

机器学习

理论与算法

MarkZZZ WeChat: MarkZZZ20XX

课程简介

本课程系统讲授机器学习的核心理论与经典算法，以严格的数学框架为基础，涵盖统计学习理论、监督学习、无监督学习、核方法、概率图模型等主题。课程强调从第一性原理出发的数学推导，包括泛化理论（PAC 学习、VC 维、Rademacher 复杂度）、凸优化方法、概率推断与贝叶斯方法、以及高维统计中的正则化理论。通过严格的定理证明与算法分析，帮助学生建立深厚的机器学习理论素养，具备独立开展学习理论研究和解决前沿问题的能力。

适合人群

- 计算机科学、应用数学、统计学、运筹学等方向的博士生及高年级硕士生
- 具备扎实数学基础，希望深入理解机器学习理论根基的研究人员
- 对统计学习理论、高维统计、优化理论感兴趣的交叉学科研究者
- 已修读本科级机器学习课程，寻求理论深化的工程师与自学者

前置知识

- **线性代数**：矩阵运算、特征值分解、奇异值分解、谱定理、矩阵范数
- **概率论与数理统计**：测度论基础、随机变量的收敛模式（a.s., L^p , 概率）、大数定律、中心极限定理、极大似然估计、贝叶斯推断
- **实分析与泛函分析**：度量空间、完备性、压缩映射、Hilbert 空间基础（内积、正交投影、Riesz 表示定理）
- **凸优化**：凸集与凸函数、KKT 条件、Lagrange 对偶、梯度下降与近端方法基础
- **编程基础**：Python/NumPy（课程以理论为主，实验为辅）

1 课程大纲

讲次	主题	内容概要
1	机器学习导论	Mitchell 定义与形式化、学习类型（监督/无监督/强化/自监督/在线）、假设空间与版本空间、归纳偏置、经验风险最小化 (ERM)、结构风险最小化 (SRM)、偏差-方差-噪声分解（回归完整推导）、NFL 定理、PAC 学习框架预览

讲次	主题	内容概要
2	线性模型	最小二乘法（正规方程 + 几何投影解释）、最大似然与高斯噪声等价性、岭回归（Tikhonov 正则化 + 贝叶斯先验解释 + 偏差-方差权衡）、Lasso (ℓ_1 正则化 + 稀疏性 + 次梯度最优性条件 + ISTA/FISTA 算法)、弹性网、逻辑回归 (MLE+Newton-Raphson/IRLS)、Softmax 回归、广义线性模型 (GLM)
3	模型评估与选择	训练/验证/测试集划分、交叉验证 (k -fold/LOOCV/分层)、自助法 (.632+ 校正)、信息准则 (AIC/BIC/MDL 推导与渐近性质)、ROC 曲线与 AUC (Mann-Whitney 等价性)、精确率-召回率、F-score、校准曲线、多重比较校正 (Bonferroni/Holm)、正则化路径、模型选择的一致性
4	支持向量机	函数间隔与几何间隔、硬间隔最大化 (二次规划)、Lagrange 对偶 (KKT 条件 + 互补松弛 + 强对偶)、支持向量与稀疏性、核技巧 (隐式特征映射)、软间隔 SVM (松弛变量 + C -SVM + ν -SVM)、Hinge loss 与 SRM、SMO 算法 (工作集选择 + KKT 违反检测 + 解析解推导)、 ϵ -SVR、一类 SVM
5	决策树与集成方法	ID3/C4.5/CART (信息增益/增益率/Gini 系数)、剪枝策略 (预剪枝/后剪枝/代价复杂度)、Bagging (Bootstrap 聚合 + 方差缩减分析)、随机森林 (特征子采样 + OOB 估计 + 变量重要性)、AdaBoost (指数损失 + 前向分步等价性 + 训练误差指数衰减证明)、梯度提升 (GBDT/XGBoost/LightGBM)、堆叠 (Stacking)
6	概率图模型	贝叶斯网络 (有向图 + 条件独立 + d -分离)、马尔可夫随机场 (无向图 + 团势函数 + Hammersley-Clifford 定理)、HMM (前向后向算法 + Viterbi 解码 + Baum-Welch/EM)、EM 算法 (Jensen 不等式推导 + ELBO + 收敛性证明 + 变体)、变分推断基础 (平均场近似 + ELBO 最大化 + 坐标上升)、MCMC (Metropolis-Hastings + Gibbs 采样)

讲次	主题	内容概要
7	无监督学习	K-means (Lloyd 算法 + 收敛性 + k -means++ 初始化 + $O(\log k)$ 竞争比)、GMM 与 EM (完整推导 + 奇异性问题 + BIC 选 k)、谱聚类 (图 Laplacian + Cheeger 不等式 + NCut 松弛)、PCA (最大方差/最小重构误差/特征值分解/概率 PCA)、核 PCA、t-SNE (Kullback-Leibler 最小化 + 拥挤问题)、UMAP
8	核方法与 RKHS	核函数与正定性、Mercer 定理 (积分算子 + 特征展开)、再生核 Hilbert 空间 (RKHS) 构造 (Moore-Aronszajn 定理)、RKHS 中的范数与正则化、表示定理 (Representer Theorem 完整证明)、核岭回归、核 PCA、核 CCA、Nyström 近似、随机 Fourier 特征 (Rahimi & Recht, 2007)
9	统计学习理论	PAC 学习框架 (可学习性定义 + 有限假设空间的样本复杂度)、VC 维 (定义 + 碎裂 + 增长函数 + Sauer 引理 + VC 维泛化界)、Rademacher 复杂度 (定义 + 与 VC 维的关系 + 泛化界 + 数据依赖界)、McDiarmid 不等式、结构风险最小化、偏差-复杂度权衡、稳定性与泛化、PAC-Bayes 界、在线学习 (Halving 算法 + WMA/Hedge+Regret 界)
10	应用专题与前沿	特征工程与特征选择 (Filter/Wrapper/Embedded)、AutoML (NAS+HPO+ 元学习)、可解释机器学习 (SHAP+LIME+Attention 可视化)、公平性与伦理 (统计公平定义 + 不可能定理)、联邦学习 (FedAvg+ 差分隐私)、因果推断基础 (do-算子 + 后门准则)、基础模型与预训练范式、课程总结与研究前沿

2 参考书目

1. Shai Shalev-Shwartz and Shai Ben-David, *Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms*, Cambridge University Press, 2014. (统计学习理论主要参考)
2. Christopher M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer, 2006. (概率视角的经典教材)
3. Trevor Hastie, Robert Tibshirani, and Jerome Friedman, *The Elements of Statistical Learning*, 2nd ed., Springer, 2009. (统计学习方法百科全书)

4. Kevin P. Murphy, *Probabilistic Machine Learning: An Introduction*, MIT Press, 2022. (概率机器学习现代教材)
5. Kevin P. Murphy, *Probabilistic Machine Learning: Advanced Topics*, MIT Press, 2023. (高阶专题: 贝叶斯深度学习、因果推断等)
6. Mehryar Mohri, Afshin Rostamizadeh, and Ameet Talwalkar, *Foundations of Machine Learning*, 2nd ed., MIT Press, 2018. (学习理论严格数学处理)
7. 周志华, 《机器学习》, 清华大学出版社, 2016. (中文经典入门教材)
8. Martin J. Wainwright, *High-Dimensional Statistics: A Non-Asymptotic Viewpoint*, Cambridge University Press, 2019. (高维统计理论)
9. Bernhard Schölkopf and Alexander J. Smola, *Learning with Kernels*, MIT Press, 2002. (核方法经典专著)
10. Daphne Koller and Nir Friedman, *Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques*, MIT Press, 2009. (概率图模型权威教材)
11. Roman Vershynin, *High-Dimensional Probability*, Cambridge University Press, 2018. (集中不等式数学工具)
12. Christoph Molnar, *Interpretable Machine Learning*, 2nd ed., 2022. (可解释 AI)