

# 前 言

这是一本面向中文读者的机器学习教科书, 为了使尽可能多的读者通过本书对机器学习有所了解, 作者试图尽可能少地使用数学知识. 然而, 少量的概率、统计、代数、优化、逻辑知识似乎不可避免. 因此, 本书更适合大学三年级以上的理工科本科生和研究生, 以及具有类似背景的对机器学习感兴趣的人士. 为方便读者, 本书附录给出了一些相关数学基础知识简介.

全书共 16 章, 大体上可分为 3 个部分: 第 1 部分包括第 1~3 章, 介绍机器学习基础知识; 第 2 部分包括第 4~10 章, 介绍一些经典而常用的机器学习方法; 第 3 部分包括第 11~16 章, 介绍一些进阶知识. 前 3 章之外的后续各章均相对独立, 读者可根据自己的兴趣和时间情况选择使用. 根据课时情况, 一个学期的本科生课程可考虑讲授前 9 章或前 10 章; 研究生课程则不妨使用全书.

书中除第 1 章外, 每章都给出了十道习题. 有的习题是帮助读者巩固本章学习, 有的是为了引导读者扩展相关知识. 一学期的一般课程可使用这些习题, 再辅以两到三个针对具体数据集的大作业. 带星号的习题则有相当难度, 有些并无现成答案, 谨供富有进取心的读者启发思考.

本书在内容上尽可能涵盖机器学习基础知识的各方面, 但作为机器学习入门读物且因授课时间的考虑, 很多重要、前沿的材料未能覆盖, 即便覆盖到的部分也仅是管中窥豹, 更多的内容留待读者在进阶课程中学习. 为便于有兴趣的读者进一步钻研探索, 本书每章均介绍了一些阅读材料, 谨供读者参考.

笔者以为, 对学科相关的重要人物和事件有一定了解, 将会增进读者对该学科的认识. 本书在每章最后都写了一个与该章内容相关的小故事, 希望有助于读者增广见闻, 并且在紧张的学习过程中稍微放松调剂一下.

书中不可避免地涉及大量外国人名, 若全部译为中文, 则读者在日后进一步阅读文献时或许会对不少人名产生陌生感, 不利于进一步学习. 因此, 本书仅对一般读者耳熟能详的名字如“图灵”等加以直接使用, 对故事中的一些主要人物给出了译名, 其他则保持外文名.

机器学习发展极迅速, 目前已成为一个广袤的学科, 罕有人士能对其众多分支领域均有精深理解. 笔者自认才疏学浅, 仅略知皮毛, 更兼时间和精力所限, 书中错谬之处在所难免, 若蒙读者诸君不吝告知, 将不胜感激.

周志华

2015 年 6 月

# 目 录

第 1 章 绪论 .....	1
1.1 引言 .....	1
1.2 基本术语 .....	2
1.3 假设空间 .....	4
1.4 归纳偏好 .....	6
1.5 发展历程 .....	10
1.6 应用现状 .....	13
1.7 阅读材料 .....	16
习题 .....	19
参考文献 .....	20
休息一会儿 .....	22
第 2 章 模型评估与选择 .....	23
2.1 经验误差与过拟合 .....	23
2.2 评估方法 .....	24
2.3 性能度量 .....	28
2.4 比较检验 .....	37
2.5 偏差与方差 .....	44
2.6 阅读材料 .....	46
习题 .....	48
参考文献 .....	49
休息一会儿 .....	51
第 3 章 线性模型 .....	53
3.1 基本形式 .....	53
3.2 线性回归 .....	53
3.3 对数几率回归 .....	57
3.4 线性判别分析 .....	60
3.5 多分类学习 .....	63

---

3.6 类别不平衡问题 .....	66
3.7 阅读材料 .....	67
习题 .....	69
参考文献 .....	70
休息一会儿 .....	72
<b>第 4 章 决策树 .....</b>	<b>73</b>
4.1 基本流程 .....	73
4.2 划分选择 .....	75
4.3 剪枝处理 .....	79
4.4 连续与缺失值 .....	83
4.5 多变量决策树 .....	88
4.6 阅读材料 .....	92
习题 .....	93
参考文献 .....	94
休息一会儿 .....	95
<b>第 5 章 神经网络 .....</b>	<b>97</b>
5.1 神经元模型 .....	97
5.2 感知机与多层网络 .....	98
5.3 误差逆传播算法 .....	101
5.4 全局最小与局部极小 .....	106
5.5 其他常见神经网络 .....	108
5.6 深度学习 .....	113
5.7 阅读材料 .....	115
习题 .....	116
参考文献 .....	117
休息一会儿 .....	120
<b>第 6 章 支持向量机 .....</b>	<b>121</b>
6.1 间隔与支持向量 .....	121
6.2 对偶问题 .....	123
6.3 核函数 .....	126
6.4 软间隔与正则化 .....	129
6.5 支持向量回归 .....	133

---

6.6 核方法 .....	137
6.7 阅读材料 .....	139
习题 .....	141
参考文献 .....	142
休息一会儿 .....	145
<b>第 7 章 贝叶斯分类器</b> .....	<b>147</b>
7.1 贝叶斯决策论 .....	147
7.2 极大似然估计 .....	149
7.3 朴素贝叶斯分类器 .....	150
7.4 半朴素贝叶斯分类器 .....	154
7.5 贝叶斯网 .....	156
7.6 EM算法 .....	162
7.7 阅读材料 .....	164
习题 .....	166
参考文献 .....	167
休息一会儿 .....	169
<b>第 8 章 集成学习</b> .....	<b>171</b>
8.1 个体与集成 .....	171
8.2 Boosting .....	173
8.3 Bagging与随机森林 .....	178
8.4 结合策略 .....	181
8.5 多样性 .....	185
8.6 阅读材料 .....	190
习题 .....	192
参考文献 .....	193
休息一会儿 .....	196
<b>第 9 章 聚 类</b> .....	<b>197</b>
9.1 聚类任务 .....	197
9.2 性能度量 .....	197
9.3 距离计算 .....	199
9.4 原型聚类 .....	202
9.5 密度聚类 .....	211

9.6 层次聚类 .....	214
9.7 阅读材料 .....	217
习题 .....	220
参考文献 .....	221
休息一会儿 .....	224
<b>第 10 章 降维与度量学习 .....</b>	<b>225</b>
10.1 $k$ 近邻学习 .....	225
10.2 低维嵌入 .....	226
10.3 主成分分析 .....	229
10.4 核化线性降维 .....	232
10.5 流形学习 .....	234
10.6 度量学习 .....	237
10.7 阅读材料 .....	240
习题 .....	242
参考文献 .....	243
休息一会儿 .....	246
<b>第 11 章 特征选择与稀疏学习 .....</b>	<b>247</b>
11.1 子集搜索与评价 .....	247
11.2 过滤式选择 .....	249
11.3 包裹式选择 .....	250
11.4 嵌入式选择与 $L_1$ 正则化 .....	252
11.5 稀疏表示与字典学习 .....	254
11.6 压缩感知 .....	257
11.7 阅读材料 .....	260
习题 .....	262
参考文献 .....	263
休息一会儿 .....	266
<b>第 12 章 计算学习理论 .....</b>	<b>267</b>
12.1 基础知识 .....	267
12.2 PAC学习 .....	268
12.3 有限假设空间 .....	270
12.4 VC维 .....	273

---

12.5 Rademacher复杂度 .....	279
12.6 稳定性 .....	284
12.7 阅读材料 .....	287
习题 .....	289
参考文献 .....	290
休息一会儿 .....	292
<b>第 13 章 半监督学习 .....</b>	<b>293</b>
13.1 未标记样本 .....	293
13.2 生成式方法 .....	295
13.3 半监督SVM .....	298
13.4 图半监督学习 .....	300
13.5 基于分歧的方法 .....	304
13.6 半监督聚类 .....	307
13.7 阅读材料 .....	311
习题 .....	313
参考文献 .....	314
休息一会儿 .....	317
<b>第 14 章 概率图模型 .....</b>	<b>319</b>
14.1 隐马尔可夫模型 .....	319
14.2 马尔可夫随机场 .....	322
14.3 条件随机场 .....	325
14.4 学习与推断 .....	328
14.5 近似推断 .....	331
14.6 话题模型 .....	337
14.7 阅读材料 .....	339
习题 .....	341
参考文献 .....	342
休息一会儿 .....	345
<b>第 15 章 规则学习 .....</b>	<b>347</b>
15.1 基本概念 .....	347
15.2 序贯覆盖 .....	349
15.3 剪枝优化 .....	352

---

15.4 一阶规则学习 .....	354
15.5 归纳逻辑程序设计 .....	357
15.6 阅读材料 .....	363
习题 .....	365
参考文献 .....	366
休息一会儿 .....	369
<b>第 16 章 强化学习 .....</b>	<b>371</b>
16.1 任务与奖赏 .....	371
16.2 $K$ -摇臂赌博机 .....	373
16.3 有模型学习 .....	377
16.4 免模型学习 .....	382
16.5 值函数近似 .....	388
16.6 模仿学习 .....	390
16.7 阅读材料 .....	393
习题 .....	394
参考文献 .....	395
休息一会儿 .....	397
<b>附录 .....</b>	<b>399</b>
A 矩阵 .....	399
B 优化 .....	403
C 概率分布 .....	409