

机器学习核心理论与应用

监督学习 · 无监督学习 · 强化学习 · 特征工程 · 模型评估

从理论到实践，全面掌握机器学习方法

AI/ML 系列教程

机器学习核心理论与应用

2026 年 1 月 6 日

目录

I	第一部分：机器学习基础	3
1	引言	3
2	机器学习基础	3
2.1	监督学习	3
2.1.1	分类问题	4
2.1.2	回归问题	4
2.1.3	监督学习的优势与局限性	4
2.2	无监督学习	5
2.2.1	聚类	5
2.2.2	降维	6
2.2.3	无监督学习的优势与局限性	6
2.3	强化学习	6
2.3.1	强化学习的核心概念	7
2.3.2	典型应用	7
2.3.3	强化学习的优势与局限性	8
II	第二部分：经典算法与特征工程	8
3	经典算法	8

3.1	线性回归	9
3.1.1	最小二乘法	9
3.1.2	正则化	9
3.1.3	应用场景	10
3.1.4	优势与局限性	10
3.2	决策树	10
3.2.1	构建决策树	11
3.2.2	特征选择准则	11
3.2.3	剪枝	12
3.2.4	应用场景	12
3.2.5	优势与局限性	12
3.3	随机森林	13
3.3.1	算法流程	13
3.3.2	随机性的作用	13
3.3.3	应用场景	13
3.3.4	优势与局限性	14
3.4	支持向量机	14
3.4.1	软间隔 SVM	15
3.4.2	核技巧	15
3.4.3	对偶形式	15
3.4.4	应用场景	16
3.4.5	优势与局限性	16
4	特征工程	16
4.1	特征选择	16
4.1.1	过滤方法 (Filter Methods)	17
4.1.2	包装方法 (Wrapper Methods)	17
4.1.3	嵌入方法 (Embedded Methods)	17
4.2	特征变换	17

4.2.1	标准化和归一化	17
4.2.2	多项式特征	18
4.2.3	对数变换	18
4.3	特征编码	18
4.3.1	独热编码 (One-Hot Encoding)	18
4.3.2	标签编码 (Label Encoding)	19
4.3.3	目标编码 (Target Encoding)	19
III	第三部分：模型评估与高级方法	19
5	模型评估与验证	19
5.1	评估指标	20
5.1.1	分类问题指标	20
5.1.2	回归问题指标	20
5.2	交叉验证	21
5.2.1	K 折交叉验证	21
5.2.2	留一法交叉验证 (LOOCV)	21
5.3	过拟合与欠拟合	21
5.3.1	识别过拟合和欠拟合	22
5.3.2	解决方法	22
5.4	偏差-方差权衡	23
5.4.1	偏差-方差权衡	23
6	集成学习方法	23
6.1	Bagging	24
6.1.1	随机森林	24
6.1.2	优势与局限性	24
6.2	Boosting	24
6.2.1	AdaBoost	25
6.2.2	梯度提升	25

6.2.3	XGBoost 和 LightGBM	25
6.2.4	优势与局限性	26
6.3	Stacking	26
6.3.1	算法流程	26
6.3.2	优势与局限性	27
7	在线学习与增量学习	27
7.1	在线学习	27
7.1.1	在线梯度下降	28
7.1.2	应用场景	28
7.1.3	优势与局限性	28
7.2	增量学习	29
7.2.1	灾难性遗忘	29
7.2.2	解决方法	29
7.2.3	应用场景	29
8	总结	30

Part I

第一部分：机器学习基础

1 引言

机器学习 (Machine Learning, ML) 是人工智能的核心分支，通过从数据中自动学习模式和规律，使计算机系统能够完成特定任务而无需显式编程。机器学习在图像识别、自然语言处理、推荐系统、医疗诊断、金融风控等领域取得了显著成功。

机器学习的独特价值：

- **处理高维特征：**能够处理包含数千甚至数万个特征的数据，自动发现重要特征
- **捕捉非线性关系：**通过非线性模型（如神经网络、核方法）捕捉数据中的复杂模式
- **自适应学习：**能够从新数据中持续学习，适应数据分布的变化
- **端到端学习：**直接从原始数据学习到最终输出，减少人工特征工程的需求

本文档系统性地介绍机器学习的核心理论、经典算法和实际应用，涵盖监督学习、无监督学习、强化学习等主要范式，以及特征工程、模型评估、集成学习等重要技术。

2 机器学习基础

机器学习根据学习方式可以分为三大类：监督学习、无监督学习和强化学习。每种范式适用于不同类型的问题和场景。

2.1 监督学习

定义 2.1 (监督学习). 监督学习 (Supervised Learning) 是从带标签的训练数据中学习一个映射函数 $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ ，使得对于新的输入 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ ，能够预测其标签 $y \in \mathcal{Y}$ 。

给定训练数据集 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$ ，其中 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 是特征向量， y_i 是对应的标签，目标是学习函数 f 使得 $f(\mathbf{x}_i) \approx y_i$ 。

通俗解释：监督学习就像有老师指导的学习。老师提供大量“题目-答案”对（训练数据），学生（模型）通过学习这些例子，掌握解题方法，然后能够解答新的题目。

2.1.1 分类问题

分类问题的目标是预测离散类别的标签。根据类别数量，可以分为：

- **二分类**：只有两个类别，如垃圾邮件分类（垃圾/正常）、疾病诊断（患病/健康）
- **多分类**：有多个类别，如图像分类（猫/狗/鸟等）、手写数字识别（0-9）

典型应用：

例 2.1 (垃圾邮件分类). **问题：**自动识别邮件是否为垃圾邮件。

数据：

- **特征：**邮件内容中的词频、发件人信息、邮件标题等
- **标签：**垃圾邮件（1）或正常邮件（0）

方法：使用朴素贝叶斯、逻辑回归或支持向量机等分类算法。

实际应用：*Gmail* 使用机器学习模型过滤垃圾邮件，准确率超过 99%。

2.1.2 回归问题

回归问题的目标是预测连续的数值。

典型应用：

例 2.2 (房价预测). **问题：**根据房屋特征预测房价。

数据：

- **特征：**面积、卧室数、位置、建造年份等
- **标签：**房价（连续值）

方法：使用线性回归、决策树回归或神经网络等算法。

实际应用：*Zillow* 的 *Zestimate* 使用机器学习模型预测房价，帮助用户了解房产价值。

2.1.3 监督学习的优势与局限性

优势：

- 有明确的优化目标（最小化预测误差）

- 可以使用大量标注数据进行训练
- 模型性能可以通过测试集准确评估
- 理论基础相对完善

局限性：

- 需要大量标注数据，标注成本高
- 对标注质量要求高，错误标注会影响模型性能
- 难以处理标注数据稀缺的场景
- 模型可能过拟合训练数据

2.2 无监督学习

定义 2.2 (无监督学习). 无监督学习 (*Unsupervised Learning*) 是从无标签的数据中学习数据的内在结构和模式，不需要人工标注。

给定数据集 $\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ ，其中只有特征向量，没有标签，目标是发现数据中的隐藏模式、结构或分布。

通俗解释：无监督学习就像没有老师指导的自学。学生只能看到大量数据，需要自己发现其中的规律和模式，比如哪些数据相似、数据如何分组等。

2.2.1 聚类

聚类是将相似的数据点分组的过程。

典型应用：

例 2.3 (客户细分). **问题：**根据客户的购买行为将其分为不同的群体。

数据：客户的购买历史、浏览记录、消费金额等特征（无标签）。

方法：使用 *K-means*、层次聚类等算法将客户分为若干群体。

实际应用：电商平台使用聚类分析进行客户细分，为不同群体提供个性化推荐和营销策略。

2.2.2 降维

降维是将高维数据映射到低维空间，保留主要信息。

典型应用：

例 2.4 (数据可视化). **问题：** 将高维数据（如 1000 维）可视化到 2D 或 3D 空间。

方法： 使用 PCA（主成分分析）、*t-SNE*、UMAP 等降维算法。

实际应用： 在生物信息学中，使用 *t-SNE* 将基因表达数据降维到 2D，可视化不同细胞类型的分布。

2.2.3 无监督学习的优势与局限性

优势：

- 不需要标注数据，数据获取成本低
- 可以发现人类未预见的模式和结构
- 适用于探索性数据分析
- 可以作为监督学习的预处理步骤

局限性：

- 没有明确的优化目标，评估困难
- 结果可能难以解释和验证
- 对参数选择敏感（如聚类数量）
- 可能发现无意义的模式

2.3 强化学习

定义 2.3 (强化学习). 强化学习 (*Reinforcement Learning, RL*) 是智能体 (*Agent*) 通过与环境的交互来学习最优策略，通过试错和奖励信号来指导学习过程。

强化学习问题可以建模为马尔可夫决策过程 (*MDP*): $(\mathcal{S}, \mathcal{A}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma)$ ，其中：

- \mathcal{S} : 状态空间
- \mathcal{A} : 动作空间

- \mathcal{P} : 状态转移概率
- \mathcal{R} : 奖励函数
- γ : 折扣因子

智能体的目标是学习策略 $\pi: \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{A}$, 最大化累积奖励:

$$R = \sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t r_t$$

通俗解释: 强化学习就像训练宠物。宠物（智能体）做出动作（如坐下），主人（环境）给出奖励（如给食物）或惩罚（如不给食物）。通过反复尝试，宠物学会在什么情况下做什么动作能获得最多奖励。

2.3.1 强化学习的核心概念

- **状态 (State):** 环境在某个时刻的完整描述
- **动作 (Action):** 智能体可以执行的操作
- **奖励 (Reward):** 环境对智能体动作的反馈信号
- **策略 (Policy):** 从状态到动作的映射
- **价值函数 (Value Function):** 评估状态或动作的长期价值

2.3.2 典型应用

例 2.5 (游戏 AI). 问题: 训练 AI 在游戏中达到人类或超人类水平。

方法:

- *Deep Q-Network (DQN):* 使用深度神经网络近似 Q 函数
- *Policy Gradient:* 直接优化策略函数
- *Actor-Critic:* 结合价值函数和策略梯度

实际应用:

- **AlphaGo:** DeepMind 开发的围棋 AI, 2016 年击败世界冠军李世石
- **AlphaStar:** 在《星际争霸 II》中达到大师级水平

- *OpenAI Five*: 在 *Dota 2* 中击败职业战队

例 2.6 (机器人控制). 问题: 训练机器人完成复杂任务, 如抓取物体、行走等。

方法: 使用强化学习让机器人在仿真或真实环境中通过试错学习。

实际应用: *Boston Dynamics* 的机器人使用强化学习进行运动控制, 实现复杂的平衡和移动能力。

2.3.3 强化学习的优势与局限性

优势:

- 适用于序列决策问题
- 可以通过试错学习, 不需要大量标注数据
- 能够学习长期策略
- 适用于动态环境

局限性:

- 训练过程可能很慢, 需要大量交互
- 奖励函数设计困难
- 探索与利用的平衡问题
- 安全性问题 (在关键应用中)

Part II

第二部分: 经典算法与特征工程

3 经典算法

本节介绍机器学习中的经典算法, 包括线性回归、决策树、随机森林和支持向量机。这些算法虽然相对简单, 但在许多实际问题中仍然非常有效。

3.1 线性回归

线性回归是监督学习中最基础的算法之一，用于解决回归问题。

定义 3.1 (线性回归). 线性回归假设目标变量 y 与特征向量 \mathbf{x} 之间存在线性关系：

$$y = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b + \epsilon$$

其中 $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$ 是权重向量， $b \in \mathbb{R}$ 是偏置项， ϵ 是误差项（通常假设 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ ）。

给定训练数据 $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$ ，线性回归的目标是找到参数 \mathbf{w} 和 b ，使得预测误差最小。

通俗解释：线性回归就像用一条直线去拟合数据点。例如，用一条直线拟合“房屋面积-房价”的关系，直线的斜率和截距就是学到的参数。

3.1.1 最小二乘法

最常用的方法是最小二乘法（Least Squares），最小化平方误差：

$$L(\mathbf{w}, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b))^2$$

通过求导并令导数为零，可以得到闭式解：

$$\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

其中 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ 是特征矩阵， $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ 是标签向量。

3.1.2 正则化

为了防止过拟合，可以加入正则化项：

- **Ridge 回归** (L_2 正则化)：

$$L_{\text{Ridge}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2$$

其中 $\lambda > 0$ 是正则化系数。Ridge 回归倾向于产生较小的权重。

- **Lasso 回归** (L_1 正则化)：

$$L_{\text{Lasso}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_1$$

Lasso 回归可以产生稀疏解（许多权重为 0），实现特征选择。

3.1.3 应用场景

例 3.1 (房价预测). 使用线性回归预测房价, 特征包括面积、卧室数、位置等。*Ridge* 回归可以防止过拟合, *Lasso* 回归可以自动选择重要特征。

例 3.2 (股票价格预测). 使用历史价格、交易量等特征预测未来股价。虽然股价受多种因素影响, 线性回归可以作为基准模型。

3.1.4 优势与局限性

优势:

- 简单易懂, 计算效率高
- 有闭式解, 训练快速
- 可解释性强 (权重表示特征重要性)
- 适合作为基准模型

局限性:

- 只能捕捉线性关系
- 对异常值敏感
- 假设特征之间相互独立
- 需要特征工程 (如多项式特征) 来捕捉非线性

3.2 决策树

决策树是一种基于树结构的分类和回归算法, 通过一系列规则进行决策。

定义 3.2 (决策树). 决策树 (*Decision Tree*) 是一个树形结构, 其中:

- 内部节点: 表示特征测试
- 分支: 表示测试结果
- 叶节点: 表示类别标签或数值

从根节点到叶节点的路径对应一条决策规则。

通俗解释: 决策树就像医生诊断疾病的流程。先问“是否发烧?”, 如果“是”再问“是否咳嗽?”, 根据一系列问题的答案, 最终得出诊断结果。

3.2.1 构建决策树

决策树的构建是一个递归过程：

Algorithm 1 构建决策树

Require: 训练数据集 \mathcal{D} ，特征集 \mathcal{F}

Ensure: 决策树 T

```

if  $\mathcal{D}$  中所有样本属于同一类别 then
    返回叶节点，标记为该类别
else if  $\mathcal{F}$  为空或  $\mathcal{D}$  为空 then
    返回叶节点，标记为  $\mathcal{D}$  中多数类
else
    选择最优特征  $f^* = \arg \max_{f \in \mathcal{F}} \text{IG}(\mathcal{D}, f)$ 
    为  $f^*$  的每个可能值创建分支
    for 每个分支 do
         $D_v = \mathcal{D}$  中  $f^* = v$  的样本子集
        if  $D_v$  为空 then
            添加叶节点，标记为  $\mathcal{D}$  中多数类
        else
            递归构建子树：BuildTree( $D_v, \mathcal{F} \setminus \{f^*\}$ )
        end if
    end for
end if
  
```

3.2.2 特征选择准则

常用的特征选择准则包括：

- 信息增益 (Information Gain)：

$$\text{IG}(\mathcal{D}, f) = H(\mathcal{D}) - \sum_v \frac{|D_v|}{|\mathcal{D}|} H(D_v)$$

其中 $H(\mathcal{D})$ 是数据集的熵。

- 基尼不纯度 (Gini Impurity)：

$$G(\mathcal{D}) = 1 - \sum_k p_k^2$$

其中 p_k 是类别 k 在数据集中的比例。

- 基尼增益：

$$\text{GiniGain}(\mathcal{D}, f) = G(\mathcal{D}) - \sum_v \frac{|\mathcal{D}_v|}{|\mathcal{D}|} G(\mathcal{D}_v)$$

3.2.3 剪枝

为了防止过拟合，需要对决策树进行剪枝：

- 预剪枝：在构建过程中提前停止（如限制树深度、最小样本数）
- 后剪枝：构建完整树后，自底向上删除节点，用叶节点替代

3.2.4 应用场景

例 3.3 (医疗诊断). 使用决策树根据症状（发烧、咳嗽、头痛等）诊断疾病。决策树的可解释性使得医生可以理解诊断依据。

例 3.4 (信用评估). 银行使用决策树评估贷款申请人的信用风险，根据收入、工作年限、信用历史等特征做出决策。

3.2.5 优势与局限性

优势：

- 可解释性强，决策过程清晰
- 可以处理数值和类别特征
- 不需要特征缩放
- 可以捕捉非线性关系

局限性：

- 容易过拟合
- 对数据的小变化敏感（不稳定）
- 倾向于选择具有更多取值的特征
- 难以处理特征之间的交互

3.3 随机森林

随机森林 (Random Forest) 是决策树的集成方法, 通过组合多个决策树来提高性能。

定义 3.3 (随机森林). 随机森林由 B 棵决策树组成, 每棵树在训练时:

1. 使用自助采样 (*Bootstrap Sampling*) 从训练集中采样
2. 在每个节点分裂时, 随机选择 k 个特征 (通常 $k = \sqrt{d}$) 进行考虑

预测时, 对于分类问题使用投票, 对于回归问题使用平均。

通俗解释: 随机森林就像一群专家投票做决策。每个专家 (决策树) 根据自己的经验 (不同的训练数据) 给出意见, 最终综合所有专家的意见做出决策。这样比单个专家更可靠。

3.3.1 算法流程

Algorithm 2 随机森林训练

Require: 训练数据集 \mathcal{D} , 树的数量 B , 特征采样数 k

Ensure: 随机森林 $\{T_1, T_2, \dots, T_B\}$

for $b = 1$ to B **do**

 使用自助采样从 \mathcal{D} 中采样得到 \mathcal{D}_b

 使用 \mathcal{D}_b 训练决策树 T_b , 在每个节点随机选择 k 个特征

end for

3.3.2 随机性的作用

随机森林通过两种随机性提高性能:

- **样本随机性:** 每棵树使用不同的训练样本 (自助采样)
- **特征随机性:** 每棵树在每个节点考虑不同的特征子集

这种随机性使得各棵树之间具有多样性, 减少过拟合, 提高泛化能力。

3.3.3 应用场景

例 3.5 (图像分类). 在 *CIFAR-10* 数据集上, 随机森林可以作为基准模型, 虽然不如深度学习模型, 但训练速度快, 可解释性强。

例 3.6 (特征重要性分析). 随机森林可以计算特征重要性, 帮助理解哪些特征对预测最重要。这在特征工程和模型解释中很有价值。

3.3.4 优势与局限性

优势：

- 性能通常优于单棵决策树
- 对过拟合有较强的抵抗力
- 可以处理高维特征
- 可以计算特征重要性
- 训练可以并行化

局限性：

- 模型可解释性不如单棵决策树
- 需要更多内存和计算资源
- 对于某些问题，可能不如梯度提升方法（如 XGBoost）

3.4 支持向量机

支持向量机（Support Vector Machine, SVM）是一种强大的分类算法，基于最大间隔原理。

定义 3.4 (支持向量机). 对于线性可分的二分类问题，SVM 寻找一个超平面 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$ ，使得两类样本之间的间隔（margin）最大。

间隔定义为两类样本到超平面的最小距离：

$$\text{margin} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

SVM 的优化目标是：

$$\min_{\mathbf{w}, b} \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad s.t. \quad y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \geq 1, \forall i$$

通俗解释：SVM 就像在两个群体之间画一条“最宽的路”。这条路要尽可能宽，同时要确保两边的群体都在路的正确一侧。支持向量就是那些“站在路边”的样本点。

3.4.1 软间隔 SVM

对于线性不可分的情况，引入松弛变量 ξ_i ，允许一些样本分类错误：

$$\min_{\mathbf{w}, b, \xi} \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$

约束条件：

$$y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i, \quad \xi_i \geq 0$$

其中 $C > 0$ 是惩罚参数，控制对误分类的惩罚程度。

3.4.2 核技巧

对于非线性问题，使用核函数将数据映射到高维空间，在高维空间中线性可分：

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$$

常用的核函数包括：

- **多项式核**： $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + 1)^d$
- **径向基函数（RBF）核**： $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp(-\gamma \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2)$
- **Sigmoid 核**： $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(\alpha \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + c)$

3.4.3 对偶形式

SVM 的对偶形式为：

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

约束条件：

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \quad 0 \leq \alpha_i \leq C$$

对偶形式的优势：

- 只需要计算核函数，不需要显式映射到高维空间
- 支持向量 ($\alpha_i > 0$) 的数量通常远小于样本数
- 更容易扩展到大规模问题

3.4.4 应用场景

例 3.7 (文本分类). *SVM* 在文本分类任务中表现优异, 特别是在小样本情况下。使用 *TF-IDF* 特征和 *RBF* 核, 可以在新闻分类、情感分析等任务中取得良好效果。

例 3.8 (图像分类). 在图像分类任务中, *SVM* 可以作为特征分类器。例如, 使用 *CNN* 提取特征, 然后用 *SVM* 进行分类, 这在某些情况下比端到端的 *CNN* 更有效。

3.4.5 优势与局限性

优势:

- 在中小规模数据集上表现优异
- 通过核函数可以处理非线性问题
- 理论基础完善 (基于统计学习理论)
- 对过拟合有较好的控制
- 支持向量提供了模型的稀疏表示

局限性:

- 对大规模数据集计算成本高
- 对特征缩放敏感
- 核函数和参数选择需要经验
- 可解释性不如决策树
- 概率输出需要额外处理 (Platt scaling)

4 特征工程

特征工程是机器学习中至关重要的一环, 好的特征可以显著提升模型性能。特征工程包括特征选择、特征变换和特征编码等。

4.1 特征选择

特征选择是从原始特征中选择最有用的特征子集, 减少维度, 提高模型性能和可解释性。

4.1.1 过滤方法 (Filter Methods)

过滤方法基于特征的统计特性进行选择，独立于具体的学习算法：

- **方差选择**：移除方差很小的特征（几乎不变的特征）
- **相关系数**：选择与目标变量相关性高的特征
- **互信息**：选择与目标变量互信息大的特征
- **卡方检验**：用于分类问题，检验特征与标签的独立性

4.1.2 包装方法 (Wrapper Methods)

包装方法使用学习算法来评估特征子集：

- **前向选择**：从空集开始，逐步添加最有用的特征
- **后向消除**：从完整特征集开始，逐步移除最无用的特征
- **递归特征消除 (RFE)**：递归地移除最不重要的特征

4.1.3 嵌入方法 (Embedded Methods)

嵌入方法在模型训练过程中进行特征选择：

- **Lasso 回归**： L_1 正则化自动产生稀疏解
- **决策树**：通过特征重要性进行选择
- **随机森林**：通过特征重要性排序

4.2 特征变换

特征变换是对特征进行数学变换，改变特征的分布或关系。

4.2.1 标准化和归一化

- **标准化 (Z-score)**：

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

将特征转换为均值为 0、标准差为 1 的分布。

- 最小-最大归一化：

$$x' = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

将特征缩放到 $[0, 1]$ 区间。

- **Robust 缩放**：使用中位数和四分位距，对异常值更鲁棒。

为什么需要特征缩放：

- 许多算法（如 SVM、K-means、神经网络）对特征尺度敏感
- 梯度下降算法在特征尺度不一致时收敛慢
- 距离-based 算法（如 KNN）受特征尺度影响大

4.2.2 多项式特征

通过创建特征的多项式组合来捕捉非线性关系：

$$(x_1, x_2) \rightarrow (x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2)$$

应用场景：线性回归无法捕捉非线性关系时，可以使用多项式特征。

4.2.3 对数变换

对偏态分布进行对数变换，使其更接近正态分布：

$$x' = \log(x + 1)$$

应用场景：处理价格、收入等右偏分布的数据。

4.3 特征编码

特征编码是将类别特征转换为数值特征的过程。

4.3.1 独热编码 (One-Hot Encoding)

将类别特征转换为二进制向量：

例 4.1. 颜色特征：["红", "绿", "蓝"] \rightarrow

- 红: [1, 0, 0]
- 绿: [0, 1, 0]
- 蓝: [0, 0, 1]

优势: 不引入类别间的顺序关系。

局限性: 类别数量多时会产生高维稀疏特征。

4.3.2 标签编码 (Label Encoding)

将类别映射为整数:

例 4.2 ("低", "中", "高"). $\rightarrow [0, 1, 2]$

注意: 只适用于有序类别, 否则会引入虚假的顺序关系。

4.3.3 目标编码 (Target Encoding)

使用目标变量的统计量对类别进行编码:

$$x' = \frac{\sum_{i: x_i = x} y_i}{|\{i : x_i = x\}|}$$

即用该类别的平均目标值作为编码。

优势: 可以捕捉类别与目标的关系。

注意: 需要防止过拟合 (如使用交叉验证)。

Part III

第三部分: 模型评估与高级方法

5 模型评估与验证

模型评估是机器学习流程中的关键步骤, 用于衡量模型性能、选择最佳模型和防止过拟合。

5.1 评估指标

5.1.1 分类问题指标

- 准确率 (Accuracy):

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{正确预测数}}{\text{总样本数}}$$

- 精确率 (Precision):

$$\text{Precision} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}}$$

预测为正例中真正为正例的比例。

- 召回率 (Recall):

$$\text{Recall} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}}$$

真正例中被正确预测的比例。

- F1 分数:

$$\text{F1} = \frac{2 \times \text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}$$

精确率和召回率的调和平均。

- ROC 曲线和 AUC: ROC 曲线以假正例率为横轴，真正例率为纵轴。AUC (曲线下面积) 衡量分类器的整体性能。

5.1.2 回归问题指标

- 均方误差 (MSE):

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- 均方根误差 (RMSE):

$$\text{RMSE} = \sqrt{\text{MSE}}$$

- 平均绝对误差 (MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|$$

- 决定系数 (R^2):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

衡量模型解释的方差比例。

5.2 交叉验证

交叉验证是评估模型泛化能力的重要方法。

5.2.1 K 折交叉验证

将数据集分为 K 折，每次使用 $K - 1$ 折训练，剩余 1 折测试，重复 K 次：

Algorithm 3 K 折交叉验证

Require: 数据集 \mathcal{D} ，折数 K ，学习算法 \mathcal{A}

Ensure: 平均性能指标

将 \mathcal{D} 随机分为 K 折： $\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_K$

for $k = 1$ to K **do**

 训练集： $\mathcal{D}_{\text{train}} = \mathcal{D} \setminus \mathcal{D}_k$

 测试集： $\mathcal{D}_{\text{test}} = \mathcal{D}_k$

 使用 $\mathcal{D}_{\text{train}}$ 训练模型 $M_k = \mathcal{A}(\mathcal{D}_{\text{train}})$

 在 $\mathcal{D}_{\text{test}}$ 上评估性能 s_k

end for

return $\bar{s} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K s_k$

优势:

- 充分利用数据
- 提供性能估计的方差
- 减少对数据划分的依赖

常见选择: $K = 5$ 或 $K = 10$ 。

5.2.2 留一法交叉验证 (LOOCV)

$K = n$ 的特殊情况，每次留一个样本作为测试集。计算成本高，但无偏估计。

5.3 过拟合与欠拟合

定义 5.1 (过拟合). 过拟合 (*Overfitting*) 是指模型在训练集上表现很好，但在测试集上表现较差的现象。模型过度学习了训练数据的噪声和细节，导致泛化能力差。

定义 5.2 (欠拟合). 欠拟合 (*Underfitting*) 是指模型在训练集和测试集上都表现较差的现象。模型过于简单，无法捕捉数据中的基本模式。

通俗解释：

- **过拟合：**就像学生死记硬背了所有练习题，但遇到新题目就不会了
- **欠拟合：**就像学生只学了基础知识，连练习题都做不好

5.3.1 识别过拟合和欠拟合

- **过拟合的迹象：**
 - 训练误差很小，但验证误差很大
 - 模型复杂度高（如深度很深的决策树）
 - 训练集和验证集性能差距大
- **欠拟合的迹象：**
 - 训练误差和验证误差都很大
 - 模型复杂度低（如线性模型处理非线性问题）
 - 模型无法捕捉数据的基本模式

5.3.2 解决方法**解决过拟合：**

- 增加训练数据
- 减少模型复杂度
- 正则化 (L_1 、 L_2)
- Dropout（神经网络）
- 早停（Early Stopping）

解决欠拟合：

- 增加模型复杂度
- 增加特征
- 减少正则化
- 增加训练时间

5.4 偏差-方差权衡

定义 5.3 (偏差和方差). • **偏差 (*Bias*)**: 模型的期望预测与真实值的差异, 衡量模型的拟合能力

- **方差 (*Variance*)**: 模型在不同训练集上预测的差异, 衡量模型的稳定性

总误差可以分解为:

$$Error = Bias^2 + Variance + Irreducible Error$$

通俗解释:

- **高偏差**: 模型太简单, 无法捕捉数据模式 (欠拟合)
- **高方差**: 模型太复杂, 对训练数据的小变化敏感 (过拟合)

5.4.1 偏差-方差权衡

- **简单模型** (如线性回归):
 - 高偏差, 低方差
 - 可能欠拟合
- **复杂模型** (如深度神经网络):
 - 低偏差, 高方差
 - 可能过拟合
- **理想模型**:
 - 低偏差, 低方差
 - 需要合适的模型复杂度和正则化

6 集成学习方法

集成学习通过组合多个基学习器来提高预测性能, 是机器学习中的重要技术。

6.1 Bagging

Bagging (Bootstrap Aggregating) 通过训练多个模型并平均预测结果来减少方差。

定义 6.1 (Bagging). *Bagging* 算法:

1. 使用自助采样从训练集中生成 B 个不同的训练集
2. 在每个训练集上训练一个基学习器
3. 对于分类问题使用投票, 对于回归问题使用平均

通俗解释: Bagging 就像多个专家独立给出意见, 然后综合所有意见做决策。每个专家看到的数据略有不同, 但综合起来更可靠。

6.1.1 随机森林

随机森林是 Bagging 的特例, 基学习器是决策树, 并在特征选择时引入随机性。

6.1.2 优势与局限性

优势:

- 减少方差, 提高泛化能力
- 可以并行训练
- 对过拟合有抵抗力

局限性:

- 不能减少偏差
- 需要足够的计算资源

6.2 Boosting

Boosting 通过顺序训练多个弱学习器, 每个学习器关注前一个学习器的错误。

定义 6.2 (Boosting). *Boosting* 算法:

1. 初始化样本权重

2. 对于 $t = 1, \dots, T$:

- 使用当前权重训练弱学习器 h_t
- 计算 h_t 的误差
- 更新样本权重（增加错误样本的权重）
- 计算 h_t 的权重 α_t

3. 最终预测: $H(\mathbf{x}) = \sum_{t=1}^T \alpha_t h_t(\mathbf{x})$

通俗解释: Boosting 就像学生做错题后, 老师重点讲解错题, 学生反复练习直到掌握。每个弱学习器专注于前一个学习器的薄弱环节。

6.2.1 AdaBoost

AdaBoost (Adaptive Boosting) 是经典的 Boosting 算法:

Algorithm 4 AdaBoost

Require: 训练集 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$, 弱学习器 \mathcal{A} , 迭代次数 T

Ensure: 集成模型 H

初始化样本权重: $w_i^{(1)} = 1/n, \forall i$

for $t = 1$ to T **do**

使用权重 $\mathbf{w}^{(t)}$ 训练弱学习器: $h_t = \mathcal{A}(\mathcal{D}, \mathbf{w}^{(t)})$

计算加权误差: $\epsilon_t = \sum_{i: h_t(\mathbf{x}_i) \neq y_i} w_i^{(t)}$

计算学习器权重: $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t} \right)$

更新样本权重: $w_i^{(t+1)} = \frac{w_i^{(t)}}{Z_t} \exp(-\alpha_t y_i h_t(\mathbf{x}_i))$

end for

return $H(\mathbf{x}) = \text{sign} \left(\sum_{t=1}^T \alpha_t h_t(\mathbf{x}) \right)$

6.2.2 梯度提升

梯度提升 (Gradient Boosting) 将 Boosting 视为优化问题, 使用梯度下降来最小化损失函数。

核心思想: 每个新学习器拟合前一个模型的负梯度 (残差)。

6.2.3 XGBoost 和 LightGBM

- **XGBoost:** 优化的梯度提升实现, 支持并行计算、正则化、处理缺失值

- **LightGBM**: 更快的梯度提升实现, 使用基于直方图的算法和 Leaf-wise 树生长策略

应用场景: 在 Kaggle 等数据科学竞赛中, XGBoost 和 LightGBM 经常是获胜方案的核心组件。

6.2.4 优势与局限性

优势:

- 通常比单个模型性能更好
- 可以减少偏差和方差
- 可以处理各种类型的数据

局限性:

- 训练时间较长 (顺序训练)
- 对异常值敏感
- 可解释性较差

6.3 Stacking

Stacking (堆叠) 使用元学习器来组合多个基学习器的预测。

定义 6.3 (Stacking). *Stacking* 算法:

1. 使用交叉验证训练多个基学习器
2. 使用基学习器的预测作为特征, 训练元学习器
3. 最终预测使用元学习器

通俗解释: Stacking 就像有一个”超级裁判”, 它不直接看原始数据, 而是看各个”专家”(基学习器)的意见, 然后综合这些意见做出最终判断。

6.3.1 算法流程

Algorithm 5 Stacking**Require:** 训练集 \mathcal{D} , 基学习器 $\{\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_M\}$, 元学习器 $\mathcal{A}_{\text{meta}}$ **Ensure:** 集成模型

使用 K 折交叉验证训练基学习器

for $m = 1$ to M **do** **for** 每折 k **do** 在折 k 的训练集上训练 $h_{m,k}$ 在折 k 的验证集上生成预测 $p_{m,k}$ **end for** 基学习器 m 的完整预测: $\mathbf{p}_m = [p_{m,1}, \dots, p_{m,K}]$ **end for**使用 $\{(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_M), \mathbf{y}\}$ 训练元学习器**return** 集成模型 (基学习器 + 元学习器)**6.3.2 优势与局限性****优势:**

- 可以捕捉基学习器之间的互补性
- 通常性能优于单个模型
- 灵活性高, 可以使用不同类型的基学习器

局限性:

- 计算成本高
- 需要仔细设计, 避免过拟合
- 可解释性差

7 在线学习与增量学习

在线学习和增量学习使模型能够从新数据中持续学习, 适应数据分布的变化。

7.1 在线学习

定义 7.1 (在线学习). 在线学习 (*Online Learning*) 是一种学习范式, 模型逐个处理样本, 每处理一个样本就更新模型参数, 不需要存储所有历史数据。

给定数据流 $\{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots\}$, 在线学习算法在时刻 t :

1. 接收样本 (\mathbf{x}_t, y_t)
2. 使用当前模型 f_t 进行预测
3. 根据预测误差更新模型: $f_{t+1} = \text{Update}(f_t, (\mathbf{x}_t, y_t))$

通俗解释: 在线学习就像实时学习, 每来一个新例子就立即学习, 不需要等所有数据都收集完。就像学生每做一道题就立即知道答案并学习, 而不是等所有题目做完再统一学习。

7.1.1 在线梯度下降

在线梯度下降是随机梯度下降的在线版本:

$$\mathbf{w}_{t+1} = \mathbf{w}_t - \eta_t \nabla_{\mathbf{w}} \ell(f(\mathbf{x}_t; \mathbf{w}_t), y_t)$$

其中 η_t 是学习率, 通常随时间衰减。

7.1.2 应用场景

例 7.1 (推荐系统). 在线推荐系统需要实时响应用户行为, 根据用户的实时反馈更新推荐模型。例如, 用户点击了某个商品, 系统立即更新该用户的兴趣模型。

例 7.2 (广告投放). 在线广告系统需要根据实时点击率调整广告投放策略, 快速适应市场变化。

7.1.3 优势与局限性

优势:

- 内存效率高 (不需要存储所有数据)
- 可以快速适应数据分布变化
- 适合大规模数据流
- 可以实时更新模型

局限性:

- 对异常值敏感

- 可能遗忘历史信息
- 需要仔细设计学习率
- 难以评估模型性能

7.2 增量学习

定义 7.2 (增量学习). 增量学习 (*Incremental Learning*) 是模型在已有知识的基础上, 从新数据中学习新知识, 同时保留或整合旧知识的过程。

与在线学习的区别: 增量学习通常处理批量新数据, 并且需要处理”灾难性遗忘”问题。

通俗解释: 增量学习就像人类学习新知识。学习新内容时, 不会完全忘记旧知识, 而是将新旧知识整合在一起。但机器学习模型容易”遗忘”旧知识, 需要特殊技术来解决。

7.2.1 灾难性遗忘

灾难性遗忘 (Catastrophic Forgetting) 是指模型在学习新任务时, 会大幅降低在旧任务上的性能。

原因: 神经网络参数在训练新任务时被更新, 可能破坏对旧任务的记忆。

7.2.2 解决方法

- **弹性权重巩固 (EWC):** 在更新参数时, 对重要参数施加惩罚, 防止大幅改变
- **渐进式神经网络:** 为每个任务添加新的网络分支, 保留旧网络不变
- **回放机制:** 存储部分旧数据, 与新数据一起训练
- **知识蒸馏:** 使用旧模型指导新模型学习

7.2.3 应用场景

例 7.3 (持续学习系统). 智能助手需要不断学习新技能, 但不能忘记已有技能。例如, 学习新语言时不能忘记已掌握的语言。

例 7.4 (个性化推荐). 推荐系统需要适应用户兴趣的变化, 同时保留对用户长期偏好的理解。

8 总结

本文档系统性地介绍了机器学习的核心理论与应用，包括：

- **机器学习基础**：监督学习、无监督学习和强化学习三大范式，每种范式适用于不同类型的问题
- **经典算法**：线性回归、决策树、随机森林和支持向量机等基础算法，虽然简单但在许多场景中仍然有效
- **特征工程**：特征选择、变换和编码等技术，是提升模型性能的关键
- **模型评估**：交叉验证、过拟合/欠拟合识别、偏差-方差权衡等评估技术
- **集成学习**：Bagging、Boosting 和 Stacking 等方法，通过组合多个模型提高性能
- **在线与增量学习**：使模型能够从新数据中持续学习，适应动态环境

机器学习的核心价值：

- 能够从数据中自动学习模式，减少人工规则设计
- 可以处理高维、复杂的现实世界数据
- 通过持续学习适应环境变化
- 在多个领域取得了突破性进展

未来发展方向：

- 自动化机器学习 (AutoML)：减少人工调参和特征工程
- 可解释性：提高模型的可解释性和可信度
- 持续学习：更好地处理数据分布变化和任务演化
- 小样本学习：在数据稀缺场景下仍能有效学习
- 联邦学习：在保护隐私的前提下进行分布式学习

机器学习作为人工智能的核心技术，将继续在各个领域发挥重要作用，推动技术进步和社会发展。