Введение в глубокое обучение (deep learning)

Н.Ю. Золотых ИТММ, ННГУ им. Н.И. Лобачевского www.uic.unn.ru/~zny

Что такое машинное обучение (machine learning)?

Идея обучающихся машин (learning machines) принадлежит А. Тюрингу

[Turing A. Computing Machinery and Intelligence // Mind. 1950. V. 59. P. 433–460; перепечатано: Can the Machine Think? // World of Mathematics. Simon and Schuster, N.Y. 1956. V. 4. P. 2099–2123; рус. перев.: Тьюринг А. М. Может ли машина мыслить? // М.: Физматлит, 1960]

Искусственный интеллект (Al – artificial intelligence)

Искусственный интеллект – компьютер/программа, решающая интеллектуальные задачи, т.е. выполнение которых традиционно считалось прерогативой человека.

Сильный искусственный интеллект (strong AI) – компьютер/программа, способная решать все интеллектуальные задачи.

Слабый искусственный интеллект (weak AI) – компьютер/программа, способная решать конкретный класс интеллектуальных задач.

Очень краткая история ML (и AI)

```
< 1950-е гг. Статистические методы
```

1950-е гг. Начало (шашки Самуэля, персептроны, логический вывод, ...)

1960-е гг. Байесовские методы

1970-е гг. "Зима" AI

1980-е гг. Backpropagation, сверточные сети и др. - "оттепель"

1990-е гг. Машина опорных векторов и др.

(смещение от дедуктивного обучения к индуктивному)

2000-е гг. Ансамбли деревьев решений, "ядерные" методы

2010-е гг. Глубокое обучение (вторая "весна" AI)

Машинное обучение сегодня

Причины "Второй весны АІ":

- Новые алгоритмы (deep learning глубокое обучение)
- Мощные компьютеры
- Много данных (Big Data)

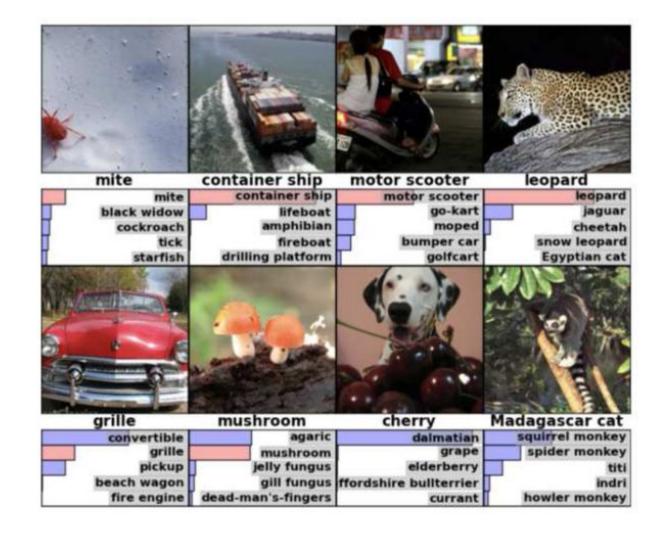
Достижения:

- ...
- Машинное обучение стало технологией

ImageNet

Прорыв 2012: ImageNet ILSVRC-2012 (около 1 млн. изображений, 1000 классов).

Ошибку удалось понизить с 26% до 15% (сейчас еще меньше) – A.Krizhevsky, I. Sutskever, G. E.Hinton



AlphaGo (Google DeepMind)

В 2015 г. – победа над чемпионом Европы Фань Хуэем

В 2016 г – победа над чемпионом мира Ли Седолем



Развитие:

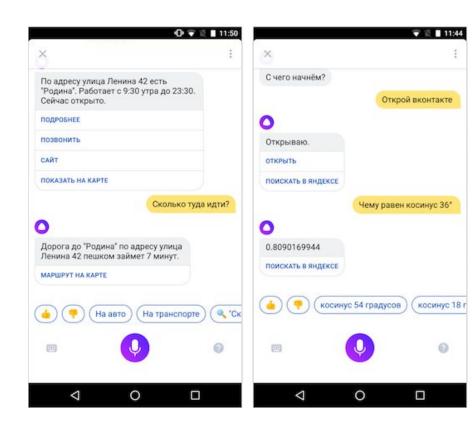
- AlphaGo (использовалась база из 10000 партий + игры с собой)
- AlphaGo Zero (без априорных знаний)
- AlphaZero (Го, Сеги, шахматы, ...) 5000 ТРU 280 Тфлоп каждый

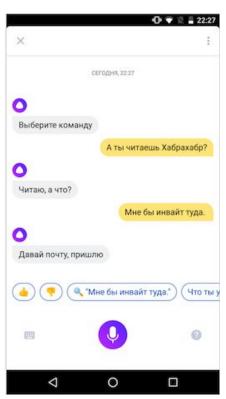
Boston Dynamics

BigDog, CHEETAH, LittleDog, RiSE, PETMAN, Atlas, Handle, SpotMini, ...



Персональные помощники





Беспилотные автомобили

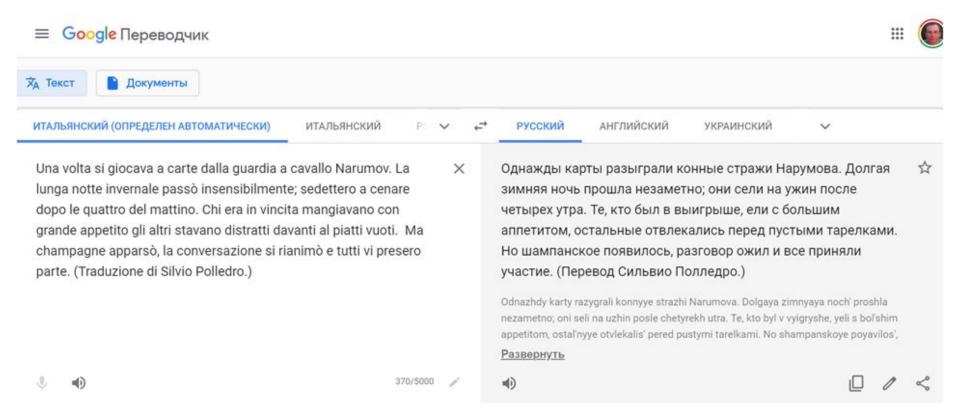








Компьютерный перевод



Основные направления ML

- Обучение с учителем:
 - классификация
 - о регрессия
 - восстановление временных рядов (например, seq2seq)
 - генеративные модели
 - 0 ...
- Обучение без учителя
- Обучение с подкреплением
- ...

Обучение с учителем

- Множество X объекты, наблюдения, примеры, ситуации, входы (samples) пространство признаков
- Множество Y ответы, отклики, «метки», выходы (responses)
- Имеется некоторая зависимость (детерминированная или вероятностная), позволяющая по $x \in X$ предсказать $y \in Y$.
- Зависимость известна только на объектах из обучающей выборки

Задача обучения с учителем: восстановить (аппроксимировать) зависимость, т. е. построить функцию (решающее правило) $f: X \to Y$, по новым объектам $x \in X$ предсказывающую $y \in Y$: y = f(x)

Важно: нужно уметь предсказывать у не только для объектов из обучающей выборки, но и для новых объектов!

- Медицинская диагностика
 Симптомы → заболевание
- Фильтрация спама
 Письмо → спам/не спам
- Рекомендательные системы
 Прошлые покупки → рекомендация
- Компьютерное зрение
 Изображение → что изображено
- Распознавание текста
 Рукописный текст → текст в машинном коде
- NLP
 Текст на русском языке → перевод на английский
- Распознавание речи
 Аудиозапись речи → текст

Каким бывает х?

Каждый объект х должен как-то кодироваться.

Самый распространенный способ: х представлен как вектор (набор) из *d* признаков

Признак может быть

- номинальным (категориальным)
- количественным (числовым):
 - о вещественный
 - дискретный
- ...

Иногда *х* сложно (или неразумно) задать как вектор признаков (фиксированной длины).

Например, х – это временной ряд, дерево, ...

Каким бывает у?

- номинальный задача классификации
- количественный задача регрессии
- временной ряд задача предсказания временного ряда
- ...

Признаковые описания объектов обучающей выборки обычно записывают в таблицу:

$$(\mathbf{X} \mid \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \dots & x_j^{(1)} & \dots & x_d^{(1)} & y^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \dots & x_j^{(2)} & \dots & x_d^{(2)} & y^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ x_1^{(i)} & x_2^{(i)} & \dots & x_j^{(i)} & \dots & x_d^{(i)} & y^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ x_1^{(N)} & x_2^{(N)} & \dots & x_j^{(N)} & \dots & x_d^{(N)} & y^{(N)} \end{pmatrix}$$

*i-*я строка соответствует *i-*му объекту в обучающей выборке *j-*й столбец – *j-*му признаку

Некоторые методы ML

- Метод наименьших квадратов
- Линейный и квадратичный дискриминантный анализ
- Логистическая регрессия
- Метод к ближайших соседей
- Наивный байесовский классификатор
- Машина опорных векторов (SVM)
- Деревья решений (C4.5, CART и др.)
- Ансамбли решающих функций (бустинг, баггинг и т. п.)
- Нейронные сети (включая глубокое обучение)
- ...



- "The Most Popular Python Data Science Platform"
- https://www.anaconda.com/download/

Anaconda - это дистрибутив Питона, включающий в себя Jupiter Notebook, некоторое количество нужных библиотек, spyder и др.

Необходимые библиотеки

- Numpy векторы, матрица, линейная алгебра
- Scipy другие численные методы
- Pandas манипуляция таблицами (dataframe) и временными рядами (series)
- Scikit-Learn методы машинного обучения

Google Colaboratory

Возможность все это запустить удаленно https://colab.research.google.com

Пример 1

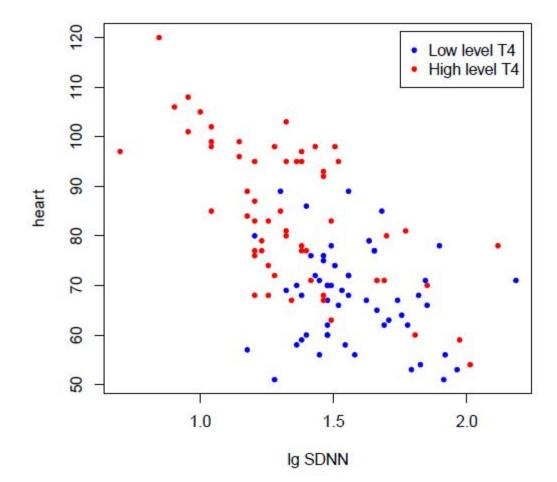
Имеются данные о 114 лицах с заболеванием щитовидной железы.

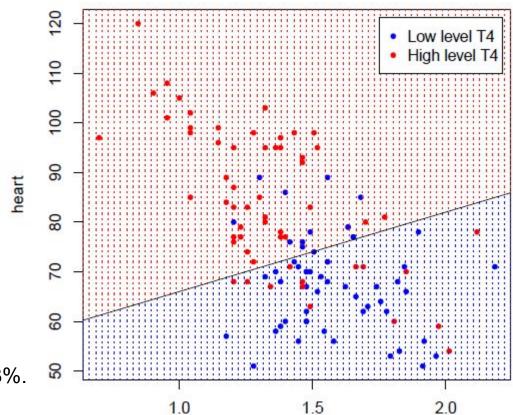
- У 61 повышенный уровень свободного гормона Т4,
- у 53 уровень гормона в норме.

Для каждого пациента известны следующие показатели:

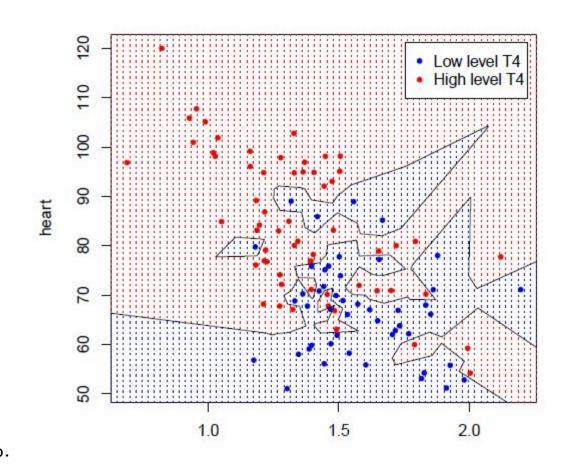
- x1 = heart частота сердечных сокращений (пульс),
- x2 = lg SDNN логарифм стандартного отклонение длительности интервалов между синусовыми сокращениями сердца.

Можно ли научиться предсказывать уровень свободного T4 по heart и SDNN?

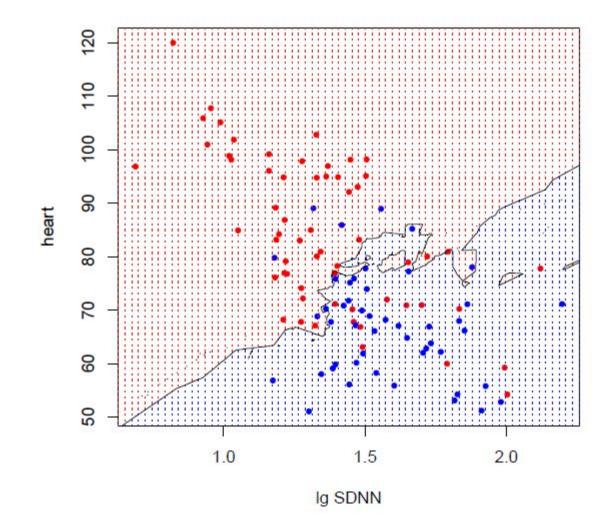




16 · Ig SDNN – heart + 50 = 0 Ошибка на обучающей выборке 23%. Можно ли ее сделать меньше?



Метод ближайшего соседа (с масштабированием) Ошибка на обучающей выборке 0%.



Метод 15 ближайших соседей

Переобучение и недообучение

Малая ошибка на обучающей выборке не означает, что мы хорошо классифицируем новые объекты.

Переобучение — решающее правило хорошо решает задачу на обучающей выборке, но плохо предсказывает ответ на новых данных.

Недообучение — решающее правило показывает плохие результаты и на обучающей выборке и на новых данных.

Обучающая и тестовая выборки

- Обучаем модель на тестовой выборке
- Тестируем на тестовой

Train Test

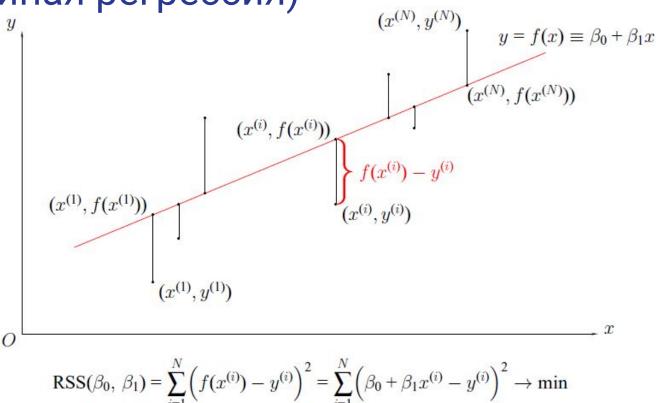
Пример 2

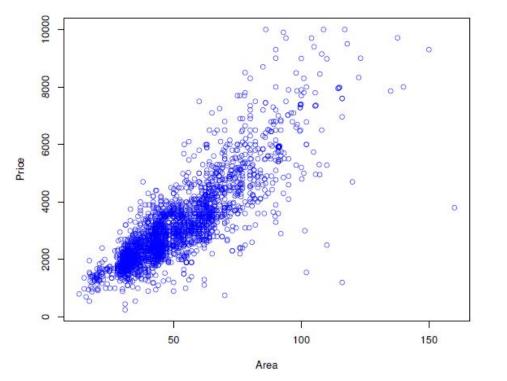
Имеются данные о стоимости 72379 квартир

Требуется научиться предсказывать цену — задача восстановления регрессии

- 1. Date дата
- 2. Lat широта (числовой)
- 3. Lng долгота (числовой)
- 4. Housing тип недвижимости (новостройка, вторичка)
- 5. Floors к-во этажей в доме (числовой)
- 6. House тип строения (кирпичный, панельный, блочный, монолитный, деревянный)
- 7. Rooms количество комнат (студия, 1, 2, . . .)
- 8. Floor № этажа
- 9. Area площадь (числовой)
- 10. Price цена (числовой)

Метод наименьших квадратов (линейная регрессия)





$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$
, $y \equiv \text{Price}$, $x \equiv \text{Area}$

$$\beta_0 = -119.53, \qquad \beta_1 = 64.89$$

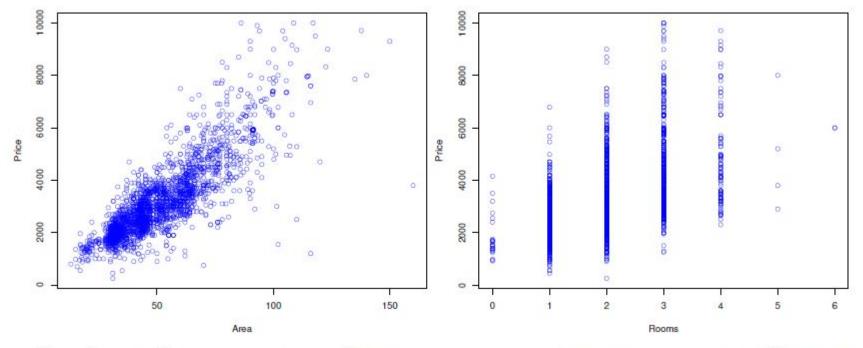
$$y$$

$$(x^{(i)}, y^{(i)})$$

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

$$x_1$$

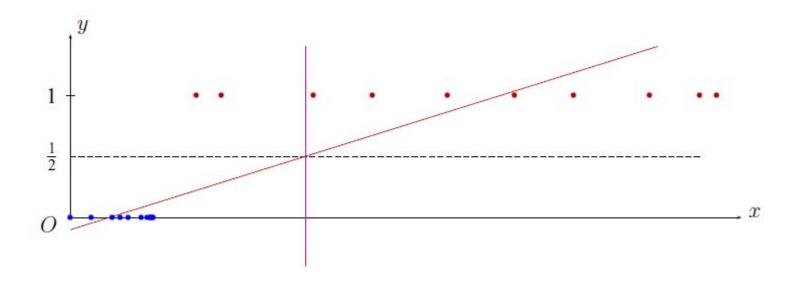
 $\sum_{i=1}^{N} \left(\beta_0 + \sum_{j=1}^{d} \beta_j x_j^{(i)} - y^{(i)} \right)^2 \to \min$



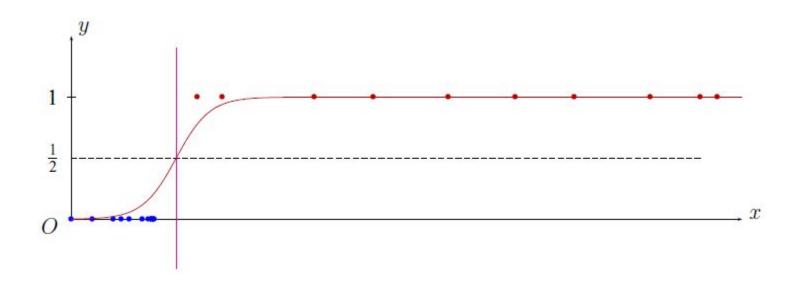
$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2,$$
 $y \equiv \text{Price},$ $x_1 \equiv \text{Area},$ $x_2 \equiv \text{Rooms}$

$$\beta_0 = -79.32$$
, $\beta_1 = 84.15$, $\beta_2 = -542.04$

Метод наименьших квадратов для задачи классификации (?)



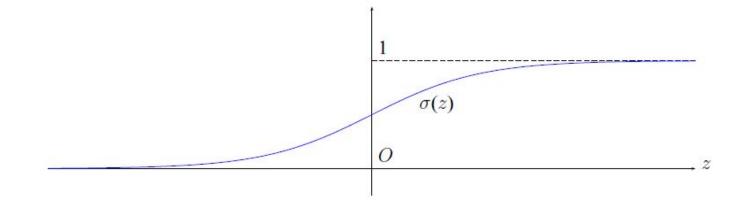
Хочется чего-то такого...



Логистическая регрессия

$$\Pr(Y = 1 \mid X = x) = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_d x_d)}} = \sigma(\beta_0 + \beta^\top x),$$

где
$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$
 — логистическая функция (элементарный сигмоид)



$$\Pr(Y = 1 \mid X = x) = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_d x_d)}} = \sigma(\beta_0 + \beta^\top x), \qquad \sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

$$g = \sigma \left(\beta_0 + \sum_{j=1}^d \beta_j x_j\right) \approx \Pr(Y = 1 \mid X = x)$$

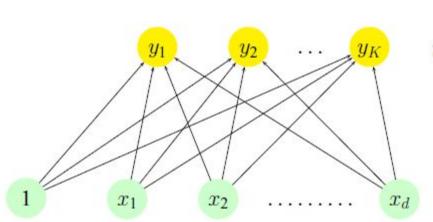
$$\beta_0 \qquad \beta_1 \qquad \beta_2 \qquad \beta_d$$

$$1 \qquad x_1 \qquad x_2 \qquad \dots \qquad x_d$$

Разделяющая поверхность - линейная (гиперплоскость):

$$\Pr(Y = 0 | x) = \Pr(Y = 1 | x) = \frac{1}{2}$$
 \Leftrightarrow $\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_d x_d = 0$

Случай К классов:



$$y_k = \frac{\exp\left(\beta_{k0} + \sum_{j=1}^d \beta_{kj} x_j\right)}{\sum_{\ell=1}^K \exp\left(\beta_{\ell0} + \sum_{j=1}^d \beta_{\ell j} x_j\right)} \approx \Pr(k \mid x)$$

$$(k = 1, 2, \dots, K)$$

(функция softmax)

Как обучать модель?

Минимизируем *кросс-энтропию* (*logloss-*функцию), вычисленную на обучающей выборке

2 класса:
$$L(g(x,\beta),y) = -y \ln g(x,\beta) - (1-y) \ln (1-g(x,\beta))$$

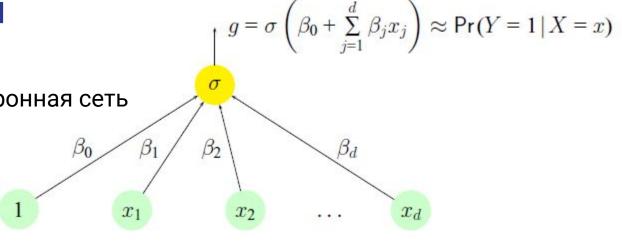
$$\widehat{R}(\beta) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(y^{(i)} \ln g(x^{(i)}, \beta) + (1 - y^{(i)}) \ln \left(1 - g(x^{(i)}, \beta) \right) \right)$$

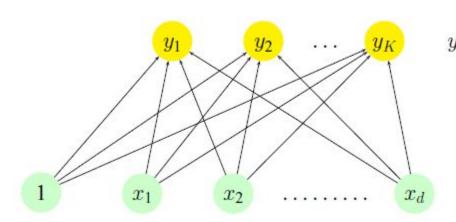
K классов:
$$L\big(g(x,\beta),y\big) = \sum_{k=1}^K I(y=k) \ln g(x,\beta)$$

$$\widehat{R}(\beta) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} I(y^{(i)} = k) \ln g(x^{(i)}, \beta)$$

Нейронные сети

Логистическая регрессия это уже однослойная* нейронная сеть

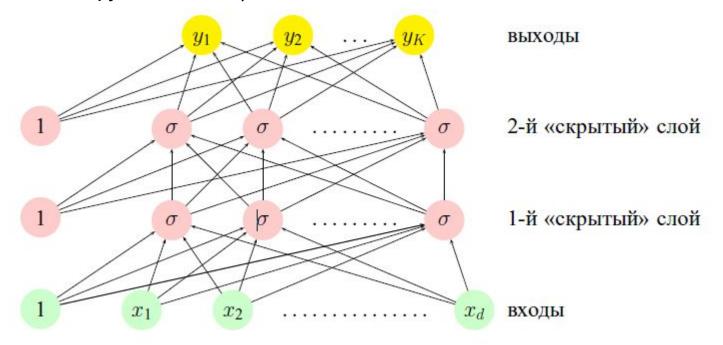




$$y_k = \frac{\exp\left(\beta_{k0} + \sum_{j=1}^d \beta_{kj} x_j\right)}{\sum_{\ell=1}^K \exp\left(\beta_{\ell0} + \sum_{j=1}^d \beta_{\ell j} x_j\right)} \approx \Pr(k \mid x)$$

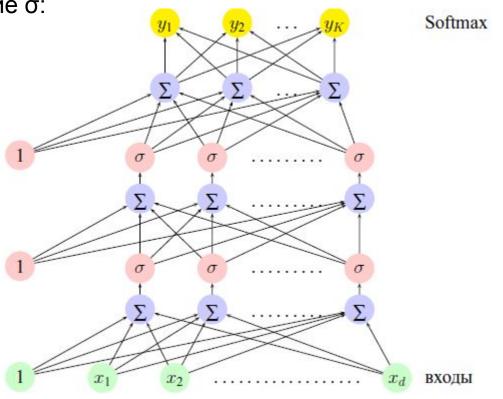
$$(k = 1, 2, \dots, K)$$

Из логистических функций можно составить суперпозицию (функция от функций от функций от ...)



Таким образом, выходы из каждого узла (нейрона) умножаются на соответствующие веса и складываются. Далее к полученному результату z применяется функция $\sigma(z)$.

Иногда отдельно изображают суммирующие элементы и элементы, вычисляющие σ:



$$z_1 = \sigma(B_1 x), \quad z_2 = \sigma(B_2 z_1), \quad t = B_3 z_2, \quad g = \text{softmax}(t)$$

Кроме сигмоидальной используют и др. функции. Сейчас наиболее популярна положительная срезка линейной функции (linear rectifier):

$$g(x_1, x_2, \dots, x_q) = (\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_q x_q)_+$$
 $(x)_+ = \max\{0, x\}$

или ее сглаженный вариант softplus:

$$\overline{O}$$

 $g = \ln(1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_q x_q))$

Обучение нейронной сети

• Штраф - сумма квадратов для задачи восстановления регрессии:

$$R(w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} \left(y^{(i)} - f(x^{(i)}) \right)^{2} \to \min$$

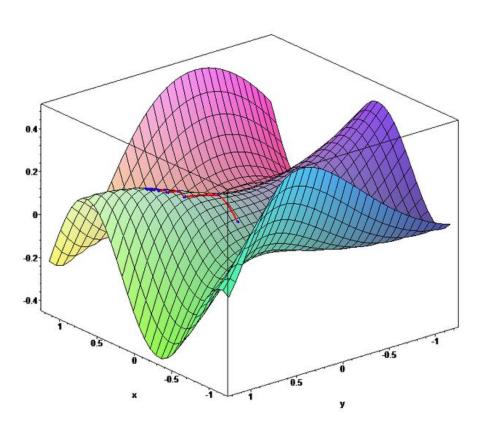
• Штраф - кросс-энтропия для задачи классификации:

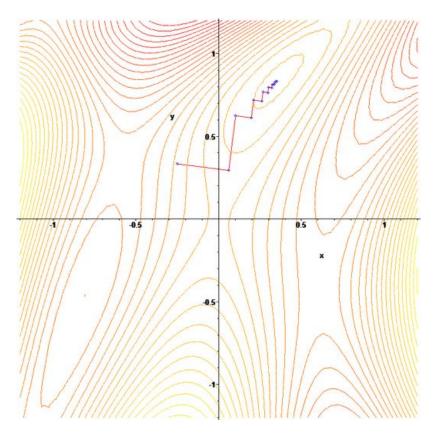
$$R(w) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} I(y^{(i)} = k) \ln g_k(x^{(i)}) \to \min$$

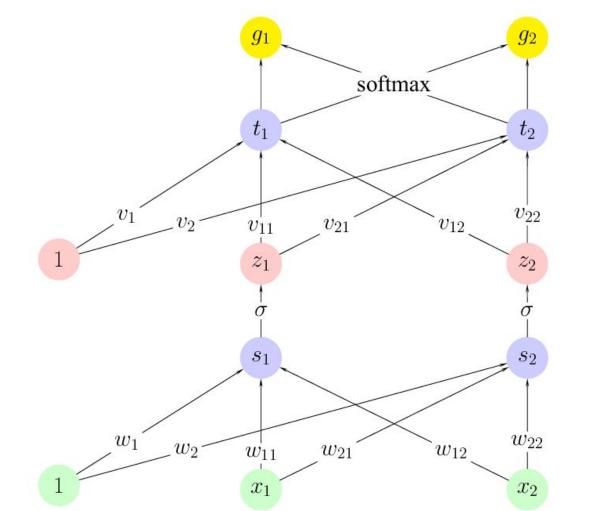
Для решения задачи минимизации используем алгоритм стохастического градиентного спуска

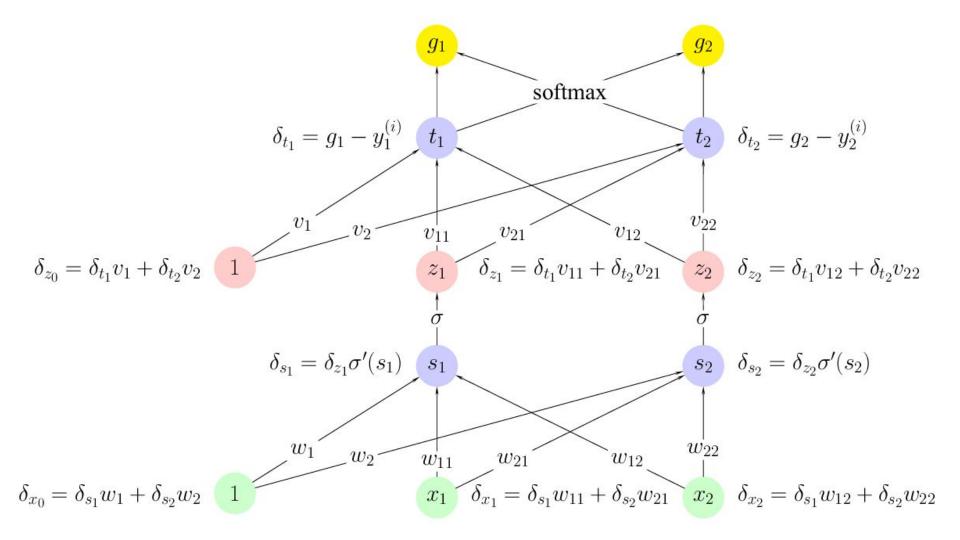
BackPropagation - это алгоритм вычисления компонент градиента $\partial R^{(i)}/\partial w$

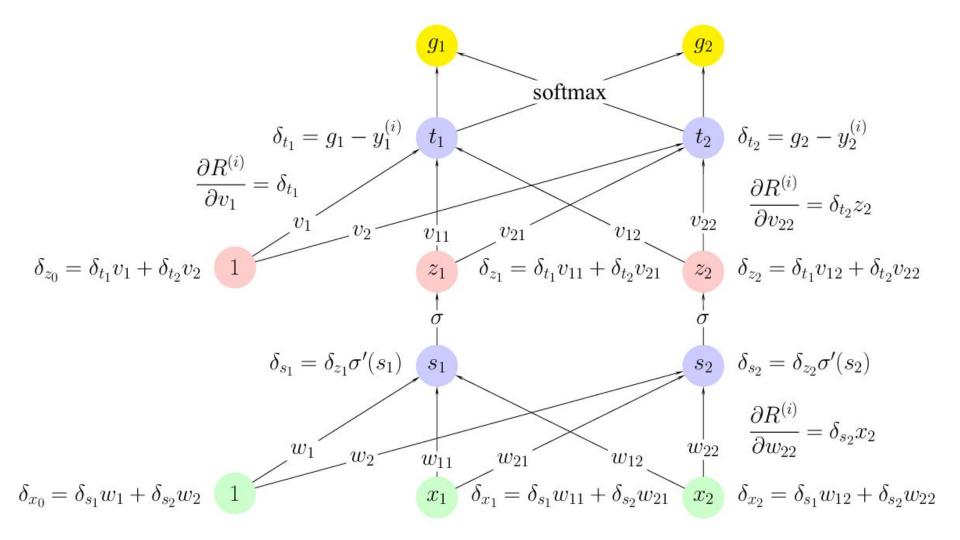
Стохастический градиентный спуск











$$g = \operatorname{softmax} (V\sigma(Wx + w) + v)$$

$$\delta_{x} = \frac{\partial R^{(i)}}{\partial x} = \underbrace{\underbrace{(g - y) \cdot V \cdot \operatorname{diag}(\sigma'(s))}_{\delta_{z}} \cdot W}$$

$$\frac{\partial R^{(i)}}{\partial W} = \delta_{s} \cdot x, \qquad \frac{\partial R^{(i)}}{\partial w} = \delta_{s}, \qquad \frac{\partial R^{(i)}}{\partial V} = \delta_{t} \cdot z, \qquad \frac{\partial R^{(i)}}{\partial v} = \delta_{t}$$

 $R^{(i)} = \operatorname{logloss}(g) = \operatorname{logloss}\left(\operatorname{softmax}\left(V \sigma (W x + w) + v\right)\right)$

 $W \leftarrow W - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial W}, \qquad w \leftarrow w - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial w}, \qquad V \leftarrow V - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial V}, \qquad v \leftarrow v - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial v}$

$$g = \operatorname{softmax} (V\sigma(Wx + w) + v)$$

$$R^{(i)} = \operatorname{logloss}(g) = \operatorname{logloss}\left(\operatorname{softmax}\left(V \underbrace{\sigma(Wx + w) + v}_{s} + v\right)\right)$$

$$\delta_x = \frac{\partial R^{(i)}}{\partial x} = \underbrace{(g-y) \cdot V \cdot \operatorname{diag}(\sigma'(s)) \cdot W}_{\delta_t}$$

$$x = \frac{\partial K^{(s)}}{\partial x} = \underbrace{\left(g - y\right) \cdot V \cdot \operatorname{diag}\left(\sigma'(s)\right) \cdot W}_{\delta_z}$$

$$\frac{\partial R^{(i)}}{\partial W} = \delta_s \cdot x, \ \frac{\partial R^{(i)}}{\partial w} = \delta_s, \qquad \frac{\partial R^{(i)}}{\partial V} = \delta_t \cdot z, \ \frac{\partial R^{(i)}}{\partial v} = \delta_t$$

$$\overline{W} = \delta_s \cdot x, \quad \overline{\partial w} = \delta_s, \qquad \overline{\partial V} = \delta_t \cdot z, \quad \overline{\partial v} = \delta_t$$

$$W \leftarrow W - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial W}, \qquad w \leftarrow w - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial w},$$

$$V \leftarrow V - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial V}, \qquad v \leftarrow v - \rho \frac{\partial R^{(i)}}{\partial v}$$

W = np.random.randn(m1, d) V = np.random.randn(K, m1) w = np.random.randn(m1)v = np.random.randn(K)for epoch in range(nepoch):

def NeuralNetFit(X, Y, rho = 1, nepoch = 1000, m1 = 10):

N, d = X.shapeN, K = Y.shape

for i in range(N):

t = V.dot(z) + vg = softmax(t)

x = X[i, :]y = Y[i, :]# Neural Net Forward s = W.dot(x) + wz = sigmoid(s)

Neural Net Backward delta t = g - v delta z = delta t.dot(V) delta s = delta_z*sigmoiddif(z) $\#delta \ x = delta \ s.dot(W)$ W = W - rho*np.outer(delta s, x)

V = V - rho*np.outer(delta_t, z) w = w - rho*delta s v = v - rho*delta t return W, w, V, v

Глубокое обучение

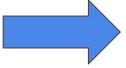
(Yann LeCun, Yoshua Bengio, Geoffrey Hinton и др.)

Глубокое обучение (Deep learning) — подход, основанный на моделировании высокоуровневых абстракций (новых признаков) с помощью последовательных нелинейных преобразований.

Более высокие уровни нейронной сети представляют абстракцию на базе предыдущих слоев.

Глубокое обучение

- Больше данных
- Глубже модели
- Дольше обучение



Выше точность!

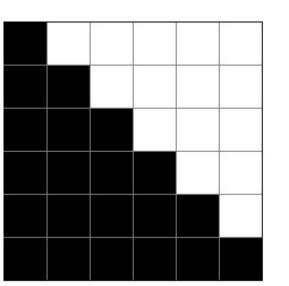
Сверточные сети

Линейный фильтр I*K с ядром K:

$$(I * K)_{pq} = \sum_{i=1}^{h} \sum_{j=1}^{w} I_{p+i-1, q+j-1} K_{ij}$$

Например,

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 1 & 0 \\
1 & -4 & 1 \\
0 & 1 & 0
\end{array}$$

$$(I * K)_{pq} = \sum_{i=1}^{h} \sum_{j=1}^{w} I_{p+i-1, q+j-1} K_{ij}$$

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

| 0 | 255 | 255 | 255 | 255 | 255 |
|---|-----|-----|-----|-----|-----|
| 0 | 0 | 255 | 255 | 255 | 255 |
| 0 | 0 | 0 | 255 | 255 | 255 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 255 | 255 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 255 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

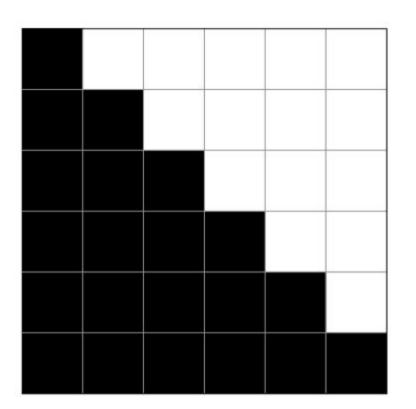
$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 1 & 0 \\
1 & -4 & 1 \\
0 & 1 & 0
\end{array}$$

$$(I * K)_{pq} = \sum_{i=1}^{h} \sum_{j=1}^{w} I_{p+i-1, q+j-1} K_{ij} \qquad K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

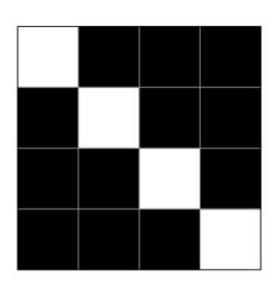
$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 1 & 0 \\
1 & -4 & 1 \\
0 & 1 & 0
\end{array}$$

| 510 | -510 | 0 | 0 |
|-----|------|------|------|
| 0 | 510 | -510 | 0 |
| 0 | 0 | 510 | -510 |
| 0 | 0 | 0 | 510 |

$$(I * K)_{pq} = \sum_{i=1}^{h} \sum_{j=1}^{w} I_{p+i-1,q+j-1} K_{ij} \qquad K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



| 0 | 1 | 0 |
|---|----|---|
| 1 | -4 | 1 |
| 0 | 1 | 0 |







Линейный фильтр (свертка) I * K с ядром K:

$$(I * K)_{pq} = \sum_{i=1}^{h} \sum_{j=1}^{w} I_{p+i-1, q+j-1} K_{ij}$$

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Сверточные сети

Основная идея сверточных сетей (сверточных слоев): Параметры фильтров будем подбирать с помощью обучения

$$z_{pq} = \sigma \left(\beta_0 + \sum_{i=1}^h \sum_{j=1}^w \beta_{ij} x_{p+i-1, q+j-1} \right)$$

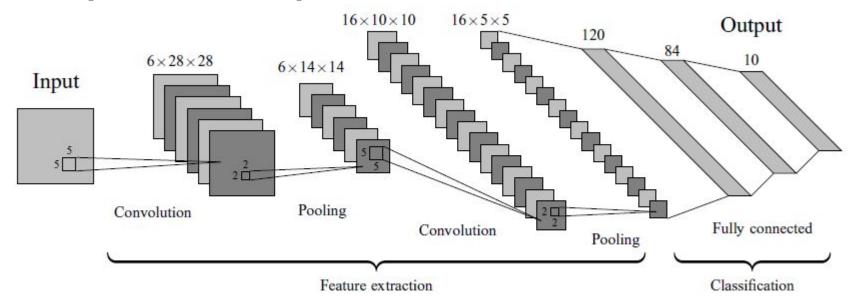
 x_{ij} - узлы (нейроны) одного слоя (например, входного)

 z_{pq} - узлы следующего слоя

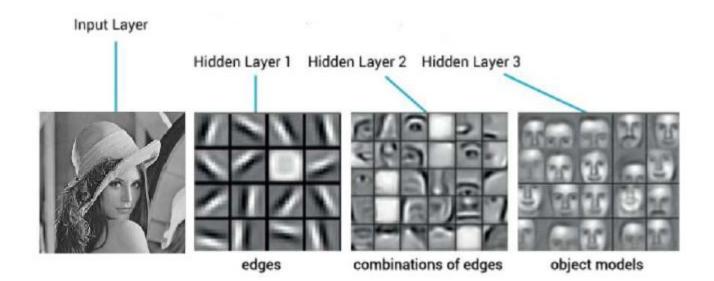
Параметры фильтра - это теперь веса нейронной сети. Отличия от полносвязной сети (полносвязного слоя):

- Нет соединения каждого узла одного слоя со всеми узлами следующего.
- Веса становятся разделяемыми.

LeNet-5 [Le Cun et al., 1998]



- Сверточные слои (convolutional layers)
- «Выборочные» слои, или слои объединения (subsampling/pooling layers)
- Полносвязные слои (fully connected layers)
- Регуляризация (weight decay, dropout, normalization)



Traditional Pattern Recognition: Fixed/Handcrafted Feature Extractor



Traditional Pattern Recognition: Fixed/Handcrafted Feature Extractor



Mainstream Modern Pattern Recognition: Unsupervised mid-level features



Deep Learning: Representations are hierarchical and trained



Другие примеры глубоких нейронных сетей

- AlexNet (Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, Geoffrey Hinton, 2012) победитель ІтадеNet-2012 — 8 слоев, 61 млн. параметров
- GoogLeNet (Christian Szegedy, Wei Liu, Yangqing Jia, Pierre Sermanet, Scott Reed, Dragomir Anguelov, Dumitru Erhan, Vincent Vanhoucke, Andrew Rabinovich, 2015) — 22 слоя, 7 млн. параметров
- Microsoft ResNet (Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, Jian Sun, 2015)
 101 слой, 44.6 млн. параметров
- DenseNet (Gao Huang, Zhuang Liu, Laurens Van Der Maaten, Kilian Q. Weinberger, 2017) 201 слой, 20 млн. параметров
- ...
- Playing Atari with Deep Reinforcement Learning (V. Mnih, 2013) 10 слоев
- AlphaGo (D.Silver et al, Alphabet Inc.'s Google DeepMind, 2015) 2 нейронных сети по 13 слоев

Библиотеки глубокого обучения

- TensorFlow
- Theano
- Keras
- Torch
- Caffe