LiVE Group
视觉智能与学习研究中心

# 机器学习（第10讲）

主讲：张 磊

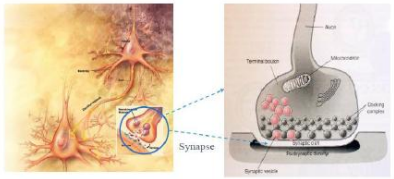
E-mail: leizhang@cqu.edu.cn
Lab Website: http://www.leizhang.tk

# 第十章：神经网络与深度学习

## 神经网络发展史

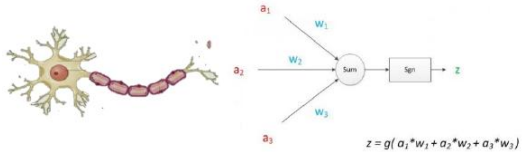
**1906**

- 神经元学说
- 神经元的连接方式被发现




**1943**

神经元MP模型，McCulloch, Pitts



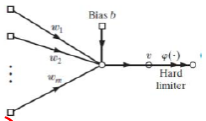

Hebb

**1949**

- Hebb学习规则
- $\Delta W_j = k \times f(W_j^{\top} X) X$

**1958**

- 感知机(Perceptron)模型

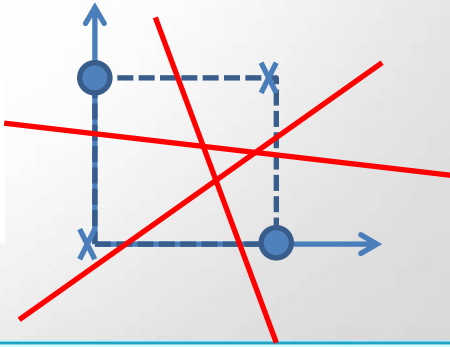



$$w = w + \eta(y - \hat{y})x$$


Marvin Minsky

**1969**

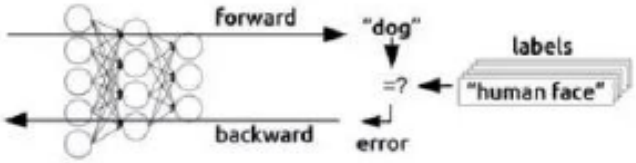
- XOR（异或）问题
- 计算能力的限制



## 神经网络发展史

G.E. Hinton

**1986** **BP神经网络，** Rumehart, Williams, Hinton




Vladmir Vapnik

**1995** ■ 支持向量机(SVM)，Vapnik

G.E. Hinton

**2006**

■ 多层神经网络

■ 深度学习

**2012** AlexNet在ImageNet比赛击败传统机器学习方法

IMAGENET Large Scale Visual Recognition Challenge 2012 (ILSVRC2012)

*Held in conjunction with PASCAL Visual Object Classes Challenge 2012 (VOC2012)*

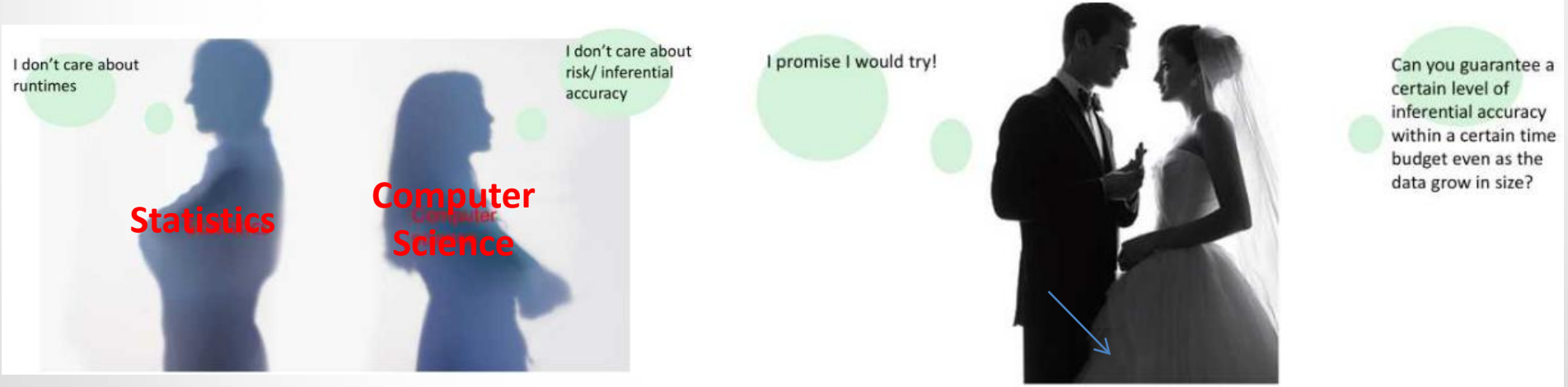
第四次技术革命

**2016** AlphaGo

**2023** ChatGPT

- 神经网络发展史

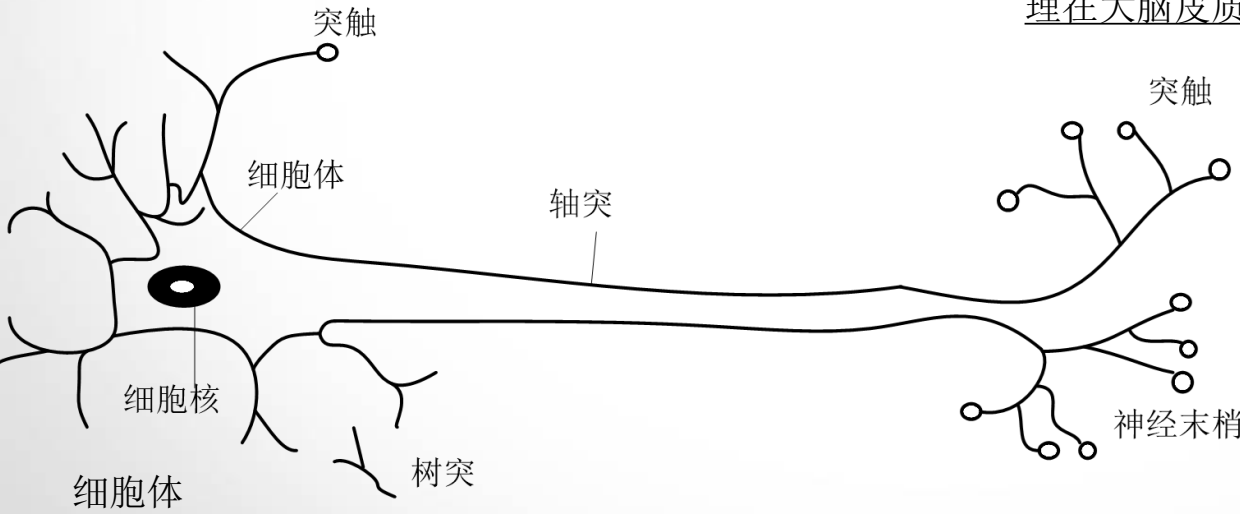
统计学与机器学习的关系



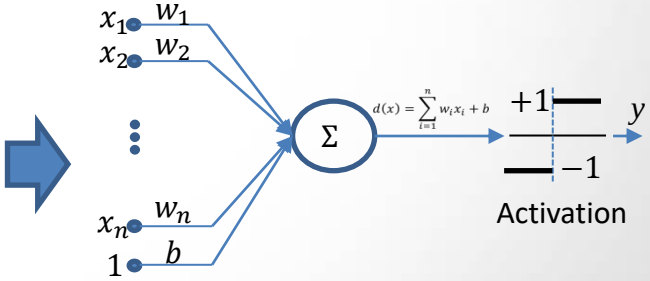
## □ 感知器(Frank Rosenblatt, 1958)

生物神经元（神经细胞）结构：

每个神经元由一个细胞体组成，其包含一个细胞核。从细胞体分支扩展出许多为树突的神经纤维和一根长的轴突。一个神经元与10到10万个其他神经元相连，连接处称为突触。信号通过复杂的化学反应从神经元传播到神经元。研究发现，大多数的信息处理在大脑皮质，即大脑外层进行。

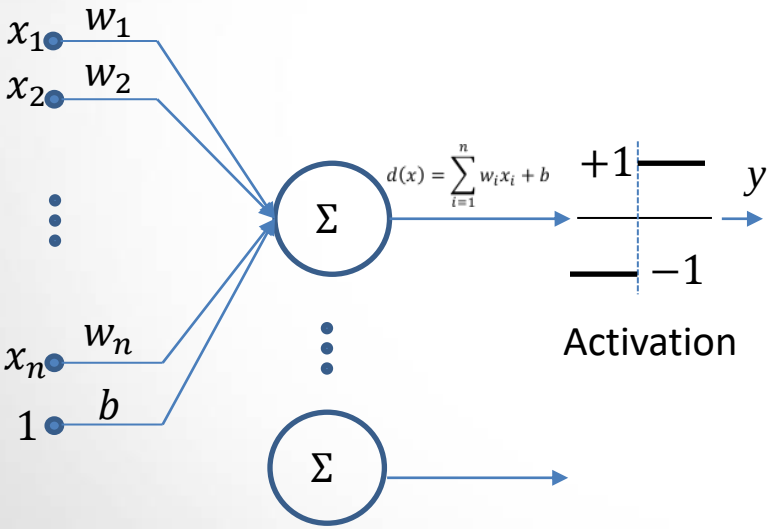



生物神经元结构




人工神经元结构

## 感知器




如何计算权重w和b呢？

### ✓ 感知器学习规则

采用类梯度下降方法：

1. 如果第j个神经元输出是正确的，则$w_{ij}$和偏差$b_j$不变;
2. 如果第j个神经元输出是0，而期望值是1，则$w_{ij}=w_{ij}+x_i$ $b_j=b_j+1$;
3. 如果第j个神经元输出是1，而期望值是0，则$w_{ij}=w_{ij}-x_i$ $b_j=b_j-1$;

W和b的学习算法：

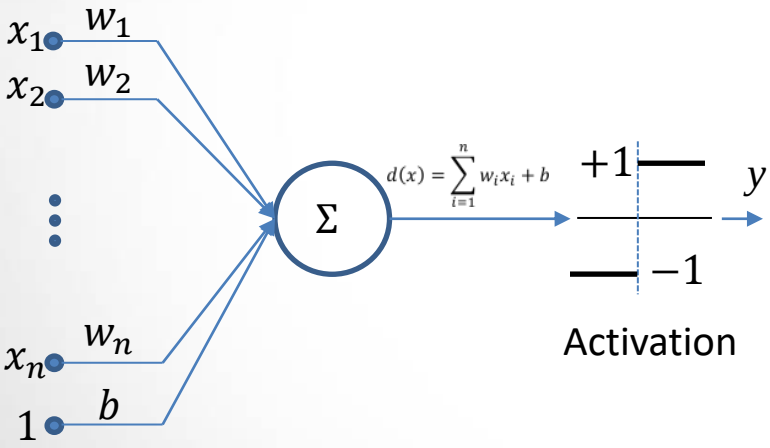
设第j个神经元输出为$y_j$, 期望值为$t_j$, 则学习规则为

$w_{ij}=w_{ij}+(t_j-y_j)x_i$

$b_j=b_j+(t_j-y_j)1$;

Y=T → 目标任务

## ◘ 感知器




单个神经元的感知器结构

### ✓ 感知器的局限性

1. 感知器的激活函数为阈值函数，输出只能是两个值，因此只能用于简单的分类问题；
2. 感知器是一种线性分类方法，适用于线性可分问题；
3. 收敛速度较慢。

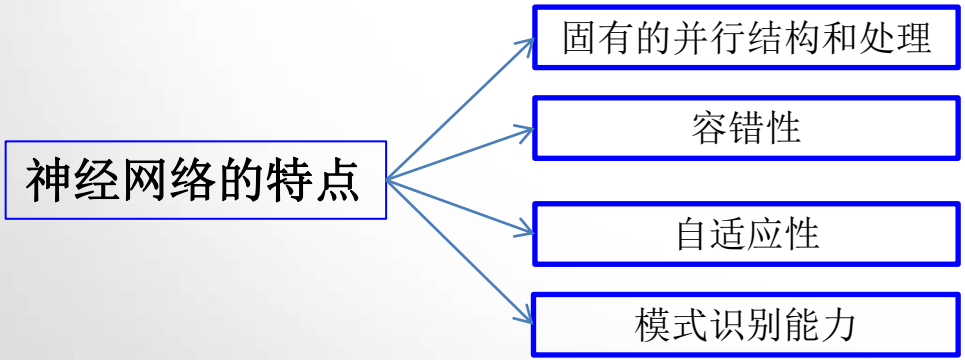
✓ 例：利用感知器，对4个二维样本进行分类：

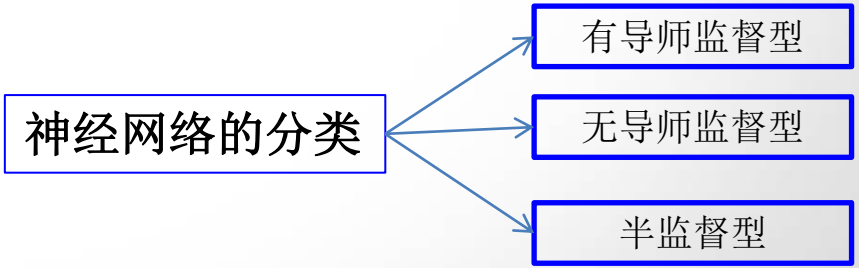
$X = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & -2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$，目标为$T = [0\ \ 0\ \ 1\ \ 1]$；

初始权重为$w = [0, 0], b = 0$

## ◘ 人工神经网络（Artificial Neural Network, ANN）

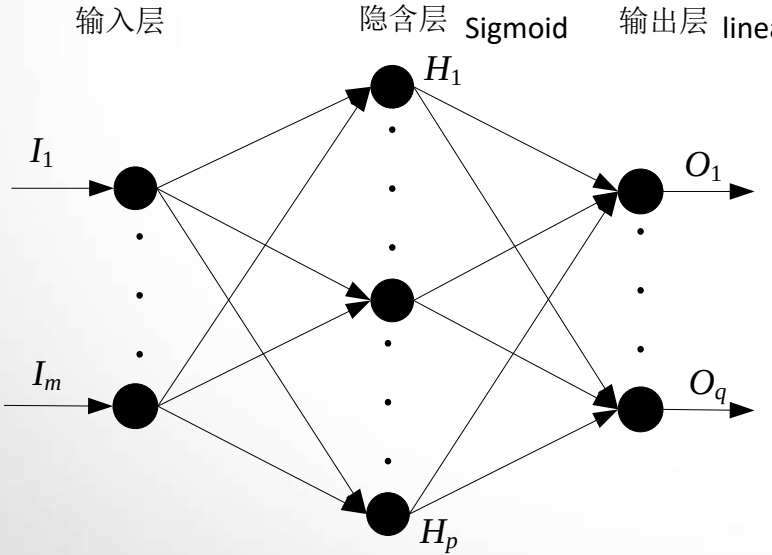
定义：ANN是对人脑或自然神经网络若干基本特性的抽象和模拟，是一种基于连接学说构造的智能仿生模型，是由大量神经元组成的非线性动力系统。神经网络可以看作是输入空间到输出空间的非线性映射，通过调整权重和阈值来“学习”和发现变量间的关系，实现分类或回归任务。



## ◘ BP神经网络（Back-propagation Neural Network）

**定义：BP网络是一种多层前馈网络，采用最小均方误差为学习函数，梯度下降算法为学习规则，是最广泛使用的网络。**




单隐层的BP网络结构

■数学理论基础—万能逼近理论

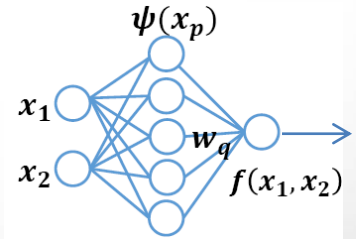
俄国数学家安德雷·柯尔莫哥洛夫,1956

**Kolmogorov定理**

$$f(x_1,\dots,x_n)=\sum_{q=1}^{q=2n+1} w_q\Big[\sum_{p=1}^{n}\psi(x_p)\Big]$$

st. $\psi$ *is a sigmoidal function*

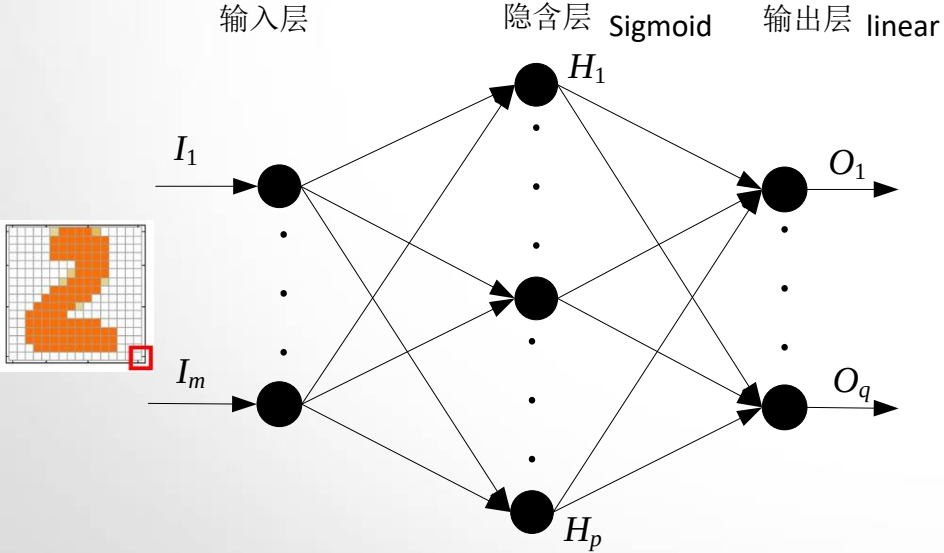
隐层大小为2n+1，**神经网络以任意精度逼近任意一个n元的连续实值函数。**




任意逼近

## BP神经网络（Back-propagation Neural Network）

**BP训练算法（链式求导法则）：**




单隐层的BP网络结构

◆ 输入层到隐含层的权重更新

$$w_{j,i}(t+1) = w_{j,i}(t) + \alpha\delta_j I_i$$

$\delta_j$ 为隐含层第*j*个节点的偏差信号；

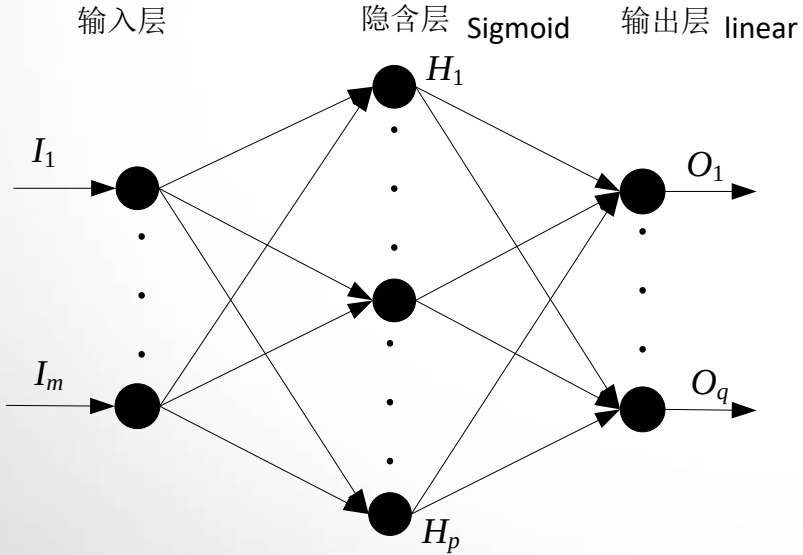
◆ 隐含层到输出层的权重更新

$$w_{k,j}(t+1) = w_{k,j}(t) + \alpha\delta_k H_j$$

$H_j$ 为隐含层第*j*个节点的输出信号；
$\delta_k$ 为输出层第*k*个节点的偏差信号；

## BP神经网络（Back-propagation Neural Network）

**BP训练算法：**




单隐层的BP网络结构

◆ 隐含层每个节点阈值的更新

$$b_j(t+1) = b_j(t) + \beta\delta_j$$

$\delta_j$ 为隐含层第*j*个节点的偏差信号；

$$\delta_j = \sum_k \delta_k w_{k,j} H_j(1-H_j)$$

◆ 输出层每个节点阈值的更新

$$b_k(t+1) = b_k(t) + \beta\delta_k$$

$\delta_k$ 为输出层第*k*个节点的偏差信号；

$$\delta_k = (T_k - O_k)O_k(1-O_k)$$

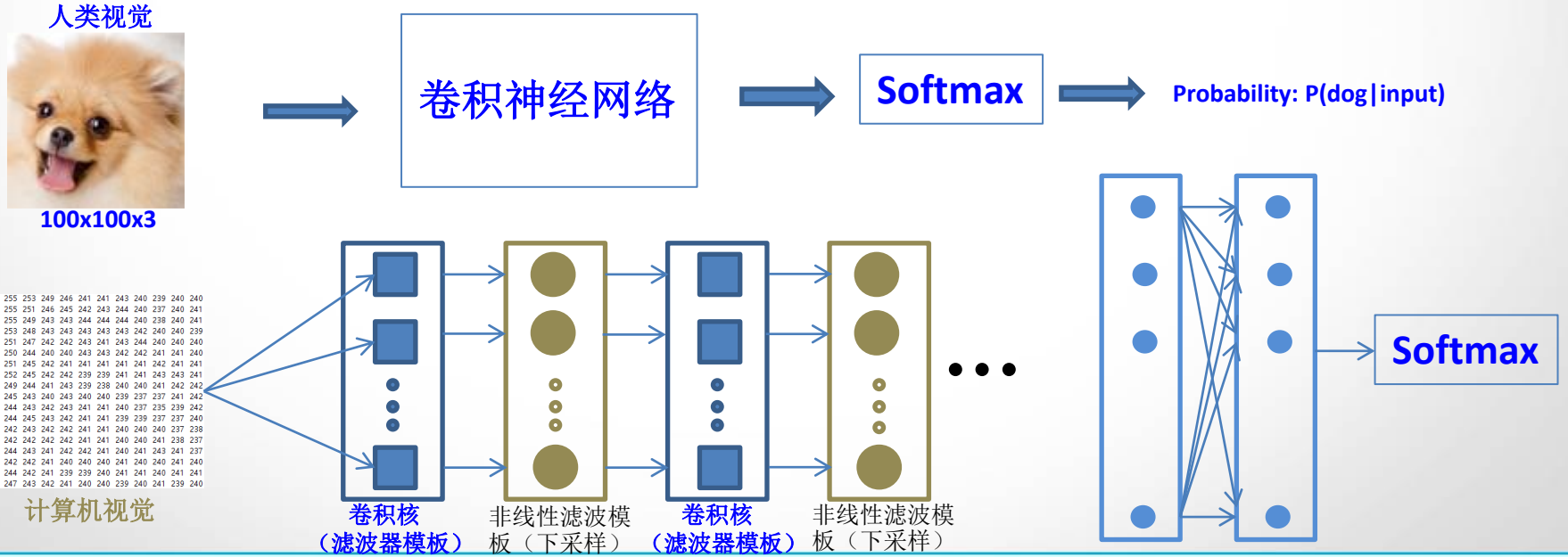
## 深度学习（Deep learning）

自2012年开始，深度学习的突破性进展

## 深度学习（Deep learning）

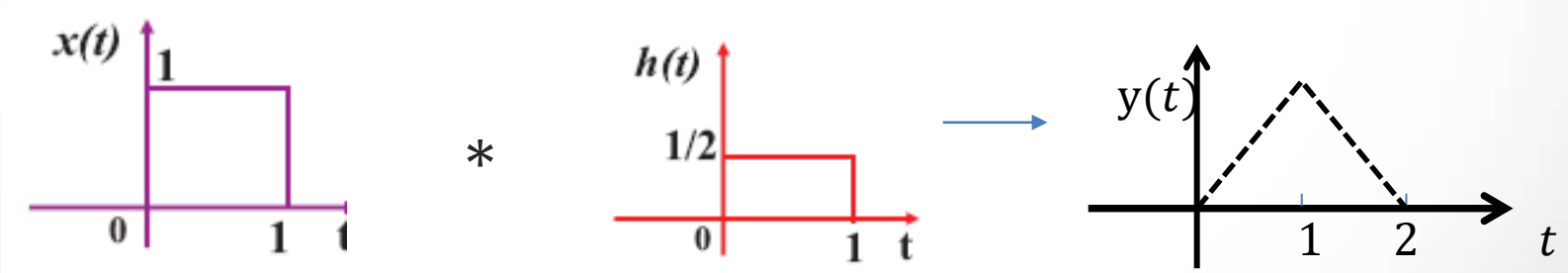
神经网络是深度学习研究的一部分，典型的网络为卷积神经网络(CNN)。

主要应用领域：图像或视频 (局部感受野，端到端学习：End to End Learning)



## ◘ 卷积（Convolution）与相关（Correlation）

$$卷积定义：y(t) = x(t) * h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(\tau)h(t-\tau)d\tau$$




$$相关定义：y(t) = x(t) * h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(\tau)h(\tau-t)d\tau$$

注：深度学习框架中的“卷积”实际上是“相关”运算，并非真正的卷积。

- 深度学习（Deep learning）
  - 卷积操作：

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

图像

| | | |
|---|---|---|
| 1 | -1 | -1 |
| -1 | 1 | -1 |
| -1 | -1 | 1 |

神经元1

卷积核1（3x3模板）

| | | |
|---|---|---|
| -1 | 1 | -1 |
| -1 | 1 | -1 |
| -1 | 1 | -1 |

卷积核2（ 3x3模板）

神经元2

先考虑卷积核1：

| | | |
|---|---|---|
| 1 | -1 | -1 |
| -1 | 1 | -1 |
| -1 | -1 | 1 |

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

3 -1

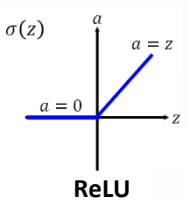
卷积核在图像上逐步滑动

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

卷积核1

| | | | |
|---|---|---|---|
| 3 | -1 | -3 | -1 |
| -3 | 1 | 0 | -3 |
| -3 | -3 | 0 | 1 |
| 3 | -2 | -2 | -1 |

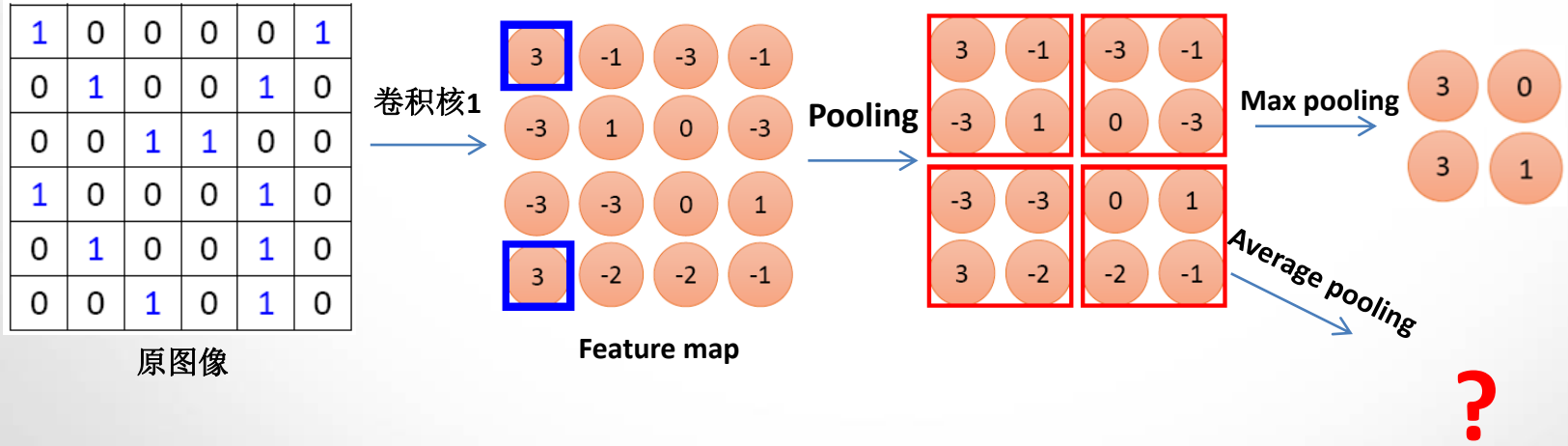
Feature map



ReLU

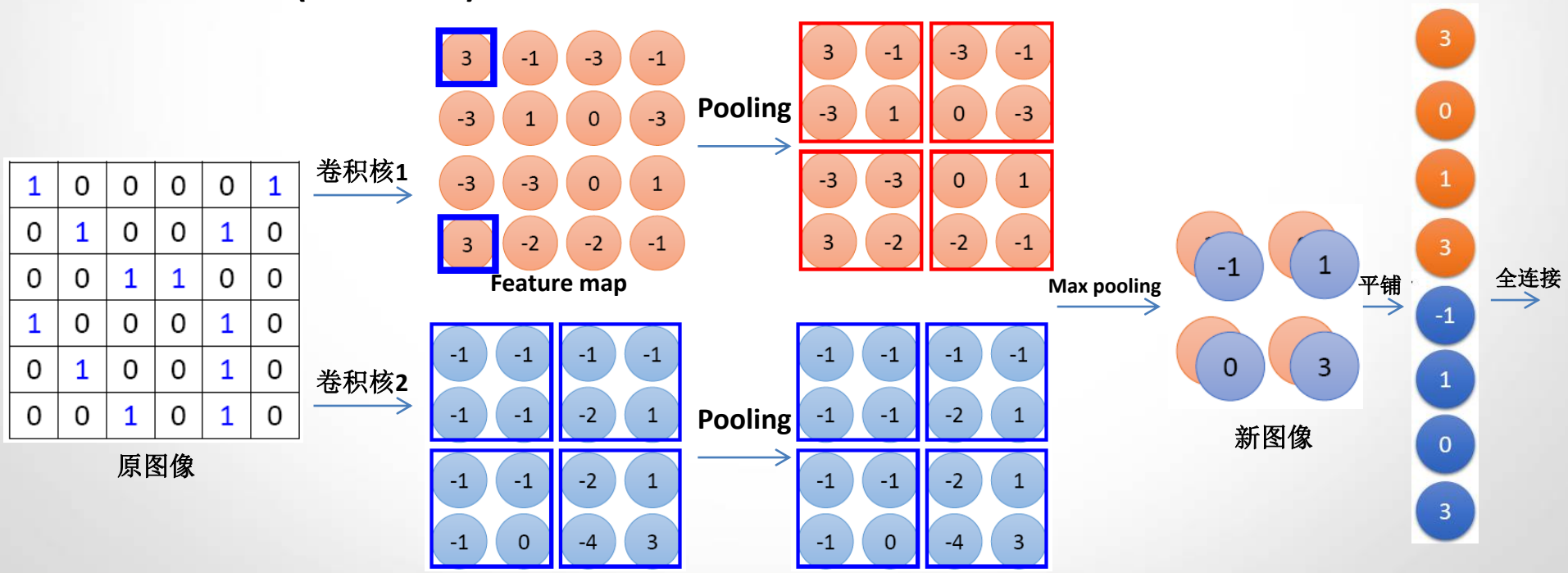
- 深度学习（Deep learning）
  - 下采样操作(Pooling池化层)：

常见方法：Average pooling(均值滤波)和Max pooling(类似非线性滤波)

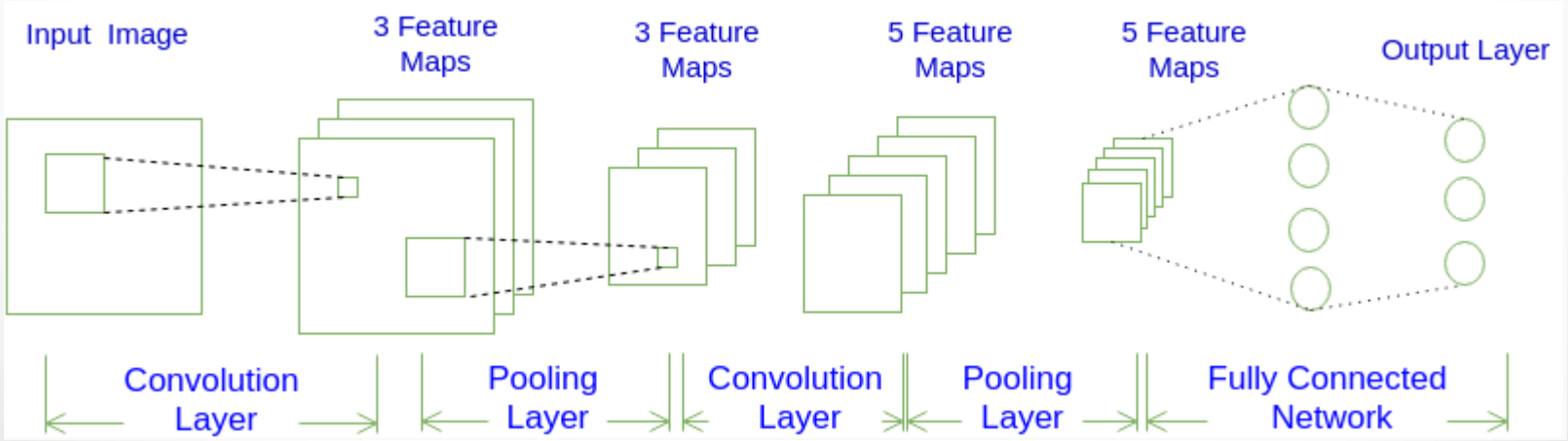



注：每一层输出还需要非线性激活函数映射，通常为ReLU: max(0,z)激活函数

- 深度学习（Deep learning）
  - 全连接层(串联平铺)：



- 深度学习（Deep learning）
  - 卷积神经网络完整结构：



- 深度学习（Deep learning）
  - CNN的训练方法

1. 损失函数：

Logistic Regression？

Softmax交叉熵损失：$L = -\sum_{i=1}^{m} \log P_i = -\sum_{i=1}^{m} \log \frac{e^{z_{y_i}}}{\sum_{j=1}^{K} e^{z_j}}$（交叉熵损失）

2. Mini-batch随机梯度下降

提高计算效率，增强网络泛化能力

3. 误差后向传播BP算法

包括三个部分的反传：卷积层、池化层、输出层

4. 深度学习开发程序

Pytorch, TensorFlow, Caffe, Jittor, MegEngine (Python, GPU)

CNN优点：

- 局部连接
- 权重共享
- 时间/空间次采样

- 关于交叉熵损失的基础概念回顾

➢ **信息量**：信息消除不确定性的程度。

定义：信息量的大小与信息x发生的概率成反比，$I(x) = -\log P(x)$

➢ **信息熵**：信息量的熵，即所有信息量的期望。

定义：$H(X) = -\sum_{i=1}^{N} P(x_i) \log P(x_i)$

➢ **相对熵**：两个概率分布p(x)和q(x)之间的差异度量，一般采用KL散度

定义：$D_{KL}(p(X) \| q(X)) = \sum_{i=1}^{N} p(x_i) \log \frac{p(x_i)}{q(x_i)}$，KL散度越小，表示两个分布更接近

- 关于交叉熵损失的基础概念回顾
  - 交叉熵：相对熵和信息熵的总和。

定义：对KL散度展开，$D_{KL}(p(X) \| q(X)) = \sum_{i=1}^{N} p(x_i) \log \frac{p(x_i)}{q(x_i)} =$

$\sum_{i=1}^{N} p(x_i) \log p(x_i) - \sum_{i=1}^{N} p(x_i) \log q(x_i) = -H(X) + (-\sum_{i=1}^{N} p(x_i) \log q(x_i))$

其中，**p(x)**为真实分布，**q(x)**为预测分布，**H(X)**可以看作常数。

交叉熵的公式定义为：

$$H(p,q) = -\sum_{i=1}^{N} p(x_i) \log q(x_i)$$

$$= -\sum_{i=1}^{N} \sum_{c=1}^{C} p_c(x_i) \log q_c(x_i) = -\sum_{i=1}^{N} \log q(x_i)$$

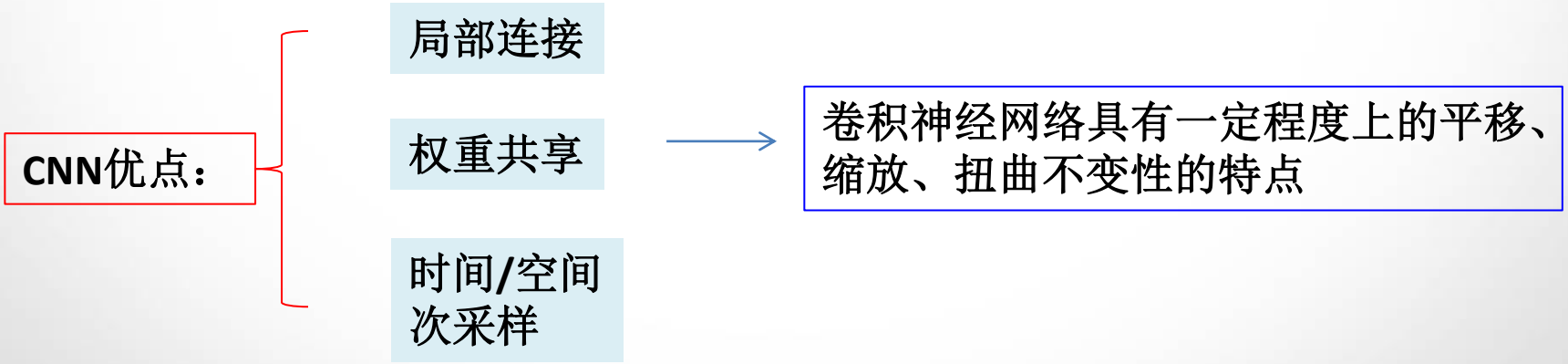
| 狗 | 猫 | 鸟 | |
|---|---|---|---|
| 0 | 1 | 0 | 真实 |
| 0.2 | 0.7 | 0.1 | 预测 |

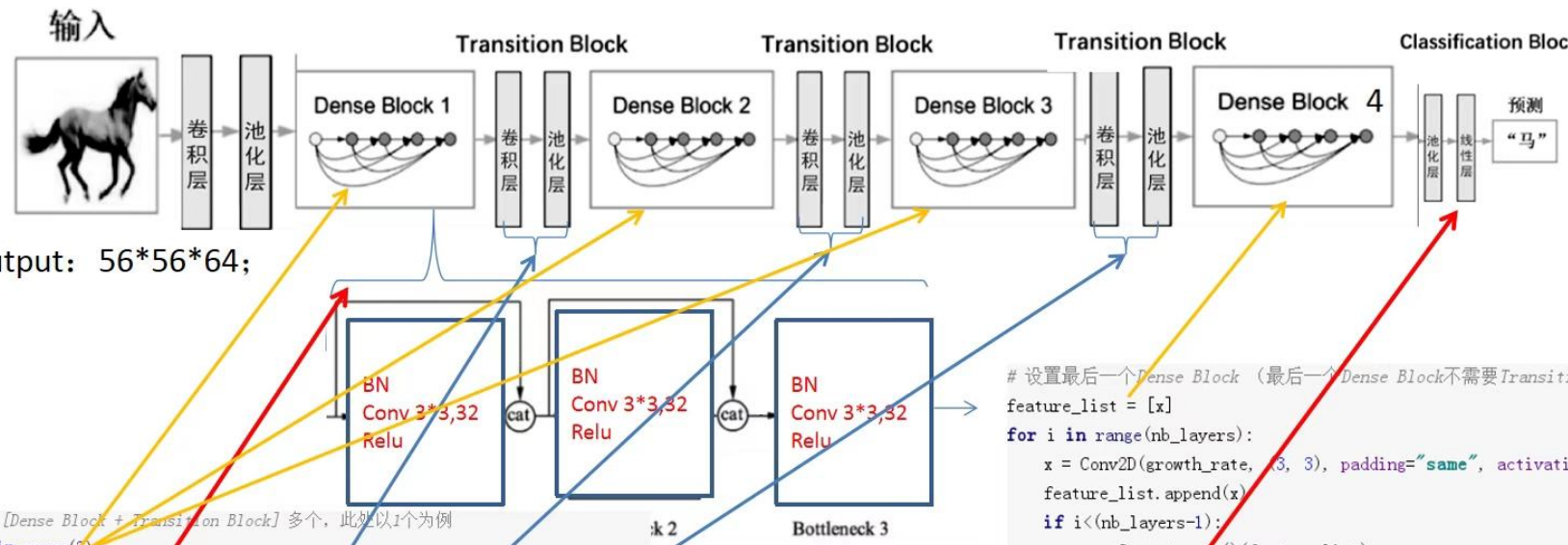
此处，KL散度和交叉熵等价

## ◘ 深度学习（Deep learning）

### ➢ CNN优点

启发于生物上的“感受野”机制，在视觉神经系统中，一个神经元的感受野是指视网膜的特定区域，只有在该区域内的刺激，才能激活该神经元。






```
# 设置 [Dense Block + Transition Block] 多个，此处以1个为例
for j in range(3):
    # 1.Dense Block
    # 用一个列表存放提供特征的层
    feature_list = [x]
    for i in range(nb_layers):
        x = BatchNormalization()(x)
        x = Conv2D(growth_rate, (3, 3), padding="same", activation='relu')(x)
        feature_list.append(x)
        if i<(nb_layers-1):
            x = Concatenate()(feature_list)


    # 2.Transition Block
    x = BatchNormalization()(x)
    x = Conv2D(growth_rate, (1, 1), padding="same", activation='relu')(x)
    x = AveragePooling2D((2, 2), strides=(2, 2))(x)
```

```
# 设置最后一个Dense Block （最后一个Dense Block不需要Transition Block）
feature_list = [x]
for i in range(nb_layers):
    x = Conv2D(growth_rate, (3, 3), padding="same", activation='relu')(x)
    feature_list.append(x)
    if i<(nb_layers-1):
        x = Concatenate()(feature_list)

# 全局池化
x = GlobalAveragePooling2D()(x)
x = Dense(2,activation='softmax')(x)
output_layer = x
model = Model(input_layer,output_layer)
model.summary()
```

```
#代码示例：6-16
from keras.optimizers import Adam
model.compile(loss='categorical_crossentropy',optimizer=Adam(lr=0.001),metrics=['accuracy'])
model.fit_generator(train_generator,epochs=5,validation_data=validation_generator)
```

## ◘ Transformer（变换器）

**背景：**2017年由谷歌团队首次提出，论文“Attention is All You Need”发表在机器学习顶会NeurIPS，在自然语言处理的多个任务上取得惊艳的效果。其在结构上完全抛弃了CNN和RNN，完全由注意力机制构成。

**贡献：**大语言模型均基于Transformer构建，如BERT、GPTs、ChatGPT (Chat Generative Pretraining Transformer)

**延伸：**视觉Transformer （ViT）的提出，开启了计算机视觉从CNN向Transformer的技术转变，成为视觉大模型的核心技术。

**大一统：**视觉-语言多模态大模型，如Sora、GPT4o

A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, et al. “Attention Is All You Need”, NeurIPS, 2017.

## Transformer（变换器）

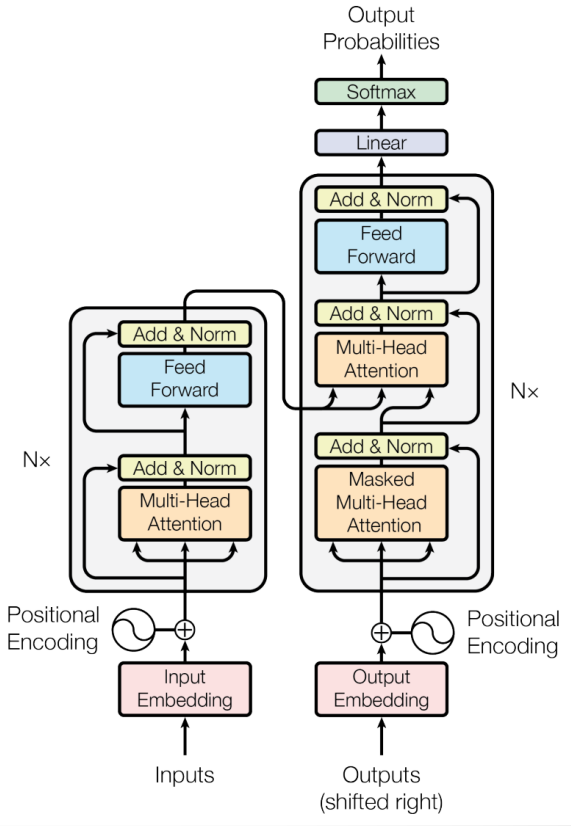
**Transformer是一个Encoder-Decoder结构。**

**输入：一段文本“ I am in CQ”**

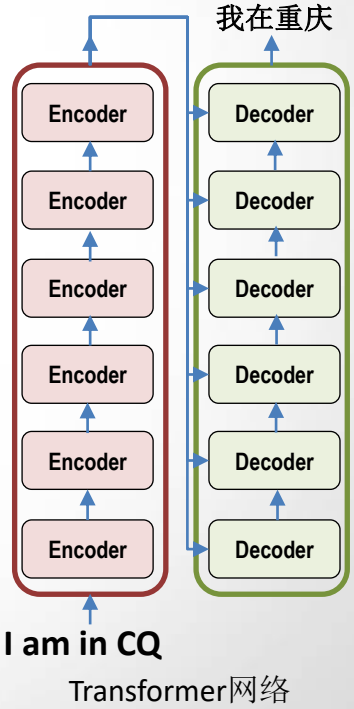
**输出：一段文本“我在重庆”**

**Encoder (编码器)：将输入变换到编码空间**

**Decoder(解码器)：获得预测输出（翻译）**




Transformer基本结构 (1个encoder+1个decoder)

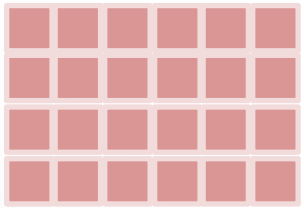



Transformer网络

## ◘ Encoder的输入（embedding）

❶ 输入嵌入 (input embedding)
将每个单词进行word embedding，
形成512维的向量

“I”
“have”
“a”
“dog”



❷ 位置编码 (positional encoding)
将每个单词的位置进行编码，
形成512维的向量

“I”
“have”
“a”
“dog”

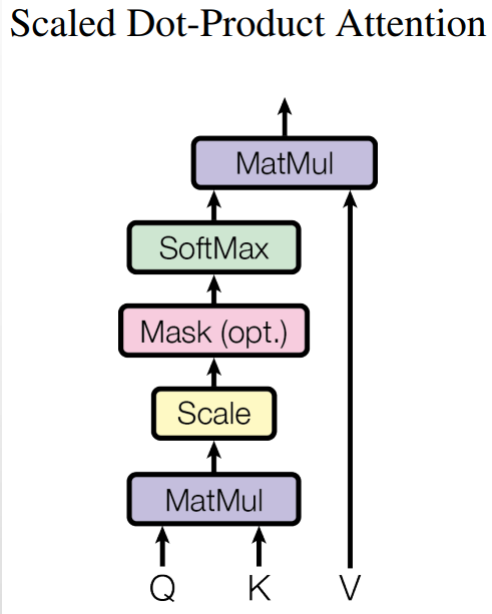
$$PE_{(pos,2i)} = sin(pos/10000^{2i/d_{\text{model}}})$$
$$PE_{(pos,2i+1)} = cos(pos/10000^{2i/d_{\text{model}}})$$

**Encoder的输入$\mathbf{X}_{n\times d}$=input embedding + positional encoding**

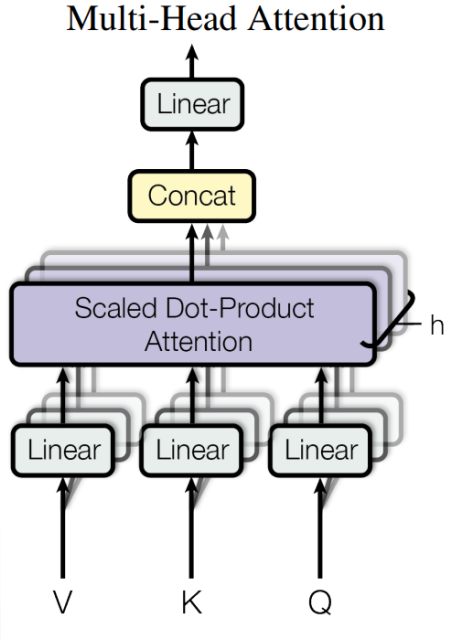
其中，n是单词的数量，d是嵌入维度

## ◘ Attention（注意力机制）

### ❶ Self-attention(自注意力)



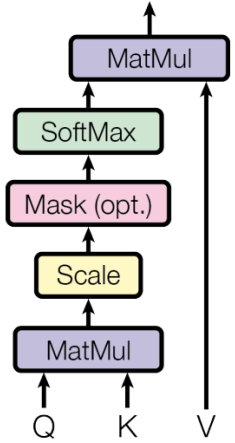

### ❷ Multi-head attention (多头注意力)



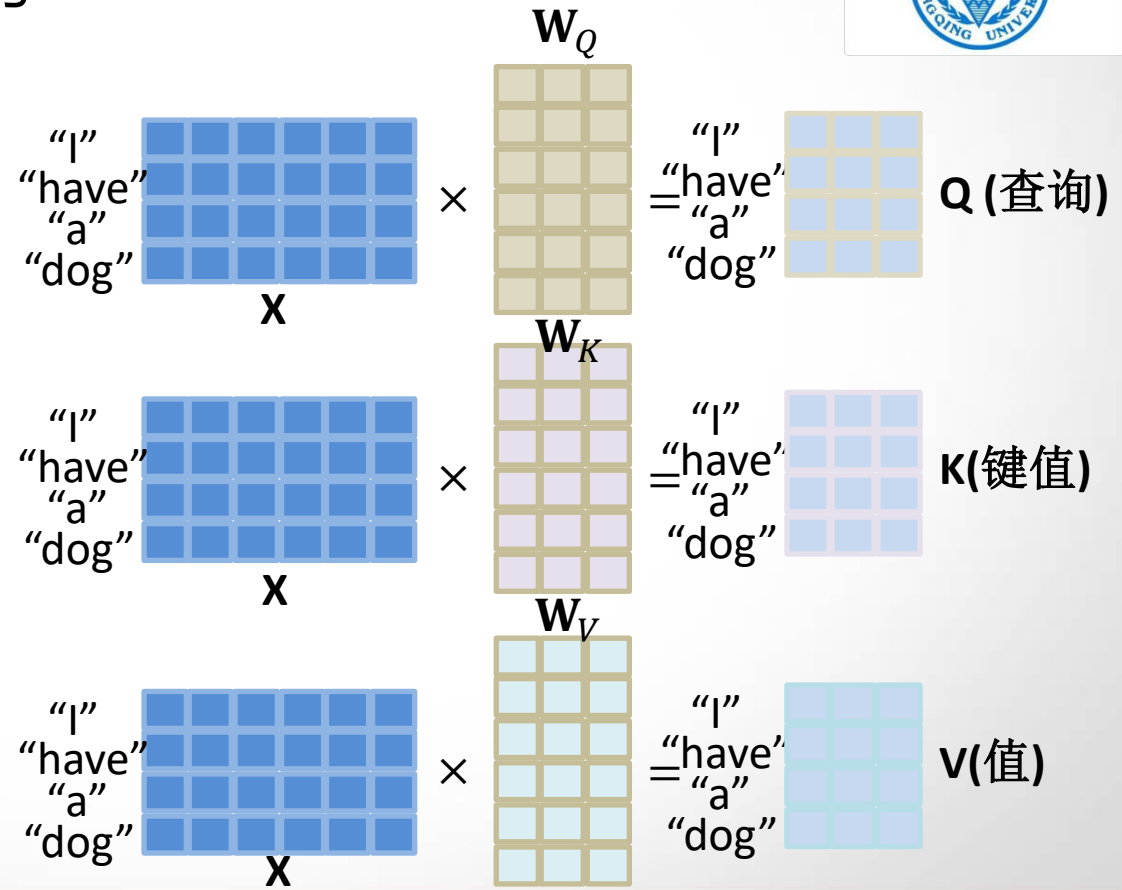
## ◘ Attention（注意力机制）

### ❶ Self-attention(自注意力)

Scaled Dot-Product Attention



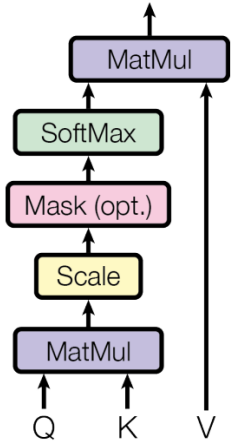

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}})V$$



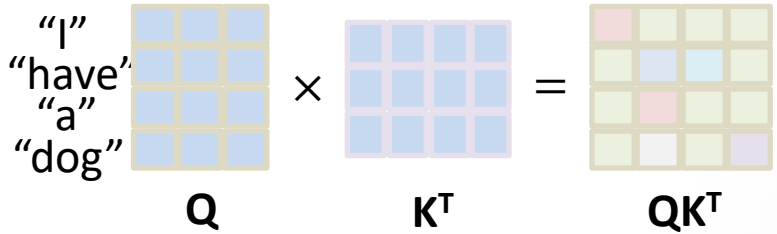
## ◘ Attention（注意力机制）

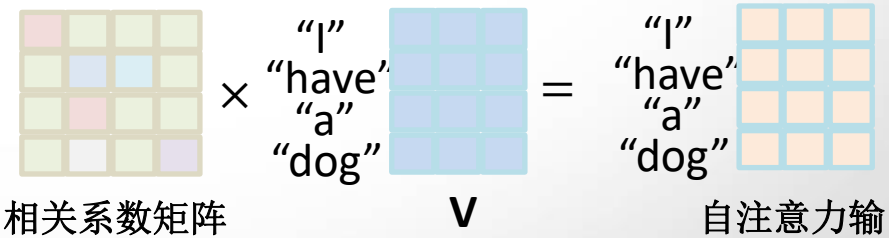
### ❶ Self-attention(自注意力)

Scaled Dot-Product Attention



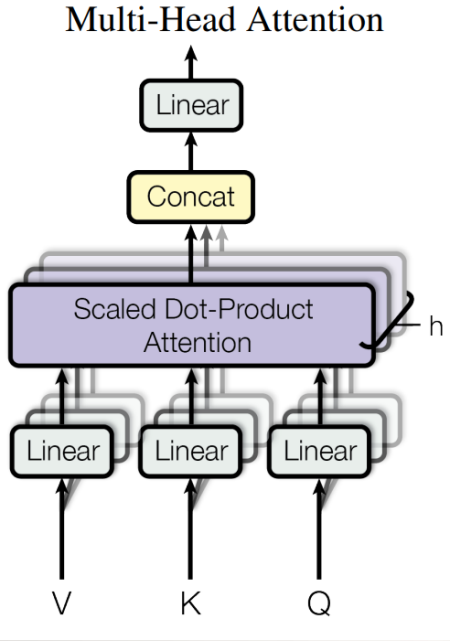

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}})V$$

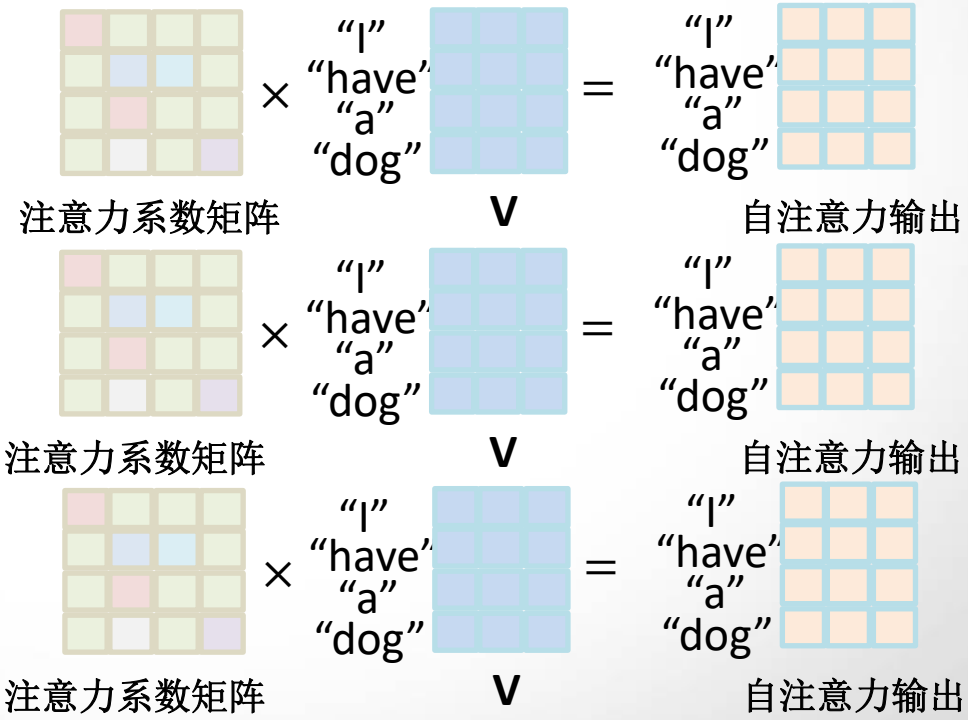


## ◘ Attention（注意力机制）

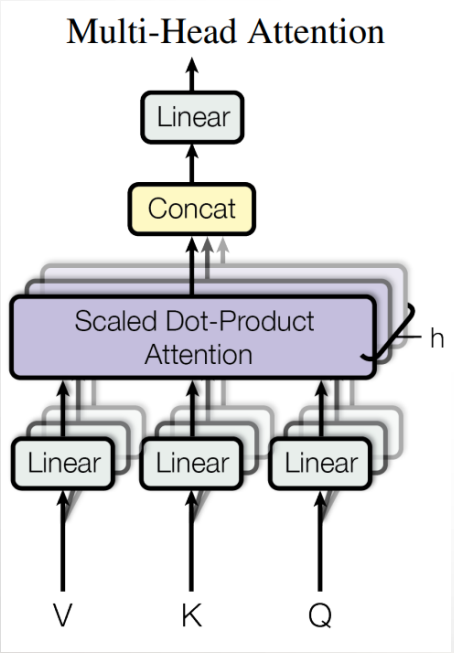
### ❷ Multi-head attention (多头注意力)

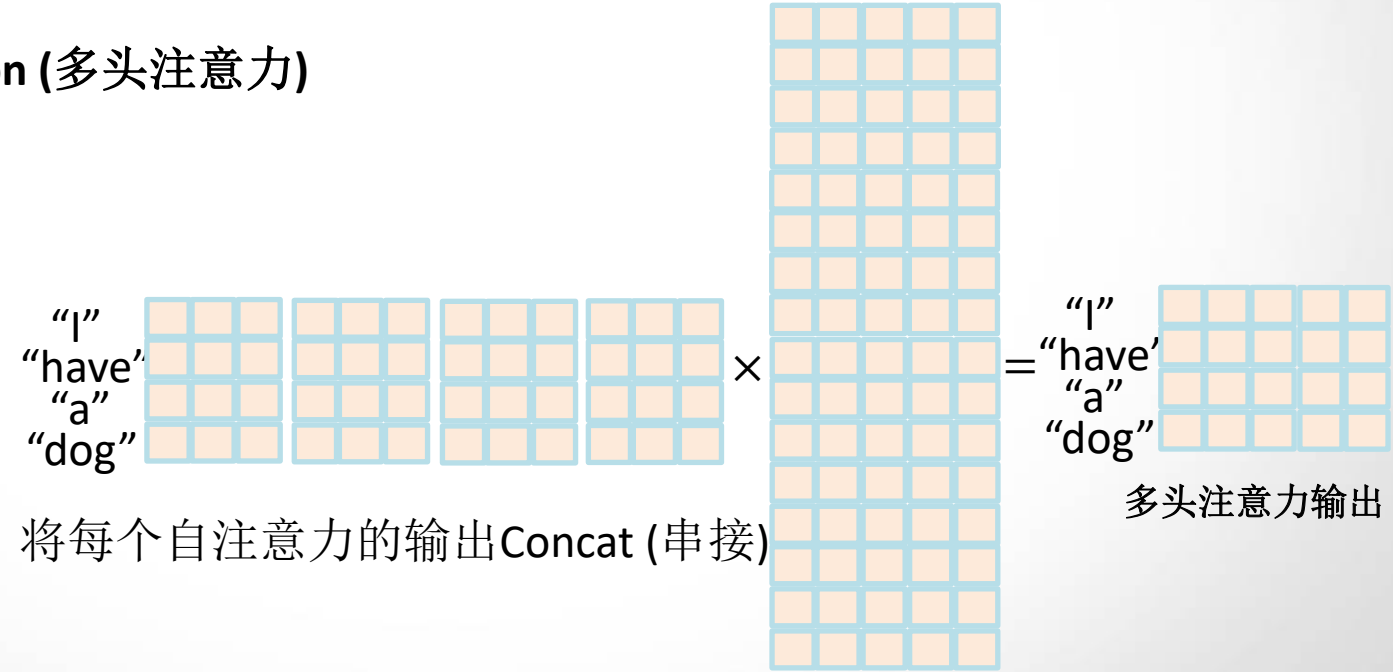


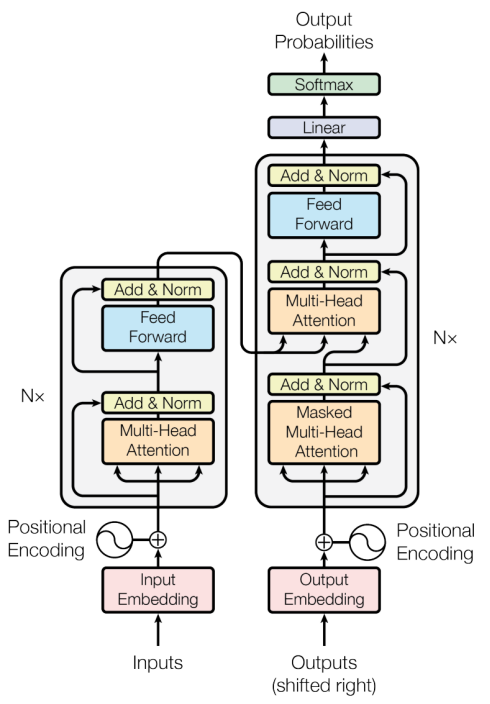
## ◘ Attention（注意力机制）

### ❷ Multi-head attention (多头注意力)



## ◘ Add、Normalization、Feed Forward（残差连接、归一化和前馈网络）

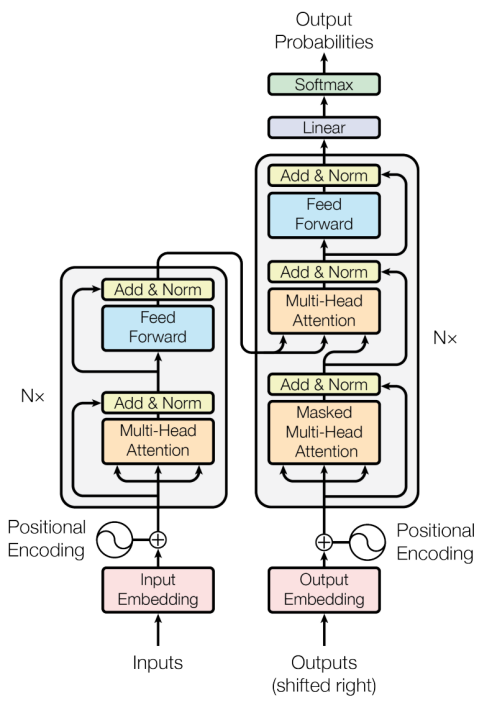



X=LayerNorm(X+MHA(X))

$$\mathrm{FFN}(x) = \max(0, xW_1 + b_1)W_2 + b_2$$

Encoder输出：Y=LayerNorm(X+FFN(X))

## Decoder




与Encoder类似，区别在于：

1. 包括两个MHA和三个Add&Norm
2. 第一个MHA是masked MHA，即预测某个单词时，需要对该单词之后的词汇掩盖。

《论语·述而》中有言：

“志于道，据于德，依于仁，游于艺”

希望本课程可激发大家学习人工智能的兴趣、了解人工智能的知识、乐于掌握人工智能的技能、形成人工智能伦理品行。

# 谢谢！

## 实验室论文、源码和数据发布

https://www.leizhang.tk

《机器学习》


主讲：张 磊
E-mail: leizhang@cqu.edu.cn