• Прикладные модели машинного обучения •
Глубокие нейронные сети

Воронцов Константин Вячеславович
k.v.vorontsov@phystech.edu
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ • 6 февраля 2026

Содержание

Напоминание: модели классификации и регрессии

Дано: выборка $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$, объекты $x_i \in \mathbb{R}^n$, ответы y_i

Задача регрессии: $y_i \in \mathbb{R}$

Найти: модель регрессии $a(x, w)$, вектор параметров w

Критерий: $Q(w; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} L\big(\underbrace{a(x_i, w) - y_i}_{\varepsilon_i(w)\ \text{— error, ошибка}}\big) \to \min_w,$

где L унимодальная: $L(\varepsilon) = \varepsilon^2$, $|\varepsilon|$, $\big(|\varepsilon| - c\big)_+$, и др.

Задача классификации с двумя классами: $y_i \in \{\pm 1\}$

Найти: модель классификации $a(x, w) = \text{sign}\ g(x, w)$

Критерий: $Q(w; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} L\big(\underbrace{g(x_i, w) y_i}_{M_i(w)\ \text{— margin, отступ}}\big) \to \min_w,$

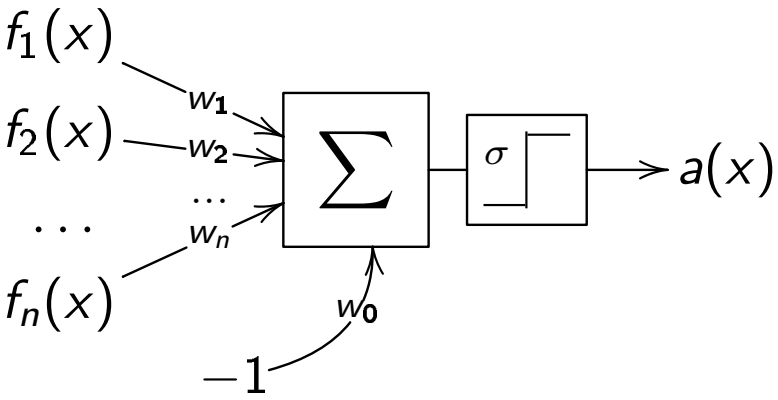
где L невозрастающая: $L(M) = \ln(1 + e^{-M})$, $(1 - M)_+$, и др.

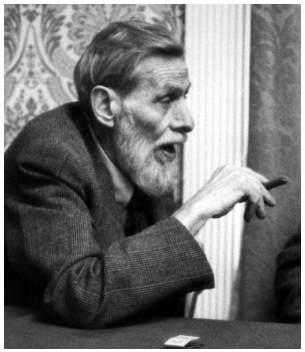
Напоминание: математическая модель нейрона

Линейная модель нейрона (1943):

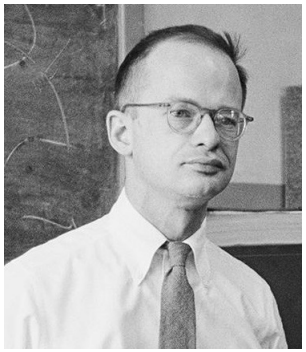
$$a(x, w) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right)$$

$f_j(x)$ — признаки объекта x
w_j — веса признаков
w_0 — порог активации
$\sigma(z)$ — функция активации

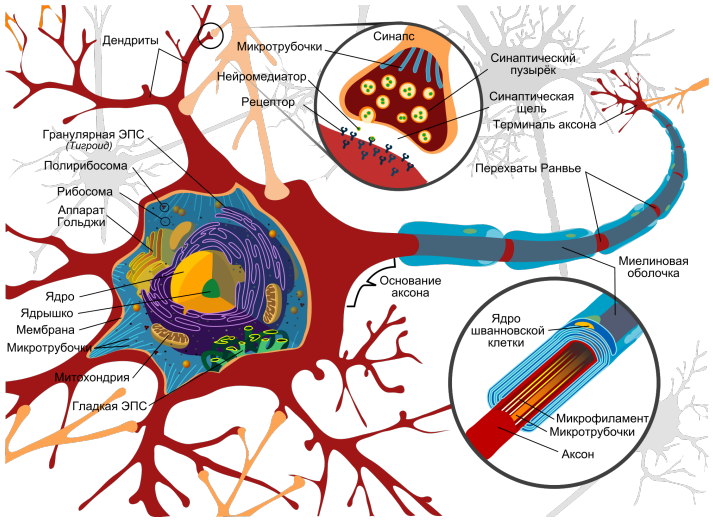




Уоррен МакКаллок (1898–1969)



Вальтер Питтс (1923–1969)



Напоминание: MLP — MultiLayer Perceptron с L слоями

Архитектура сети: H_l — число нейронов в l-м слое, $l = 1, \ldots, L$

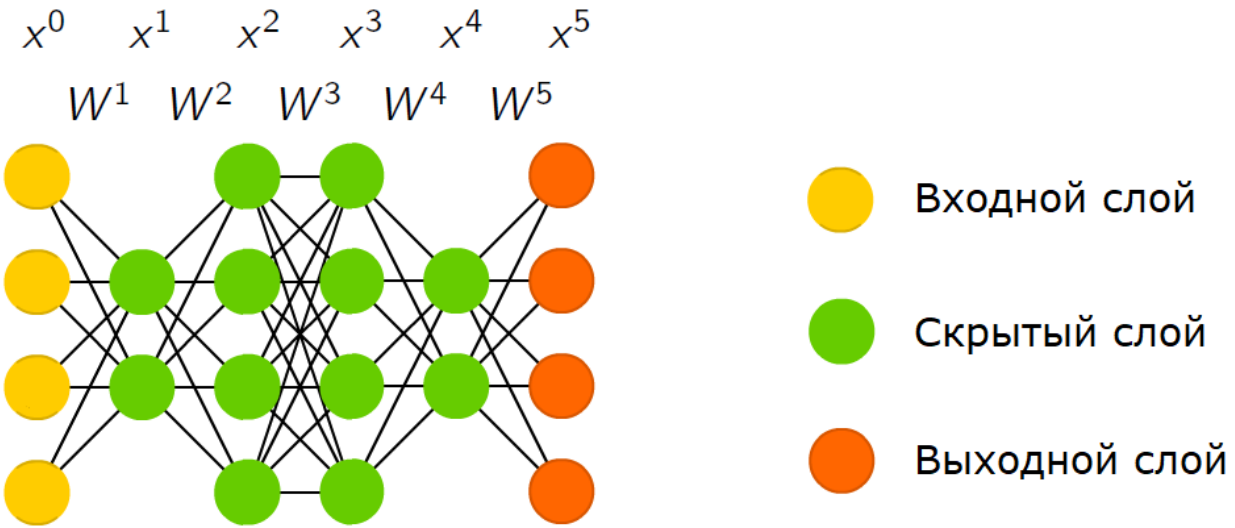
$x^0 \in \mathbb{R}^{n+1}$ — вектор признаков на входе сети, $x_0^0 = -1$

$x^l \in \mathbb{R}^{H_l}$ — вектор «признаков» на выходе l-го слоя, $x_0^l = -1$

$x^L \in \mathbb{R}^{H_L}$ — вектор на выходе сети

W^l — матрица весов l-го слоя, размера $(H_{l-1}+1) \times H_l$

$x^l = \sigma^l\left(W^l x^{l-1}\right)$ — вычисление сети по слоям $l = 1, \ldots, L$

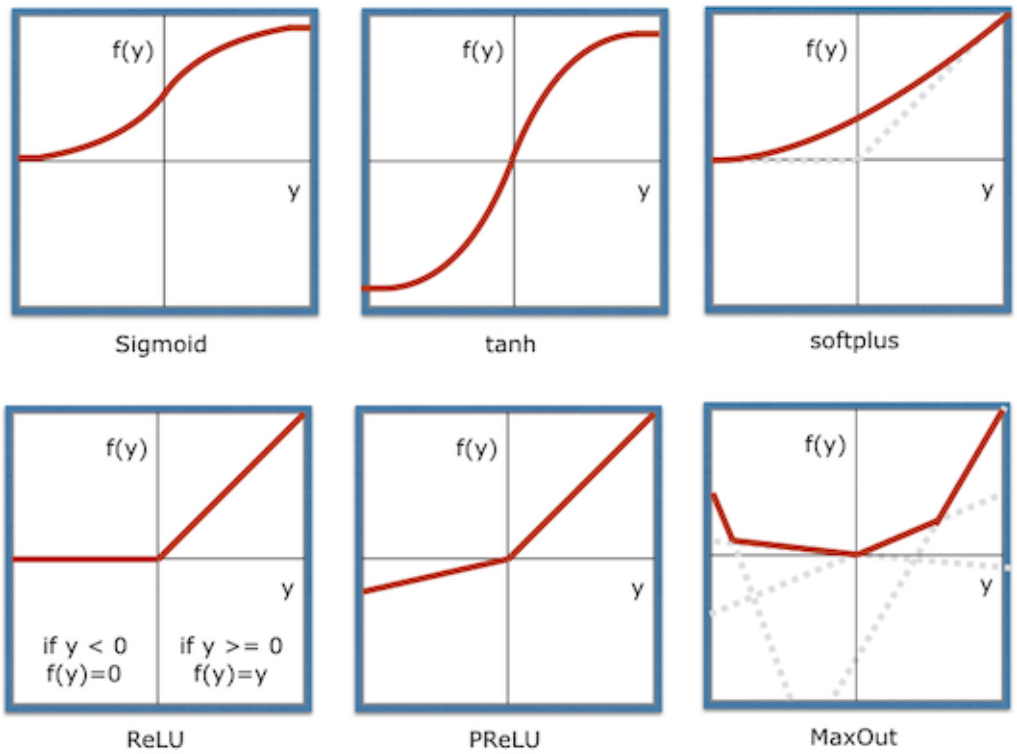


Напоминание. Функции активации

Функции $\sigma(y) = \frac{1}{1+e^{-y}}$ и $\text{th}(y) = \frac{e^{y}-e^{-y}}{e^{y}+e^{-y}}$ могут приводить к затуханию градиентов или «параличу сети»

Функция положительной срезки (Rectified Linear Unit, ReLU)

$$\text{ReLU}(y) = \max\{0, y\}; \qquad \text{PReLU}(y) = \max\{0, y\} + \alpha \min\{0, y\}$$



Напоминание: алгоритм SG (Stochastic Gradient)

$\mathscr{L}(w, x)$ — потеря, допущенная моделью $a(x, w)$ на объекте x

Критерий минимума средних потерь на обучающей выборке:

$$Q(w) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(w, x_i) \to \min_w$$

Вход: выборка $(x_i)_{i=1}^{\ell}$; темп обучения η; параметр λ;

Выход: вектор весов всех слоёв $w = (W^1, \ldots, W^L)$;

инициализировать веса w и текущую оценку $Q(w)$;

повторять

- выбрать объект x_i из X^ℓ (например, случайно);
- вычислить потерю $\mathscr{L}_i := \mathscr{L}(w, x_i)$;
- градиентный шаг: $w := w - \eta \nabla \mathscr{L}(w, x_i)$;
- оценить значение функционала: $Q := (1 - \lambda) Q + \lambda \mathscr{L}_i$;

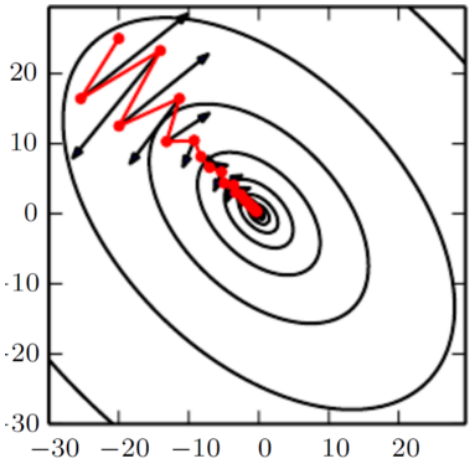
пока значение Q и/или веса w не стабилизируются;

H.Robbins, S.Monro. A stochastic approximation method // Annals of Math. Stat., 1951.

Напоминание: метод накопления инерции (momentum)

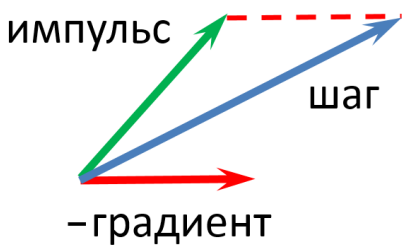
Momentum — экспоненциальное скользящее среднее градиента по $\approx \frac{1}{1-\gamma}$ последним итерациям [Б.Т.Поляк, 1964]:

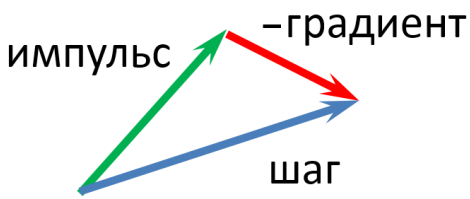
$$v := \gamma v + (1-\gamma)\nabla \mathscr{L}(w, x_i)$$
$$w := w - \eta v$$



NAG (Nesterov's accelerated gradient) — ускоренный стохастический градиент с инерцией [Ю.Е.Нестеров, 1983]:

$$v := \gamma v + (1-\gamma)\nabla \mathscr{L}(w - \eta\gamma v, x_i)$$
$$w := w - \eta v$$

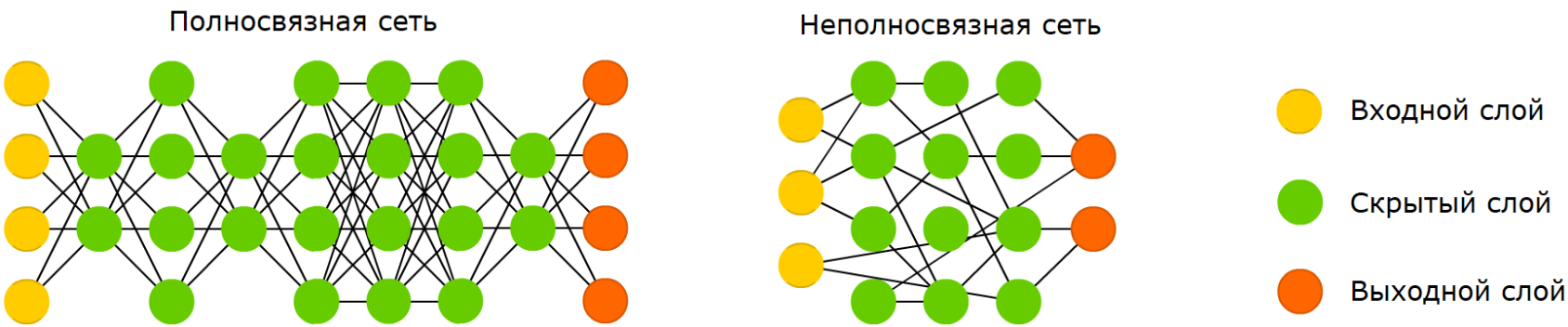




Глубокие нейронные сети (Deep Neural Network, DNN)

1965: первые глубокие нейронные сети

2012: свёрточная сеть для классификации изображений AlexNet



- *Архитектура сети* — структура слоёв и связей между ними, позволяющая наделять DNN нужными свойствами
- DNN позволяют принимать на входе и генерировать на выходе *сложно структурированные данные*

Ива́хненко А. Г., Лапа В. Г. Кибернетические предсказывающие устройства. 1965.

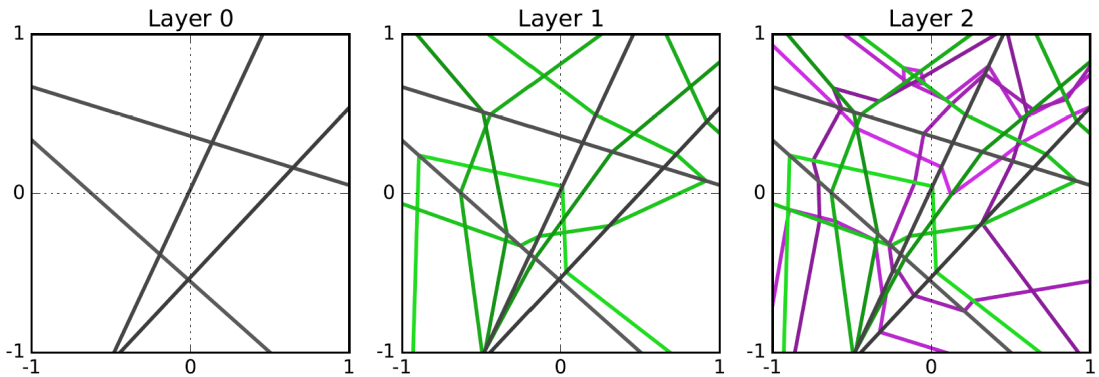
Krizhevsky A. et al. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. 2012.

Глубина важнее ширины

A^n_{LH} — семейство полносвязных многослойных сетей $a(x, w)$:
n признаков, L слоёв, H нейронов в каждом слое, $x \in \mathbb{R}^n$,
функции активации кусочно-линейные: ReLU, hard-tanh и т.п.

Мера разнообразия семейства A^n_{LH} — максимальное число участков линейности $a(x, w)$ — выпуклых многогранников в $\mathbb{R}^n$.

Пример. Участки линейности, $n = 2$, $L = 3$, $H = 4$:



Теорема. Разнообразие семейства A^n_{LH} растёт как $O(H^{nL})$.

M.Raghu et al. On the Expressive Power of Deep Neural Networks, 2016.

Избыточная параметризация может ускорять сходимость

Рассмотрим t-й шаг SGD: $\mathscr{L}(x_i w) \to \min\limits_w$, $x_i, w \in \mathbb{R}^n$, $i \equiv i(t)$:

$$w^{t+1} := w^t - \eta\, x_i \mathscr{L}'(x_i w^t)$$

Пример избыточной параметризации: $\mathscr{L}(x_i w_1 v) \to \min\limits_{w_1, v}$, $v \in \mathbb{R}$:

$$w_1^{t+1} := w_1^t - \eta\, x_i v^t \mathscr{L}'(x_i w_1^t v^t)$$
$$v^{t+1} := v^t - \eta\, (x_i w_1^t)\, \mathscr{L}'(x_i w_1^t v^t)$$

Рекуррентная формула для $w^t = w_1^t v^t$:

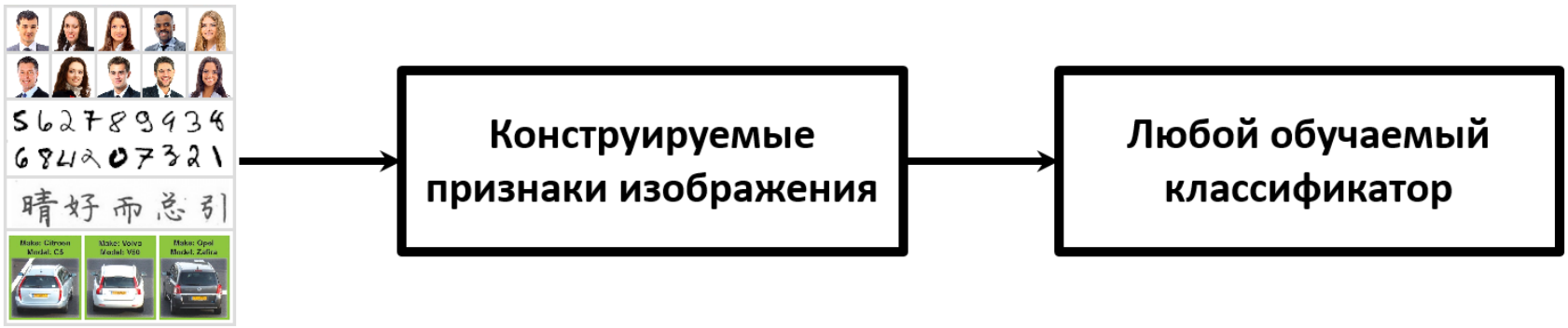
$$w^{t+1} := w_1^{t+1} v^{t+1} = w^t - \eta^t x_i \mathscr{L}'(x_i w^t) - \sum_{\tau=1}^{t-1} \eta^{t,\tau} x_{i(\tau)} \mathscr{L}'(x_{i(\tau)} w^\tau)$$

Это (неожиданно!) метод Momentum с адаптивным шагом η^t и адаптивными коэффициентами сглаживания $\eta^{t,\tau}$.

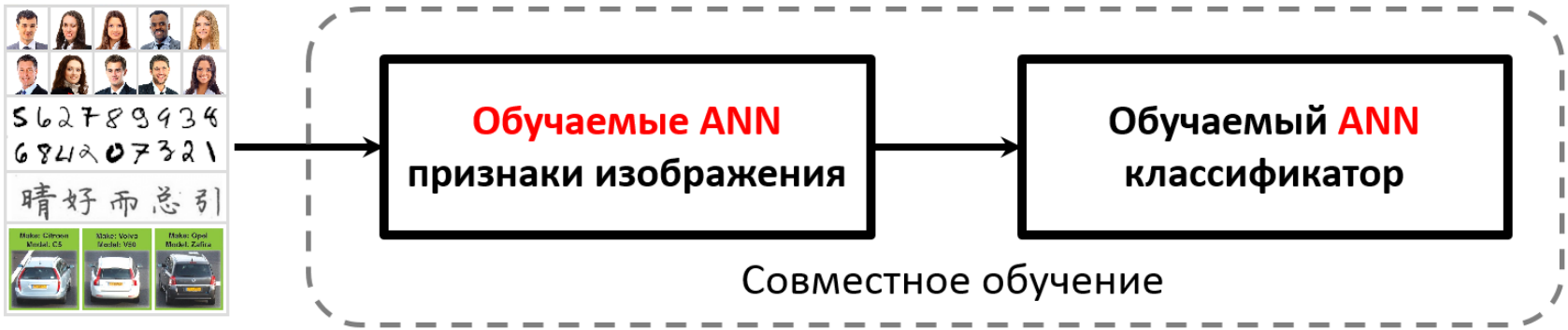
Sanjeev Arora, Nadav Cohen, Elad Hazan. On the Optimization of Deep Networks: Implicit Acceleration by Overparameterization. 2018

Генерация признаков для распознавания изображений

Классический подход к распознаванию изображений:



Современный подход — end-to-end deep learning:



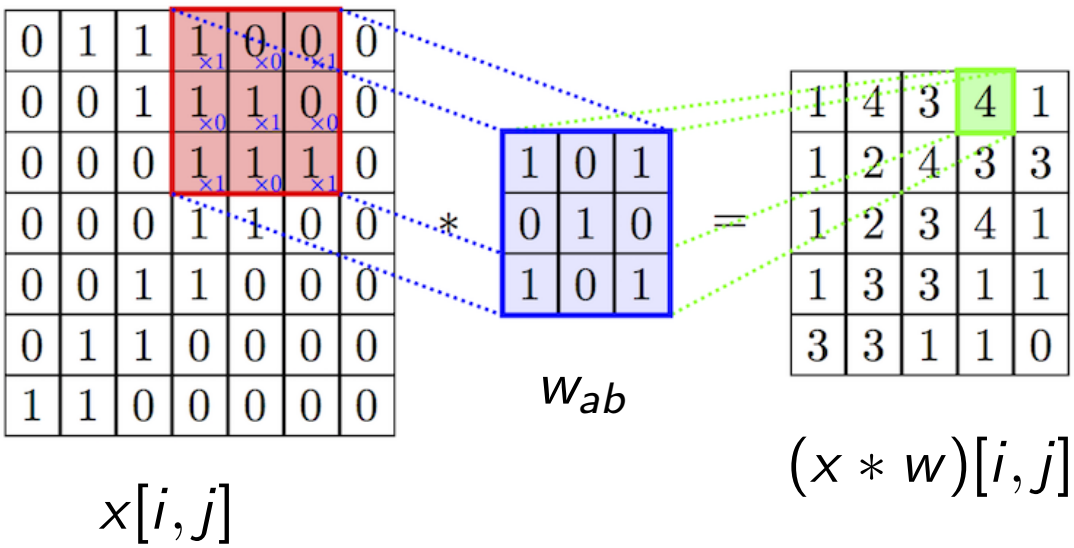
Sanjeev Arora. Toward theoretical understanding of deep learning. ICML-2018 Tutorial
https://unsupervised.cs.princeton.edu/deeplearningtutorial.html

Свёрточный слой нейронов (convolution layer)

$x[i,j]$ — исходные признаки, пиксели $n \times m$-изображения
w_{ab} — ядро свёртки, $a = -A, \ldots, +A$, $b = -B, \ldots, +B$

Неполносвязный свёрточный нейрон с $(2A+1)(2B+1)$ весами:

$$(x * w)[i,j] = \sum_{a=-A}^{A} \sum_{b=-B}^{B} w_{ab}\, x[i+a, j+b]$$



Объединяющий слой нейронов (pooling layer)

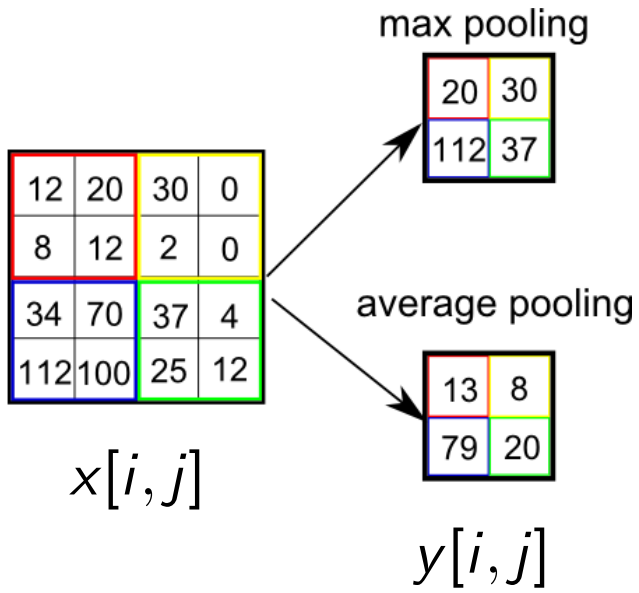
Объединяющий нейрон — необучаемая свёртка с шагом $h > 1$, агрегирующая данные прямоугольной области $h \times h$:

$$y[i,j] = F\big(x[hi,hj],\ldots,x[hi+h-1,hj+h-1]\big),$$

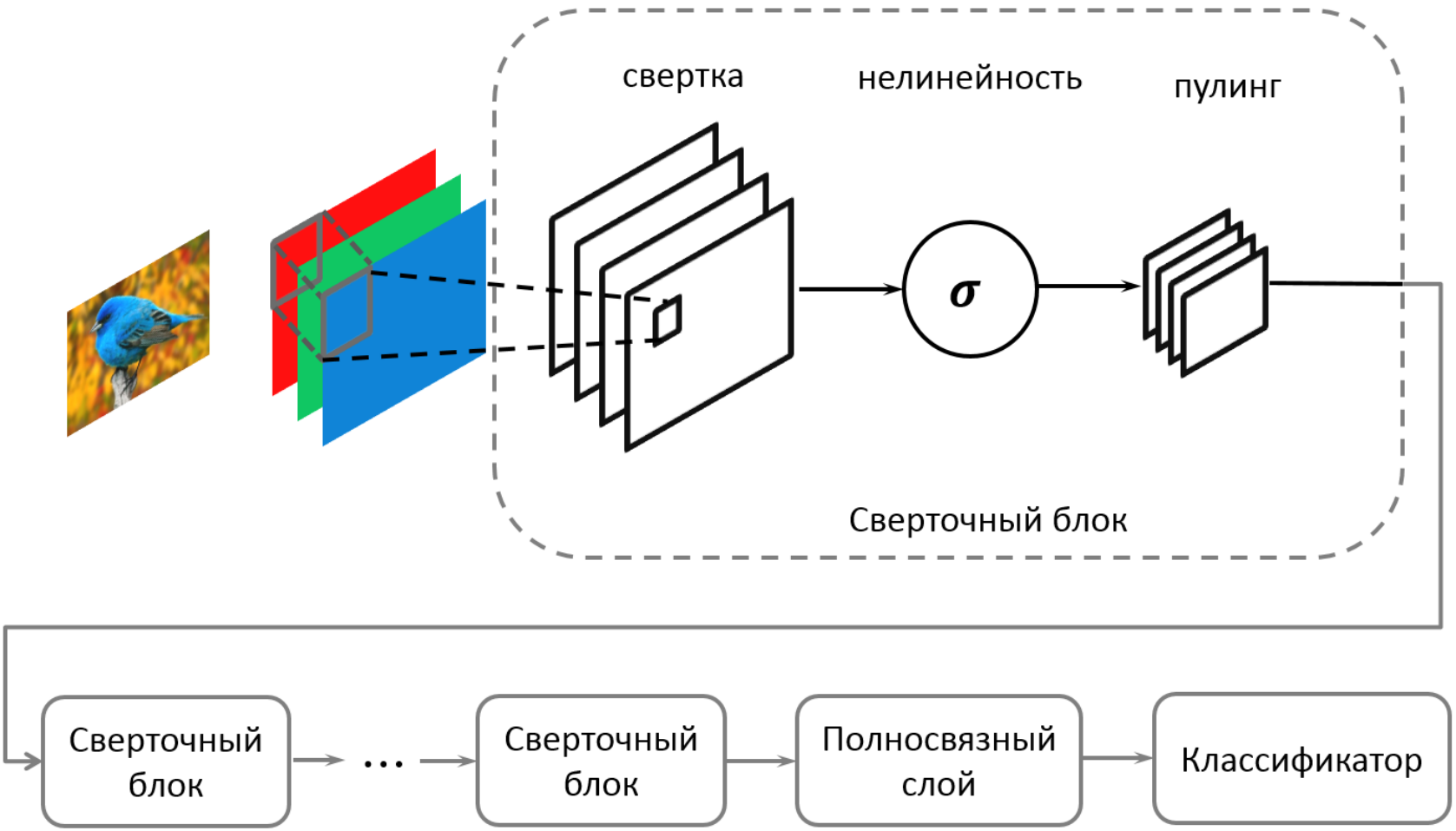
где F — агрегирующая функция: max, average и т.п.

Размер изображения сокращается в h раз по ширине и по высоте

Если нейрон предыдущего слоя отвечал за детектирование некоторого элемента, то max-pooling позволяет обнаружить этот элемент в любом месте из h-окрестности (инвариантность детектирования относительно сдвигов)



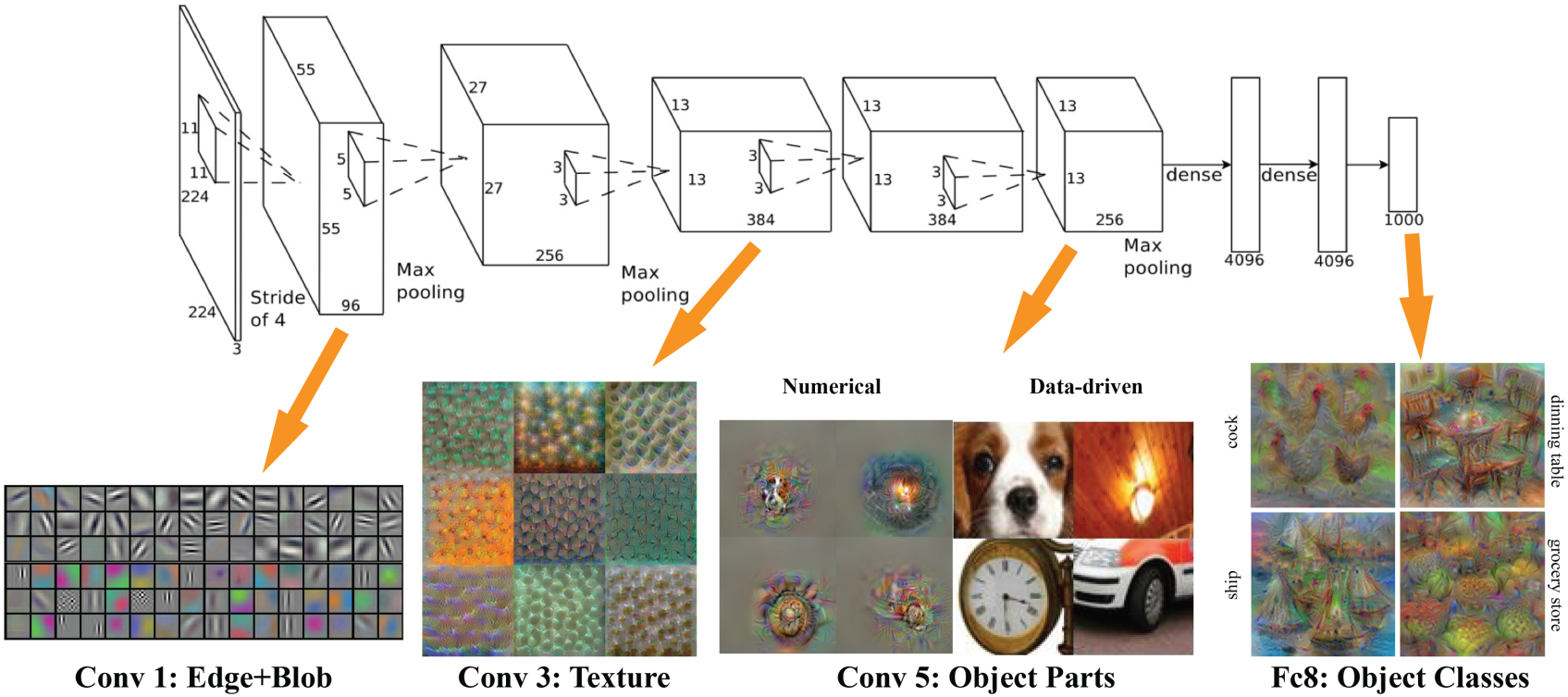
Стандартная схема сверточной сети (Convolutional NN)



Yann LeCun et al. Learning algorithms for classification: A comparison on handwritten digit recognition. 1995

Свёрточная сеть обучается извлечению признаков

Чем выше слой, тем более крупные и сложные элементы изображений он способен распознавать



Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. 2012.

ImageNet — большая выборка размеченных изображений

2,5 года на разметку (2008/07–2010/04)

14 197 122 изображений

21 841 классов объектов

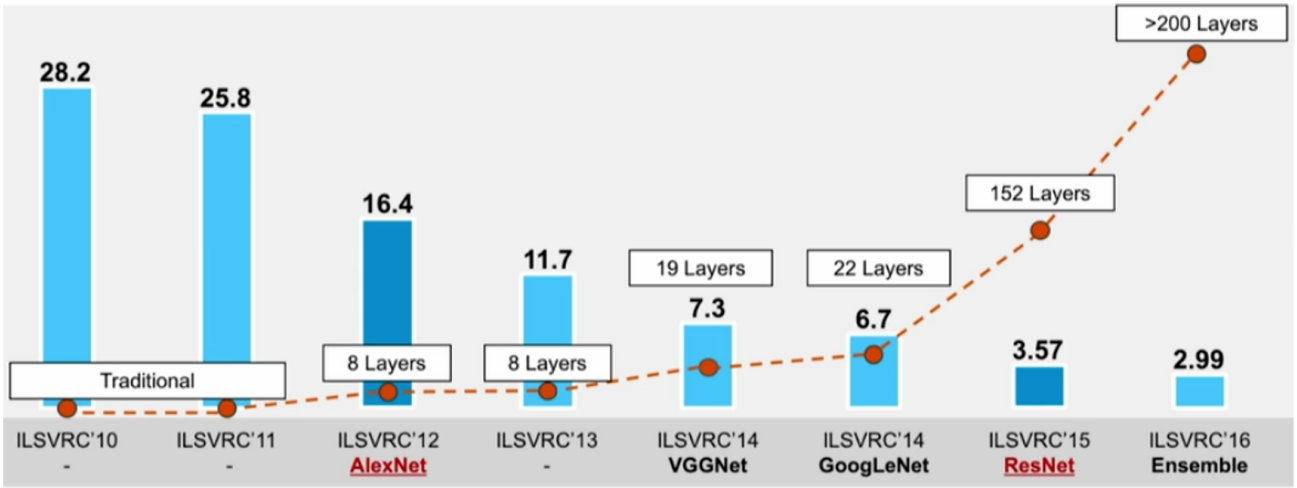
3 разметки каждого изображения

https://image-net.org

Li Fei-Fei et al. ImageNet: A large-scale hierarchical image database. 2009.

Li Fei-Fei et al. Construction and analysis of a large scale image ontology. 2009.

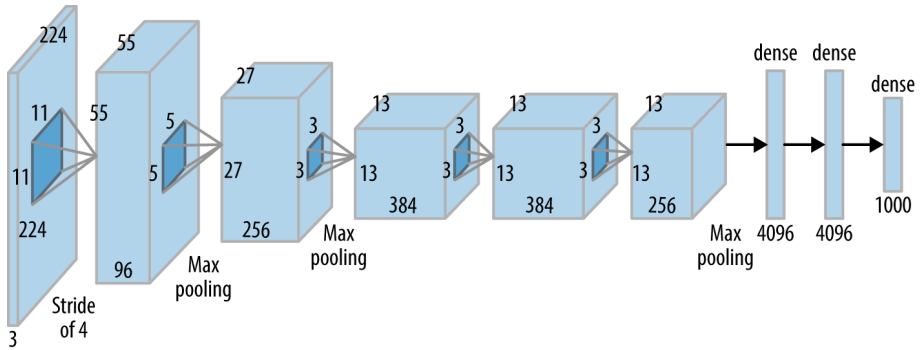
Глубокие свёрточные сети для классификации изображений



Старт в 2009. Человеческий уровень ошибок 5% пройден в 2015

Свёрточная сеть **AlexNet**:

+ ReLU + Dropout
+ 60M параметров
+ пополнение выборки
+ подбор размеров слоёв
+ GPU

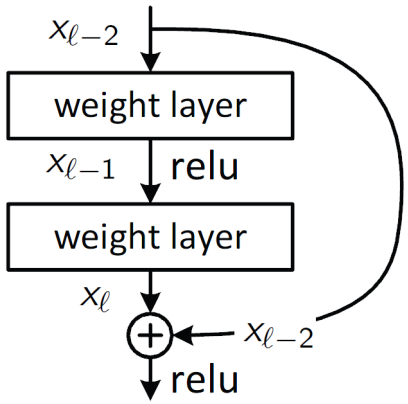


Krizhevsky A. et al. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. 2012.

ResNet: остаточная нейронная сеть (Residual NN)

Сквозная связь (skip connection) слоя l с предшествующим слоем $l-d$:

$$x_l = \sigma(Wx_{l-1}) + x_{l-d}$$



Слой l выучивает не новое векторное представление x_l, а его приращение $x_l - x_{l-d}$

- Приращения более устойчивы $\Rightarrow$ улучшается сходимость
- Появляется возможность увеличивать число слоёв
- Обобщение — Highway Networks:

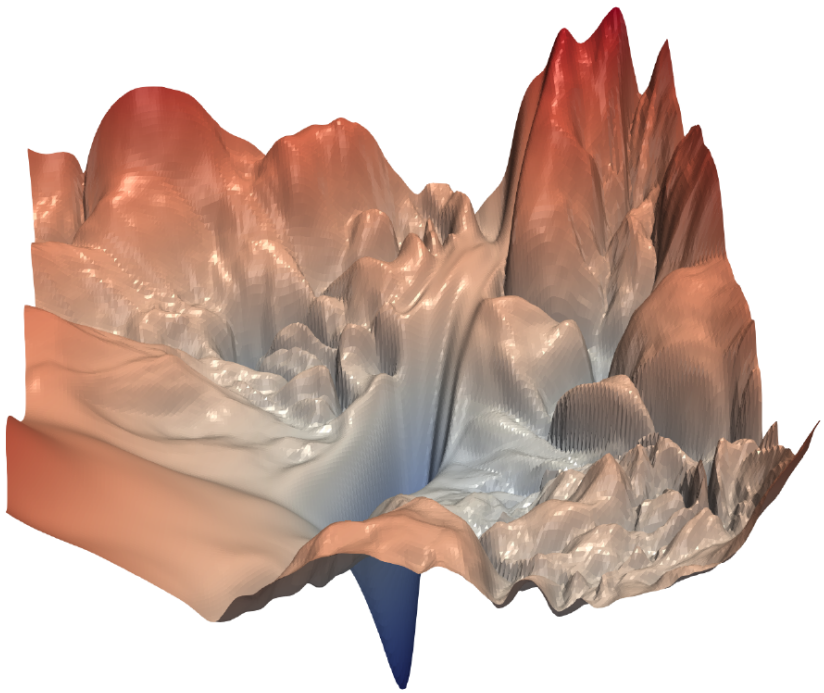
$$x_l = \sigma(Wx_{l-1})\underbrace{\tau(W'x_{l-1})}_{\text{transform gate}} + x_{l-d}\underbrace{\big(1-\tau(W'x_{l-1})\big)}_{\text{carry gate}}$$

Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun. Deep Residual Learning for Image Recognition. 2015

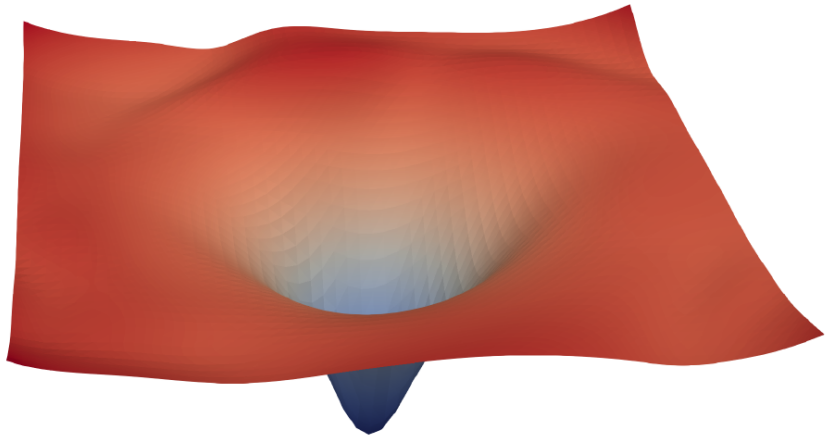
R.K.Srivastava, K.Greff, J.Schmidhuber. Highway Networks. 2015

ResNet: визуализация оптимизационного критерия

Сквозные связи (skip connection) упрощают оптимизируемый критерий, устраняя локальные экстремумы и седловые точки:



without skip connections



with skip connections

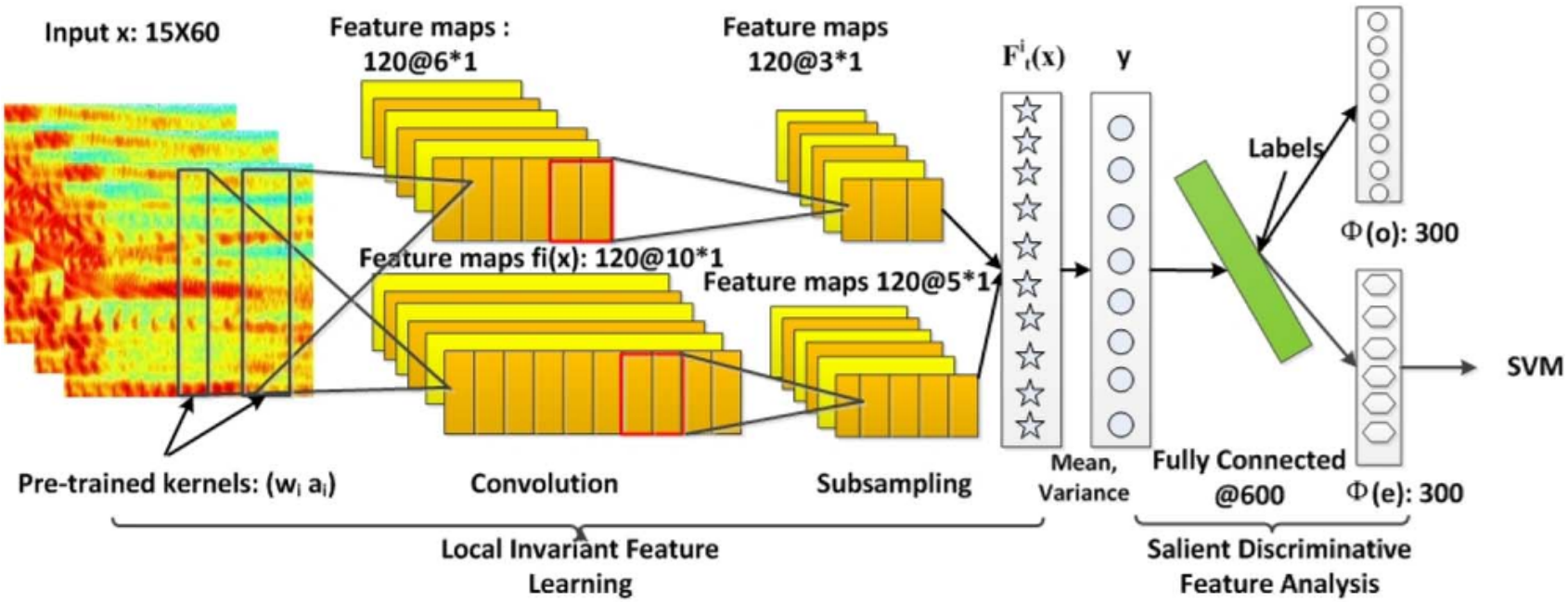
Hao Li et al. Visualizing the Loss Landscape of Neural Nets. 2018

Часто используемые приёмы в CNN

- функции активации без горизонтальных асимптот, типа ReLU
- адаптивные градиентные методы
- остаточные нейронные сети (Residual NN)
- dropout (используется всё реже, считается устаревшим)
- batch normalization
- подбор числа слоёв и их размеров
- dataset augmentation — пополнение выборки с помощью преобразований, сохраняющих класс объекта

Приложение: распознавание речевых сигналов

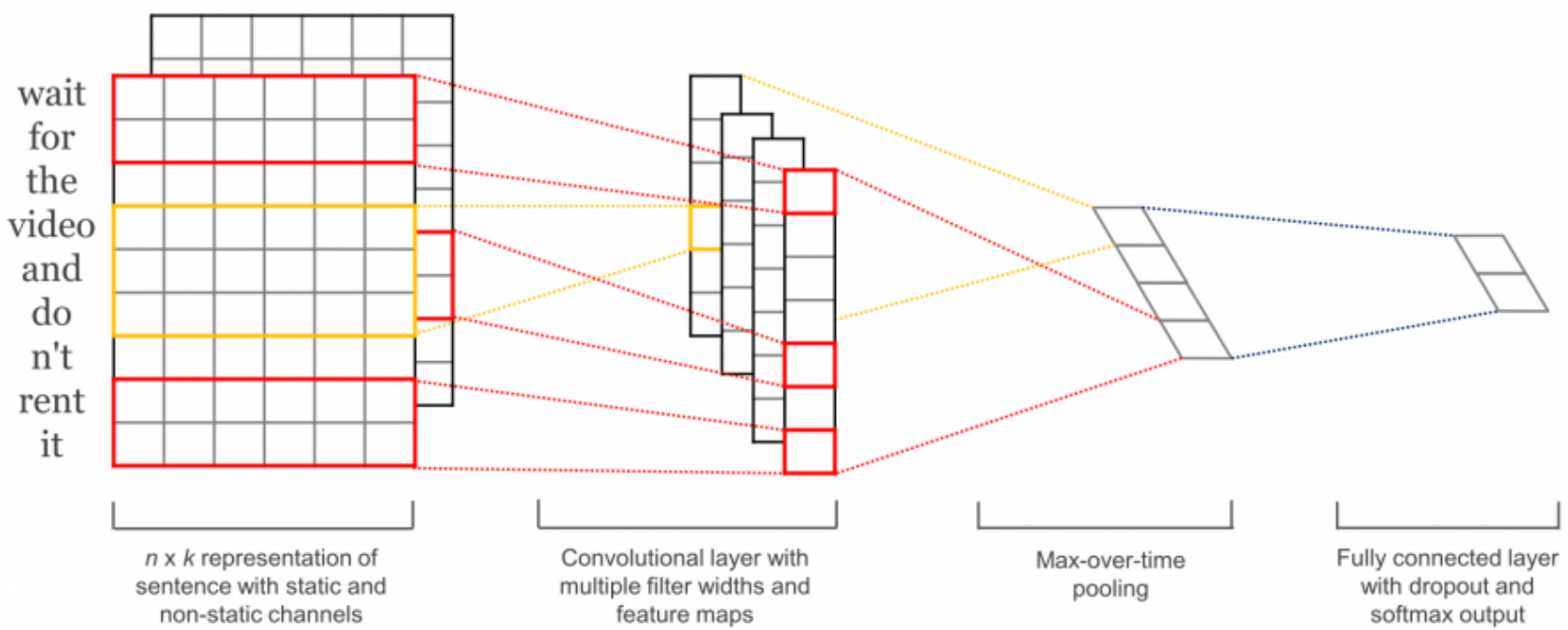
Последовательные фрагменты сигнала представляются векторами спектрального разложения



Qirong Mao, Ming Dong, Zhengwei Huang, Yongzhao Zhan. Learning salient features for speech emotion recognition using convolutional neural networks. 2014.

Приложение: классификация предложений в тексте

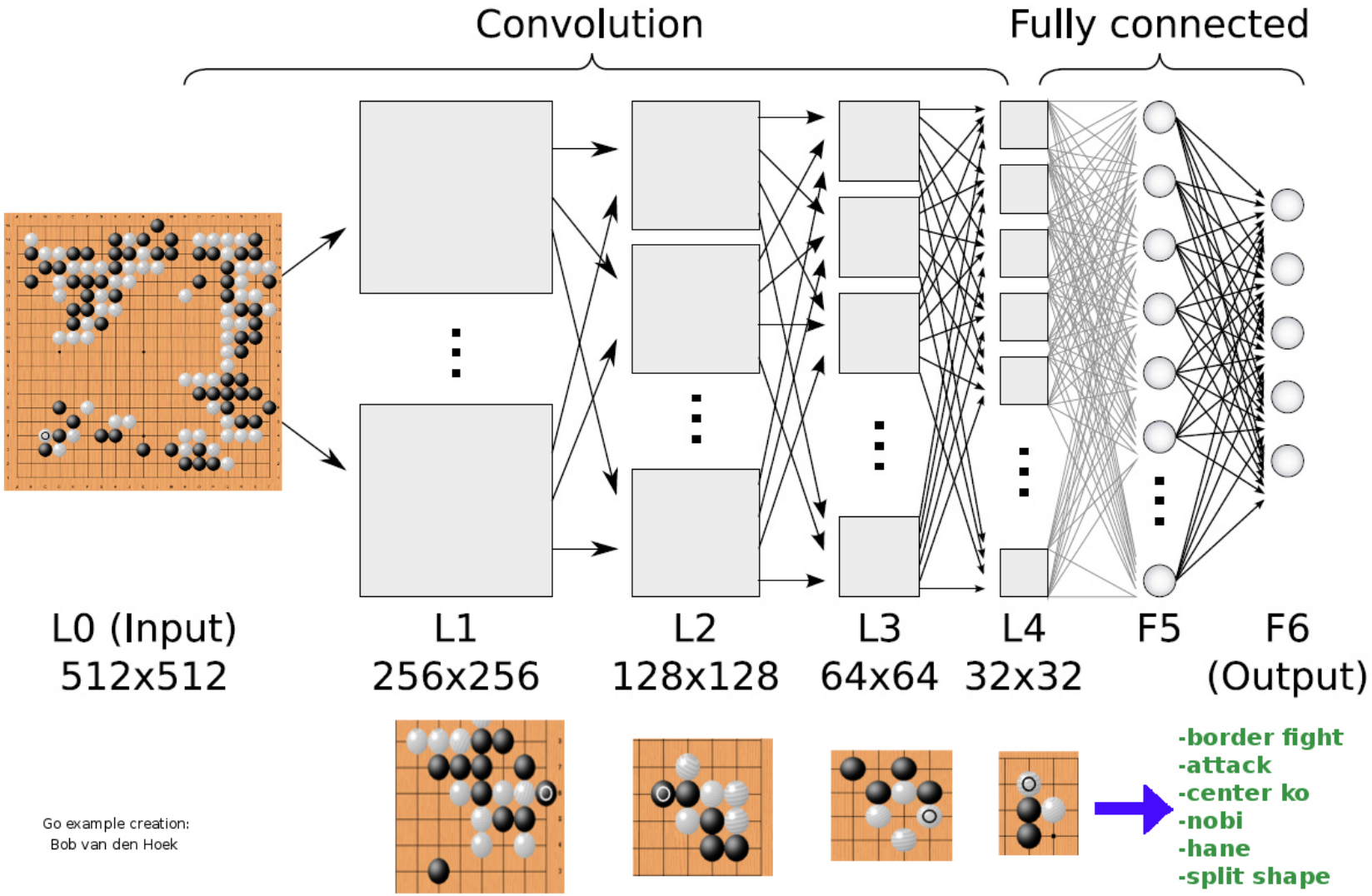
Последовательные слова в тексте представляются векторами с помощью векторных представлений (word2vec и др.)



Yoon Kim. Convolutional neural networks for sentence classification. 2014

Yann N. Dauphin et al. Language modeling with gated convolutional networks, 2017.

Приложение: принятие решений в логических играх



David Silver et al. (DeepMind) Mastering the game of Go without human knowledge. 2017

Задачи обработки последовательностей

Дано: $(x_t)_{t=0}^T$ — последовательность входных векторов

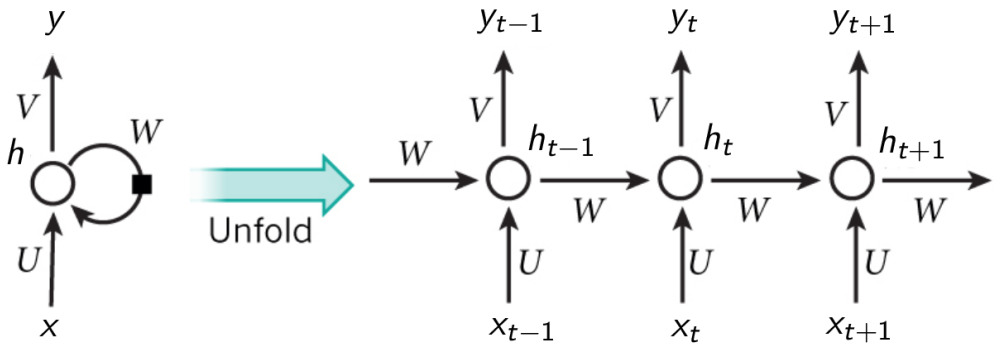
Найти модель с матрицами параметров W, U, V, вычисляющую

h_t — вектор скрытого состояния, $t = 0, \ldots, T$;

y_t — выходной вектор (в некоторых приложениях $y_t \equiv h_t$).

Двухслойная сеть и её развёрнутое представление (unfolding):

$$h_t = \sigma_h(Ux_t + Wh_{t-1})$$
$$y_t = \sigma_y(Vh_t)$$



Критерий обучения рекуррентной сети:

$$\sum_{t=0}^{T} \mathscr{L}_t\big(y_t(U, V, W)\big) \to \min_{U,V,W}$$

$\mathscr{L}_t\big(y_t(U, V, W)\big)$ — потеря от предсказания y_t в момент t

Приложения рекуррентных нейронных сетей

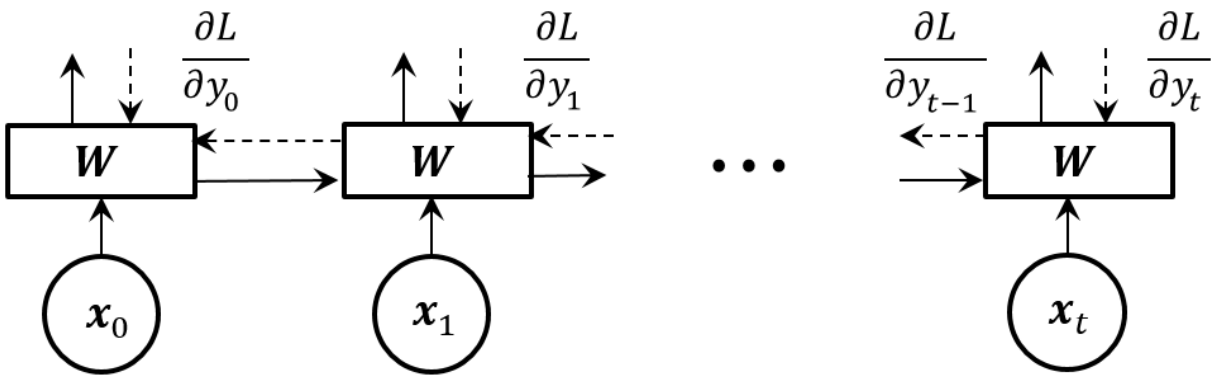
- Прогнозирование временных рядов
- Управление технологическими процессами
- Классификация текстов или их фрагментов
- Анализ тональности документа / предложений / слов
- Машинный перевод
- Распознавание речи
- Синтез речи
- Синтез ответов на вопросы, разговорный интеллект
- Генерация подписей к изображениям
- Генерация рукописного текста
- Интерпретация генома и другие задачи биоинформатики

Andrej Karpathy. The unreasonable effectiveness of recurrent neural networks. 2015.

Обучение рекуррентных сетей

Специальный вариант обратного распространения ошибок, Backpropagation Through Time (BPTT)

$$\frac{\partial \mathscr{L}_t}{\partial W} = \frac{\partial \mathscr{L}_t}{\partial y_t}\frac{\partial y_t}{\partial h_t}\sum_{k=0}^{t}\left(\prod_{i=k+1}^{t}\frac{\partial h_i}{\partial h_{i-1}}\right)\frac{\partial h_k}{\partial W}$$

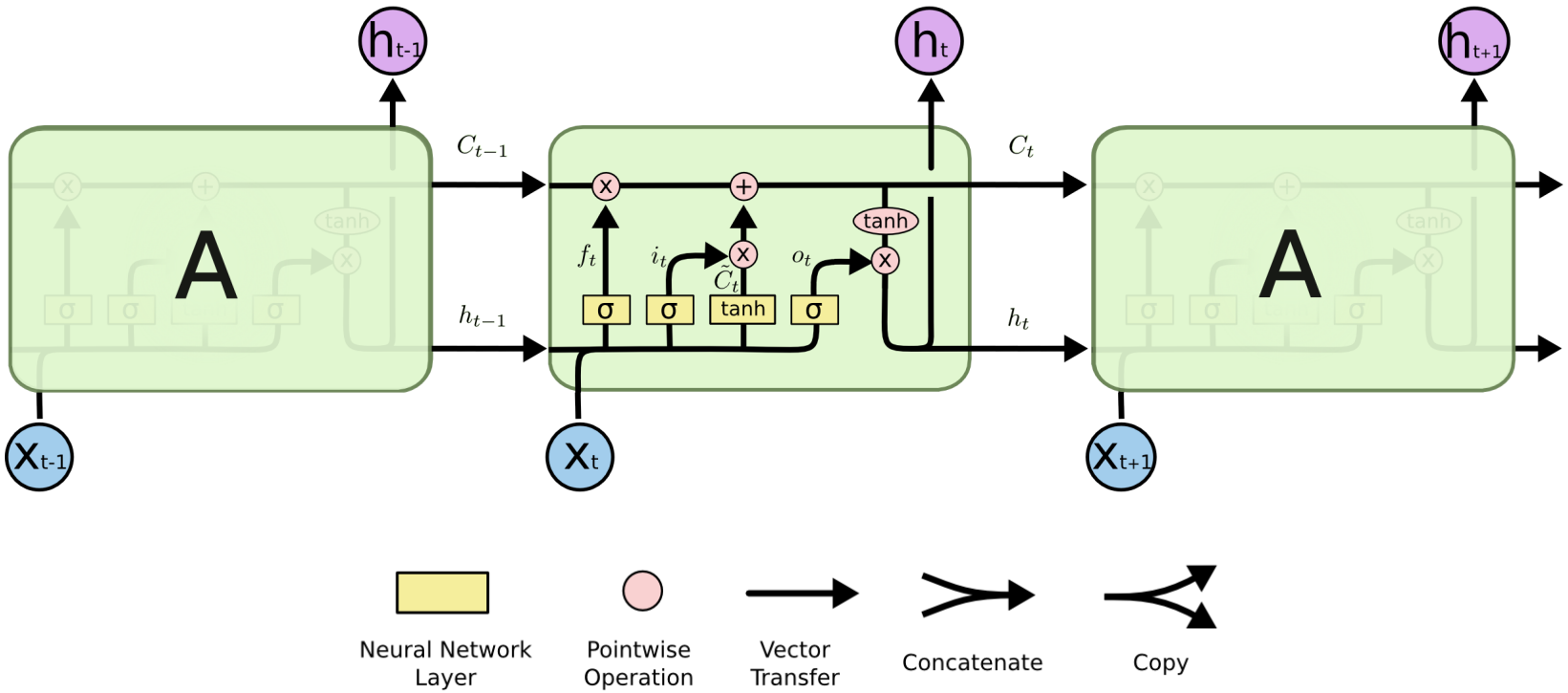


Для предотвращения затухания и взрыва градиентов: $\frac{\partial h_i}{\partial h_{i-1}} \to 1$

D.Rumelhart, G.Hinton, R.Williams. Learning internal representations by error propagation, 1985.

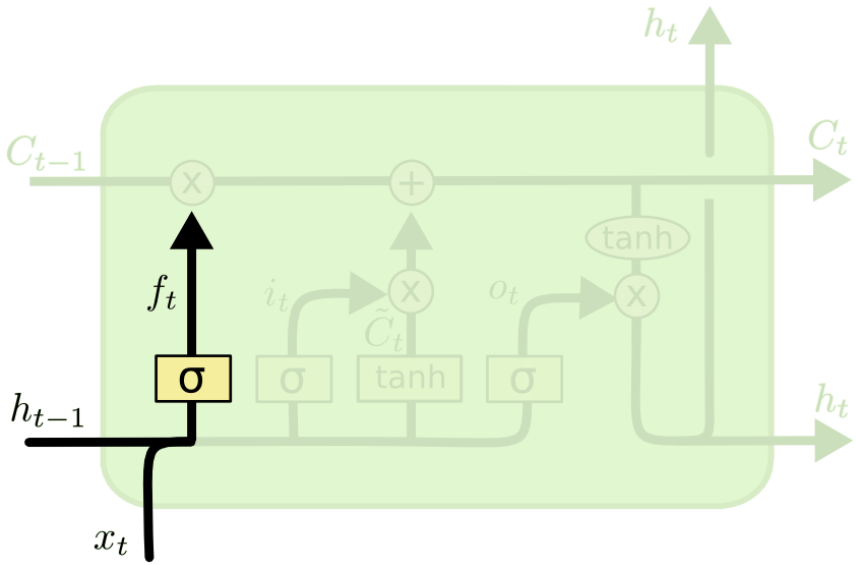
Сети долгой кратковременной памяти (long short-term memory)

Мотивация LSTM: сеть должна долго помнить предысторию, т.е. контекст, какой именно — сеть должна выучить сама.
Вводится C_t — вектор долгого контекста сети в момент t.



Hochreiter S., Schmidhuber J. Neural Computation, 9(8), 1997
Greff K., Schmidhuber J. `http://arxiv.org/pdf/1503.04069.pdf`, 2015

Сети долгой кратковременной памяти (long short-term memory)



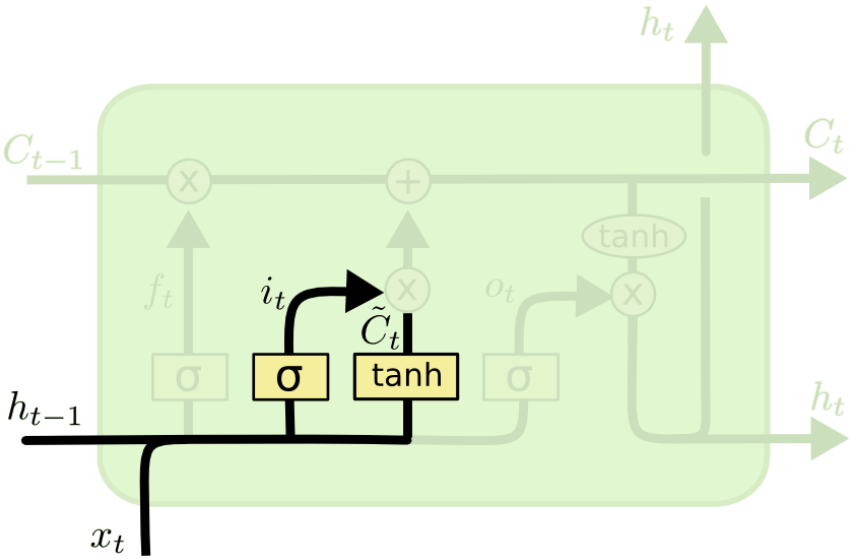
$$f_t = \sigma\big(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f\big)$$
$$i_t = \sigma\big(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i\big)$$
$$o_t = \sigma\big(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o\big)$$
$$\tilde{C}_t = \text{th}\big(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c\big)$$
$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t$$
$$h_t = o_t \odot \text{th}(C_t)$$

Фильтр забывания (forget gate) с параметрами W_f, b_f решает, какие координаты вектора контекста C_{t-1} надо запомнить.

$[h_{t-1}, x_t]$ — конкатенация векторов;
$\sigma\colon \mathbb{R} \to (0,1)$ — сигмоидная функция; $\text{th}\colon \mathbb{R} \to (-1,1)$;
$\odot$ — операция покомпонентного перемножения векторов.

Christopher Olah. `http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs`

Сети долгой кратковременной памяти (long short-term memory)



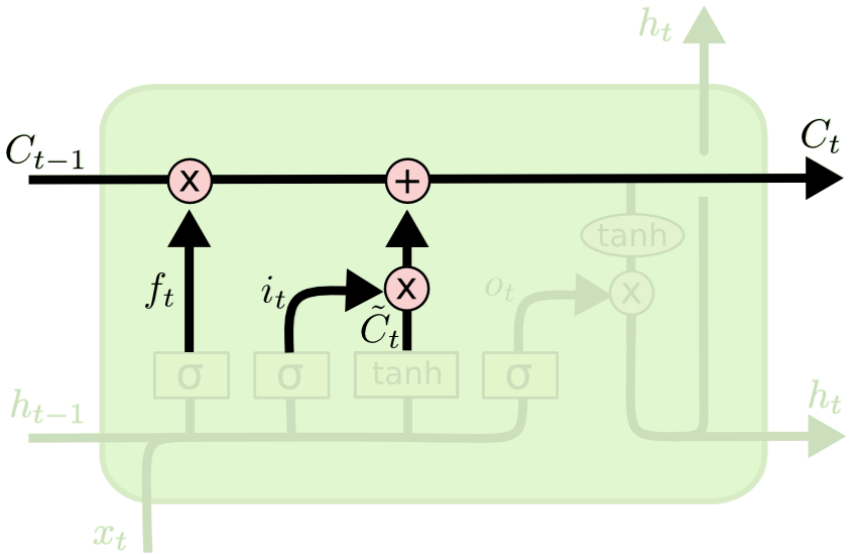
$$f_t = \sigma\big(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f\big)$$
$$i_t = \sigma\big(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i\big)$$
$$o_t = \sigma\big(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o\big)$$
$$\tilde{C}_t = \text{th}\big(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c\big)$$
$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t$$
$$h_t = o_t \odot \text{th}(C_t)$$

Фильтр входных данных (input gate) с параметрами W_i, b_i решает, какие координаты вектора контекста надо обновить.

Модель нового контекста с параметрами W_c, b_c формирует вектор $\tilde{C}_t$ с информацией о новом контексте.

Christopher Olah. `http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs`

Сети долгой кратковременной памяти (long short-term memory)



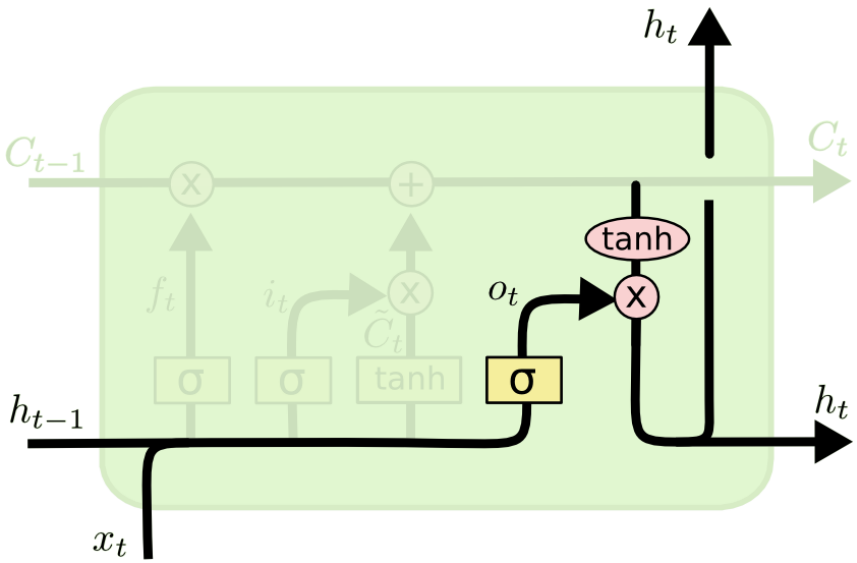
$$f_t = \sigma\big(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f\big)$$
$$i_t = \sigma\big(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i\big)$$
$$o_t = \sigma\big(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o\big)$$
$$\tilde{C}_t = \text{th}\big(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c\big)$$
$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t$$
$$h_t = o_t \odot \text{th}(C_t)$$

Новый вектор контекста C_t формируется как смесь старого вектора контекста C_{t-1} с фильтром f_t и нового вектора контекста $\tilde{C}_t$ с фильтром i_t.

Настраиваемых параметров нет.

Christopher Olah. http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs

Сети долгой кратковременной памяти (long short-term memory)



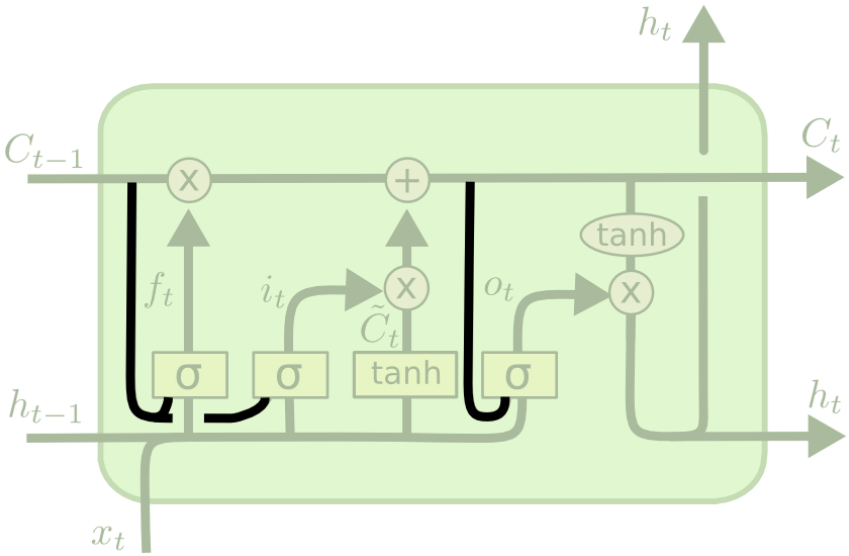
$$f_t = \sigma\big(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f\big)$$
$$i_t = \sigma\big(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i\big)$$
$$o_t = \sigma\big(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o\big)$$
$$\tilde{C}_t = \text{th}\big(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c\big)$$
$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t$$
$$h_t = o_t \odot \text{th}(C_t)$$

Фильтр выходных данных (output gate) с параметрами W_o, b_o решает, какие координаты вектора контекста C_t пойдут на выход.

Выходной сигнал h_t формируется из вектора контекста C_t с помощью нелинейного преобразования th и фильтра o_t.

Christopher Olah. `http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs`

Вариант LSTM с «замочными скважинами» (peepholes)



$$f_t = \sigma\big(W_f \cdot [C_{t-1}, h_{t-1}, x_t] + b_f\big)$$
$$i_t = \sigma\big(W_i \cdot [C_{t-1}, h_{t-1}, x_t] + b_i\big)$$
$$\tilde{C}_t = \mathrm{th}\big(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c\big)$$
$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t$$
$$o_t = \sigma\big(W_o \cdot [C_t, h_{t-1}, x_t] + b_o\big)$$
$$h_t = o_t \odot \mathrm{th}(C_t)$$

Все фильтры «подглядывают» вектор контекста C_{t-1} или C_t.

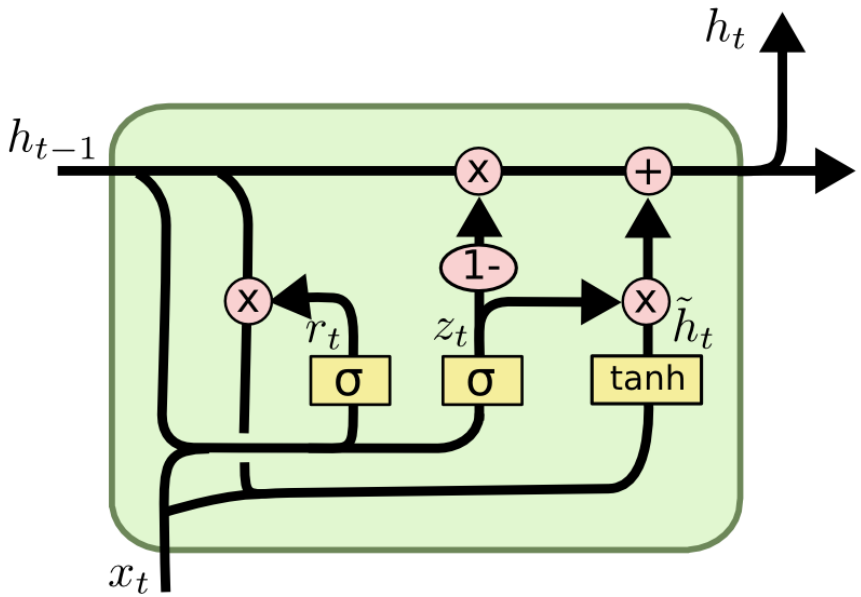
Увеличивается число параметров модели.

Увеличивается число слоёв — с трёх до четырёх.

Замочную скважину можно использовать не для всех фильтров.

Gers F. A., Schmidhuber J. Recurrent Nets that Time and Count. 2000.

Упрощение LSTM: Gated Recurrent Unit (GRU)



$$z_t = \sigma\big(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_z\big)$$
$$r_t = \sigma\big(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_r\big)$$
$$\tilde{h}_t = \text{th}\big(W_h \cdot [r_t \odot h_{t-1}, x_t] + b_h\big)$$
$$h_t = (1 - z_t) \odot h_{t-1} + z_t \odot \tilde{h}_t$$

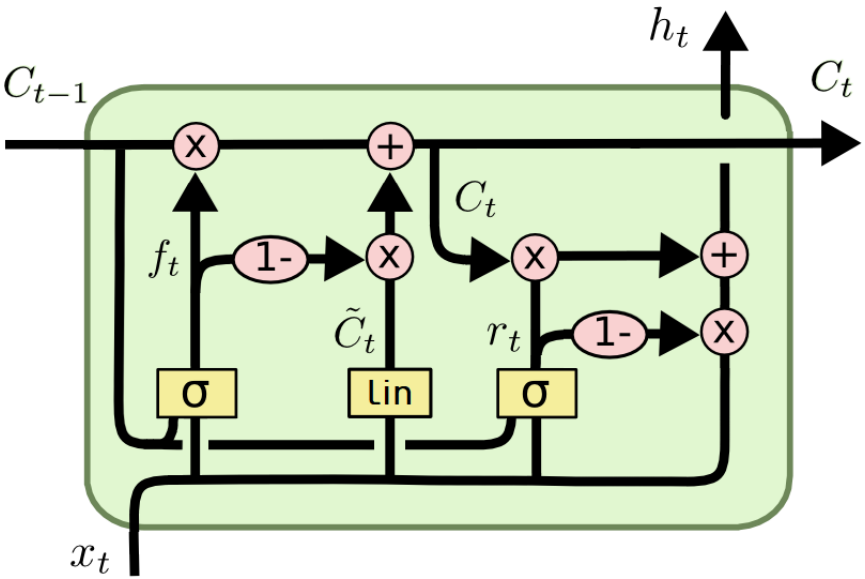
Используется только состояние h_t, вектор C_t не вводится.

Фильтр обновления (update gate) вместо входного и забывающего.

Фильтр перезагрузки (reset gate) r_t решает, какую часть памяти нужно перенести дальше с прошлого шага.

Cho K. On the properties of neural machine translation: encoder-decoder approaches. 2014.

Упрощение LSTM: Simple Recurrent Unit (SRU)



$$f_t = \sigma\big(W_f x_t + v_f \odot C_{t-1} + b_f\big)$$
$$r_t = \sigma\big(W_r x_t + v_r \odot C_{t-1} + b_r\big)$$
$$\tilde{C}_t = W_C x_t$$
$$C_t = f_t \odot C_{t-1} + (1 - f_t) \odot \tilde{C}_t$$
$$h_t = r_t \odot C_t + (1 - r_t) \odot x_t$$

С предыдущего шага передаётся только вектор C_{t-1}.
Два фильтра: забывания (forget gate) и перезагрузки (reset gate).

Сквозные связи (skip connections): x_t передаётся на все слои.

Облегчённая рекуррентность: $v_f \odot C_{t-1}$ вместо $W_f C_{t-1}$,
позволяет вычислять координаты векторов параллельно.

Tao Lei et al. Simple recurrent units for highly parallelizable recurrence. 2018.

Резюме

- *Свёрточные сети:* постепенная векторизация сложно структурированных данных, обучаемая совместно с основной предсказательной моделью
- *Рекуррентные сети:* обучаемые преобразования входной последовательности в выходную (seq2seq)
- Приёмы, сделавшие возможным глубокое обучение:
  - продвинутые градиентные методы ускоряют сходимость
  - регуляризации и dropout предотвращают переобучение
  - skip connections увеличивает глубину без переобучения
  - batch norm сокращает вычислительные погрешности
  - augmentation обеспечивает устойчивость к искажениям
  - ReLU предотвращает затухание и взрыв градиентов
  - свёртки и разреживание сокращают число параметров
- Переход от feature engineering к architecture engineering
- Подбор архитектуры и гиперпараметров всё ещё искусство