人工智能学习笔记

西瓜书学习笔记

烂石

2025 年 4 月 8 日

1 绪论

1.1 引言

略

1.2 基本术语

(i) 样本/示例-sample/instance

(ii) 训练集-training data

(iii) 测试集-testing data

(iv) 标记-label

(v) 样例-example: 拥有 label 的 instance

(vi) 泛化-generalization

1.3 假设空间

1.3.1 科学推理

- 归纳–induction 从具体的事实归结出一般性规律
- 演绎–deduction 从基础原理推演出具体状况

1.3.2 归纳学习–inductive learning

- 广义归纳学习
- 狭义归纳学习–概念学习 eg: 布尔概念学习

1.3.3 版本空间–version space

即存在着一个与训练集一致的" 假设集合"

1.4 归纳偏好

有多个与训练集一致的假设, 但测试新样本时有不同的输出结果, 那么采用哪种模型 (假设)?

1.4.1 ”奥卡姆剃刀”原则

若有多个假设与观察一致, 则选最简单的那个. 利用什么原则, 取决于算法能否获得更好的性能, 泛化能力是否更强

1.4.2 NFL(No Free Lunch Theorem) 定理–”没有免费的午餐”定理

定理 1.1 (No Free Lunch 定理)**.** 对于所有学习算法 $\mathcal{L}_a$ 和 $\mathcal{L}_b$，在均匀分布的目标函数空间下，它们的训练外误差满足：

$$\sum_f E_{ote}(\mathcal{L}_a|X,f) = \sum_f E_{ote}(\mathcal{L}_b|X,f)$$

证明.

步骤 1.1.1 (定义与假设)**.** 假设样本空间 $\mathcal{X}$ 和假设空间 $\mathcal{H}$ 是离散的。定义：

$$E_{ote}(\mathcal{L}_a|X,f) = \sum_{h\in\mathcal{H}}\sum_{x\in\mathcal{X}-X} P(x)\cdot\mathbb{I}(h(x)\neq f(x))\cdot P(h|X,\mathcal{L}_a)$$

其中 $\mathbb{I}(\cdot)$ 为指示函数。

步骤 1.1.2 (总误差求和)**.** 对所有目标函数求和：

$$\sum_f E_{ote}(\mathcal{L}_a|X,f) = \sum_f\sum_h\sum_{x\in\mathcal{X}-X} P(x)\mathbb{I}(h(x)\neq f(x))P(h|X,\mathcal{L}_a) \tag{1}$$

步骤 1.1.3 (交换求和顺序)**.** 将 $\sum_f$ 移至内部：

$$\begin{aligned} &= \sum_{x\in\mathcal{X}-X} P(x)\sum_h P(h|X,\mathcal{L}_a) \\ &\quad \times \underbrace{\sum_f \mathbb{I}(h(x)\neq f(x))}_{\boxed{\text{关键项}}} \end{aligned} \tag{2}$$

步骤 1.1.4 (计算关键项)**.** 对于二分类问题，每个 x 处的 $f(x)$ 有等概率取 *0* 或 *1*：

$$\sum_f \mathbb{I}(h(x)\neq f(x)) = \frac{1}{2}\cdot 2^{|\mathcal{X}|} = 2^{|\mathcal{X}|-1}$$

步骤 1.1.5 (最终化简)**.** 代入关键项并利用 $\sum_h P(h|X,\mathcal{L}_a) = 1$：

$$\text{原式} = 2^{|\mathcal{X}|-1}\sum_{x\in\mathcal{X}-X} P(x)$$

该结果与算法 $\mathcal{L}_a$ 无关，故对任意 $\mathcal{L}_a,\mathcal{L}_b$：

$$\sum_f E_{ote}(\mathcal{L}_a|X,f) = \sum_f E_{ote}(\mathcal{L}_b|X,f)$$

□

由1.1可知, 脱离具体问题, 空谈”什么学习算法最好”是毫无意义的

1.5 发展历程

推理期:1950s-1970s–符号知识, 演绎推理
知识期:1970s 中期–符号知识, 领域知识
学习期:1980s–机器学习, 归纳逻辑程序设计 (Inductive Logic Programming)
统计学习:1990s 中期–向量机 (Support Vector Machine), 核方法 (Kernel Methods)
深度学习:2000s–神经网络

1.6 应用现状

信息科学, 自然科学…

1.7 阅读材料

1.7.1 机器学习

国际会议:ICML,NIPS，COLT,ECML(Europe),ACML(Asia)
国际期刊:JMLR,ML
国内会议:CCML,MLA

1.7.2 人工智能

国际会议:IJCAI,AAAI
国际期刊:AI,JAIR

1.7.3 数据挖掘

国际会议:KDD,ICDM
国际期刊:ACM-TKDD,DMKD

1.7.4 计算机视觉

CVPR(会议),IEEE-TPAMI(期刊)

1.7.5 神经网络

期刊:NC,IEEE-TNNLS

1.7.6 统计学

期刊:AS

1.8 习题

1.8.1 表 1.1 中若只包含编号为 1 和 4 的两个样例，试给出相应的版本空间.

表 1.1 西瓜数据集

编号	色泽	根蒂	敲声	好瓜
1	青绿	蜷缩	浊响	是
2	乌黑	蜷缩	浊响	是
3	青绿	硬挺	清脆	否
4	乌黑	稍蜷	沉闷	否

图 1: 表 1.1 西瓜数据集

解:

表 1: 版本空间表

色泽	根蒂	敲声	逻辑表达式
青绿	瓣缩	浊响	(色泽 = 青绿) ∧ (根蒂 = 瓣缩) ∧ (敲声 = 浊响)
青绿	瓣缩	*	(色泽 = 青绿) ∧ (根蒂 = 瓣缩)
青绿	*	浊响	(色泽 = 青绿) ∧ (敲声 = 浊响)
*	瓣缩	浊响	(根蒂 = 瓣缩) ∧ (敲声 = 浊响)
青绿	*	*	(色泽 = 青绿)

1.8.2 估算共有多少种可能的假设

与使用单个合取式来进行假设表示相比，使用“析合范式”将使得假设空间具有更强的表示能力。例如

好瓜 ⇔ (色泽 = ⋆) ∧ (根蒂 = 蜷缩 ∧ 敲声 = ⋆)

∨ (色泽 = 乌黑 ∧ 根蒂 = ⋆)∧ 敲声 = 沉闷)，

会把“(色泽 = 青绿) (根蒂 = 蜷缩) (敲声 = 清脆)”以及“(色泽 = 乌黑) (根蒂 = 硬挺) (敲声 = 沉闷)”都分类为“好瓜”。若使用最多包含 k 个合取式的析合范式来表达表 1.1 西瓜分类问题的假设空间，试估算共有多少种可能的假设。

解: 色泽包含两种情况 (青绿, 乌黑), 三种选择 (青绿, 乌黑,*);
根蒂 (蜷缩, 稍蜷, 硬挺) 共 4 种选择;
敲声 (浊响/沉闷/清脆) 共 4 种选择;

除了不能存在 (*,*,*) 的组合, 共包含 $3 \times 4 \times 4 - 1 = 47$ 种组合.
题目求 k 个合取式的所有可能的组合之和, 则有

$$\boxed{\sum_{i}^{k} \binom{47}{i}} \tag{3}$$

1.8.3 若数据包含噪声，则假设空间中有可能不存在与所有训练样本都一致的假设。在此情形下，试设计一种归纳偏好用于假设选择。

解: 刚入门, 可能无法正确回答此问题, 但存在的方法应该有权重噪声注入/梯度稳定性惩罚/稀疏性偏好/集成鲁棒性.

1.8.4 试证明“没有免费的午餐定理”仍成立。

本章 1.4 节在论述“没有免费的午餐”定理时，默认使用了“分类错误率”作为性能度量来对分类器进行评估。若换用其他性能度量 ℓ，则式 (1.1) 将改为

$$E_{ote}(\mathcal{L}_a|X, f) = \sum_{h} \sum_{x \in \mathcal{X}-X} P(x)\ell(h(x), f(x))P(h|X, \mathcal{L}_a)$$

试证明“没有免费的午餐定理”仍成立。

证明.

步骤 **1.1.6.** 性能度量虽发生了改变, 目标函数仍然均匀分布, 总误差表达式为:

$$\begin{aligned} E_{ote}(\mathcal{L}_a|X, f) &= \sum_{h} \sum_{x \in \mathcal{X}-X} P(x)\ell(h(x), f(x))P(h|X, \mathcal{L}_a) \\ &= \sum_{x \in \mathcal{X}-X} P(x) \sum_{h} P(h|X, \mathcal{L}_a) \sum_{f} \ell(h(x), f(x)) \end{aligned}$$

步骤 **1.1.7.** 由*1.1*证明过程可知:$\sum_f f(x) = 2^{|\mathcal{X}|-1}$

$$\therefore \sum_{f} \ell(h(x), f(x)) = 2^{|\mathcal{X}|-1} \left[\ell(h(x), 0) + \ell(h(x), 1)\right]. \tag{4}$$

步骤 **1.1.8.**

$$\because P(h(x) = 0|X, \mathcal{L}_a) = P(h(x) = 1|X, \mathcal{L}_a) = \frac{1}{2}. \therefore \sum_{h} P(h|X, \mathcal{L}_a) \left[\ell(h(x), 0) + \ell(h(x), 1)\right] = \frac{1}{2} \left[\ell(0, 0) + \ell \right. \tag{5}$$

此结果与算法 $\mathcal{L}_a$ 无关。

$$\sum_f E_{\text{ote}}(\mathcal{L}_a|X,f) = 2^{|X|-1} \cdot \frac{1}{2} \sum_{x \in X-X} P(x) \left[\ell(0,0) + \ell(0,1) + \ell(1,0) + \ell(1,1) \right]. \qquad (6)$$

□

无论选择何种性能度量 ℓ，只要真实目标函数 f 在所有可能的函数上均匀分布，无免费午餐定理仍然成立。算法的平均性能仅由数据分布和度量 ℓ 的对称性决定，而与算法本身的设计无关。

1.8.5 试述机器学习能在互联网搜索的哪些环节起什么作用。

机器学习贯穿搜索的全流程，从理解用户意图到动态优化结果，其核心价值在于通过数据驱动的方式提升搜索效率、准确性和个性化程度。知识库中提到的超参数优化（如随机搜索）、分布式表示（如协同过滤）等技术均为此提供了方法论支持。