

Кристофер М. Бишоп  
Хью Бишоп

# Глубокое обучение

Принципы  
и концепции

Второе издание с решениями

# Содержание

От издательства .....	15
Предисловие .....	16
<b>Глава 1. Революция глубокого обучения .....</b>	<b>22</b>
1.1 Влияние глубокого обучения.....	23
1.1.1 Медицинская диагностика.....	23
1.1.2 Структура белка .....	24
1.1.3 Синтез изображений.....	25
1.1.4 Большие языковые модели .....	26
1.2 Учебный пример.....	28
1.2.1 Синтетические данные.....	28
1.2.2 Линейные модели.....	30
1.2.3 Функция ошибки .....	30
1.2.4 Сложность модели .....	31
1.2.5 Регуляризация.....	35
1.2.6 Выбор модели.....	37
1.3 Краткая история машинного обучения .....	39
1.3.1 Однослойные сети.....	40
1.3.2 Обратное распространение .....	42
1.3.3 Глубокие сети .....	44
<b>Глава 2. Вероятности .....</b>	<b>47</b>
2.1 Правила вероятности.....	49
2.1.1 Пример медицинского обследования .....	49
2.1.2 Правила суммы и произведения.....	50
2.1.3 Теорема Байеса .....	53
2.1.4 Повторное медицинское обследование .....	53
2.1.5 Априорные и апостериорные вероятности.....	56
2.1.6 Независимые переменные.....	56
2.2 Плотность распределения вероятностей.....	56
2.2.1 Примеры распределений .....	58
2.2.2 Ожидания и ковариации .....	60
2.3 Гауссово распределение .....	61
2.3.1 Среднее значение и дисперсия .....	63
2.3.2 Функция правдоподобия.....	63
2.3.3 Ошибка максимального правдоподобия .....	65

2.3.4	Линейная регрессия .....	67
2.4	Преобразование плотностей .....	69
2.4.1	Многомерное распределение .....	72
2.5	Теория информации .....	73
2.5.1	Энтропия.....	73
2.5.2	Физическая перспектива.....	75
2.5.3	Дифференциальная энтропия.....	77
2.5.4	Максимальная энтропия.....	78
2.5.5	Дивергенция Кульбака–Лейблера.....	79
2.5.6	Условная энтропия .....	82
2.5.7	Взаимная информация .....	82
2.6	Байесовские вероятности .....	83
2.6.1	Параметры модели.....	84
2.6.2	Регуляризация.....	85
2.6.3	Байесовское машинное обучение .....	86
	Упражнения .....	87
<b>Глава 3. Стандартные распределения .....</b>		<b>94</b>
3.1	Дискретные переменные .....	95
3.1.1	Распределение Бернулли.....	95
3.1.2	Биноминальное распределение .....	96
3.1.3	Полиномиальное распределение .....	97
3.2	Многомерное гауссово распределение .....	99
3.2.1	Геометрия гауссова распределения .....	101
3.2.2	Моменты .....	104
3.2.3	Ограничения .....	105
3.2.4	Условное распределение .....	107
3.2.5	Маргинальное распределение .....	110
3.2.6	Теорема Байеса .....	113
3.2.7	Максимальное правдоподобие .....	115
3.2.8	Последовательная оценка .....	117
3.2.9	Гауссовы смеси.....	117
3.3	Периодические переменные .....	121
3.3.1	Распределение фон Мизеса .....	121
3.4	Семейство экспоненциальных распределений .....	127
3.4.1	Достаточная статистика .....	130
3.5	Непараметрические методы .....	131
3.5.1	Гистограммы .....	132
3.5.2	Ядерная оценка плотности .....	134
3.5.3	Методика ближайших соседей .....	137
	Упражнения .....	140
<b>Глава 4. Однослойные сети: регрессия .....</b>		<b>147</b>
4.1	Линейная регрессия.....	147
4.1.1	Базисные функции .....	148
4.1.2	Функция правдоподобия.....	150

4.1.3	Максимальное правдоподобие .....	151
4.1.4	Геометрия наименьших квадратов .....	153
4.1.5	Последовательное обучение .....	154
4.1.6	Регуляризованный метод наименьших квадратов .....	154
4.1.7	Множественные выходы .....	155
4.2	Теория принятия решений .....	157
4.3	Обратное отношение между смещением и дисперсией .....	161
	Упражнения .....	166
<b>Глава 5. Однослойные сети: классификация .....</b>		<b>170</b>
5.1	Дискриминантные функции .....	171
5.1.1	Два класса .....	171
5.1.2	Множественные классы .....	173
5.1.3	Кодирование «1 из K» .....	175
5.1.4	Наименьшие квадраты для классификации .....	175
5.2	Теория принятия решений .....	178
5.2.1	Коэффициент ошибок классификации .....	179
5.2.2	Ожидаемые потери .....	182
5.2.3	Опция отказа .....	183
5.2.4	Вывод и принятие решения .....	184
5.2.5	Точность классификатора .....	188
5.2.6	ROC-кривая .....	190
5.3	Генеративные классификаторы .....	193
5.3.1	Непрерывные входные данные .....	195
5.3.2	Решение методом максимального правдоподобия .....	197
5.3.3	Дискретные параметры .....	199
5.3.4	Экспоненциальное семейство .....	200
5.4	Дискриминационные классификаторы .....	201
5.4.1	Функции активации .....	201
5.4.2	Фиксированные базисные функции .....	202
5.4.3	Логистическая регрессия .....	203
5.4.4	Логистическая регрессия для нескольких классов .....	205
5.4.5	Пробит-регрессия .....	207
5.4.6	Канонические функции связей .....	209
	Упражнения .....	211
<b>Глава 6. Глубокие нейронные сети .....</b>		<b>215</b>
6.1	Ограничения фиксированных базисных функций .....	215
6.1.1	Проклятие размерности .....	216
6.1.2	Пространства большой размерности .....	219
6.1.3	Многообразие данных .....	221
6.1.4	Базисные функции на основе данных .....	223
6.2	Многослойные сети .....	224
6.2.1	Матрицы параметров .....	226
6.2.2	Универсальная аппроксимация .....	227
6.2.3	Функции активации скрытых элементов .....	228

6.2.4	Симметрии весового пространства .....	231
6.3	Глубокие сети .....	232
6.3.1	Иерархические представления .....	233
6.3.2	Распределенные представления .....	234
6.3.3	Обучение представлений .....	234
6.3.4	Трансферное обучение .....	236
6.3.5	Контрастивное обучение .....	238
6.3.6	Основные сетевые архитектуры .....	241
6.3.7	Тензоры .....	242
6.4	Функции ошибок .....	242
6.4.1	Регрессия .....	242
6.4.2	Бинарная классификация .....	244
6.4.3	Многоклассовая классификация .....	245
6.5	Сети смешанной плотности .....	246
6.5.1	Пример кинематики робота .....	247
6.5.2	Распределение условного смешивания .....	248
6.5.3	Градиентная оптимизация .....	251
6.5.4	Прогнозируемое распределение .....	252
	Упражнения .....	254
<b>Глава 7. Градиентный спуск .....</b>		<b>259</b>
7.1	Поверхности ошибок .....	260
7.1.1	Локальная квадратичная аппроксимация .....	261
7.2	Оптимизация методом градиентного спуска .....	264
7.2.1	Использование градиентной информации .....	264
7.2.2	Пакетный градиентный спуск .....	265
7.2.3	Стохастический градиентный спуск .....	265
7.2.4	Мини-батчи .....	266
7.2.5	Инициализация параметров .....	268
7.3	Сходимость .....	269
7.3.1	Импульс .....	271
7.3.2	График скорости обучения .....	274
7.3.3	RMSProp и Adam .....	274
7.4	Нормализация .....	277
7.4.1	Нормализация данных .....	277
7.4.2	Пакетная нормализация .....	278
7.4.3	Нормализация слоев .....	281
	Упражнения .....	282
<b>Глава 8. Обратное распространение .....</b>		<b>286</b>
8.1	Оценка градиентов .....	287
8.1.1	Однослойные сети .....	287
8.1.2	Общие сети с прямой передачей .....	288
8.1.3	Простой пример .....	291
8.1.4	Численное дифференцирование .....	292
8.1.5	Матрица Якоби .....	294

8.1.6	Матрица Гессе .....	296
8.2	Автоматическое дифференцирование .....	299
8.2.1	Прямой режим автоматического дифференцирования.....	301
8.2.2	Обратный режим автоматического дифференцирования.....	305
	Упражнения .....	306
<b>Глава 9. Регуляризация.....</b>		<b>310</b>
9.1	Индуктивное смещение .....	311
9.1.1	Обратные задачи .....	311
9.1.2	Теорема об отсутствии бесплатного обеда.....	312
9.1.3	Симметрия и инвариантность .....	314
9.1.4	Эквивариантность.....	317
9.2	Уменьшение весов.....	318
9.2.1	Последовательные регуляризаторы .....	320
9.2.2	Обобщенное уменьшение весов .....	323
9.3	Кривые обучения.....	324
9.3.1	Ранняя остановка .....	325
9.3.2	Двойной спуск.....	327
9.4	Совместное использование параметров .....	330
9.4.1	Мягкое разделение весов .....	331
9.5	Остаточные связи.....	333
9.6	Усреднение модели .....	337
9.6.1	Прореживание.....	340
	Упражнения .....	342
<b>Глава 10. Сверточные сети.....</b>		<b>347</b>
10.1	Компьютерное зрение .....	348
10.1.1	Данные изображений .....	349
10.2	Сверточные фильтры.....	350
10.2.1	Детекторы признаков .....	351
10.2.2	Эквивариантный перенос .....	352
10.2.3	Заполнение .....	355
10.2.4	Свертки со сдвигом .....	356
10.2.5	Многомерные свертки.....	356
10.2.6	Пулинг .....	358
10.2.7	Многослойные свертки.....	360
10.2.8	Примеры сетевых архитектур .....	361
10.3	Визуализация обученных CNN.....	364
10.3.1	Зрительная кора головного мозга.....	364
10.3.2	Визуализация обученных фильтров .....	366
10.3.3	Карты значимости.....	368
10.3.4	Состязательные атаки.....	369
10.3.5	Синтетические изображения.....	371
10.4	Определение объектов .....	372
10.4.1	Ограничительные рамки.....	373
10.4.2	Пересечение по объединению.....	374

10.4.3	Скользящие окна .....	375
10.4.4	Обнаружение в разных масштабах .....	377
10.4.5	Немаксимальное подавление .....	378
10.4.6	Быстрая региональная CNN .....	379
10.5	Сегментация изображений .....	380
10.5.1	Сверточная сегментация .....	380
10.5.2	Повышающая дискретизация .....	381
10.5.3	Полностью сверточные сети .....	383
10.5.4	Архитектура U-net .....	384
10.6	Перенос стиля .....	385
	Упражнения .....	387
<b>Глава 11. Структурированные распределения .....</b>		<b>390</b>
11.1	Модели графов .....	391
11.1.1	Ориентированные графы .....	391
11.1.2	Факторизация .....	392
11.1.3	Дискретные переменные .....	394
11.1.4	Гауссовы переменные .....	397
11.1.5	Бинарный классификатор .....	399
11.1.6	Параметры и наблюдения .....	400
11.1.7	Теорема Байеса .....	402
11.2	Условная независимость .....	403
11.2.1	Три примера графов .....	404
11.2.2	Объяснения .....	408
11.2.3	D-разделение .....	410
11.2.4	Наивный Байес .....	411
11.2.5	Генеративные модели .....	413
11.2.6	Покрытие Маркова .....	415
11.2.7	Графы в качестве фильтров .....	416
11.3	Модели последовательностей .....	417
11.3.1	Латентные переменные .....	420
	Упражнения .....	421
<b>Глава 12. Трансформеры .....</b>		<b>425</b>
12.1	Внимание .....	426
12.1.1	Обработка трансформеров .....	428
12.1.2	Коэффициенты внимания .....	430
12.1.3	Самовнимание .....	431
12.1.4	Сетевые параметры .....	432
12.1.5	Масштабируемое самовнимание .....	435
12.1.6	Многоголовое внимание .....	436
12.1.7	Слои трансформера .....	438
12.1.8	Вычислительная сложность .....	440
12.1.9	Позиционное кодирование .....	440
12.2	Естественный язык .....	444
12.2.1	Векторное представление слов .....	444

12.2.2	Лексическая обработка.....	446
12.2.3	Мультимножество слов.....	448
12.2.4	Модели авторегрессии.....	449
12.2.5	Рекуррентные нейронные сети.....	450
12.2.6	Обратное распространение во времени.....	452
12.3	Языковые модели трансформеров.....	453
12.3.1	Декодирующие трансформеры.....	454
12.3.2	Стратегии выборки.....	457
12.3.3	Кодирующие трансформеры.....	460
12.3.4	Трансформеры последовательности в последовательность.....	462
12.3.5	Большие языковые модели.....	464
12.4	Мультимодальные трансформеры.....	467
12.4.1	Визуальные трансформеры.....	468
12.4.2	Генеративные визуальные трансформеры.....	470
12.4.3	Аудиоданные.....	473
12.4.4	Преобразование текста в речь.....	474
12.4.5	Визуальные и языковые трансформеры.....	476
	Упражнения.....	478

## **Глава 13. Графовые нейронные сети.....** 482

13.1	Машинное обучение на графах.....	483
13.1.1	Свойства графов.....	484
13.1.2	Матрица смежности.....	485
13.1.3	Эквивариантность перестановок.....	486
13.2	Нейронный обмен сообщениями.....	488
13.2.1	Сверточные фильтры.....	488
13.2.2	Графовые сверточные сети.....	490
13.2.3	Операторы агрегации.....	491
13.2.4	Операторы обновления.....	494
13.2.5	Классификация узлов.....	495
13.2.6	Классификация ребер.....	496
13.2.7	Классификация графов.....	496
13.3	Общие графовые сети.....	497
13.3.1	Графовые сети с вниманием.....	497
13.3.2	Встраивание ребер.....	498
13.3.3	Вложения графов.....	499
13.3.4	Чрезмерное сглаживание.....	500
13.3.5	Регуляризация.....	501
13.3.6	Геометрическое глубокое обучение.....	501
	Упражнения.....	502

## **Глава 14. Выборка.....** 505

14.1	Основные алгоритмы выборки.....	505
14.1.1	Ожидаемые значения.....	505
14.1.2	Стандартные распределения.....	507
14.1.3	Выборка с отклонением.....	509

14.1.4	Адаптивная выборка с отклонением.....	511
14.1.5	Выборка по важности .....	513
14.1.6	Выборка и повторная выборка по значимости .....	515
14.2	Метод Монте-Карло с цепями Маркова.....	517
14.2.1	Алгоритм Метрополиса .....	517
14.2.2	Марковские цепи.....	519
14.2.3	Алгоритм Метрополиса–Гастингса .....	521
14.2.4	Выборка Гиббса.....	523
14.2.5	Выборка по предкам .....	527
14.3	Выборка Ланжевена .....	528
14.3.1	Модели на основе энергии.....	529
14.3.2	Максимизация правдоподобия .....	530
14.3.3	Динамика Ланжевена.....	532
	Упражнения .....	534
<b>Глава 15. Дискретные латентные переменные .....</b>		<b>537</b>
15.1	Кластеризация К-средних.....	538
15.1.1	Сегментация изображений .....	542
15.2	Гауссовы смеси.....	544
15.2.1	Функция правдоподобия.....	547
15.2.2	Максимальное правдоподобие .....	549
15.3	Алгоритм ожидания-максимизации.....	554
15.3.1	Гауссовы смеси.....	557
15.3.2	Сравнение с алгоритмом К-средних .....	559
15.3.3	Смеси распределений Бернулли .....	560
15.4	Нижняя граница доказательств .....	564
15.4.1	Новый взгляд на EM .....	566
15.4.2	Независимые и одинаково распределенные данные .....	568
15.4.3	Априорные параметры.....	568
15.4.4	Обобщенный EM.....	569
15.4.5	Последовательный EM .....	570
	Упражнения .....	571
<b>Глава 16. Непрерывные латентные переменные .....</b>		<b>575</b>
16.1	Анализ главных компонент.....	576
16.1.1	Определение максимальной дисперсии.....	577
16.1.2	Определение минимальной ошибки.....	579
16.1.3	Сжатие данных.....	582
16.1.4	Отбеливание данных .....	583
16.1.5	Данные высокой размерности .....	585
16.2	Вероятностные латентные переменные.....	586
16.2.1	Генеративная модель .....	587
16.2.2	Функция правдоподобия.....	588
16.2.3	Максимальное правдоподобие .....	590
16.2.4	Факторный анализ .....	594
16.2.5	Анализ независимых компонентов.....	595

16.2.6	Фильтры Калмана.....	597
16.3	Нижняя граница доказательств .....	599
16.3.1	Максимизация ожидания.....	600
16.3.2	EM для PCA .....	603
16.3.3	EM для факторного анализа.....	604
16.4	Нелинейные модели латентных переменных .....	605
16.4.1	Нелинейные многообразия .....	606
16.4.2	Функция правдоподобия.....	608
16.4.3	Дискретные данные .....	609
16.4.4	Четыре метода генеративного моделирования.....	610
	Упражнения .....	612
<b>Глава 17. Генеративные состязательные сети .....</b>		<b>617</b>
17.1	Состязательное обучение.....	617
17.1.1	Функция потерь .....	619
17.1.2	Практическое обучение GAN.....	620
17.2	GAN для обработки изображений.....	623
17.2.1	CycleGAN.....	624
	Упражнения .....	628
<b>Глава 18. Нормализующие потоки .....</b>		<b>631</b>
18.1	Потоки сопряжения .....	633
18.2	Потоки авторегрессии .....	637
18.3	Непрерывные потоки .....	639
18.3.1	Нейронные дифференциальные уравнения .....	639
18.3.2	Обратное распространение нейронных ОДУ.....	640
18.3.3	Потоки нейронных ОДУ .....	642
	Упражнения .....	644
<b>Глава 19. Автокодировщики .....</b>		<b>647</b>
19.1	Детерминированные автокодировщики .....	647
19.1.1	Линейные автокодировщики .....	648
19.1.2	Глубокие автокодировщики.....	649
19.1.3	Разреженные автокодировщики.....	651
19.1.4	Шумоподавляющие автокодировщики.....	651
19.1.5	Маскированные автокодировщики .....	652
19.2	Вариационные автокодировщики .....	655
19.2.1	Амортизированный вывод .....	657
19.2.2	Метод перепараметризации.....	659
	Упражнения .....	663
<b>Глава 20. Диффузионные модели .....</b>		<b>666</b>
20.1	Прямой кодировщик.....	667
20.1.1	Диффузионное ядро.....	668
20.1.2	Условное распределение .....	669

---

20.2	Обратное декодирование.....	670
20.2.1	Обучение декодера.....	673
20.2.2	Нижняя граница доказательств.....	673
20.2.3	Переименование ELBO .....	675
20.2.4	Прогнозирование шума.....	677
20.2.5	Генерация новых выборок .....	679
20.3	Соответствие оценок .....	681
20.3.1	Оценка функции потерь.....	682
20.3.2	Модифицированная оценка потерь .....	682
20.3.3	Дисперсия шума .....	684
20.3.4	Стохастические дифференциальные уравнения.....	685
20.4	Управляемая диффузия.....	686
20.4.1	Наведение классификатора .....	687
20.4.2	Наведение без классификатора.....	688
	Упражнения .....	691
	<b>Приложение А. Линейная алгебра.....</b>	<b>696</b>
A.1	Матричные тождества .....	696
A.2	Следы и определители.....	697
A.3	Производные матрицы.....	698
A.4	Собственные векторы.....	700
	<b>Приложение В. Вариационное исчисление .....</b>	<b>704</b>
	<b>Приложение С. Множители Лагранжа.....</b>	<b>707</b>
	<b>Решения упражнений .....</b>	<b>711</b>
	<b>Список литературы .....</b>	<b>820</b>
	<b>Предметный указатель.....</b>	<b>840</b>