

机器学习

费宗铭 吕建 王志坚 陈道蓄 徐家福
(南京大学计算机软件研究所)

摘要

This paper outlines our understanding of some aspects of Machine Learning (ML). It then analyzes the state of the art of two important fields (i. e. inductive learning and explanation-based learning) in symbolic ML. It also presents some ideas of our future work.

目前,机器学习研究方兴未艾,同时,对一些基本概念、基本问题的提法尚各执一词。本文首先概述了我们关于机器学习有关问题的基本认识,在此基础上,分析了符号机器学习研究中比较重要的两个领域(归纳学习和基于解释的学习)的研究现状,最后提出了我们的一些想法。

一、关于机器学习的一些看法

何谓机器学习?我们认为,机器学习从内在行为看,是从未知到知的过程,是知识

增加的过程。从外在表现看,是系统的某些适应性改变,使得系统能完成原来不能完成的任务或把原来能完成的任务做得更好。这是一个问题的两个方面,各有侧重,归纳学习就侧重于概念获取即知识增加的一面,而基于解释的学习则侧重于技能提高的一面。同时,两方面又互为补充,知识增加后可表现出能力提高,而能力提高也可看作是知识(如控制知识)的增加。

心理学研究表明,人之所以具有智能,特别是学习的能力,是因为遗传使人生来就有自调整、自适应的机制。机器要具有学习

家交互的问题和向化学家学习的问题。

学习和问题求解 本项目与 Jeff Schlimmer合作,寻求用于表示、问题求解和学习的通用体系结构。它的主要假设有:(1)学习要求有推广具体经验(如训练实例)的能力;(2)通过构造具体经验的似然解释并只记住这些解释中起重要作用的细节,就可推广这些具体经验;(3)只有使系统具有能全面思考其操作和构造解释的高度统一表示,它才能改进其操作的各个方面;(4)大多数学习涉及改变问题表示。在我们

现在的THEO系统中采用的思想是所有的信念都表示成框架的槽值,而问题求解对应于推导所需要的槽值,并且问题求解方法本身也以槽值方式表示。所有推出的槽值的解释被存贮起来并用于指导学习。这里有待研究的问题包括开发更复杂的学习方法,引入类比推理和自动改变表示的方法,以及理解THEO和其它体系结构的关系。

[李波 康建初 罗玉龙摘译自《Faculty Research Guide 1990—1991》CMU,赵沁平校]

功能,也必须要有这些元级知识,它们构成学习的基础。机器学习在某种意义上是解决知识获取的问题,而这些元级知识本身的获取是机器学习研究中必须很好重视的。可能正是这些元级知识决定了学习系统的能力。

机器学习程序的核心技术之一是推广,即从一种或若干种情形中总结出一般规律,应用于其他情形。科学研究中应用了无数次的归纳方法就是从许多现象中总结出共性,发现科学定律。新近提出的基于解释的学习方法中的推广也是关键一步。

机器学习的分类方法很多,我们不想在此罗列。本文也不准备讨论机器学习的所有模式,只选择了其中有代表性的归纳学习和基于解释的学习两个领域。

归纳学习和基于解释的学习是符号学习方面的主要工作,它们反映了学习定义中概念获取和技能提高两个侧面,也恰好包含了获取新知识和把知识组织成有效形式这两步。我们对这两方面的研究现状作一个分析,以期对今后的工作有所裨益。

二、归纳学习的方法和理论

归纳学习主要指从实例中学习,研究工作有两方面,一是具体的归纳方法,代表性的工作有Quinlan的ID3算法,Michalski的Star方法学,二是对可学习类进行理论刻画。

1. Quinlan的ID3

ID3是Quinlan提出的从实例得出判定树的递归算法。它假定实例域 U 中的点由特征向量 $\langle f_1(u), f_2(u), \dots, f_k(u) \rangle$ 表示,其中 $f_i (i=1, \dots, k)$ 取布尔值,这样目标概念即为 $f_1, \dots, f_k$ 的一个布尔函数,归纳结果为对这一目标概念的判定树。

算法ID3大致思想如下:

ID3(S), S为实例集,对S递归

if S只含正例then return (+)

else if S只含反例then return (-)

else begin 根据 information-gain (f_i) 取值大小选取某一 f_i , 将S分为
 $S_0^i = \{s \in S | f_i(s) = 0\}$
 $S_1^i = \{s \in S | f_i(s) = 1\}$
return (以 f_i 为根, ID3(S_0^i)为左子树, ID3(S_1^i)为右子树的树)
end

information-gain 定义了从已知 $f_i(s)$ 中可得到关于 $F(s)$ 属正例集还是反例集的信息量。

从实例中可学到这样的判定树(图1)。

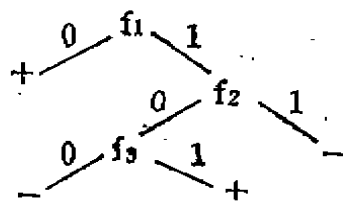


图1 与公式 $f_1 \vee (f_2 \wedge f_3)$ 等价的判定树

Quinlan将ID3算法用于棋局的判定中,后来人们还将其用于专家系统的知识获取中,收到很好效果。最近Utgoff给出了ID3的一个增殖版本ID5,它每次接受一个实例,在接受后对判定树更新。ID3方法的一个不足之处是学到的公式较局限,有些问题无法表达。

2. Michalski的Star方法学

概念获取一直是归纳学习的重要方面,Michalski在这方面作了一系列工作。

概念获取一般形式为:

给定观察实例 $F: \{e_{i,j} :: i \in I\}$ (其中 $e_{i,j}$ 表示概念类 K_i 的第 j 个实例)及背景知识(包括关于假设空间的优先准则LEF)找出归纳断言 $H: \{D_i :: i \in I\}$ (其中 D_i 为类 K_i 的概念描述,为一表达式),使得满足 $H \wedge \text{Background Knowledge} \models F$ 。

设 B_i 是被类 K_i 的所有实例满足且只被这些实例满足的描述。

1) 若 $\forall_i \in I (E_i \Rightarrow D_i)$, 则称 H 为完备的, 即 D_i 描述了所有实例;

2) 若 $\forall_{i,j} \in I (D_i \Rightarrow \sim E_j)$ if $i \neq j$, 则称

H为一致的,即D不包含其他类的实例。

实例及归纳断言采用一种称为带标记的谓词演算(Annotated Predicate Calculus,记为APC)来描述,这里标记是有关变量、函数和关系等描述符的背景知识,其中比较重要的标记信息就是对该描述符值集性质的刻画。描述符按值集性质分直称描述符(值集由独立的符号和名组成)、线性描述符(值集是全序集)和结构描述符(值集具有层次结构)三种。

在Star中,实例用APC的一种特殊情况a-表达式表示(一种关系语句的合取形式,而每个合取项不含内部析取),而归纳假设可用APC中定义的较复杂的表达式。

Star算法思想是先产生一个实例的推广,再产生不被它覆盖的其他实例的推广,依此类推,最后归纳断言由这些推广的析取构成。推广过程中使用了十多条规则。如对描述符有如下规则:

a) 若L为直称描述符,则(其中|<表示“推广为”)

$$\text{CTX} \& \{L=R_1\} :: > K \quad | < \text{CTX} \& \{L=R_2\} :: > K$$

其中 $R_1 \subseteq R_2 \subseteq \text{DOM}(L)$

b) 若L为线性描述符,则

$$\begin{aligned} &\text{CTX} \& \{L=a\} :: > K \\ &\text{CTX} \& \{L=b\} :: > K \quad | < \text{CTX} \& \{L=a \cdot \cdot b\} :: > K \end{aligned}$$

c) 若L为结构描述符,则

$$\begin{aligned} &\text{CTX} \& \{L=a\} :: > K \\ &\quad \vdots \quad \quad \quad | < \text{CTX} \& \{L= \\ &\text{CTX} \& \{L=i\} :: > K \quad \quad \quad s\} :: > K \end{aligned}$$

其中s在推广树中是a, ..., i的最近祖先。

Michalski的Star方法学企图做成一个通用的归纳方法,[5]中给出了获取关于正常细胞和癌细胞的例子,Star方法学后来被许多工作所借鉴。

从实例是由属性向量描述的角度看,Star方法学接受的实例的属性比ID3中布尔特征广,产生的归纳断言也比布尔函数(命

题演算公式)一般,但算法的确定性和时空效率不如ID3。同时,像所有归纳方法一样,其推广的正确性无法保证。

3. 归纳学习的理论

众所周知,归纳学习系统只要作了归纳跳跃,就无法保证其正确性。正是基于这一认识,L.G.Valiant在他的开创性工作中用概率方法提出了“几乎正确”的概念,在此基础上,人们研究了为学习“几乎正确”的概念所需实例数及相应学习算法复杂性。

首先我们定义“概率几乎正确”PAC(Probably Approximately Correct)的概念。

定义1 设U为对象全体,P(u)为U中对象的概率分布,F为要学概念($F \subseteq U$),又设 $\hat{F}$ 为通过某种学习系统学到的假设,则 $\hat{F}$ 与F不一致的概率为 $\text{error}(F, \hat{F}) = \sum_{u \in F \oplus \hat{F}} P(u)$, (其中 $F \oplus \hat{F}$ 为F与 $\hat{F}$ 的对称差)。

如果对精确度参数 $\epsilon > 0$,可信度参数 $\delta > 0$,有 $\Pr[\text{error}(F, \hat{F}) > \epsilon] < \delta$ (其中Pr为对假设空间而言的概率),则称该学习系统是概率几乎正确的(PAC)。

假设空间是有限集时,为保证系统是PAC所需实例数,我们有:

定理1 设H为关于域U的假设集合,S是根据概率分布P(u)独立抽取的m个实例, $\epsilon > 0$, $\delta > 0$,如果 $\hat{F} \in H$ 且与S中实例相容, $m \geq \frac{1}{\epsilon} (\ln \frac{1}{\delta} + \ln |H|)$ 则 $\Pr[\text{error}(F') > \epsilon] < \delta$,即为PAC。

为讨论假设空间为无限集的情形,我们先给出以下两个定义:

定义2 如果不管把实例集 $E \subseteq U$ 中元素标为正例或反例,总能在假设集H中找到h,使得h与这种标法一致,则我们称H完全适合E。

定义3 (Vapnik-Chervonenkis dimension)

设H为假设空间,定义H的VC-dimension为H能完全适合的最大实例集E的大小。

从而我们有:

定理2 假设空间 H 是PAC可学习的iff H 有有限的VC-dimension。

定理3 任何假设空间的PAC学习算法必须接受 $O\left(\frac{1}{\epsilon}[\ln\frac{1}{\delta} + VC - \dim(H)]\right)$ 个实例。

由实例复杂性,可得出算法复杂性的理论刻画,Valiant特别分析了布尔函数(命题演算公式)相对于 $\frac{1}{\epsilon}$, $\frac{1}{\delta}$, 变量数 n 的多项式时间内可学习的假设空间。值得指出的是,任意布尔函数不是多项式可学习的(只使用多项式个实例,运行多项式时间),由此得出一个结论,没有一个高效的通用的归纳学习方法。当然也有一些假设空间是多项式时间可学习的,包括 k -CNF(每个合取项至多只有 k 个literals的合取范式)、单调析取范式(不含变量否定)、 μ -表达式(每个变量至多出现一次)。

归纳学习的理论对PAC可学习类的刻画,指导我们在确定归纳偏向(inductive bias)时,有意识地限制假设空间的大小,使在假设空间找到的与实例相容的假设是PAC的。ID3和Star中对实例和归纳假设的描述形式的限制恰恰反映了这一点。

三、基于解释的学习(Explanation Based Learning, 记为EBL)的思想及代表工作

EBL是近期提出且研究颇多的一种学习方法,它的提出基于下面三点:1)人们经常能够从观察或执行的单个实例中得出一个一般概念或规则。2)在归纳学习中,选择归纳断言根据归纳偏向进行,EBL的提出可能解决这个问题,可用背景知识指导选择推广。3)EBL也是对问题求解中一些实用的提高效率的方法的总结。

T. Mitchell将EBL总结为如下框架:

给定: 领域理论 DT

目标概念 TC

训练实例 E

操作性准则 C

找出: 满足 C 的关于目标概念的充分条件。

EBL的一般过程是,使用领域理论 DT ,找出 E 为什么是目标概念 TC 的实例的证明(即解释),然后根据 C 对证明进行推广,从而得出关于 TC 的一个充分条件。

操作性准则指明了哪些测试在运行时容易判定。领域理论中已经给出了目标概念的陈述,但一般较难使用。通过学习得出 TC 的一个充分条件,它在判定新实例时比较方便。学习过程中操作性准则指导学习系统对用来描述目标的概念进行取舍。操作性准则不仅要使学习的概念描述可用(usable)、而且要使之有用(useful),特别是用于问题求解中能提高系统的执行效率。

下面我们介绍EBL两个代表性的工作。

1. Mitchell的LEX-II

LEX-II是LEX工作的继续。LEX是求不定积分的一个问题求解系统,它在解决问题的过程中学习问题求解策略。LEX-II在LEX中加入了目标概念的显式定义,解决了LEX中归纳跳跃的基础问题,使推广步有了根据。同时,目标概念的显式定义使得系统有可能发现新的语法单位。

系统求解问题是 $\int f(x)dx$ 这种不定积分,将积分公式看成是操作符(如 $\int u dv = uv - \int v du$)状态即为求解过程中 $f(x)$ 的某种形式,要学的启发式信息 H 就是:在状态 $State$ 下使用操作 op ,LEX-II引入版本空间(version space)的概念,表示学到的不完全的知识,用两个界 S (most Specific)和 G (most General)来表示状态,随着解决问题的增加而不断精化 S 和 G 。

系统的目标概念是 $PosInst(op, state)$,即在状态 $state$ 时使用操作 op 是一个正例,关于目标概念有:

$$\begin{aligned} \text{PosInst}(\text{op}, \text{state}) &\Leftrightarrow \sim \text{Goal}(\text{state}) \\ &\wedge [\text{Goal}(\text{Apply}(\text{op}, \text{state})) \vee \text{Solvable} \\ &\quad (\text{Apply}(\text{op}, \text{state}))] \\ \text{Solvable}(\text{state}) &\Leftrightarrow \exists \text{op} [\text{Goal}(\text{Apply}(\text{op}, \\ &\text{state})) \vee \text{Solvable}(\text{Apply}(\text{op}, \text{state}))] \end{aligned}$$

背景知识包括不定积分的公式,即操作符性质的知识,关于函数形式有如下推广结构作为背景知识(图2)。

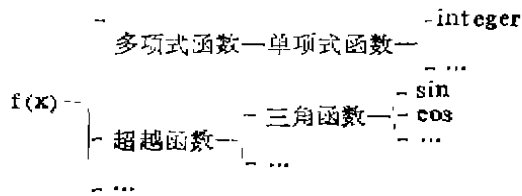


图2 函数形式的推广结构

操作性准则要求得出的状态是某种函数匹配形式。

学习过程首先是产生一个求解步是PosInst的实例的解释,推广得到满足PosInst的一个充分条件,然后将该充分条件转换为某种状态匹配的形式,最后得出在某状态下使用某操作的启发信息。

值得一提的是,在求解 $\int \cos^7 x dx$ 时,对其中正实例解释后,得出在满足 $\text{real}(c) \wedge \text{integer}((c-1)/2)$ 时,求解 $\int \cos^7 x dx$ 可使用 op3 。这里感兴趣的是这个条件 $\text{real}(c) \wedge \text{integer}((c-1)/2)$,它在原来的推广结构中是无法表达的,而实质上就是奇数的定义,只是没给它取个名罢了。可见通过解释可发现新的语法概念。

LEX-II是应用EBL早期比较成功的例子,在使用EBL后使得系统能够学到启发式信息,并在一定意义下保证其正确性,由此提高了系统解决问题的效率。

2. Minton的PRODIGY

PRODIGY是一个通用的问题求解系统,它采用手段-目的(means-ends)分析的方法,同时采用若干学习机制,获取问题求解的控制知识,EBL是其中比较重要的一种。

PRODIGY区分了两类知识:1)特定领域的知识,包括可使用的操作符及推理规则。

2)控制知识,它描述了如何去解决领域中的问题,限制了问题求解程序搜索时的可能选择,进而提高系统的能力或搜索效率。这里EBL所要学的正是这种知识。

PRODIGY的特色之一是依赖于从特定领域学到控制策略去指导问题求解,而不是采用一般的与问题领域无关的弱方法。

PRODIGY的控制知识改变系统求解问题的缺省行为,它们有三种类型:1)SELECT在某一状态下选择某一特定操作符。2)REJECT在某一状态下拒绝某一操作,回溯时也不再考虑它。3)PREFER某一操作比其他操作优先考虑。

从下面四个方面来看PRODIGY的EBL功能:

1)目标概念 有四类:SUCCEEDS:导致成功的选择,FAILS:后继所有路径都导致失败,SOLE-ALTERNATIVE:其他选择都失败,GOAL-INTERFERENCE:已经达到的目标被破坏或后面操作所需的条件被破坏。这四类目标分别导致系统学到PREFER规则、REJECT规则、SELECT规则和PREFERR规则。

2)领域理论 包括问题求解结构的元级知识,上述目标概念的知识,等等。

3)操作性准则 PRODIGY认为,学到的控制知识不仅要可用,而且要能提高系统效率。定义:

$$\text{Utility} = (\text{AvrSavings} \times \text{ApplicFreq}) - \text{AvrMatchCost}$$

其中AvrMatchCost为匹配规则时平均开销,AvrSavings为规则可用时平均节省,ApplicFreq为规则测试时可使用的比例。

系统学到控制知识后,对其以后问题求解中的作用进行统计,以决定其有用性,如果Utility成为负值,则该规则就被消除掉。

4)解释过程 EBL可以在问题求解过程中或结束后进行,系统根据选择训练实例的启发式信息选择问题求解中与目标概念对应的部分。采用EBS(Explanation-Based Sp-

ecialization) 的方法用目标概念对实例进行解释。这种方法对目标概念中的谓词使用规则替代, 当有多个选择时, 以与实例相容的选择优先考虑, 直到证出实例为目标概念的例化。最后根据控制规则模板(template) 生成相应控制规则。

Minton将PRODIGY用于机器车间的调度这一问题求解领域。试验结果表明, 学习控制规则后, 调度100个问题所需的时间是没有学习前的43%, 并且跟人工写的规则进行了比较。人工写的规则比学到的规则效率更高, 但差别并不大, 且人工写的规则开始有些错, 且不全, 在注意到PRODIGY做得好的地方后进行了修改, 故自动学到的规则更完全、更正确。

3. 讨论

对EBL方法的一个扩充是采用多个实例(称为mEBL)。在多个类似实例同时存在时, 对各实例构造解释树, 然后找出它们最大子树, 从而导出规则。这种方法可能克服只解释一个实例时得出的规则太特别的问题, 可能适用性更广。

在领域理论正确的情况下, 得出的描述也一定是正确的。实际使用中, 领域理论常是不完善的。不完善理论有三种: 1) 不完备理论: 不能完全解释某些实例。2) 不一致理论: 可能有几种不一致的解释。3) 不可行理论: 受计算时空复杂性的限制解释不能完成。

近期一些工作讨论了领域理论重组和修正的策略, 以弥补领域理论不完善的地方。使用多个实例也可能对不完善理论有所帮助。

EBL本质上是把问题求解搜索(采用领域理论的规则)转换为模式匹配搜索, 这就有时空的权衡, 同时也有两种搜索时间的权衡, 这是实现中必须很好处理的问题。有结果表明, 并不是学到规则越多越能提高系统效率。

四、结束语

以上我们讨论了符号机器学习的两种方法及代表工作, 但它们在实际使用中还有一些问题尚待解决。

归纳学习从多个实例中得出一个概念描述, 它对领域理论要求较少, 但须有多个实例。对有些领域给出多个实例并不是一件容易的事, 并且得出的归纳结论的正确性问题进一步限制了其使用的范围。

基于解释的学习只需一个实例, 并且在领域理论正确时得出的结论也是正确的, 这似乎解决了归纳学习存在的问题。但它本身对领域理论的要求却相当苛刻, 发表的工作中列举的领域复杂性相对较小, 实际领域常常无法给出一个完善理论, 而只有在学习过程中不断完善, 这样把现有EBL方法用到一个复杂性稍大的领域就相当困难。虽然近期有些工作对EBL方法作了改进, 但却是以牺牲EBL方法的某些优点为代价的, 因而并未从根本上解决问题。

有人提出将两种方法结合起来, 两者互补, 或许能解决问题。但值得注意的是, 当保持一个方法的优点的同时, 就抑制了另一个方法长处的发挥, 两者是相互矛盾的两个方面, 只存在一个权衡的问题, 但这种权衡补充后能否解决问题还是个问号。

我们认为, 将现有方法用到具有一定复杂性的领域还有许多工作要做, 要应用成功必须作某些质的改变。我们期待着这方面工作有所突破。

参考文献

- [1] 徐家福, 软件笔谈. 计算机科学 90.3. PP1-4.
- [2] Simon, H. A. Why Should Machines Learn, in Michalski, R. S. et al (Eds) Machine Learning, An Artificial Intelligence Approach. (Tioga, Palo Alto, CA, 1983).

智能系统与机器学习

罗钧旻

(西北大学计算机科学系)

摘 要

Having analysed intelligence systems' construction, working process and characteristics, this paper puts forward the thoughts of building a hypothetical base and a problem base in knowledge base; Having compared the present learning systems, it gives the thoughts of questioning learning and creative learning.

随着计算机科学特别是人工智能的发展,人们对智能系统的研究更加深入,逐步认识到智能系统的核心问题就是它的学习能力。那么,智能系统的一般组成及工作过程怎样?智能系统有哪些性质?要模拟智能系统应该解决哪些问题?尽管当前出现了各种学习系统,如机械学习,指导式学习,发现式学习,示例式学习,类比学习,解释学习等,但这些系统在学习过程中有何作用,处于何种地位?还有哪些学习方式值得我们研究?这就是本文要力求阐明的问题。

1. 智能系统的一般结构

智能系统的主要功能无非就是学习知识以及用所学知识进行工作,并在工作中再学习,因此我们可以把智能系统抽象为图1所示模式。在这个模式中,虚线右边为智能系统,左边为系统所处环境,虚线表示系统与外界间的界面,箭头表示信息流动方向。其中EV表示环境,IO表示索引机构,由它决定是启动学习机构LO,还是启动工作机构WO,KB表示知识库。

[3] Dietterich, T. G. Learning at the Knowledge Level. Machine Learning vol1. (1986). PP287-316.

[4] Quinlan, J. R. Induction of Decision Trees. Machine Learning, Vol1 (1986) PP.81-106.

[5] Michalski, R. S. et al. A Theory and Methodology of Inductive Learning. 同2 PP83-129.

[6] Valiant, L. G. A Theory of the Learnable. CACM Vol27. (1984). PP 1134-1142.

[7] Mitchell, T. M. et al. Explanation-

Based Generalization, A Unifying View. Machine Learning Vol1 (1986) PP47-80.

[8] DeJong, G. et al. Explanation-Based Learning, An Alternative View. Machine Learning Vol1 (1986). PP145-176

[9] Mitchell, T. M. Learning and Problem Solving. In IJCAI-83 (1983) pp1139-1151.

[10] Minton, S. et al. Explanation-Based Learning, A Problem Solving Perspective. AI Vol40 (1989). pp63-118