了。这里`FCCheck`做的则是核心的限制传播部分，当$V = d$后把X不能取的值删去
5. 如果不出现DWO，则进入下一层（选择新的未赋值变量赋值）
6. 否则需要恢复当层`FCCheck`剪枝的部分，即d不可取，V要重新取值

```
FC(Level) /*Forward Checking Algorithm */
   If all variables are assigned
        PRINT Value of each Variable
        RETURN or EXIT (RETURN for more solutions)
                       (EXIT for only one solution)
   V := PickAnUnassignedVariable()
   Assigned[V] := TRUE
   for d := each member of CurDom(V)
        Value[V] := d
        DWOoccured:= False
        for each constraint C over V such that
               a) C has only one unassigned variable X in its scope
           if(FCCheck(C,X) == DWO)     /* X domain becomes empty*/
                DWOoccurred:= True
                break /* stop checking constraints */
        if(not DWOoccured) /*all constraints were ok*/
           FC(Level+1)
        RestoreAllValuesPrunedByFCCheck()
   Assigned[V] := FALSE //undo since we have tried all of V's values
   return;
```



其实这是人工解数独一种很常见的方法，即当前格填了某一个值后会不会导致其他格填不了。

3.3 泛化边一致性(GAC)

定义 4 (一致). 限制$C(X,Y)$是一致的，当且仅当对于所有X的值都存在某些Y满足C，即$\forall X \exists Y : C(X,Y)$。

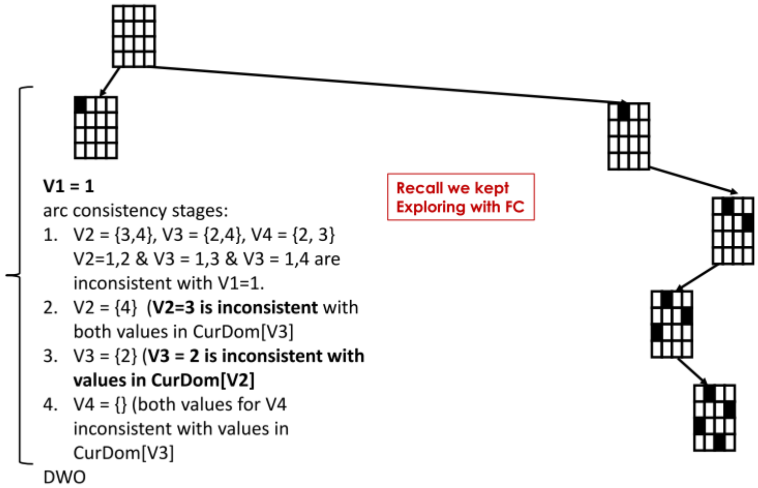
定义 5 (泛化边一致性(Generalized Arc Consistency, GAC)). 限制$C(V_1,V_2,\ldots,V_n)$是关于V_i边一致的，当且仅当$\forall V_i, \exists V_1,\ldots,V_{i-1},V_{i+1},\ldots,V_n$满足$C$。限制$C$是$GAC$的当且仅当对于每一变量都是$GAC$的。一个$CSP$是$GAC$的当且仅当它的限制都是$GAC$的。

有GAC算法：

- 在$V_i = d$下，没有其他变量赋值能够满足该限制，则d是边不一致的，进而可以被剪枝剪掉。
- 注意当从论域中移除一个值时可能导致新的不一致，故需要采用队列的方式，不断将需要检测边一致性限制添加，直到队列为空，即限制条件变为GAC。
- 近似可理解为将后续搜索步骤都前移到剪枝部分。
- 注意在未进入循环之前就可以先进行检测了。（同样类比数独，先将每一个格不能填的数字都划掉）

```
GAC(Level) /*Maintain GAC Algorithm */
   If all variables are assigned
      PRINT Value of each Variable
      RETURN or EXIT (RETURN for more solutions)
                     (EXIT for only one solution)
   V := PickAnUnassignedVariable()
   Assigned[V]  := TRUE
   for d := each member of CurDom(V)
      Value[V]  := d
      Prune all values of V ≠ d from CurDom[V]
      for each constraint C whose scope contains V
         Put C on GACQueue
      if(GAC_Enforce() != DWO)
         GAC(Level+1) /*all constraints were ok*/
      RestoreAllValuesPrunedFromCurDoms()
   Assigned[V]  := FALSE
   return;
```

```
GAC_Enforce()
   // GAC-Queue contains all constraints one of whose variables has
   // had its domain reduced. At the root of the search tree
   // first we run GAC_Enforce with all constraints on GAC-Queue
   while GACQueue not empty
      C = GACQueue.extract()
      for V := each member of scope(C)
         for d := CurDom[V]
            Find an assignment A for all other
            variables in scope(C) such that
            C(A ∪ V=d) = True
            if A not found
               CurDom[V] = CurDom[V] - d
               if CurDom[V] = ∅
                  empty GACQueue
                  return DWO //return immediately
               else
                  push all constraints C′ such that
                  V  ∈ scope(C′) and C′ ∉ GACQueue
                  on to GACQueue
   return TRUE //while loop exited without DWO
```

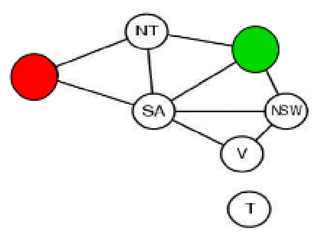


定义 6 (支撑). 在限制C下变量赋值$V = d$的支撑是对C中其他变量的赋值A，使得$A \cup \{V = d\}$满足C。即其他变量的指派构成了当前变量的支撑。

向前检测和边一致性检测的区别如下

- Assign *{Q=green}*
- Effects on other variables connected by constraints with Q
  - *NT can no longer be green = {B}*
  - *NSW can no longer be green = {R, B}*
  - *SA can no longer be green = {B}*
- *DWO there is no value for SA that will be consistent with NT ≠ SA and NT = B*

Note Forward Checking would not have detected this DWO.



4 知识表示与推理

4.1 基本概念

一阶逻辑(First-Order Logic,FOL)

- 个体/常量(0-arity)
- 一元(unary)谓词：$A(x), B(x)$
- 关系/二元谓词：$L(x, y)$

定义 7 (项(term)). 每一个变量都是一个项。若$t_1, \ldots, t_n$都为项，且f为n参数的的函数符号，则$f(t_1, \ldots, t_n)$是一个项。

定义 8 (公式(formular)). 公式包括以下几种情况：

- 若$t_1, \ldots, t_n$都是项，且P是n元的谓词符号，则$P(t_1, \ldots, t_n)$是一个公式
- 若t_1, t_2都是项，那么$(t_1 = t_2)$是一个原子公式
- 若α, β都是公式，v是一个变量，则$\neg\alpha, (\alpha \wedge \beta), (\alpha \neg \beta), \exists v.\alpha, \forall v.\alpha$都是公式

注意公式中的变量是自由的*(free)*还是约束的*(bound)*，通过全称特称符号可进行约束。没有自由变量的公式称为句子*(sentence)*。

定义 9 (替换). $\alpha[v/t]$表示α中所有自由出现的v都用项t替代

定义 10 (解释(interpretation)). 一个解释是一个对*(pair)*$\mathcal{I} = \langle D, I \rangle$，其中

- D是论域，可以是任何非空集
- I是从谓词到函数符号的映射
- 若P是一个n元谓词符号，则$I(P)$是一个在D上的n元关系，即$I(P) \subset D^n$。如p是一个常量/命题符号，则$I(p) \in \{True, False\}$。
- 若f是一个n元函数符号，则$I(f)$是一个在D上的n元函数，即$I(f) : D^n \to D$。如c是一个零元常量符号，则$I(c) \in D$。

定义 11 (赋值(denotation)). 变量指派*(assignment)*μ是一个从变量集合到论域D的映射

$$\|v\|_{\mathcal{I},\mu} = \mu(v)$$
$$\|f(t_1, \ldots, t_n)\|_{\mathcal{I},\mu} = I(f)(\|t_1\|_{\mathcal{I},\mu}, \ldots, \|t_n\|_{\mathcal{I},\mu})$$

定义 12 (满足). $\mathcal{I}, \mu \models \alpha$读作$\mathcal{I}, \mu$满足$\alpha$

- $\mathcal{I}, \mu \models P(t_1, \ldots, t_n) \iff \langle \|t_1\|_{\mathcal{I},\mu}, \ldots, \|t_n\|_{\mathcal{I},\mu} \rangle \in I(P)$
- $\mathcal{I}, \mu \models (t_1 = t_2) \iff \|t_1\|_{\mathcal{I},\mu} = \|t_2\|_{\mathcal{I},\mu}$

同样也有命题逻辑的一些性质

- $\mathcal{I}, \mu \models \neg\alpha \iff \mathcal{I}, \mu \not\models \alpha$
- $\mathcal{I}, \mu \models (\alpha \wedge \beta) \iff (\mathcal{I}, \mu \models \alpha \wedge \mathcal{I}, \mu \models \beta)$
- $\mathcal{I}, \mu \models (\alpha \vee \beta) \iff (\mathcal{I}, \mu \models \alpha \vee \mathcal{I}, \mu \models \beta)$
- $\mathcal{I}, \mu \models \exists v.\alpha \iff (\exists d \in D : \mathcal{I}, \mu\{d; v\} \models \alpha)$
- $\mathcal{I}, \mu \models \forall v.\alpha \iff (\forall d \in D : \mathcal{I}, \mu\{d; v\} \models \alpha)$

令S为句子的集合，若对于所有$\alpha \in \mathcal{I}, \mathcal{I} \models \alpha$，则称$\mathcal{I}$满足$S$，记作$\mathcal{I} \models S$，$\mathcal{I}$又被称为$S$的一个模型。若$S$是可满足的，则存在$\mathcal{I}$使得$\mathcal{I} \models S$。

例 3. 通常的问题是下列句子集合是否是可满足的

$$\{\forall x(P(x) \to Q(x)), P(a), \neg Q(a)\}$$

即是否存在这样的解释/变量赋值使全部句子都成立。

定义 13 (蕴含(entail)). $S \models \alpha$是指对于任意满足$\mathcal{I} \models S$的$\mathcal{I}$有$\mathcal{I} \models \alpha$，读作$S$蕴含$\alpha$或$\alpha$是$S$一个逻辑结果*(consequence)*。注意$\{\alpha_1, \ldots, \alpha_n\} \models \alpha$当且仅当$\alpha_1 \wedge \cdots \wedge \alpha_n \to \alpha$合法，当且仅当$\alpha_1 \wedge \cdots \wedge \neg\alpha$不可满足。

例 4. 令知识库KB为句子集合，α为一个询问，想要知道知识库是否能推出询问，即求蕴含$KB \models \alpha$。若要证明$KB \not\models \alpha$，则只需给出一个解释满足KB但不满足α。

4.2 推理

4.2.1 归结

定义 14 (子句(clause)). 文字*(literal)*是原子公式或它的取反，一个子句是文字的析取*(disjunction)*，如$p \vee \neg r \vee s$，写作$(p, \neg r, s)$。特殊地，空子句$()$代表为假。公式*(formula)*则是子句的合取*(conjunction)*。

定义 15 (归结(resolution)). 从两条子句$\{p\} \cup c_1$和$\{\neg p\} \cup c_2$中推出子句$c_1 \cup c_2$的过程称为归结。

定义 16 (获取(derivation)). 句子序列$c_1, \ldots, c_n = c$，对于每一个c_i，或者$c_i \in S$，或者c_i是先前**两个子句**的归结，这个过程称为获取，记为$S \vdash c$。

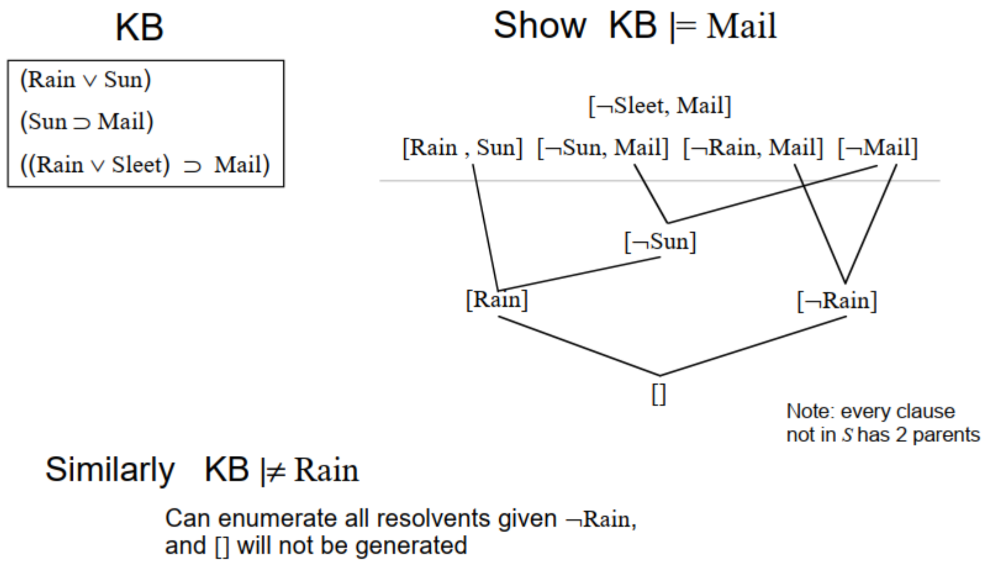
定理 4. 若$S \vdash c$，则$S \models c$

但注意其逆命题并不成立，考虑$(p) \models (p, q)$，但是$(p) \nvdash (p, q)$。

定理 5. $S \vdash () \iff S \models () \iff S$是不可满足的

进而得到基于归结的推理过程：反驳(refutation)，即$KB \models \alpha \iff KB \wedge \alpha$是不可满足的

- 将KB和$\neg\alpha$改写为子句形式构成S
- 检测是否$S \vdash ()$



利用归结（两条文字合一变真删除）看是否能得到空子句。

4.2.2 子句形式转换

- 消除蕴含：$A \to B \iff \neg A \vee B$
- 将非向内推：德摩根定律
- 标准化变量：重命名变量使得每一个量词都是唯一的
- 消除存在量词(skloemize)：引入新的函数符号，如$\forall x P(x)$改为$P(g(y))$
- 将所有量词带到最前面：只有全局量词，且名字均不同
- 析取分配到合取
- 压平嵌套合取和析取
- 转化为子句：将量词全部移除，然后分离成几条子句

4.2.3 合一

归结过程中可能需要合一(unification)，用来消除两个子句中不同的变量。

定义 17 (合一子(unifier)). *令公式f和g语义等价的替换σ称为f和g的合一子*

例 5. *$P(f(x),a)$和$P(y,f(w))$不能被合一，因没有令$a=f(w)$的替换使得两者相同*

定义 18 (最一般合一子(Most General Unifier, MGU)). *两个公式f和g的替换σ是MGU，若*

- *σ是一个合一子*
- *对于其他合一子θ必然存在第三个替换λ使得$\theta=\sigma\lambda$*

也就是说其他的合一子都比σ更特殊(specialized)。

例 6. *考虑$P(f(x),z)$和$P(y,a)$*

- $\sigma = \{y = f(a), x = a, z = a\}$是一个合一子，但不是$MGU$
- $\theta = \{y = f(x), z = a\}$是一个$MGU$
- $\sigma = \theta\lambda$，其中$\lambda = \{x = a\}$

计算MGU的算法：不断代入新的元，使其一致

Given two atomic formulas f and g

1. $k = 0$; $\sigma_0 = \{\}$; $S_0 = \{f, g\}$
2. If S_k contains an identical pair of formulas, stop and return σ_k as the MGU of f and g.
3. Else find the disagreement set $D_k = \{e_1, e_2\}$ of S_k
4. If $e_1 = V$ a variable, and $e_2 = t$ a term not containing V (or vice-versa) then let $\sigma_{k+1} = \sigma_k\{V = t\}$; $S_{k+1} = S_k\{V = t\}$; $k = k + 1$; Goto 2
5. Else stop, f and g cannot be unified.

4.2.4 完整例子

基于反驳的归结推理

1. $A(tony)$
2. $A(mike)$
3. $A(john)$
4. $L(tony, rain)$
5. $L(tony, snow)$

$\forall x(A(x) \wedge \neg S(x)) \to C(x) \quad \Rightarrow \quad$ 6. $(\neg A(x), S(x), C(x))$

$\forall x(C(x) \to \neg L(x, rain)) \quad \Rightarrow \quad$ 7. $(\neg C(y), \neg L(y, rain))$

$\forall x(\neg L(x, snow) \to \neg S(x)) \quad \Rightarrow \quad$ 8. $(L(z, snow), \neg S(z))$

$\forall x(L(tony, x) \to \neg L(mike, x)) \quad \Rightarrow \quad$ 9. $(\neg L(tony, u), \neg L(mike, u))$

$\forall x(\neg L(tony, x) \to L(mike, x)) \quad \Rightarrow \quad$ 10. $(L(tony, v), L(mike, v))$

$\neg \exists x(A(x) \wedge C(x) \wedge \neg S(x)) \quad \Rightarrow \quad$ 11. $(\neg A(w), \neg C(w), S(w))$

Note that we must standardize variables.

12. R[5, 9a]u = snow $\neg L(mike, snow)$
13. R[8,12]z = mike $\neg S(mike)$
14. R[6b, 13]x = mike $(\neg A(mike), C(mike))$
15. R[2,14a] $C(mike)$
16. R[8a, 12]z = mike $\neg S(mike)$
17. R[2,11]w=mike $(\neg C(mike), S(mike))$
18. R[15, 17] $S(mike)$
19. R[16,18] ()

答案抽取(answer extraction)

- 将询问$\exists x P(x)$用$\exists x[P(x) \wedge \neg \text{answer}(x)]$替换（因为取非后变成$\forall x P(x) \implies \text{answer}(x)$）
- 直到获得任意子句只包含答案的谓词

例 7. 对下列查询进行归结及答案查询

- *Whoever can read $R(x)$ is literate $L(x)$*
- *Dolphins $D(x)$ are not literate*
- *Flipper is an intelligent dolphin $I(x)$*

Who is intelligent but cannot read?

分析. 对语句进行形式化

$\forall x(R(x) \to L(x))$	*1*	$(\neg R(u), L(u))$
$\forall x(D(x) \to \neg L(x))$	*2*	$(\neg D(v), \neg L(v))$
$D(Flip) \wedge I(Flip)$	*3*	$D(Flip)$
	4	$I(Flip)$
$Q{:}\exists x(I(x) \wedge \neg R(x))$	*5*	$(\neg I(y), R(y), answer(y))$
$R[4,5]/y = Flip$	*6*	$(R(Flip), answer(Flip))$
$R[1,6]/u = Flip$	*7*	$(L(Flip), answer(Flip))$
$R[2,7]/v = Flip$	*8*	$(\neg D(Flip), answer(Flip))$
$R[3,8]$	*9*	$(answer(Flip))$

因此得到$Flipper$是聪明的但是不能阅读

5 确定性规划

智能体应该能够对世界做出动作(action)，而不仅仅是通过搜索解决问题或推理及知识表示。核心是对动作的效果进行推理，并且计算什么动作能够达成特定的效果。

本节中主要关注确定性规划，即有完全的初始状态描述及确定性的动作效果。

5.1 情景演算

情景演算(Situation Calculation, SitCalc)三个基本部分

- 动作(action)：一组谓词
- 情景(situations)：动作序列，$do(a,s)$为动作、情景到新情景的函数映射，S_0为初始情景

$$do(put(a,b), do(put(b,c), S_0))$$

要区别情景与状态(state)，如将硬币转两次，情景/动作历史不同，但状态都是一样的

- 流(fluent)：从情景到情景的谓词或函数（动态变化过程），用谓词或函数符号描述，其中最后一个参数为情景，如$Holding(r,x,s)$代表机器人r在状态s下拿着物体x，有

$$\neg Holding(r,x,s) \wedge Holding(r,x,do(pickup(r,x),s))$$

经过后面的流操作会得到一个新情景下的谓词

- 条件(precondition)：动作执行的前提条件
- 影响(effect)：执行动作后改变的流。如下在情景s下执行修复动作后，x就不是破碎的

$$\neg Broken(x, do(repair(r,x)), s)$$

情景演算的形式化仅陈述了执行动作的影响，而没有阐述没影响的部分。但是给定一个流只有很少的动作会被影响，而大多数都保持不变。

形式化后的情景即可以利用归结进行规划，但是开销会非常大。而框架(frame)问题则是找到一种高效的方法来确定动作的非效果(non-effects)。而不是显式地将它们全部写下来，可以考虑用一阶逻辑。

5.2 STRIPS

传统的规划没有不完全或不确定的信息，因此可以做以下假设。

- 封闭世界假设(Closed-World Assumption, CWA)：初始状态的信息是完备的，用于表示世界状态的知识库是一系列真实的原子事实（与数据库类似）。如$emp(A, C)$不在数据库中，则$\neg emp(A, C)$为真。
- 动作的前提只能是原子命题的合取
- 动作的影响只会使原子命题变真或变假，不会出现条件影响或析取影响

STRIPS(Stanford Research Institute Problem Solver)：

- 世界被表示成封建世界知识库(CW-KB)，一个STRIPS的动作表示成更新CW-KB的方式
- 一个动作生成新的KB，用以描述新的世界

在SitCalc中我们可能有不完全的信息（用一阶逻辑公式表示），而在STRIPS中，我们有完整的信息（用CW-KB表示）。

STRIPS中需要用3个列表来表示一个动作

- 动作的前提`pre`
- 动作增加的影响`add`
- 动作减少的影响`delete`

例 8. *$pickup(X)$:*

- $Pre: handempty, clear(X), ontable(X)$
- $Adds: holding(X)$
- $Dels: handempty, clear(X), ontable(X)$

注意STRIPS的表达力还是有限制的，如它没有条件(conditional)影响。因此需要有表达力更强的语言Action Description Language(ADL)，允许在前提中有任意公式，而且可以有条件和全称影响。

可以将规划看成是一个搜索问题，每个动作都是由一个CW-KB到CW-KB的映射，但搜索空间会非常巨大。

5.3 松弛问题

传统的规划给出

- 一个封闭世界知识库表示原始状态
- 一组STRIPS动作（从状态到新状态的映射）
- 一个目标状态

放松(relaxed)问题即考虑**忽略删除动作**的列表，这样可能得到有用的启发式函数估计。

定理 6. 放松问题的一个最优规划的长度是原始问题最优规划长度的下界

证明. 由于我们将所有影响都添加了，并且不删除负面影响，因此很直觉地会很快得到目标。令P为原始问题，P'为放松问题，我们希望得到$Sols(P) \subset Sols(P')$，则有$Minlen(Sols(P')) \leq Minlen(Sols(P))$。

- 令$a_0, \ldots, a_{n-1}$为P的解，证明它也是P'的一个解。令s_0为初始状态，令$s_{i+1} = s_i \cup add(a_i) - del(a_i), \forall i < n$，且$Goal \subset s_n$，$pre(a_i) \subset s_i, \forall i < n$。
- 又令$s'_0 = s_0$，且$s'_{i+1} = s'_i \cup add(a_i)$，通过数学归纳法证明$s_i \subset s'_i, \forall i \leq n$。
  - 归纳奠基：$i = 0$时$s_0 \subset s'_0 = s_0$
  - 归纳假设：假设$s_i \subset s'_i, \forall i < n$，证明$s_{i+1} \subset s'_{i+1}$
  - 推理：因为a_i在s_i中是可采纳的，即$pre(a_i) \subset s_i$，因此$pre(a_i) \subset s_i \subset s'_i$，即$a_i$在$s'_i$中是可采纳的。所以得到
  $$s_{i+1} = s_i \cup add(a_i) - del(a_i) \subset s'_i \cup add(a_i) = s'_{i+1}$$

进而$Goal \subset s_n \subset s'_n$，且$pre(a_i) \subset s_i \subset s'_i, \forall i < n$，因此$a_0, \ldots, a_{n-1}$也是$P'$的一个解。 □

因此最优放松问题的规划可以作为$A^\star$算法的可采纳启发式函数。然而在放松问题中计算一个最优的问题是NP难的，可以从S开始建立层次(layered)结构使其到达目标。

可达性分析：$s_0, a_1, s_1, \ldots, a_n, s_n$，直到$s_n \subset Goal$，或者状态层$s_n$不再改变（到达不动点）。

命题 5. 令$a_0, \ldots, a_{n-1}$为S_0中可采纳的动作序列，令$s_0 = S_0$，且$s_{i+1} = s_i \cup add(a_i) - del(a_i)$。那么$\forall i < n, \exists j, k \leq i$使得$a_i \in A_k$且$s_i \subset S_j$

分析. 用数学归纳法

- 归纳奠基：$i = 0$显然成立
- 归纳假设：假设$\forall i < n \exists j \leq i$：$s_i \subset S_j$
- 因为$pre(a_i) \subset s_i, pre(a_i) \subset S_j$，令$k$为最小的$u \leq j$使得$pre(a_i) \subset S_u$，那么$a_i \in A_k$，故$add(a_i) \subset S_{k+1} \subset S_{j+1}$ 因此
$$s_{i+1} \subset s_i \cup add(a_i) \subset S_j \cup S_{j+1} = S_{j+1}$$

定理 7. 假设状态层不再改变且目标不被满足，则原始规划问题是不可解的。

证明. 用反证法，假设$a_0, \ldots, a_{n-1}$为原始问题的一个解，则$Goal \subset s_n$。由前面的命题，存在$m \leq n$使得$Goal \subset s_n \subset S_m$，导致矛盾。 □

假设目标G包含在状态层中，现在想要计算一个好的放松规划，想法即对每个i选择最小的A_i子集。

CountActions(G,S_K):
/* Here G is contained in S_K, and we compute the number of actions contained in a relaxed plan achieving G. */

- If $K=0$ return 0
- Split G into $G_P = G \cap S_{K-1}$ and $G_N = G - G_P$
  - G_P contains the previously achieved (in S_{K-1}), and
  - G_N contains the just achieved parts of G (only in S_K).
- Find a minimal set of actions A whose add effects cover G_N.
  - cannot contain redundant actions,
  - but may not be the minimum sized set
    (computing the minimum sized set of actions is the set cover problem and is NP-Hard)
- NewG := G_P U preconditions of A.
- return CountAction(NewG,S_{K-1}) + size(A)

进而变成一个集合覆盖问题：从集合的集合S中选择m个集合使得其并集可以覆盖全集。

定理 8. 假设$Goal \subset S_k$，对于$i<k$，令A'_{i-1}为调用$CountActions(G_i, S_i)$的结果，则$A'_0, \dots, A'_{k-1}$为松弛问题的一个解。

证明. 用数学归纳法 □

6 不确定性规划

6.1 基础知识

一组变量$V_1, \dots, V_n$以及其对应的有限域$\mathrm{dom}[V_i]$，很容易导致指数的计算复杂度。

定理 9 (全概率公式). $\{B\}_{i=1}^k$为全集U的一个划分，则

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(A) &= \mathbb{P}(A \cap B_1) + \cdots + \mathbb{P}(A \cap B_k) \\ &= \mathbb{P}(A \mid B_1)\mathbb{P}(B_1) + \cdots + \mathbb{P}(A \mid B_k)\mathbb{P}(B_k)\end{aligned}$$

定理 10 (条件独立). 若

$$\mathbb{P}(B \mid A \cap C) = \mathbb{P}(B \mid A)$$

，则在给定A的情况下B条件独立于C（C没有给A增加知识）。若对于所有$x \in \mathrm{dom}[X], y \in \mathrm{dom}[Y], z \in \mathrm{dom}[Z]$，

$$\mathbb{P}(X = x \wedge Y = y \mid Z = z) = \mathbb{P}(X = x \mid Z = z)\mathbb{P}(Y = y \mid Z = z)$$

则在给定$Z=z$下，$X=x$和$Y=y$条件独立。

命题 6 (独立性性质). • 若A和B独立，则$\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A) \cdot \mathbb{P}(B)$

- 给定A，B和C条件独立，则

$$\mathbb{P}(B \cap C \mid A) = \mathbb{P}(B \mid A) \mathbb{P}(C \mid A)$$

定理 11 (贝叶斯公式). 条件概率定义

$$\mathbb{P}(X \mid Y) = \mathbb{P}(XY) / \mathbb{P}(Y) \implies \mathbb{P}(XY) = \mathbb{P}(X \mid Y) \mathbb{P}(Y)$$

注意与贝叶斯公式区分

$$\mathbb{P}(Y \mid X) = \frac{\mathbb{P}(XY)}{\mathbb{P}(X)} = \frac{\mathbb{P}(X \mid Y) \mathbb{P}(Y)}{\mathbb{P}(X)}$$

定理 12 (链式法则).

$$\mathbb{P}(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_n) = \mathbb{P}(A_1 \mid A_2 \cap \cdots \cap A_n) \mathbb{P}(A_2 \mid A_3 \cdots \cap A_n) \mathbb{P}(A_{n-1} \mid A_n) \mathbb{P}(A_n)$$

6.2 贝叶斯网络

6.2.1 基础知识

$$E \to C \to A \to B \to H$$

有以下概率公式成立

- $\mathbb{P}(H \mid B, A, E, C) = \mathbb{P}(H \mid B)$
- 由链式法则和独立性假设

$$\mathbb{P}(HBACE) = \mathbb{P}(H \mid BACE) \mathbb{P}(B \mid ACE) \mathbb{P}(A \mid CE) \mathbb{P}(C \mid E) \mathbb{P}(E)$$
$$\mathbb{P}(HBACE) = \mathbb{P}(H \mid B) \mathbb{P}(B \mid A) \mathbb{P}(A \mid C) \mathbb{P}(C \mid E) \mathbb{P}(E)$$

- 通用公式

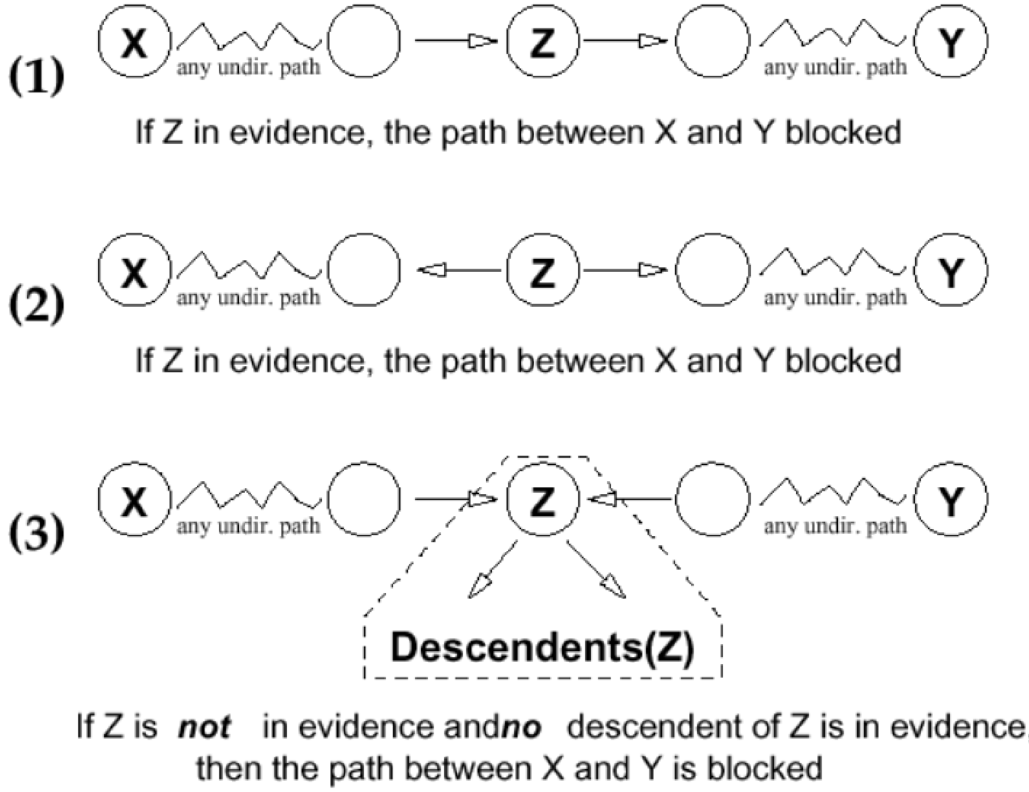
$$\mathbb{P}(X_1 X_2 \cdots X_n) = \mathbb{P}(X_n \mid Par(X_n)) \cdots \mathbb{P}(X_1 \mid Par(X_1))$$

- 单点概率（由全概率公式和条件概率定义）

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(a) &= \sum_{c_i \in \mathrm{dom}[C]} \mathbb{P}(a \mid c_i) \mathbb{P}(c_i) \\ &= \sum_{c_i \in \mathrm{dom}[C]} \mathbb{P}(a \mid c_i) \sum_{e_i \in \mathrm{dom}[E]} \mathbb{P}(c_i \mid e_i) \mathbb{P}(e_i)\end{aligned}$$

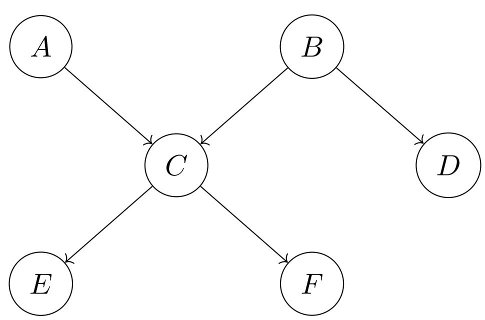
因此每个结点只需存一个条件概率表(conditional probability table, CPT)。

定义 19 (D分隔(separation)). 若一组变量E阻隔*(block)*了X到Y的所有无向路径P，则称E D-分隔了X和Y，且有给定证据E下，X和Y条件独立。 E阻隔*(block)*了路径P当且仅当在路径上存在某点Z使得下面任一成立。

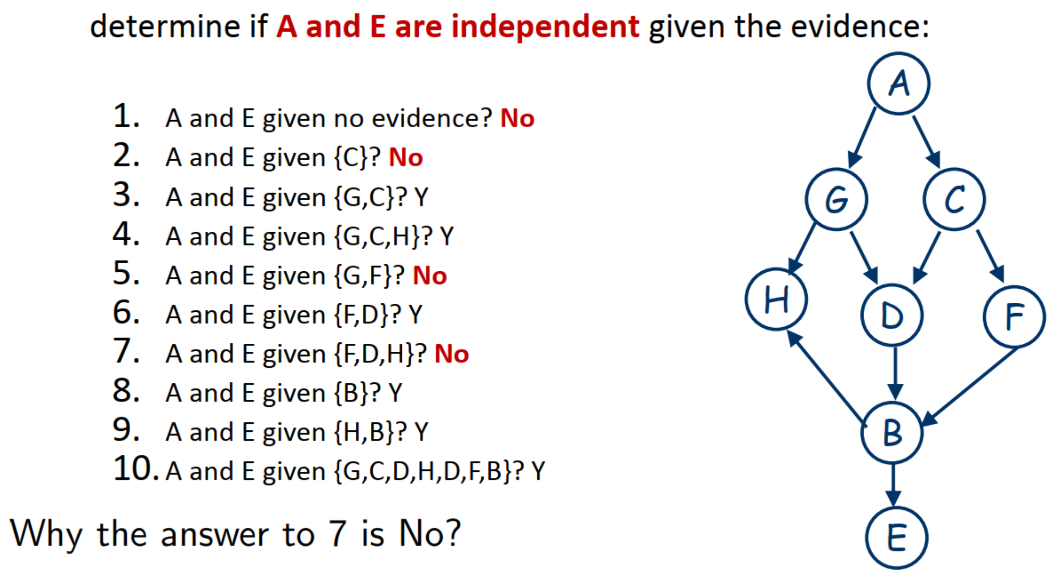


注意第3种情况，证据集中没有给交叉结点及其子结点，则父亲节点都独立。

例 9. 考虑如下贝叶斯网络



在此例中$\mathbb{P}(c \mid a, b, \neg d, \neg e, \neg f) \neq \mathbb{P}(c \mid a, b)$。



例 10. 注意第3种情况的适用条件，由于H在证据集中，所以并不满足第3种情况。在第7个例子中，$AGHBE$没有被阻隔，故给定FDH，A, E也不独立。

6.2.2 贝叶斯推断

推断过程如下：

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(a \mid d, e) &= \mathbb{P}(a, d, e) / \mathbb{P}(d, e) \\ &= \mathbb{P}(a, d, e) / \sum_{A} \mathbb{P}(a, d, e)\end{aligned}$$

$$\mathbb{P}(a, d, e) = \sum_{B,C} \mathbb{P}(a, B, C, d, e)$$

故只需计算$\mathbb{P}(a, d, e)$。

采用动态规划的思想，存储子项，减少计算量。

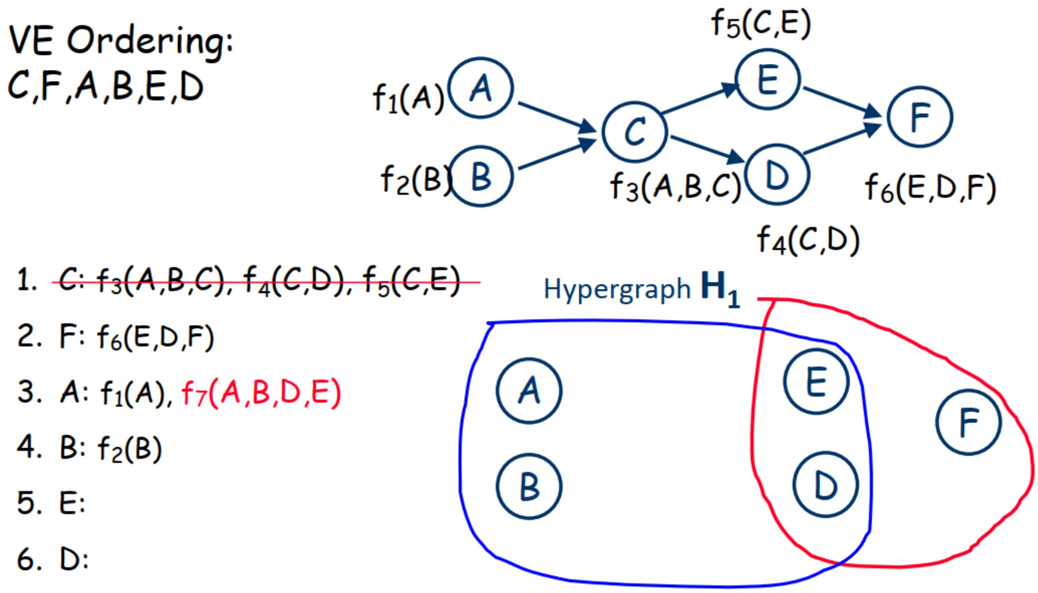
记因子为某些变量的函数，如$\mathbb{P}(C \mid A)) = f(A, C)$

- 乘积：$h(X, Y, Z) = f(X, Y) \times g(Y, Z)$
- 求和：$h(Y) = \sum_{x \in \mathrm{dom}[X]} f(x, Y)$
- 因子限定：$h(Y) = f(a, Y)$

算法 1 (变量消除(Variable Elimination, VE)). 给定贝叶斯网络，条件概率表F，询问Q，证据E，其余变量为Z，计算$\mathbb{P}(Q \mid E)$。

1. 对于$f \in F$中每一变量，将其替换为$f_{E=e}$（因子限定）
2. 对于每一$Z_j \in Z$，按给定Z_j顺序，并按照以下步骤消除：
   - $f_1, f_2, \ldots, f_k$为含有Z_j的因子
   - 计算新的因子$g_j = \sum_{Z_j} f_1 \times f_2 \times \cdots \times f_k$
   - 将f_i从F中移除，并将新的因子g_j添加到F中
3. 剩下的因子只包含询问Q中的变量，则计算它们的乘积归一化得到$\mathbb{P}(Q \mid E)$

可以采用桶消除(bucket elimination)算法，每次将新生成的因子放在第一个可被应用的桶中。下图展示的是超图(hypergraph)，最大超边(hyperedge)的大小即为最大的CPT表项/VE算法的复杂度。

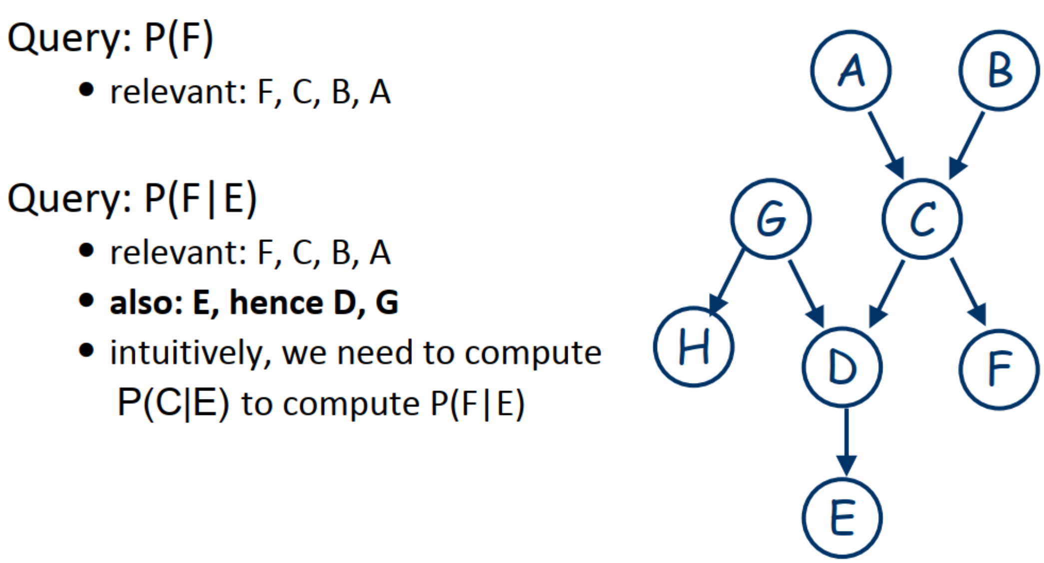


多树(polytree)：单连通(singly connected)的贝叶斯网络，即在任意两个结点间只有一条路径。

最小填充(min-fill)启发式：总是先消除产生最小因子大小的变量，这种方法可以使得在线性时间内求解多树。

定义 20 (相关性(relevance)). 给定证据E询问Q，则有以下几种情况：

- Q自身当然是相关的
- 若结点Z相关，则它的父母也相关
- 若$e \in E$是一个相关结点的后代，则E也是相关的



例 11. 但询问$P(F \mid H)$，则D, E, G是不相关的。而且这种算法会过度估计相关的变量。

7 机器学习

7.1 决策树

假定样本集合D中第k类样本所占比例为$p_k(k=1,2,\ldots,|\mathcal{Y}|)$，则$D$的信息熵定义为

$$\mathrm{Ent}(D)=-\sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|}p_k\log_2 p_k$$

又假定离散属性a有V个可能取值$\{a^1,a^2,\ldots,a^V\}$，第v个分支结点包含了D中所在属性a上取值为a^v的样本，记为D^v，进而可定义信息增益

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

每次选择最大增益的属性进行划分，即

$$a_*=\operatorname*{arg\,max}_{a\in A}\mathrm{Gain}(D,a)$$

以信息增益为准则来选择划分属性的算法即为ID3决策树。

7.2 贝叶斯学习

先验$\mathbb{P}(H)$、似然$\mathbb{P}(d\mid H)$、证据$d=\langle d_1,d_2,\ldots,d_n\rangle$，有贝叶斯公式（先验推后验）

$$\mathbb{P}(H\mid d)=\alpha\mathbb{P}(d\mid H)\mathbb{P}(H)$$

假设独立同分布$\mathbb{P}(d\mid h)=\prod_j\mathbb{P}(d_j\mid h)$

- 贝叶斯学习：$\mathbb{P}(X\mid d)=\sum_i\mathbb{P}(X\mid d,h_i)\mathbb{P}(h_i\mid d)=\sum_i\mathbb{P}(X\mid h_i)\mathbb{P}(h_i\mid d)$
- 极大后验(MAP)学习：$\mathbb{P}(X\mid d)\approx\mathbb{P}(X\mid h_{MAP})$

$$h_{MAP}=\operatorname*{arg\,max}_{h_i}\mathbb{P}(h_i\mid d)=\operatorname*{arg\,max}_{h_i}\mathbb{P}(h_i)\mathbb{P}(d\mid h_i)$$

- 最大似然(ML)学习：$\mathbb{P}(X\mid d)\approx\mathbb{P}(X\mid h_{ML})$

$$h_{ML}=\operatorname*{arg\,max}_{h_i}\mathbb{P}(d\mid h_i)$$

基于属性条件独立性假设

$$\mathbb{P}(c\mid\mathbf{x})=\frac{\mathbb{P}(c)\mathbb{P}(\mathbf{x}\mid c)}{\mathbb{P}(x)}=\frac{\mathbb{P}(c)}{\mathbb{P}(\mathbf{x})}\prod_{i=1}^{d}\mathbb{P}(x_i\mid c)$$

其中d为属性数目，x_i为$\mathbf{x}$在第i个属性上的取值。因对所有类别来说$\mathbb{P}\left(\mathbf{x}\right)$相同，因此贝叶斯判定准则为

$$h_{NB}(\mathbf{x}) = \arg\max_{c\in\mathcal{Y}} \mathbb{P}\left(c\right) \prod_{i=1}^{d} \mathbb{P}\left(x_i \mid c\right)$$

令D_c表示训练集D中第c类样本组成的集合，有

$$\mathbb{P}\left(c\right) = \frac{D_c}{D} \qquad \mathbb{P}\left(x_i \mid c\right) = \frac{|D_{c,x_i}|}{|D_c|}$$

7.3 聚类算法

- 硬聚类：每个样本都决定放在哪一个类别中
- 软聚类：每个样本都被指派每个类别的概率分布

7.3.1 EM算法

最大期望(Expectation-Maximization, EM)算法：用作软聚类

- E步：计算期望，利用对隐藏变量的现有估计值（实际上就是扩充了当前数据，初始化先随机赋值，然后进入迭代），计算其最大似然估计值
- M步：最大化在E步上求得的最大似然值来计算参数的值。

M步上找到的参数估计值被用于下一个E步计算中，这个过程不断交替进行。

7.3.2 K-means算法

- E步：对于每一个类别i和特征X_j，有

$$pval(i, X_j) \leftarrow \frac{\sum_{e:class(e)=i} val(e, X_j)}{|\{e : class(e) = i\}|}$$

- M步：对于每一个样本e，指派e给类别i使得

$$\min_i \sum_{j=1}^{n} (pval(i, X_j) - val(e, X_j))^2$$

7.4 神经网络

定理 13 (一致近似理论(Universal Approximator Theorem)). 具有至少一个隐层的深度神经网络可以无限逼近任意连续函数

前向后向传播过程：

- 前向过程：

$$in_j = \sum_i w_{ij} a_i \qquad a_j = g(in_j)$$

- 后向过程：

$$\text{output:}\Delta_j = g'(in_j)(y_j - a_j)$$
$$\text{hidden:}\Delta_i = g'(in_i)\sum_j w_{ij}\Delta_j$$

注意以下两条求导公式

$$\begin{aligned} \sigma(x) &= \frac{1}{1+\mathrm{e}^{-x}} & \frac{\partial\sigma(x)}{\partial x} &= (1-\sigma(x))\sigma(x) \\ \tanh(x) &= \frac{\mathrm{e}^{x}-\mathrm{e}^{-x}}{\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x}} & \frac{\partial\tanh(x)}{\partial x} &= 1-\tanh^2(x) \end{aligned}$$

7.5 强化学习

目标：

$$\max_{\pi_\theta}\left[\sum_{t=1}^{\infty}\gamma^t r_t\right]$$

给定策略π：

$$\begin{aligned} Q^\pi(s,a) &= \sum_{s'}\mathbb{P}\left(s' \mid a,s\right)\left(R(s,a,s')+\gamma V^\pi(s')\right) \\ V^\pi(s) &= Q(s,\pi(s)) \end{aligned}$$

Q学习：随机选择动作a，观察回报r和下一状态s'

Algorithm 3 Q-Learning

1: 随机初始化$Q[S,A]$
2: 观测当前状态s
3: **repeat**
4: 选择动作a并执行
5: 观察回报r和状态s'
6: 依据下述公式进行更新

$$Q[s,a] \leftarrow Q[s,a] + \alpha(r + \gamma\max_{a'} Q[s',a'] - Q[s,a])$$

7: $s \leftarrow s'$
8: **until** 收敛