Chapter1 Introduction

1.1 机器学习的关键组件

data

每个数据集由一个个样本(example, sample)组成,大多时候,它们遵循独立同分布 (independently and identically distributed, i.i.d.)。 样本有时也叫做数据点(data point)或数据实例(data instance),通常每个样本由一组称为特征(features,或协变量(covariates))的属性组成。 机器学习模型会根据这些属性进行预测。 在监督学习问题中,要预测的是一个特殊的属性,它被称为标签(label,或目标(target))。

model

深度学习与经典方法的区别主要在于: 前者关注的功能强大的模型, 这些模型由神经网络错综复杂的交织在一起, 包含层层数据转换, 因此被称为深度学习 (deep learning) 。

loss function

机器学习中,我们需要定义模型的优劣程度的度量,这个度量在大多数情况是"可优化"的,这被称之为目标函数(objective function)。 我们通常定义一个目标函数,并希望优化它到最低点。 因为越低越好,所以这些函数有时被称为损失函数(loss function,或cost function)。

通常,损失函数是根据模型参数定义的,并取决于数据集。 在一个数据集上,我们可以通过最小化总损失来学习模型参数的最佳值。 该数据集由一些为训练而收集的样本组成,称为训练数据集 (training dataset,或称为训练集 (training set))。 然而,在训练数据上表现良好的模型,并不一定在"新数据集"上有同样的性能,这里的"新数据集"通常称为测试数据集 (test dataset,或称为测试集 (test set))。 当一个模型在训练集上表现良好,但不能推广到测试集时,这个模型被称为过拟合 (overfitting)的。

optimization algorithm

深度学习中,大多流行的优化算法通常基于一种基本方法--梯度下降(gradient descent)。简而言之,在每个步骤中,梯度下降法都会检查每个参数,看看如果仅对该参数进行少量变动,训练集损失会朝哪个方向移动。然后,它在可以减少损失的方向上优化参数。

1.2 各种机器学习问题

1. 监督学习

监督学习(supervised learning)擅长在"给定输入特征"的情况下预测标签。 每个"特征-标签"对都称为一个样本(example)。 有时,即使标签是未知的,样本也可以指代输入特征。 我们的目标是生成一个模型,能够将任何输入特征映射到标签(即预测)。

监督学习的学习过程一般可以分为三大步骤:

- i. 从已知大量数据样本中随机选取一个子集,为每个样本获取真实标签。有时,这些样本已有标签(例如,患者是否在下一年内康复?);有时,这些样本可能需要被人工标记(例如,图像分类)。这些输入和相应的标签一起构成了训练数据集;
- ii. 选择有监督的学习算法,它将训练数据集作为输入,并输出一个"已完成学习的模型";
- iii. 将之前没有见过的样本特征放到这个"已完成学习的模型"中,使用模型的输出作为相应标签的 预测。

2. 回归

回归 (regression) 是最简单的监督学习任务之一。当标签取任意数值时,我们称之为回归问题,此时的目标是生成一个模型,使它的预测非常接近实际标签值。

3. 分类

区分"哪一个"的问题叫做分类(classification)问题。分类问题希望模型能够预测样本属于哪个类别(category,正式称为类(class))。例如,手写数字可能有10类,标签被设置为数字0~9。最简单的分类问题是只有两类,这被称之为二项分类(binomial classification)。回归是训练一个回归函数来输出一个数值;分类是训练一个分类器来输出预测的类别,预测类别的概率的大小传达了一种模型的不确定性。

当有两个以上的类别时,我们把这个问题称为多项分类(multiclass classification)问题。 常见的例子包括手写字符识别 {0,1,2,...9,a,b,c,...}。 与解决回归问题不同,分类问题的常见损失函数被称为交叉熵(cross-entropy)。

4. 标注

学习预测不相互排斥的类别的问题称为多标签分类 (multi-label classification)。

5. 搜索

有时我们不仅仅希望输出一个类别或一个实值,例如在信息检索领域,我们希望对一组项目进行排序。

6. 推荐

另一类与搜索和排名相关的问题是推荐系统(recommender system),它的目标是向特定用户进行"个性化"推荐。尽管推荐系统具有巨大的应用价值,但单纯用它作为预测模型仍存在一些缺陷。首先,我们的数据只包含"审查后的反馈":用户更倾向于给他们感觉强烈的事物打分。例如,在五分制电影评分中,会有许多五星级和一星级评分,但三星级却明显很少。此外,推荐系统有可能形成反馈循环:推荐系统首先会优先推送一个购买量较大(可能被认为更好)的商品,然而目前用户的购买习惯往往是遵循推荐算法,但学习算法并不总是考虑到这一细节,进而更频繁地被推荐。

7. 序列学习

序列学习需要摄取输入序列或预测输出序列,或两者兼而有之。 具体来说,输入和输出都是可变长度的序列,例如机器翻译和从语音中转录文本。

8. 无监督学习

数据中不含有"目标"的机器学习问题通常被为无监督学习(unsupervised learning)。

- i. 聚类 (clustering) 问题: 没有标签的情况下, 我们是否能给数据分类呢?
- ii. 主成分分析 (principal component analysis) 问题: 我们能否找到少量的参数来准确地捕捉数据的线性相关属性?

- iii. 因果关系 (causality) 和概率图模型 (probabilistic graphical models) 问题: 我们能否描述观察到的许多数据的根本原因?
- iv. 生成对抗性网络(generative adversarial networks):为我们提供一种合成数据的方法,甚至像图像和音频这样复杂的非结构化数据,潜在的统计机制是检查真实和虚假数据是否相同的测试。

9. 与环境交互(强化学习)

在强化学习问题中,智能体(agent)在一系列的时间步骤上与环境交互。 在每个特定时间点,智能体从环境接收一些观察(observation),并且必须选择一个动作(action),然后通过某种机制(有时称为执行器)将其传输回环境,最后智能体从环境中获得奖励(reward)。 此后新一轮循环开始,智能体接收后续观察,并选择后续操作,依此类推。 请注意,强化学习的目标是产生一个好的策略(policy)。 强化学习智能体选择的"动作"受策略控制,即一个从环境观察映射到行动的功能。

当环境可被完全观察到时,强化学习问题被称为马尔可夫决策过程(markov decision process)。当状态不依赖于之前的操作时,我们称该问题为上下文赌博机(contextual bandit problem)。当没有状态,只有一组最初未知回报的可用动作时,这个问题就是经典的多臂赌博机(multi-armed bandit problem)。

1.3 参考文献

- PyTorch documentation
- PyTorch中文文档