Тверской
государственный
технический
университет

Интеллектуальные информационные системы

Искусственные нейронные сети
Deep Learning Intro

2025 г.

$\mathbf{DL} \subset \mathbf{NN} \subset \mathbf{ML} \subset \mathbf{AI}$

Artificial Intelligence (AI)

- The broad concept of machines performing tasks that typically require **human intelligence**.

Machine Learning (ML)

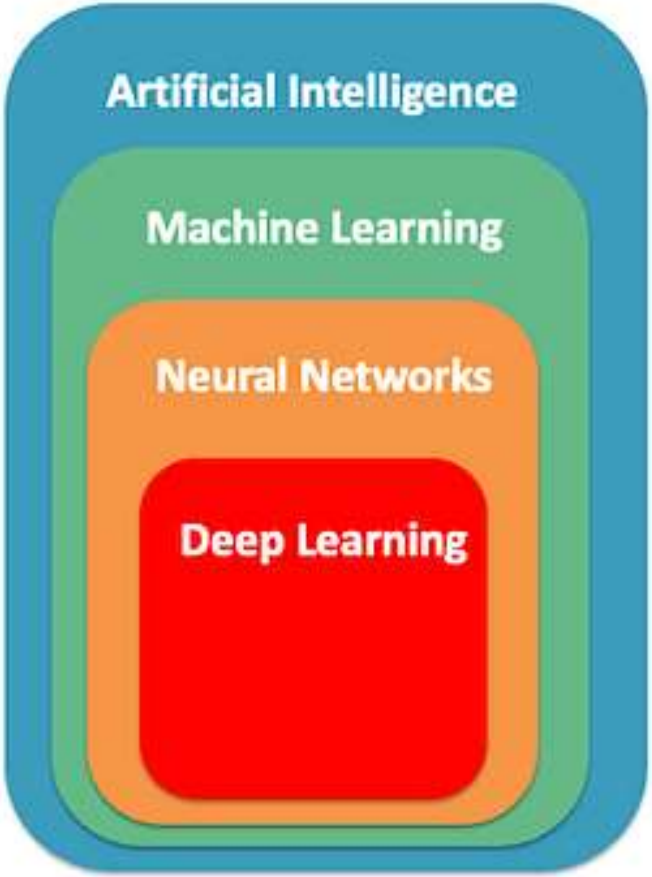
- A subset of AI where systems **learn from data**, identify patterns, and make decisions with minimal human intervention.

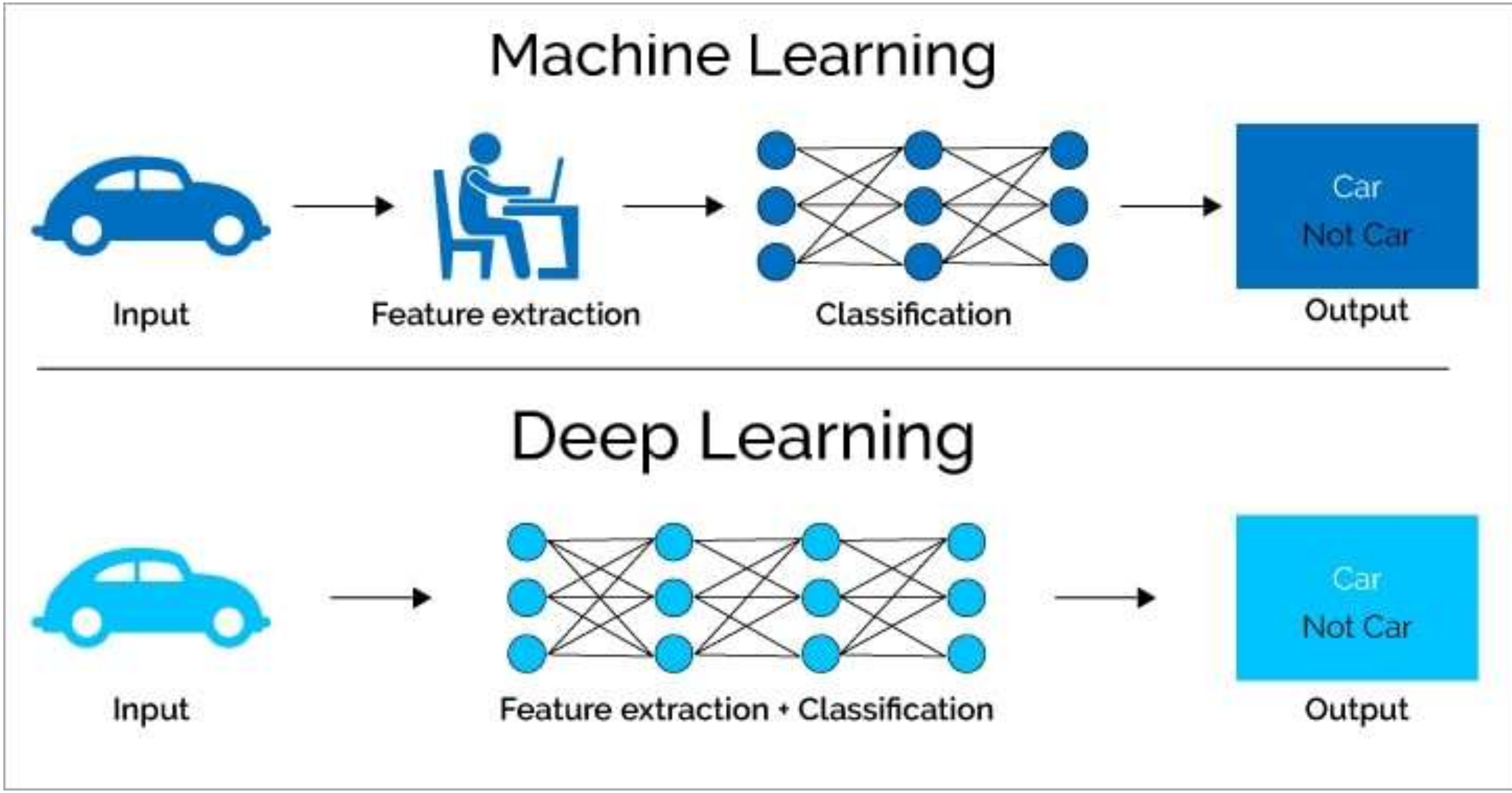
Neural Networks (NN)

- A subset of ML. **Computational models inspired by the human brain**; used in ML to recognize complex patterns.

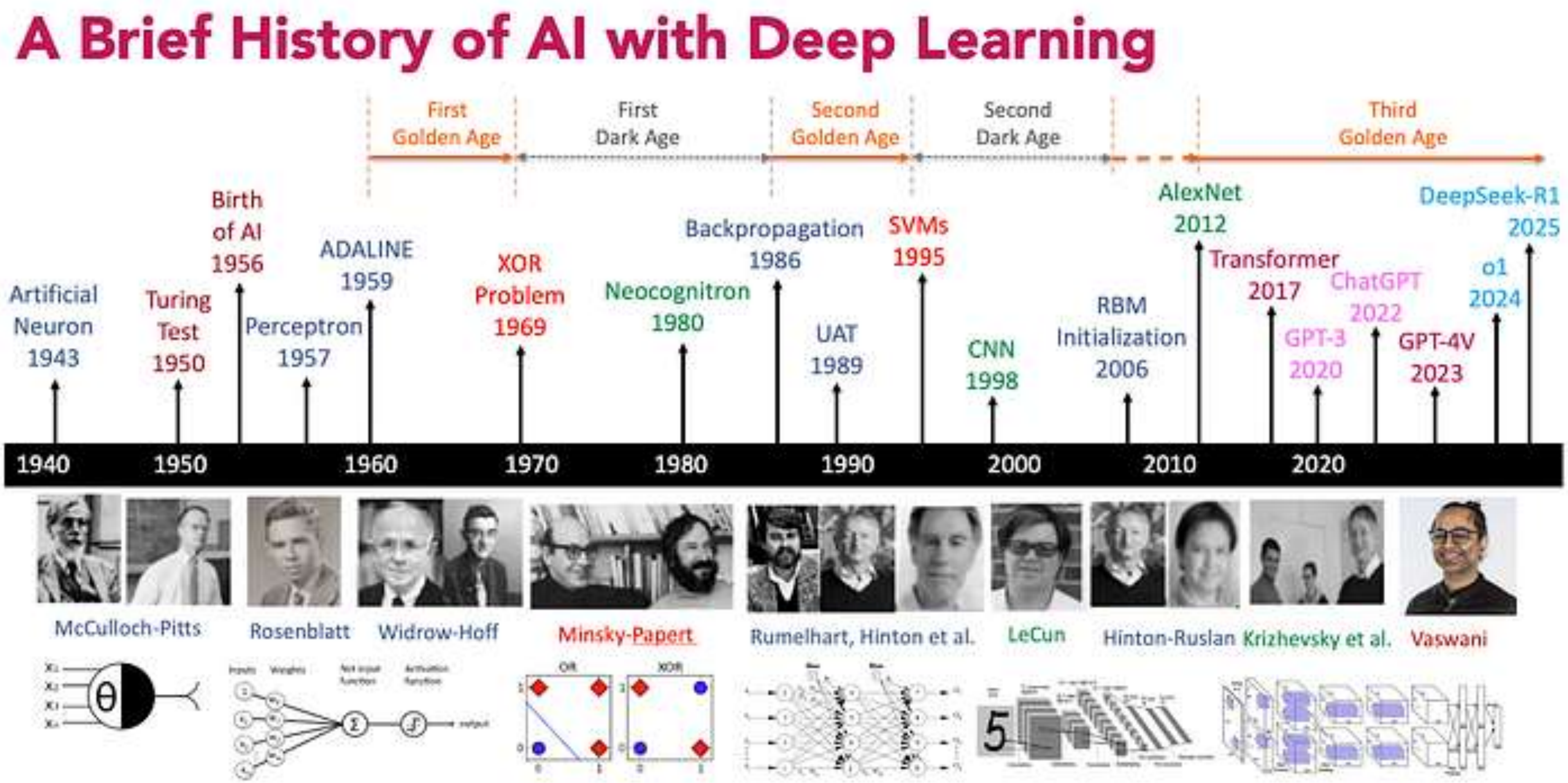
Deep Learning (DL)

- A subset of NN using **neural networks with many layers** ("deep" architectures).




Machine Learning
Input
Feature extraction
Classification
Car
Not Car
Output
Deep Learning
Input
Feature extraction + Classification
Car
Not Car
Output

История развития нейронных сетей

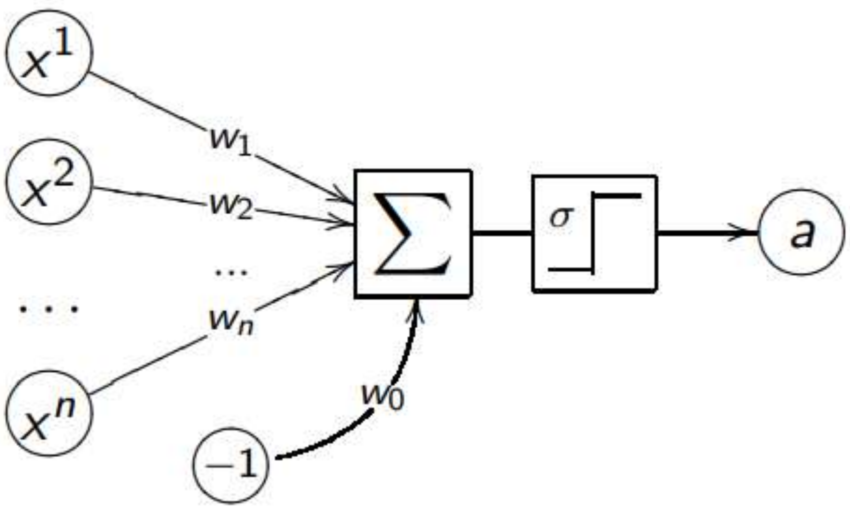


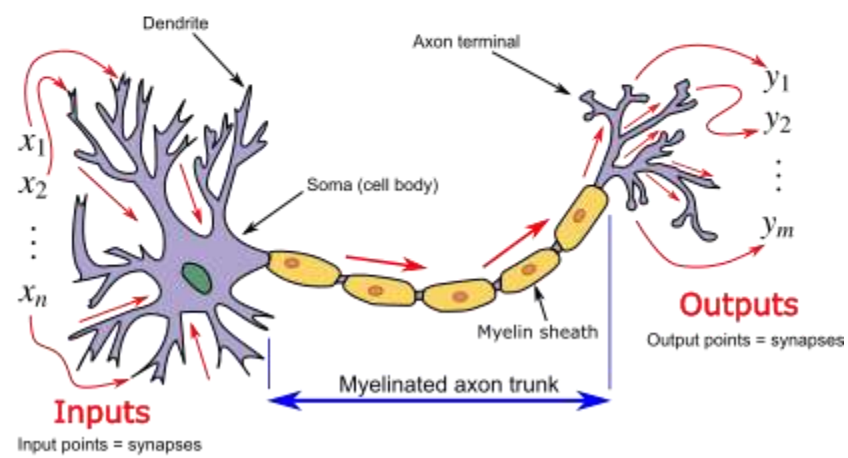
McCulloch-Pitts Neuron

Линейная модель нейрона:

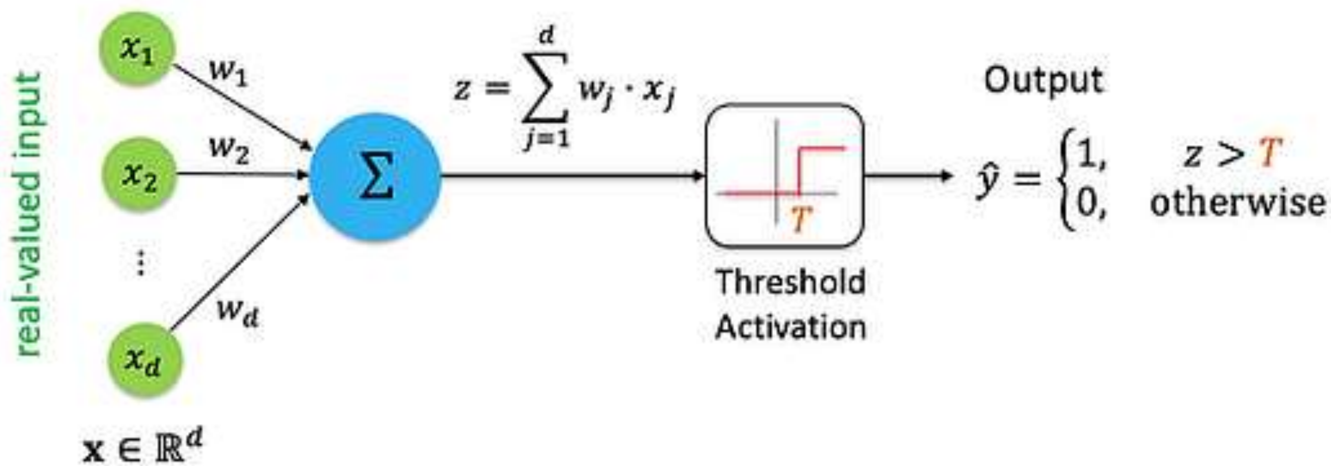
$$a(x, w) = \sigma(\langle w, x \rangle) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j\, f_j(x) - w_0\right)$$

$\sigma(z)$ – функция активации
w_j – весовые коэффициенты синаптических связей
w_0 – порог активации



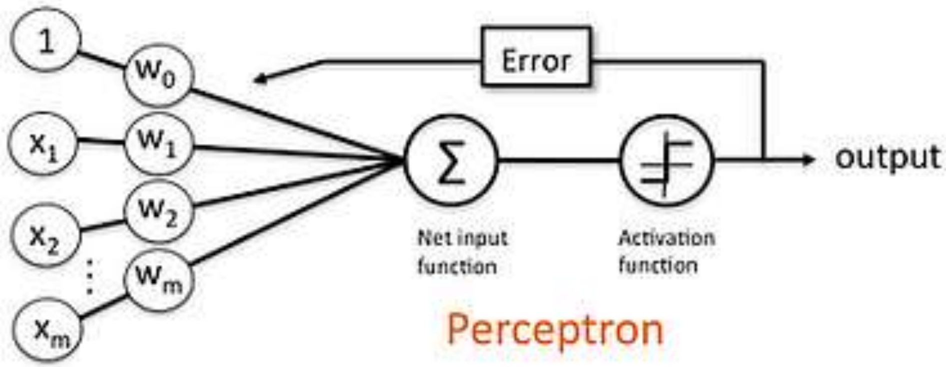


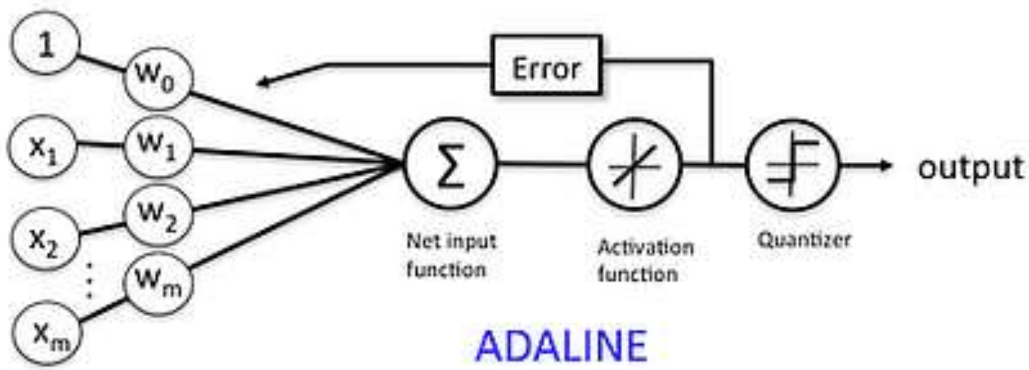
Rosenblatt’s Perceptron Model



Frank Rosenblatt

ADALINE (Adaptive Linear Neuron aka Delta Learning Rule)



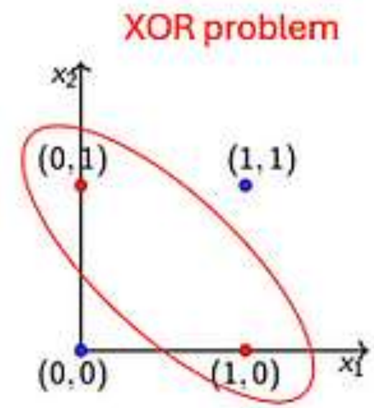


Bernard Widrow

Marcian Hoff

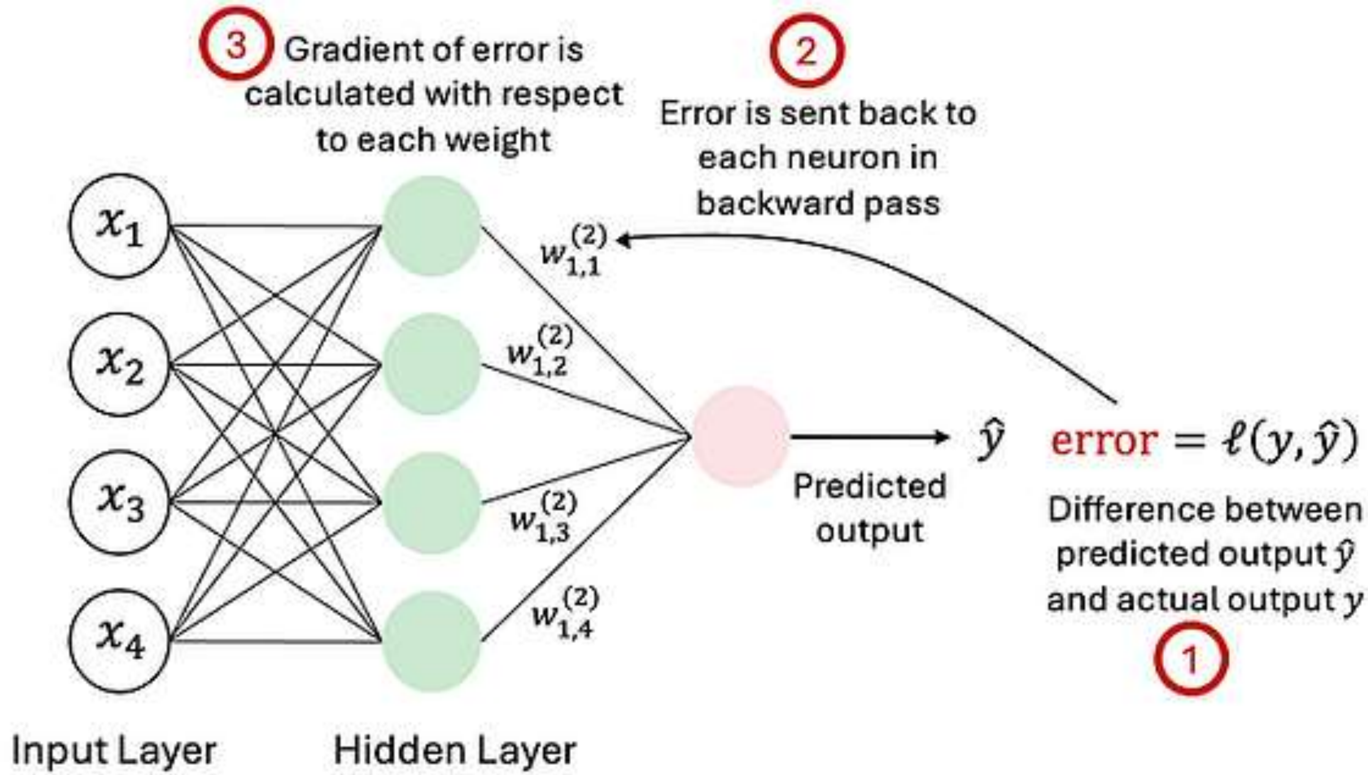
The XOR Problem (1969)

Minsky and **Papert**: Perceptrons: An introduction to computational geometry. MIT Press, 1969.



В книге “Perceptrons.” математически доказаны ограничения перцептронов. Было показано, что они принципиально не в состоянии выполнять многие из тех функций, которые хотели получить от перцептронов.
К тому же, в то время была слабо развита теория о параллельных вычислениях, а перцептрон полностью соответствовал принципам таких вычислений.

Backpropagation (1970s-1980s)



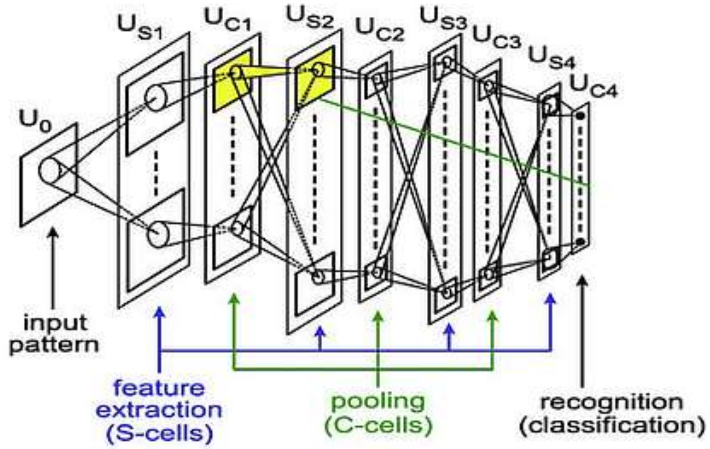
David Rumelhart

Geoffrey Hinton

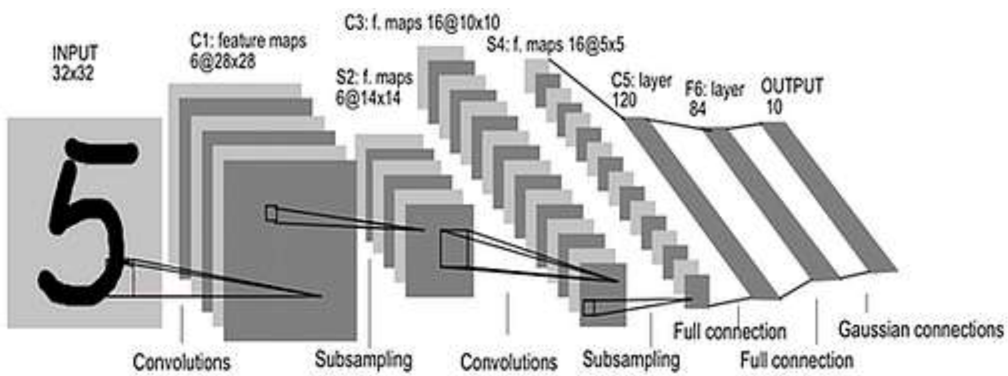
Ronald Williams

Convolutional Neural Networks (1980s — 2010s)

Neocognitron



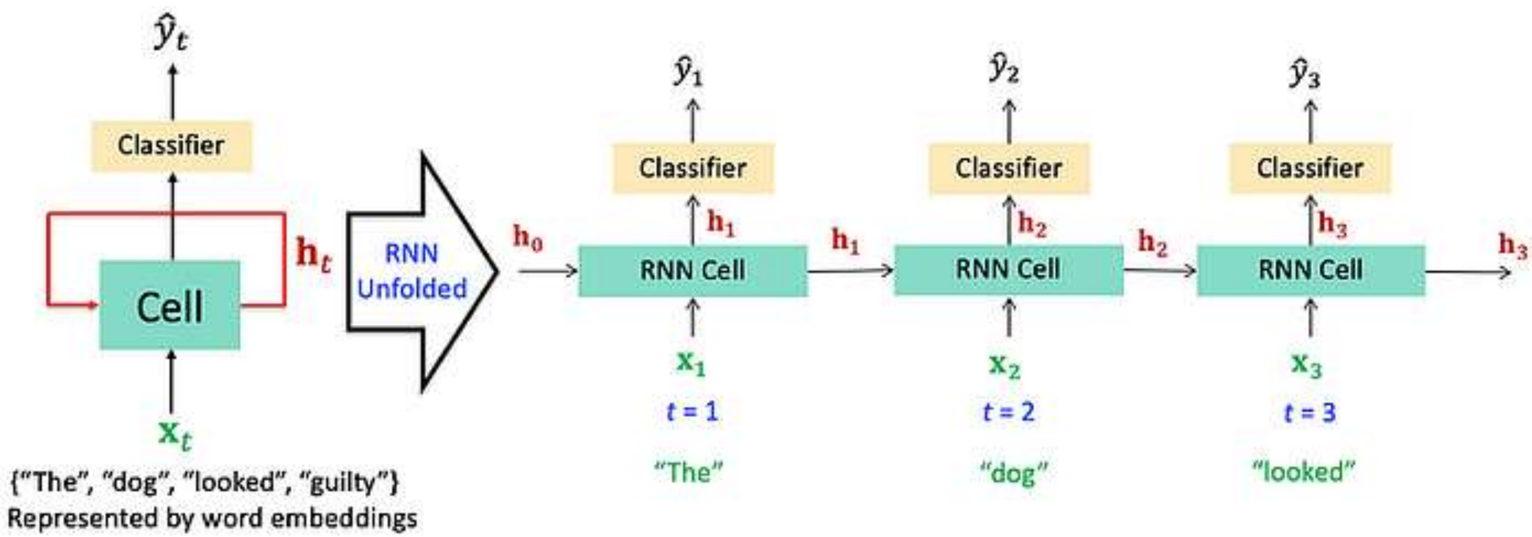
Kenji Fukushima

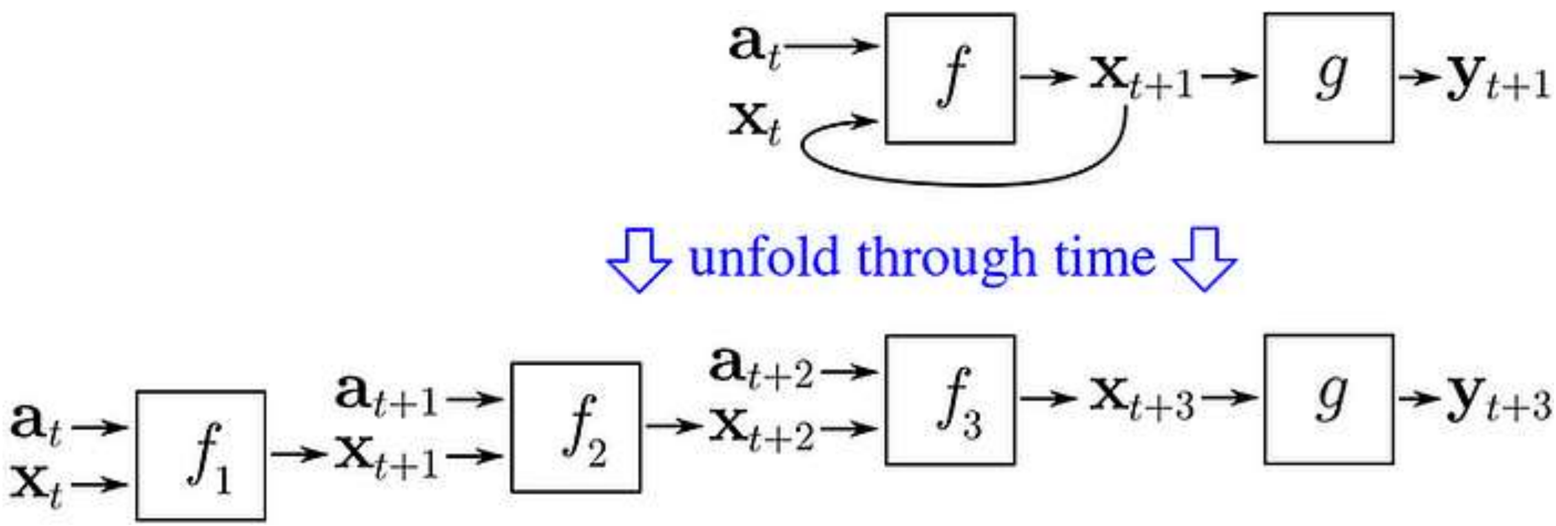


LeNet-5

Yann LeCun

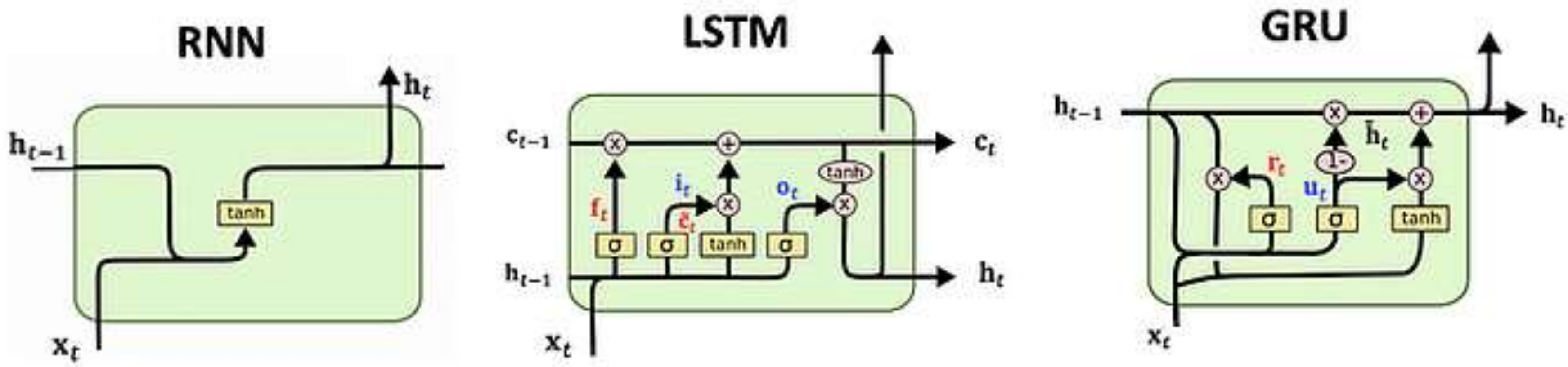
Recurrent Neural Networks (1986–2017)

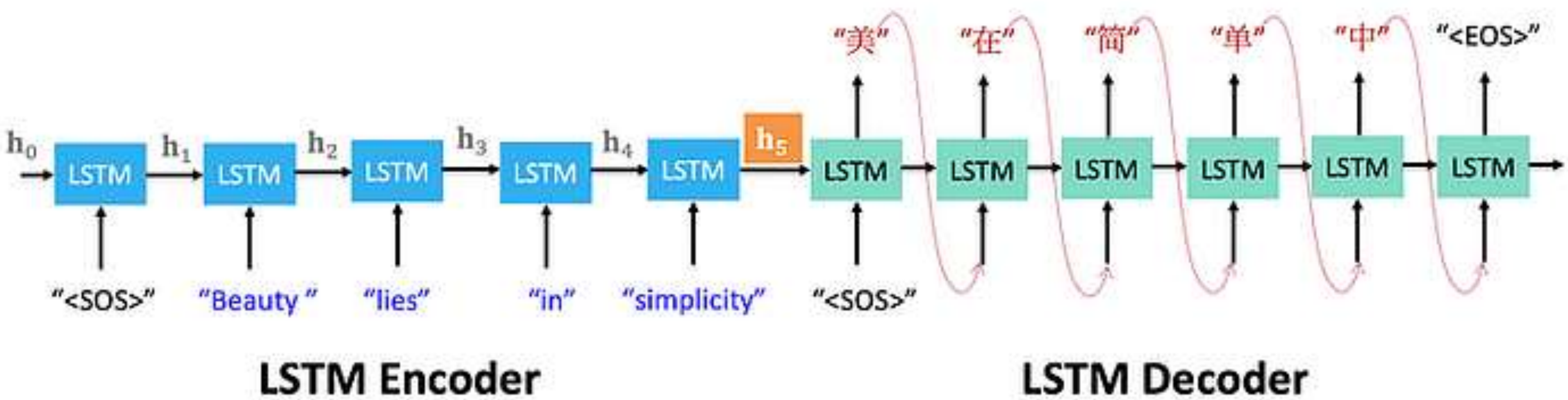




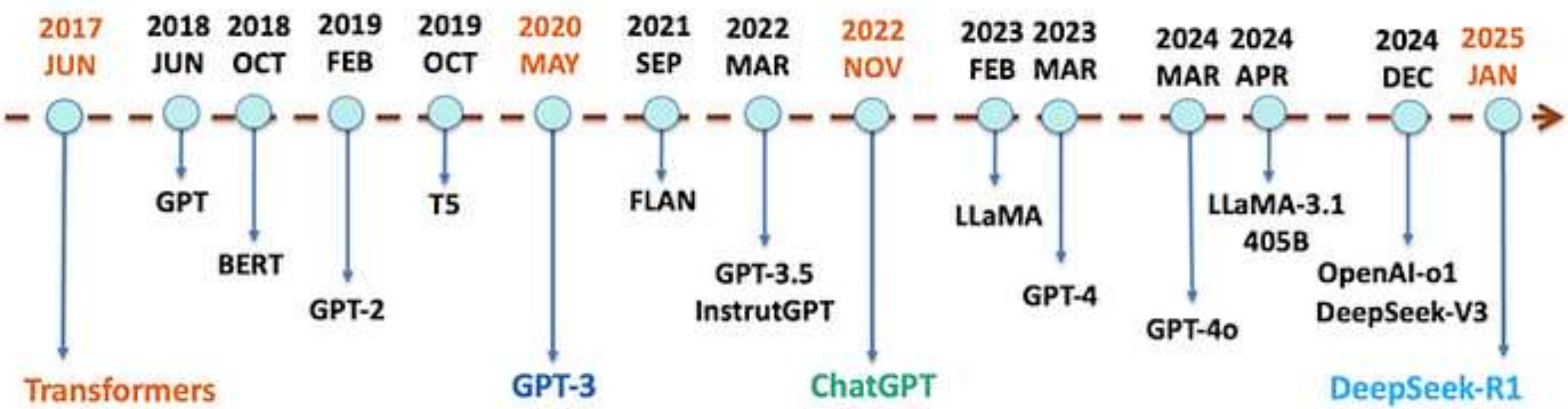
Recurrent Neural Networks

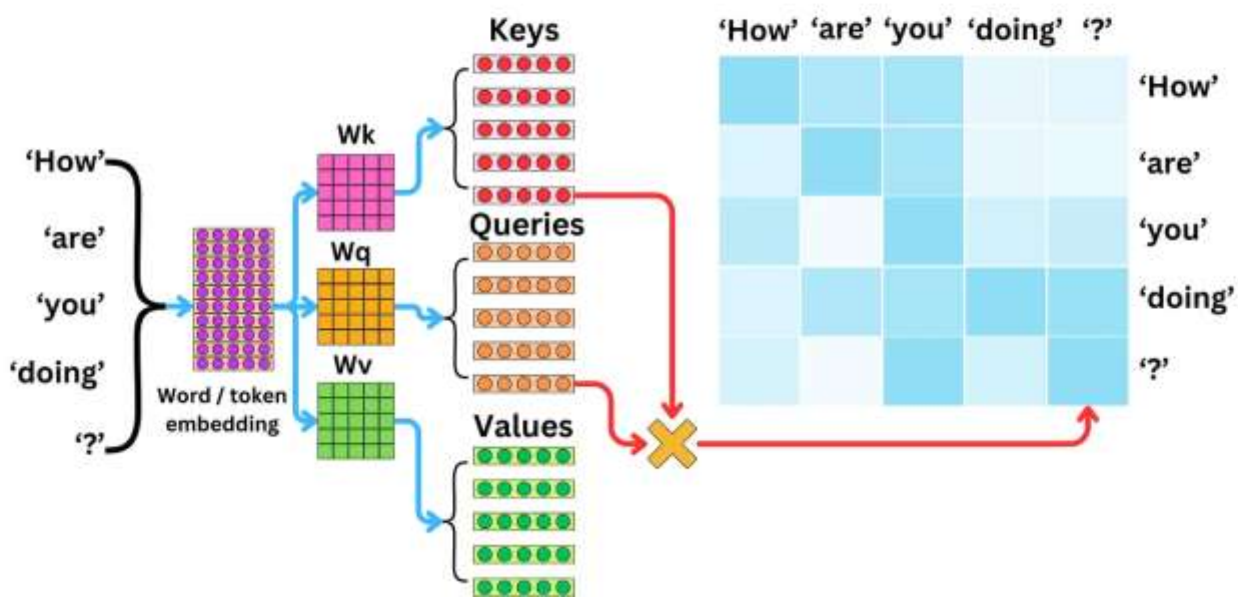
LSTM, GRU and Seq2Seq Models (1997-2014)



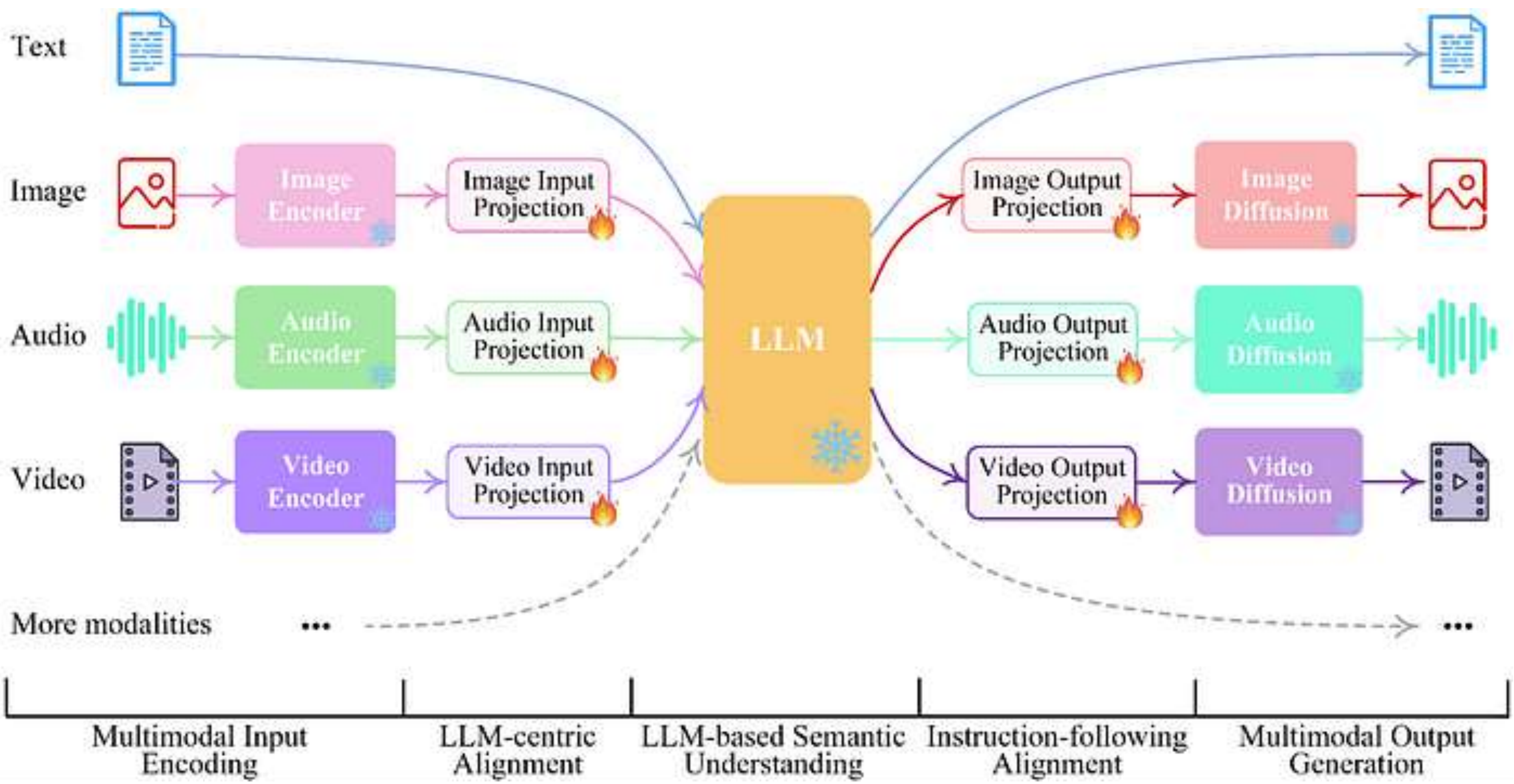


Transformers and the LLM Revolution
«Attention Is All You Need» (2017)

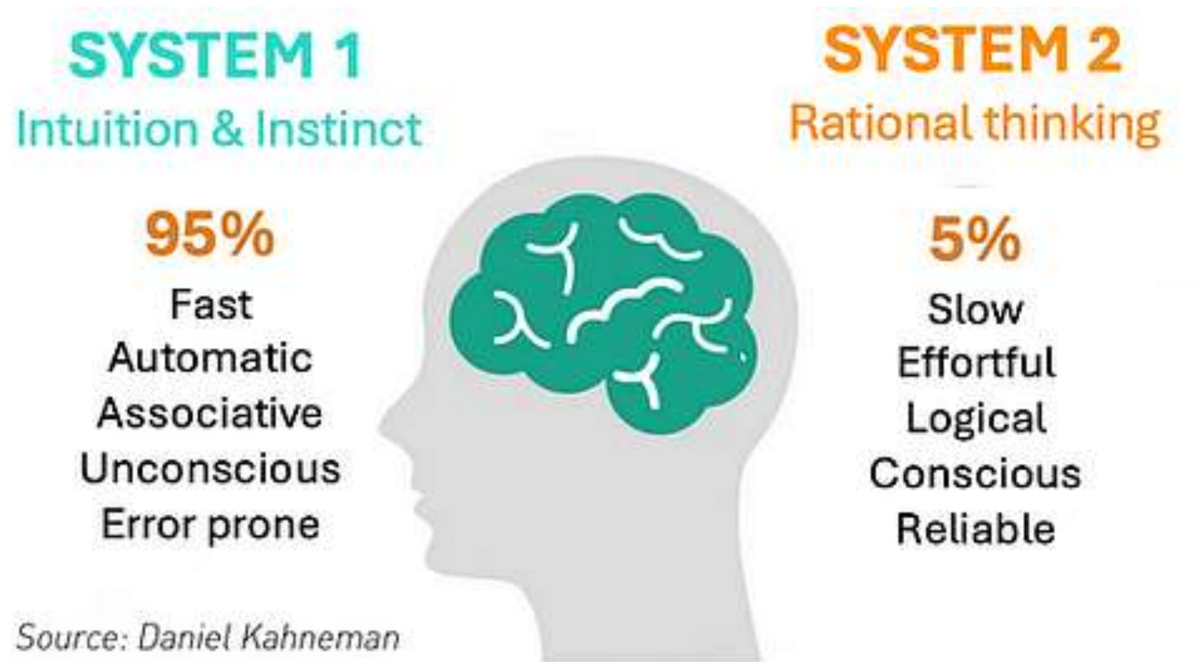




Multimodal Models

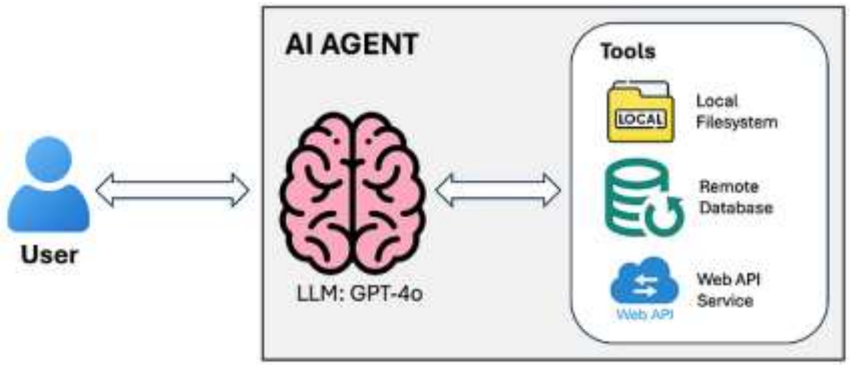


The Reasoning Revolution: From System 1 to System 2 (2024–2025)

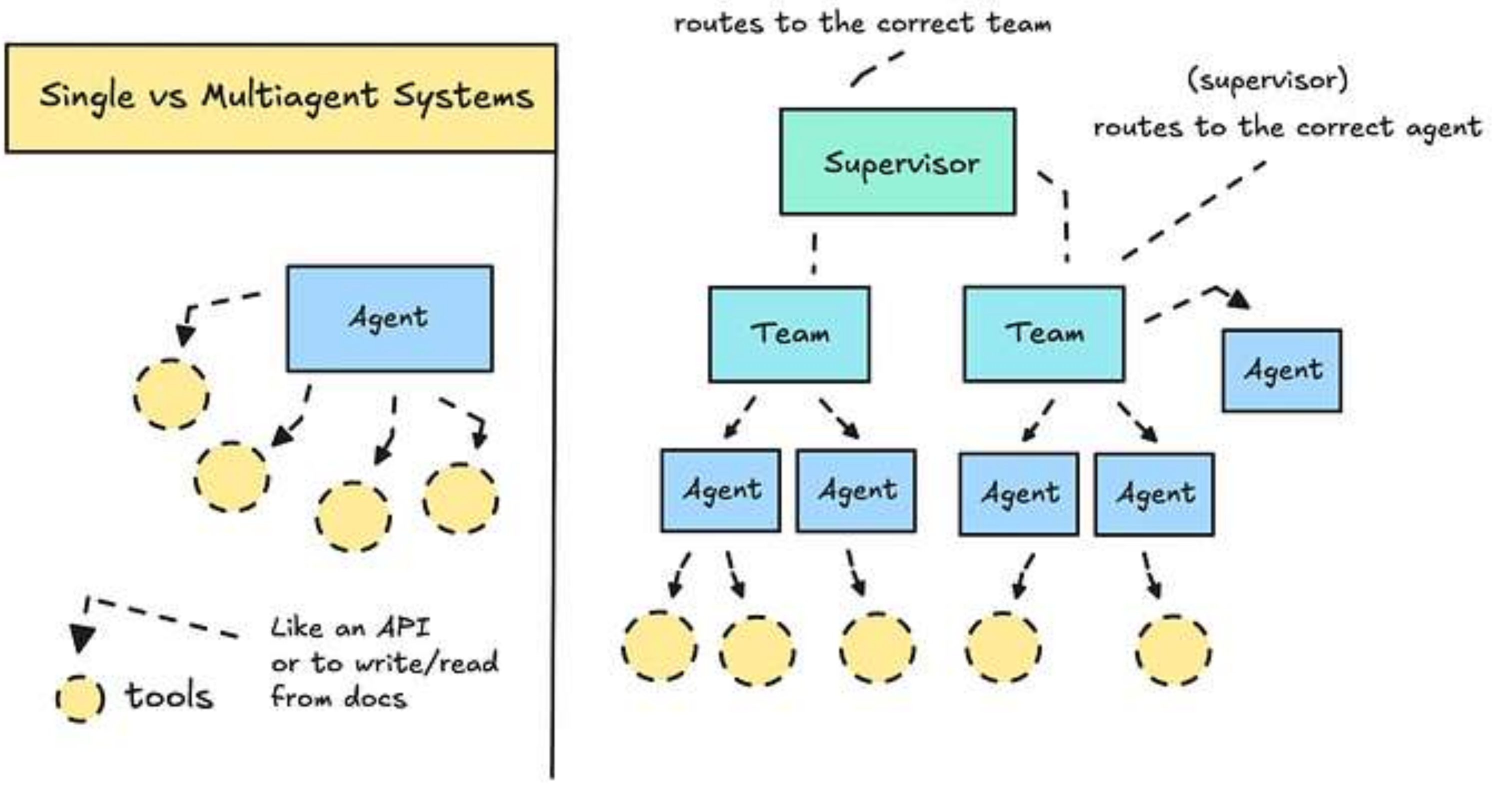


Акцент на улучшении способностей к рассуждению, выход за рамки простого распознавания образов и переход к структурированному аналитическому мышлению. Переход вдохновлён теорией двойного процесса в когнитивной психологии, различающей быстрые, интуитивные реакции (Система 1) и медленные, аналитические рассуждения (Система 2).

LLM-based Agentic AI



Создание автономных агентов, которые могут планировать, выполнять сложные задачи и взаимодействовать с внешними системами, используя LLM в качестве своей когнитивной основы. Эти агентные системы представляют собой переход от пассивного ответа на вопросы к проактивному решению проблем и выполнению задач.



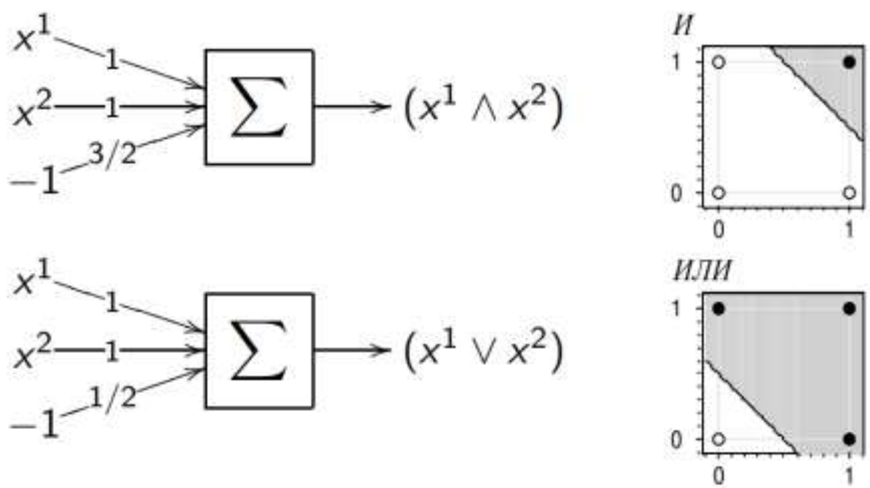
Нейронная сеть (ИНС, НС) – сложная дифференцируемая функция, задающая отображение из исходного признакового пространства в пространство ответов, все параметры которой могут настраиваться одновременно и взаимосвязано

Нейронная сеть – универсальный аппроксиматор функций

С помощью одного нейрона можно реализовать гиперплоскость

Функции И, ИЛИ, НЕ бинарных признаков x^1, x^2

$$x^1 \wedge x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{3}{2} > 0\right];$$
$$x^1 \vee x^2 = \left[x^1 + x^2 - \tfrac{1}{2} > 0\right];$$
$$\neg x^1 = \left[-x^1 + \tfrac{1}{2} > 0\right];$$



Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

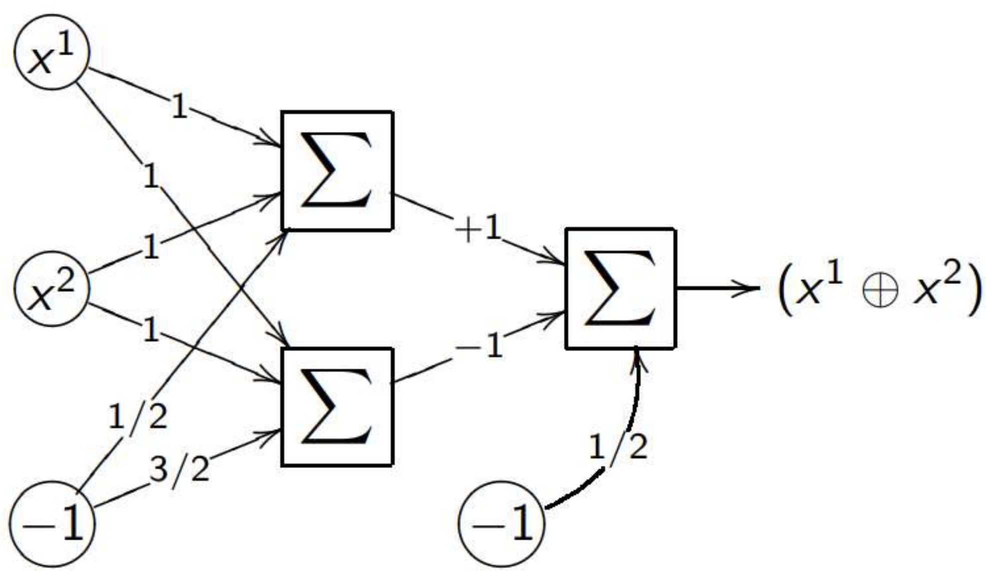
Например, функция XOR не реализуема одним нейроном, но может быть реализована двумя способами:

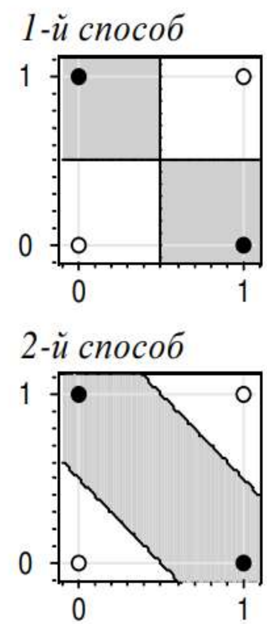
- Добавлением нелинейного признака:

$$x^1 \oplus x^2 = [x^1 + x^2 - 2x^1x^2 - \frac{1}{2} > 0]$$

- Построить нейронную сеть (многослойную суперпозицию) функций И, ИЛИ:

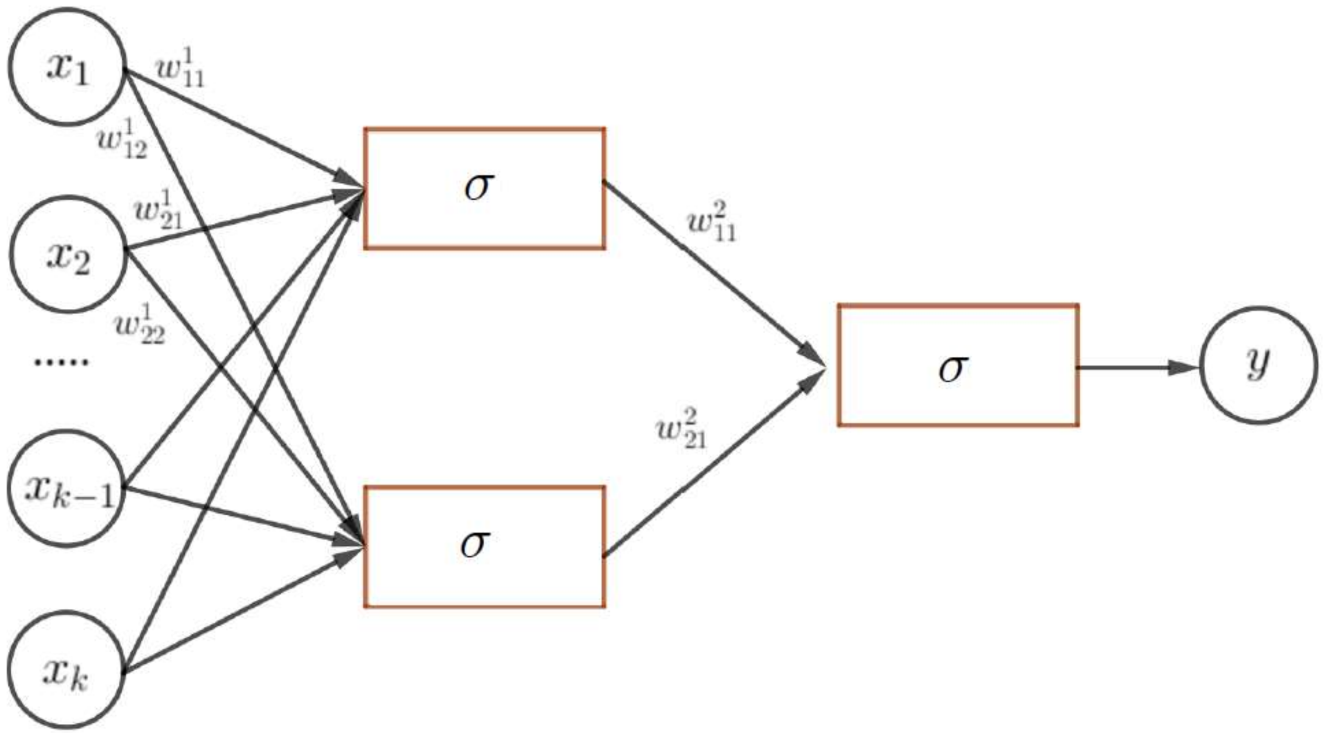
$$x^1 \oplus x^2 = [(x^1 \vee x^2) - (x^1 \wedge x^2) - \frac{1}{2} > 0]$$





Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

MLP (multi-layer-perceptron)



$$h = \sigma(X \cdot W)$$
$$y = \sigma(h \cdot W)$$

Универсальная теорема аппроксимации

Если $\sigma(z)$ *- непрерывная сигмоида, то для любой непрерывной на [0,1]*^{n} *функции f(x) существуют такие значения параметров H,* $\alpha_h \in R, w_h \in R^n, w_0 \in R,$ *что двухслойная сеть*

$$a(x) = \sum_{h=1}^{H} \alpha_h \, \sigma(\langle x, w_h \rangle - w_0)$$

равномерно приближает f(x) с любой точностью ε:

$$|a(x) - f(x)| < \varepsilon, \text{для всех } x \in [0,1]^n$$

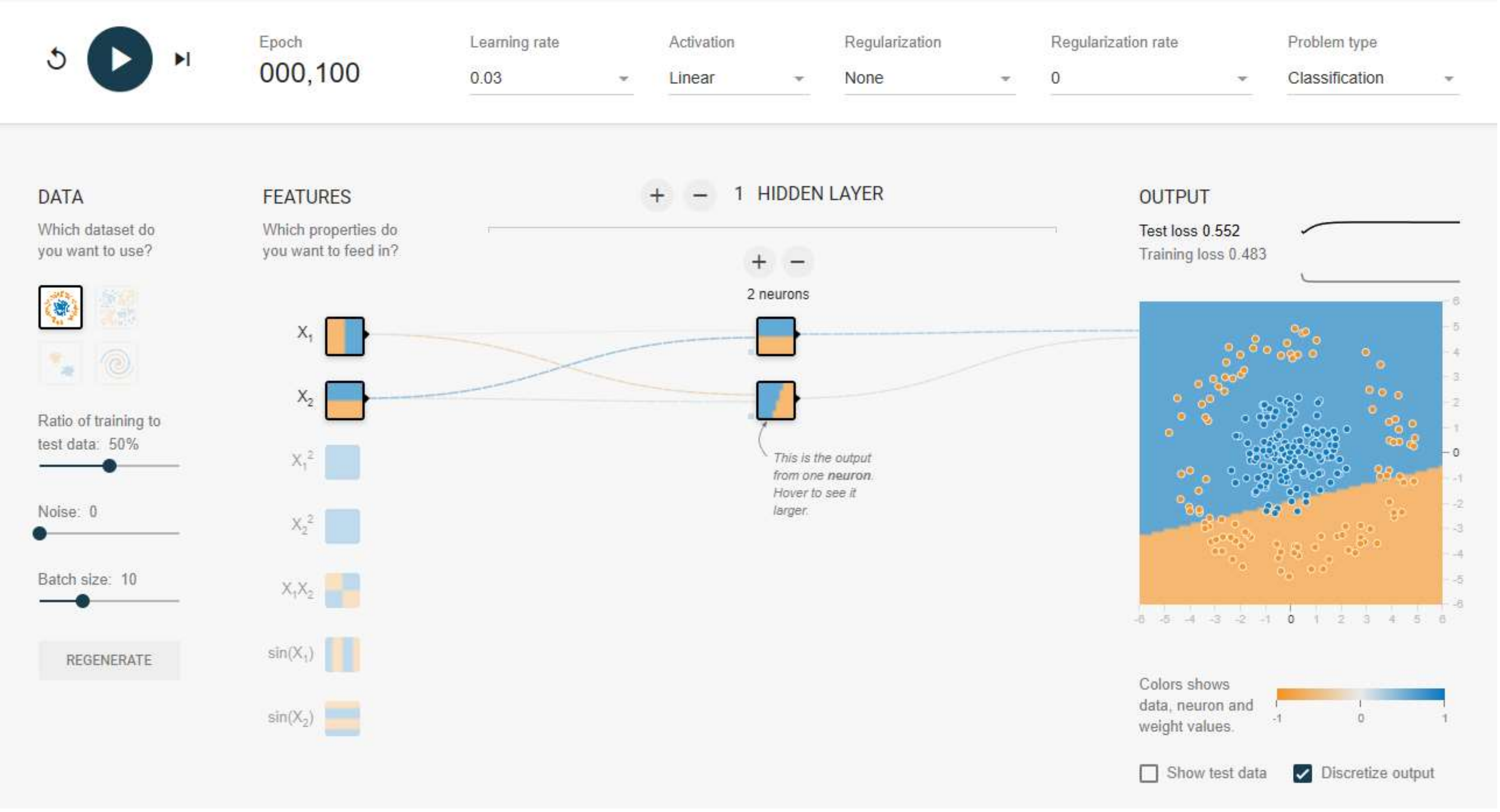
Искусственная нейронная сеть прямой связи с одним скрытым слоем может аппроксимировать любую непрерывную функцию многих переменных с любой точностью при условии достаточного количества нейронов и подбора оптимального вектора весов

George Cybenko. Approximation by Superpositions of a Sigmoidal function. Mathematicscs of Control, Signals, and Systems. 1989

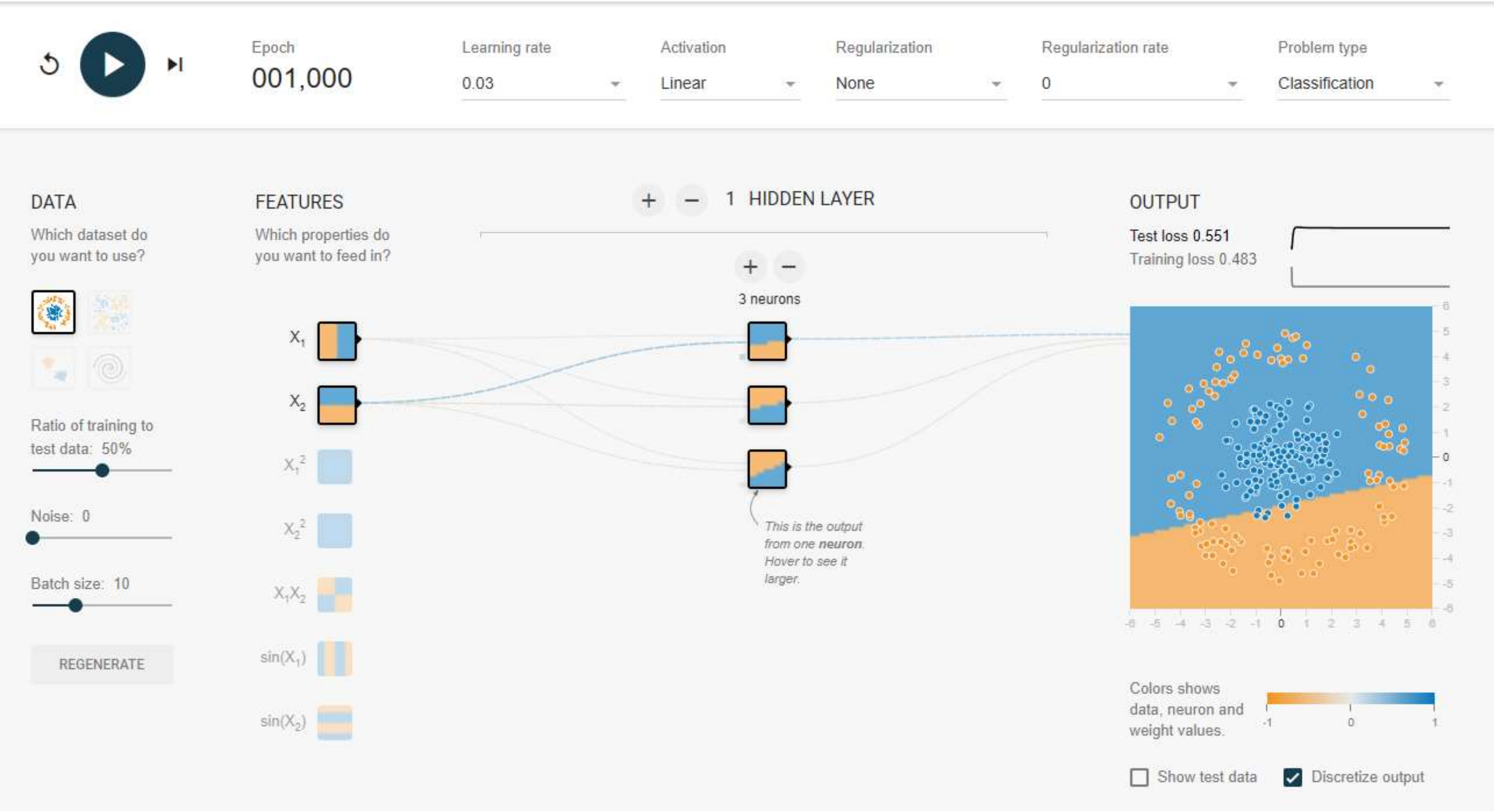
- Линейный слой (linear layer, dense layer) – линейное преобразование над входящими данными. Его обучаемые параметры – матрица весов W и вектор w_0. Слой преобразует d-мерные векторы в k-мерные:

$$x \to xW + w_0, W \in R^{d \times k}, x \in R^d, w_0 \in R^k$$

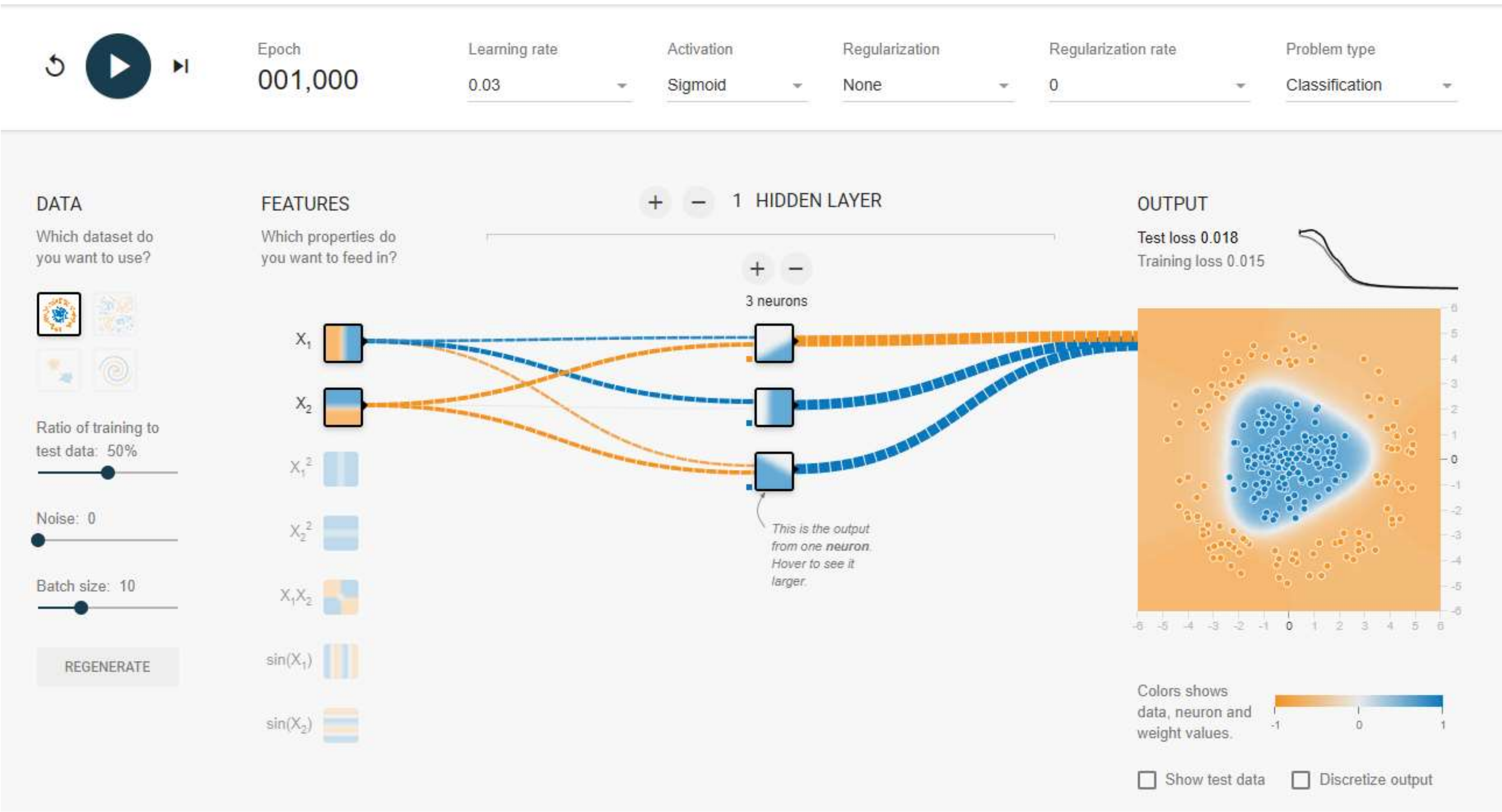
- Функция активации (activation function) – нелинейное преобразование, поэлементно применяющееся к пришедшим на вход данным. Благодаря функциям активации НС способны порождать более информативные признаковые описания, преобразуя данные нелинейным образом



Источник: https://playground.tensorflow.org/



Источник: https://playground.tensorflow.org/



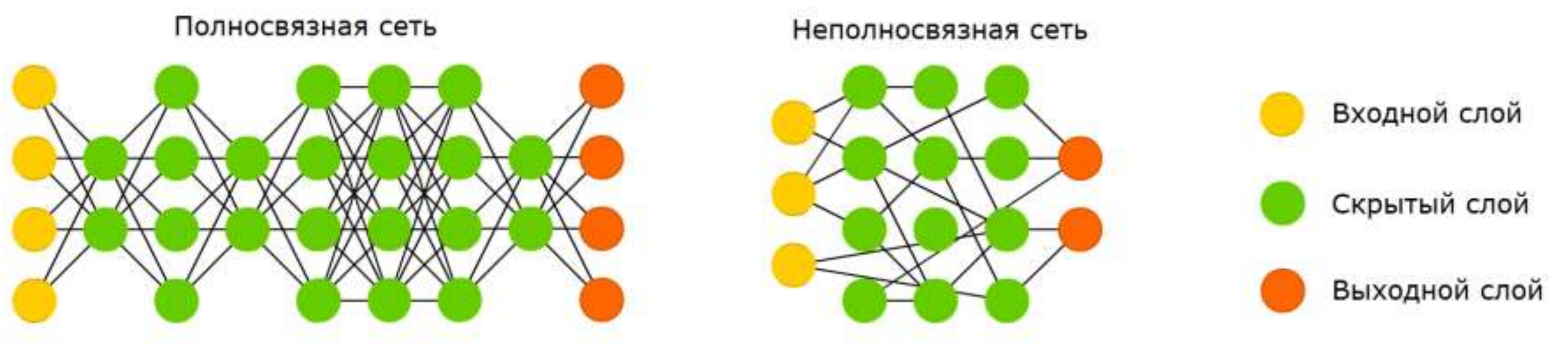
Источник: https://playground.tensorflow.org/

Входной слой (input layer) – вход нейросети, который получает исходные данные в виде матрицы «объекты-признаки»

Скрытый слой (hidden layer) – преобразовывают исходные данные в промежуточные (внутренние, скрытые) представления

Выходной слой (output layer) – финальное преобразование промежуточного представления в пространство ответов

Полносвязная НС (fully connected, multilayer perceptron, MLP с одним слоем) – нейросеть, в которой есть только линейные слои и различные функции активации.



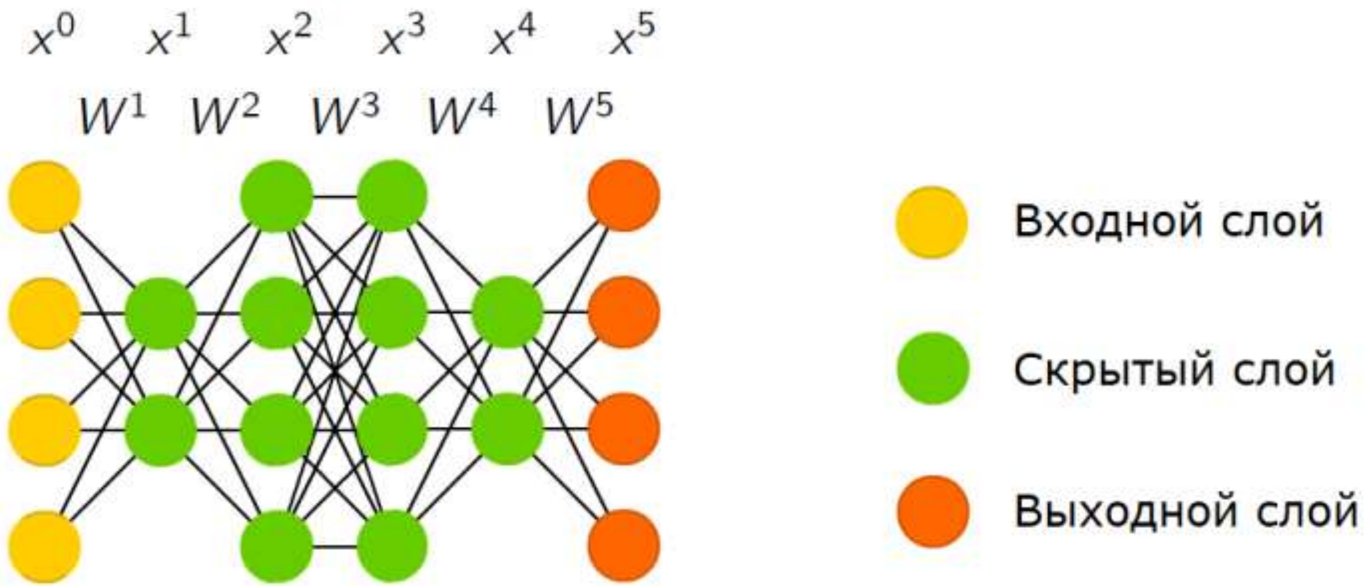
Архитектура сети: H_l — число нейронов в l-м слое, $l = 1, \dots, L$

$x^0 = x = \big(f_j(x)\big)_{j=0}^{n}$ — вектор признаков на входе сети, $H_0 = n$

$x^l = \big(x_h^l\big)_{h=0}^{H_l}$ — вектор признаков на выходе l-го слоя, $x_0^l = -1$

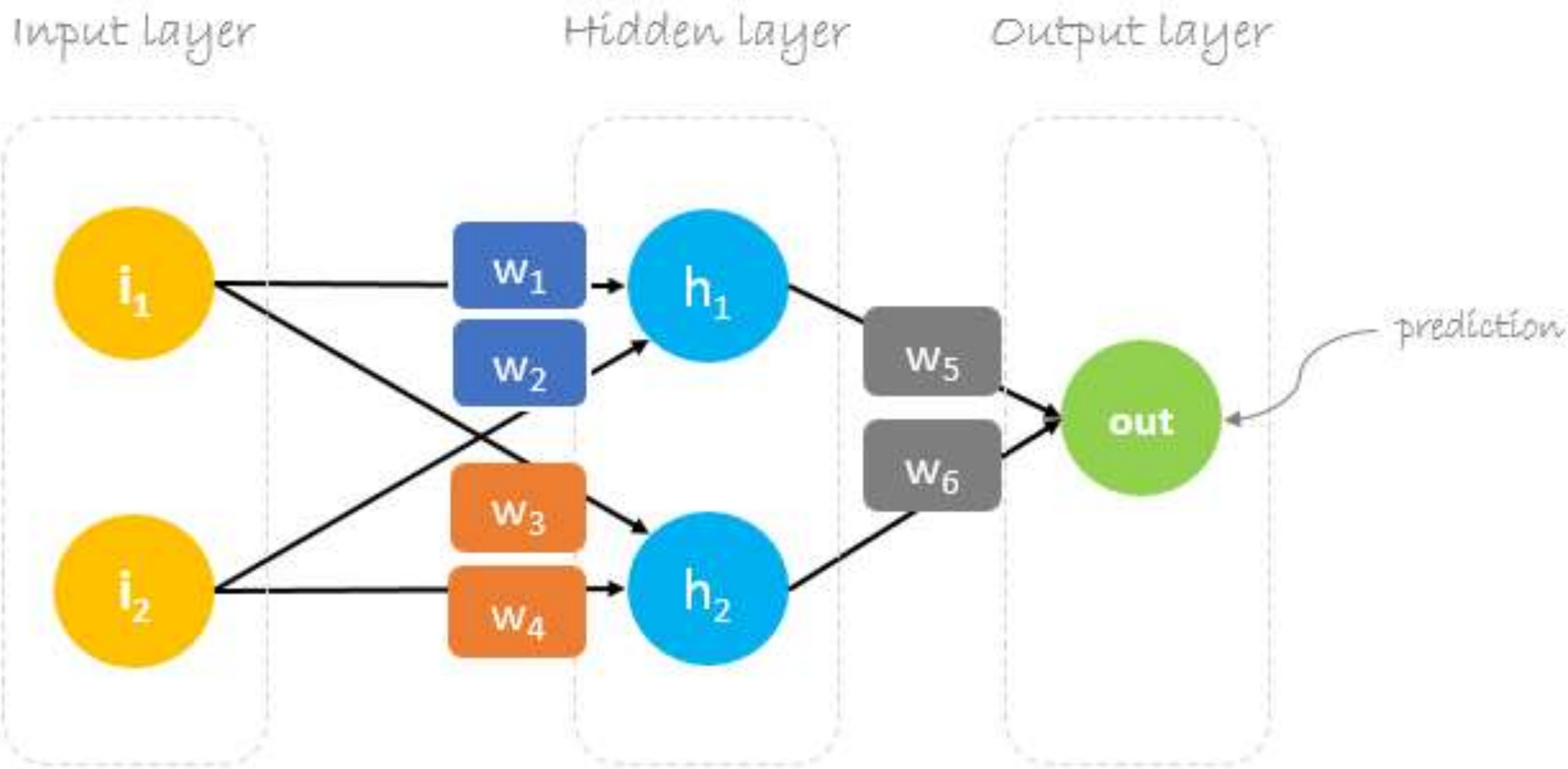
$x^L = a(x) = \big(a_m(x)\big)_{m=1}^{M}$ — выходной вектор сети, $H_L = M$

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



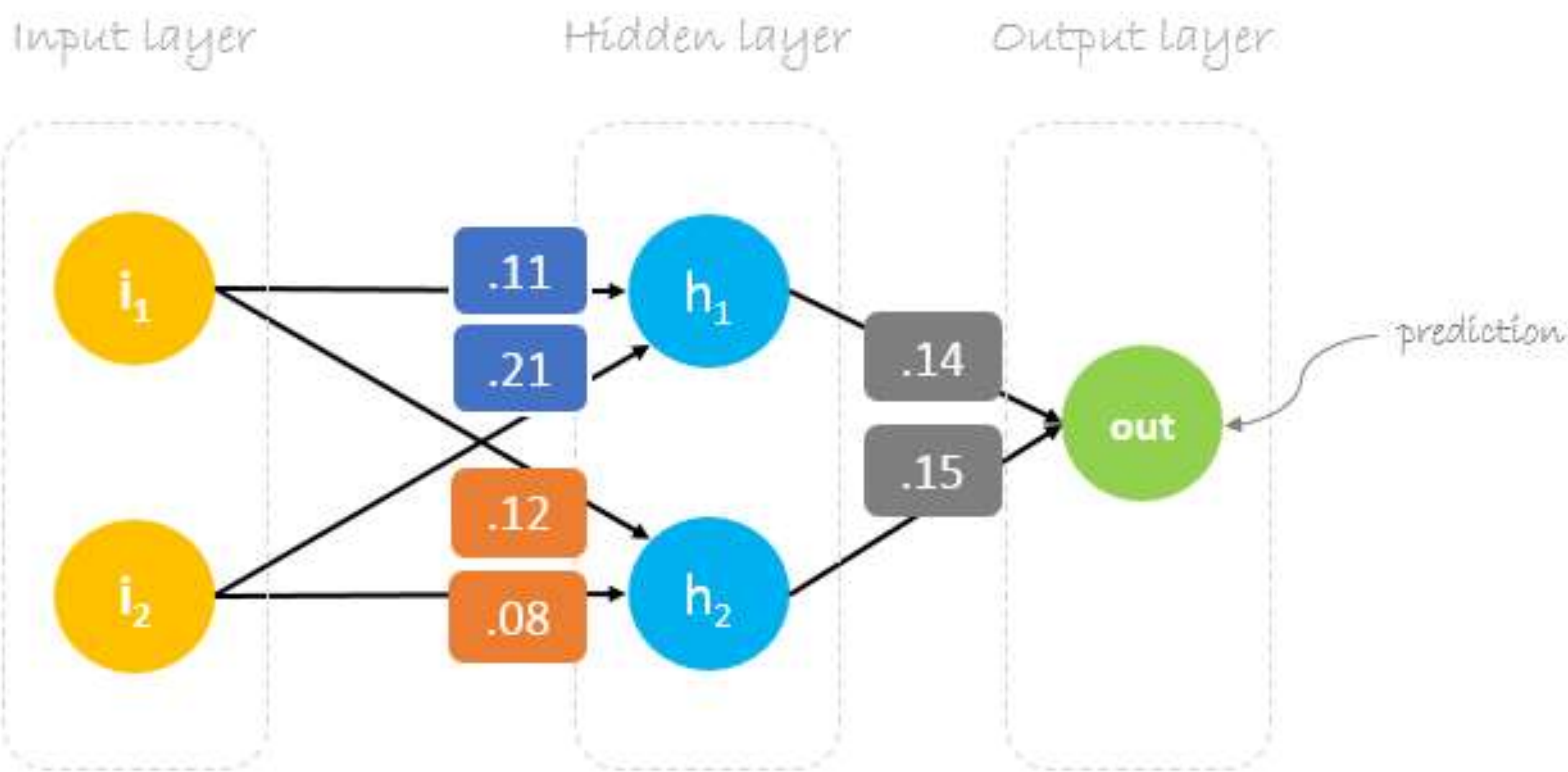
Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

Структура нейронной сети



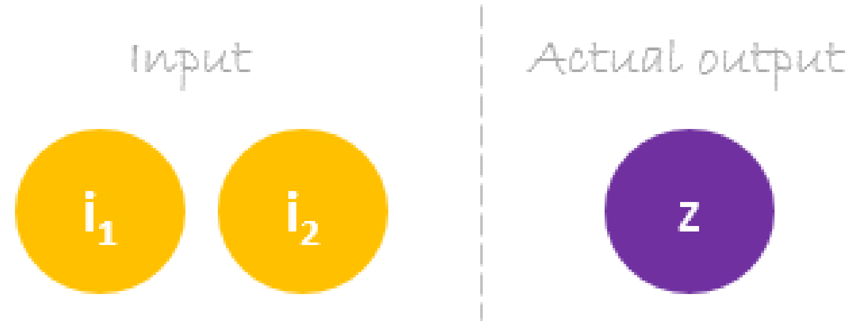
Источник: https://hmkcode.com/ai/backpropagation-step-by-step/

Инициализация случайными весами



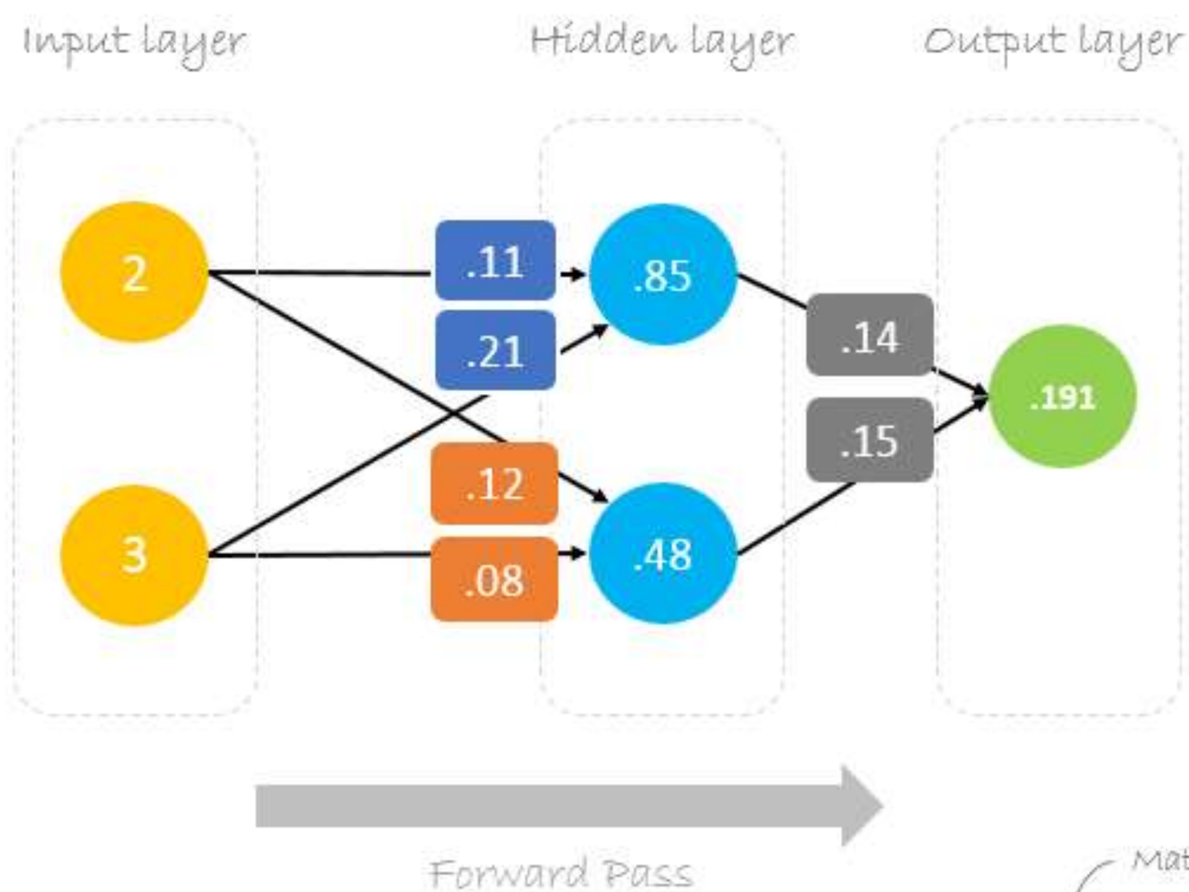
Датасет

Our dataset has one sample with two inputs and one output.



Our single sample is as following `inputs=[2, 3]` and `output=[1]`.

Forward Pass



Matrix multiplication

$$[2 \quad 3] \cdot \begin{bmatrix} 0.11 & 0.12 \\ 0.21 & 0.08 \end{bmatrix} = [0.85 \quad 0.48] \cdot \begin{bmatrix} 0.14 \\ 0.15 \end{bmatrix} = [0.191]$$

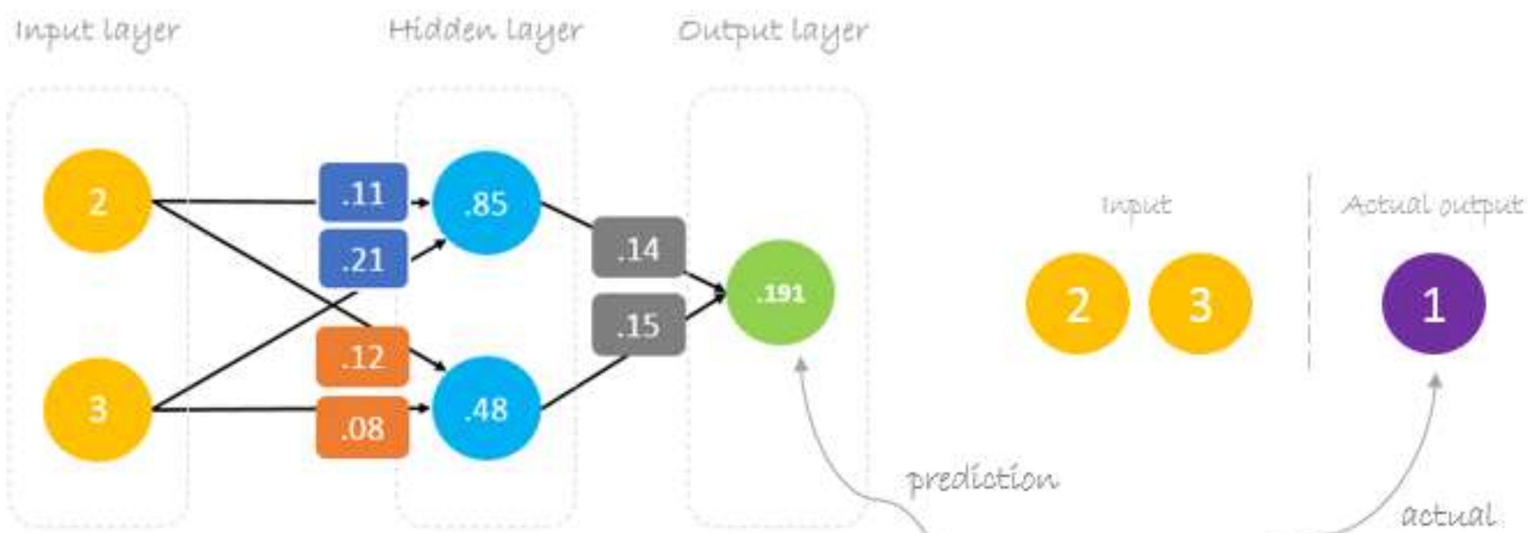
Details

2 x .11 + 3 x .21 = .85

2 x .12 + 3 x .08 = .48

.85 x .14 + .48 x .15 = .191

Calculating Error



Error = 0 , if prediction = actual

$$\text{Error} = \frac{1}{2}(\text{prediction} - \text{actual})^2$$

Error is always positive because of the square

$\frac{1}{2}$ is added to ease the calculation of the derivative

$$\text{Error} = \frac{1}{2}(0.191 - 1.0)^2 = 0.327$$

Reducing Error

$$\textbf{prediction} = \underline{out}$$

$$\textbf{prediction} = \underline{(h_1)\, w_5 + (h_2)\, w_6}$$

$h_1 = i_1 w_1 + i_2 w_2$

$h_2 = i_1 w_3 + i_2 w_4$

$$\textbf{prediction} = (i_1 \boldsymbol{w_1} + i_2 \boldsymbol{w_2})\, \boldsymbol{w_5} + (i_1 \boldsymbol{w_3} + i_2 \boldsymbol{w_4})\, \boldsymbol{w_6}$$

to change ***prediction*** value,
we need to change ***weights***

Backpropagation

Derivative of Error with respect to weight

Old weight

$$^{*}W_x = W_x - a\left(\frac{\partial Error}{\partial W_x}\right)$$

New weight

Learning rate

For example, to update `w6`, we take the current `w6` and subtract the partial derivative of **error** function with respect to `w6`. Optionally, we multiply the derivative of the **error** function by a selected number to make sure that the new updated **weight** is minimizing the error function; this number is called ***learning rate***.

$$^{*}W_6 = W_6 - a\left(\frac{\partial Error}{\partial W_6}\right)$$

Backpropagation

The derivation of the error function is evaluated by applying the chain rule:

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = \frac{\partial Error}{\partial prediction} * \frac{\partial prediction}{\partial W_6}$$

chain rule

Error = $\frac{1}{2}$(prediction – actual)^2

prediction = $(i_1 w_1 + i_2 w_2)\, w_5 + (i_1 w_3 + i_2 w_4)\, w_6$

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = \frac{\frac{1}{2}(predictoin - actula)^2}{\partial prediciton} * \frac{\partial\, (i_1 w_1 + i_2 w_2)\, w_5 + (i_1 w_3 + i_2 w_4)\, w_6}{\partial W_6}$$

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = 2 * \frac{1}{2}(\mathbf{predictoin} - \mathbf{actula})\, \frac{\partial (predictoin - actula)}{\partial prediciton} * (i_1 w_3 + i_2 w_4)$$

$h_2 = i_1 w_3 + i_2 w_4$

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = (\mathbf{predictoin} - \mathbf{actula}) * (h_2)$$

Δ = prediction – actual

delta

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = \Delta h_2$$

Backpropagation

So to update `w6` we can apply the following formula

$$^{*}W_6 = W_6 - a\,\Delta h_2$$

Similarly, we can derive the update formula for `w5` and any other weights existing between the output and the hidden layer.

$$^{*}W_5 = W_5 - a\,\Delta h_1$$

Backpropagation

However, when moving backward to update w1, w2, w3 and w4 existing between input and hidden layer, the partial derivative for the error function with respect to w1:

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = \frac{\partial Error}{\partial prediction} * \frac{\partial prediction}{\partial W_6}$$

chain rule

Error = $\frac{1}{2}$(prediction – actual)^2

prediction = $(i_1\, w_1 + i_2\, w_2)\, w_5 + (i_1\, w_3 + i_2\, w_4)\, w_6$

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = \frac{\frac{1}{2}(predictoin - actula)^2}{\partial prediciton} * \frac{\partial\,(i_1\, w_1 + i_2\, w_2)\, w_5 + (i_1\, w_3 + i_2\, w_4)\, w_6}{\partial W_6}$$

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = 2 * \frac{1}{2}(\mathbf{predictoin} - \mathbf{actula})\, \frac{\partial (predictoin - actula)}{\partial prediciton} * (i_1\, w_3 + i_2\, w_4)$$

$h_2 = i_1\, w_3 + i_2\, w_4$

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = (\mathbf{predictoin} - \mathbf{actula}) * (h_2)$$

Δ = prediction – actual

delta

$$\frac{\partial Error}{\partial W_6} = \Delta h_2$$

Backpropagation

updated weights

$$^{*}w_6 = w_6 - a\,(h_2\,.\,\Delta)$$

$$^{*}w_5 = w_5 - a\,(h_1\,.\,\Delta)$$

$$^{*}w_4 = w_4 - a\,(i_2\,.\,\Delta w_6)$$

$$^{*}w_3 = w_3 - a\,(i_1\,.\,\Delta w_6)$$

$$^{*}w_2 = w_2 - a\,(i_2\,.\,\Delta w_5)$$

$$^{*}w_1 = w_1 - a\,(i_1\,.\,\Delta w_5)$$

We can rewrite the update formulas in matrices:

$$\begin{bmatrix} w_5 \\ w_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_5 \\ w_6 \end{bmatrix} - a\,\Delta \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_5 \\ w_6 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} ah_1\Delta \\ ah_2\Delta \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} w_1 & w_3 \\ w_2 & w_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 & w_3 \\ w_2 & w_4 \end{bmatrix} - a\,\Delta \begin{bmatrix} i_1 \\ i_2 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} w_5 & w_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 & w_3 \\ w_2 & w_4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a\,i_1\Delta w_5 & a\,i_1\Delta w_6 \\ a\,i_2\Delta w_5 & a\,i_2\Delta w_6 \end{bmatrix}$$

Backward Pass

Using derived formulas we can find the new weights.
Learning rate: is a hyperparameter which means that we need to manually guess its value.

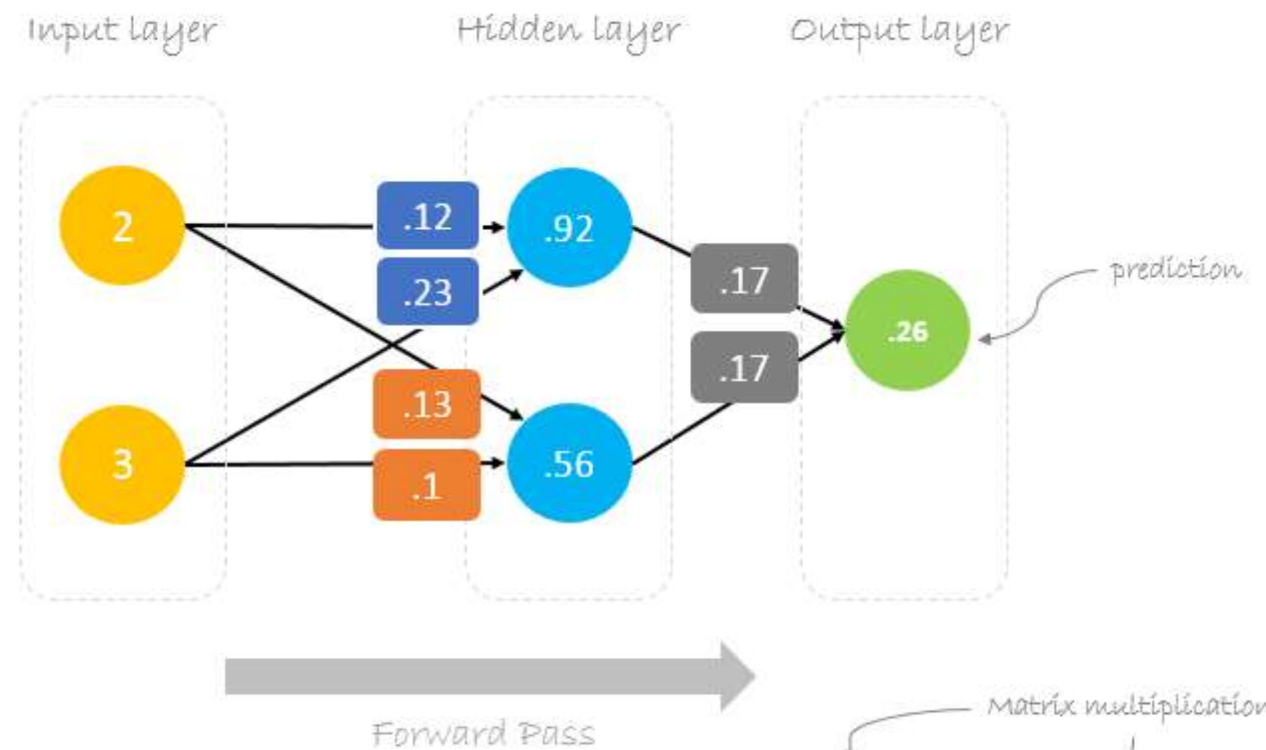
$\boldsymbol{\Delta} = 0.191 - 1 = -0.809$ Delta = prediction - actual

$a = 0.05$ Learning rate, we smartly guess this number

$$\begin{bmatrix} w_5 \\ w_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.14 \\ 0.15 \end{bmatrix} - 0.05(-0.809)\begin{bmatrix} 0.85 \\ 0.48 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.14 \\ 0.15 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.034 \\ -0.019 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.17 \\ 0.17 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} w_1 & w_3 \\ w_2 & w_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} .11 & .12 \\ .21 & .08 \end{bmatrix} - 0.05(-0.809)\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}.\begin{bmatrix} 0.14 & 0.15 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} .11 & .12 \\ .21 & .08 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.011 & -0.012 \\ -0.017 & -0.018 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} .12 & .13 \\ .23 & .10 \end{bmatrix}$$

Yet another forward pass



Matrix multiplication

$$[2 \quad 3] \cdot \begin{bmatrix} 0.12 & 0.13 \\ 0.23 & 0.10 \end{bmatrix} = [0.92 \quad 0.56] \cdot \begin{bmatrix} 0.17 \\ 0.17 \end{bmatrix} = [0.26]$$

Details

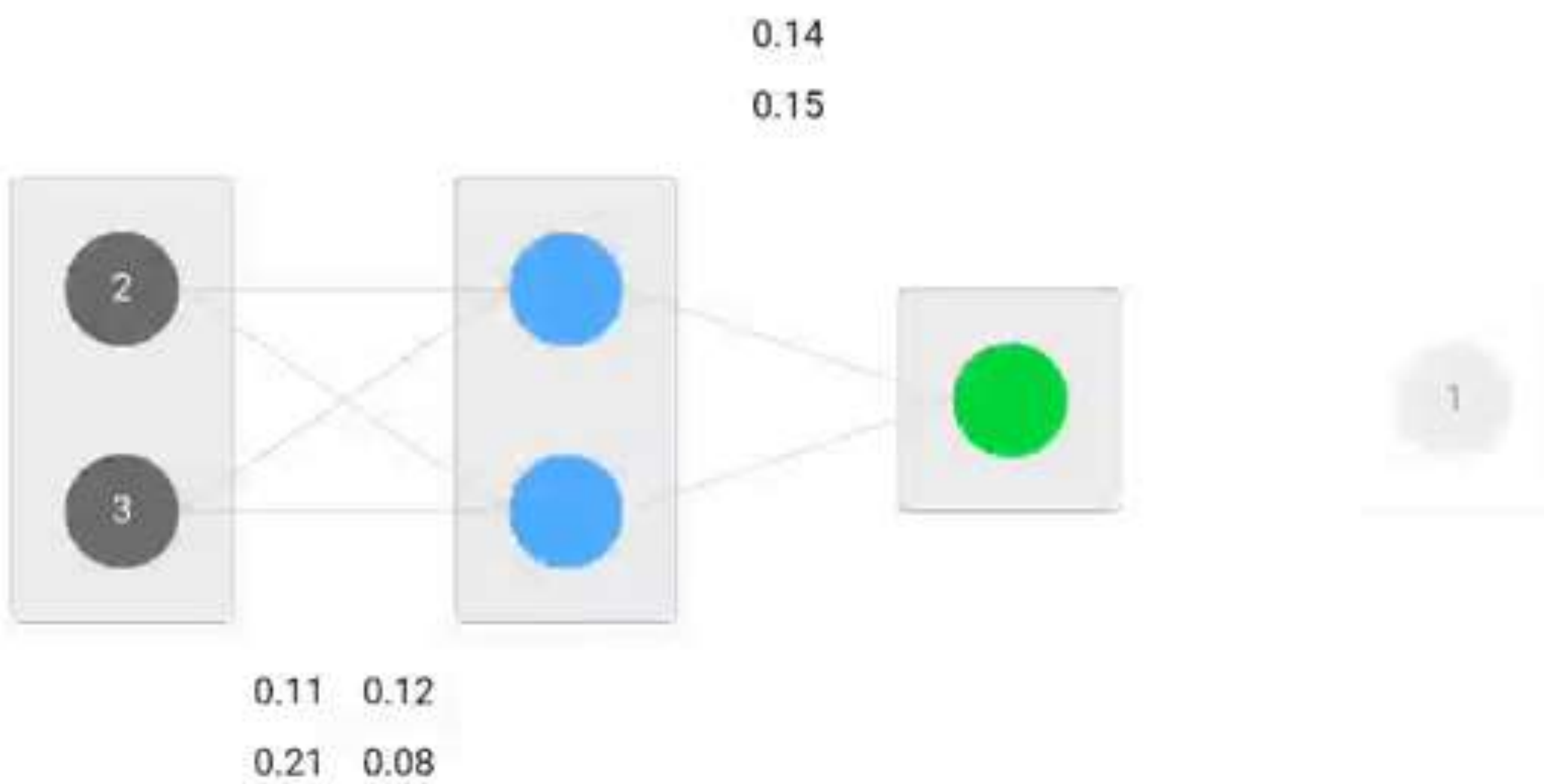
2 x .12 + 3 x .23 = .85

.92 x .17 + .56 x .17 = .26

2 x .13 + 3 x .10 = .48

We can notice that the prediction 0.26 is a little bit closer to actual output than the previously predicted one 0.191. We can repeat the same process of backward and forward pass until error is close or equal to zero.

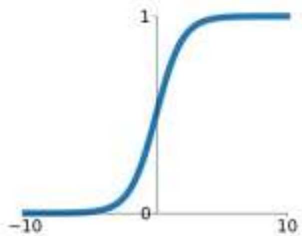
Visualization



Наиболее популярные функции активации

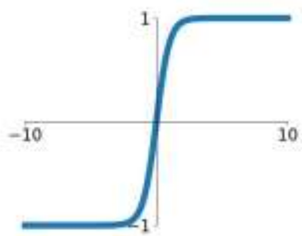
Sigmoid

$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$



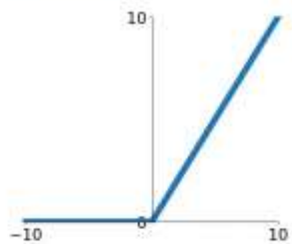
tanh

$\tanh(x)$



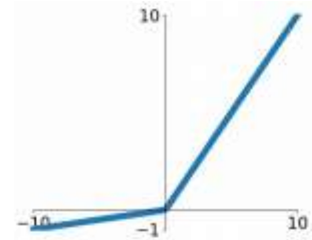
ReLU

$\max(0, x)$



Leaky ReLU

$\max(0.1x, x)$

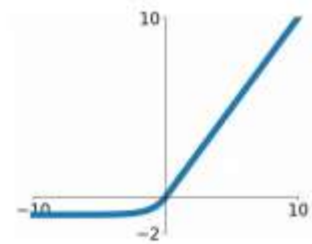


Maxout

$\max(w_1^T x + b_1, w_2^T x + b_2)$

ELU

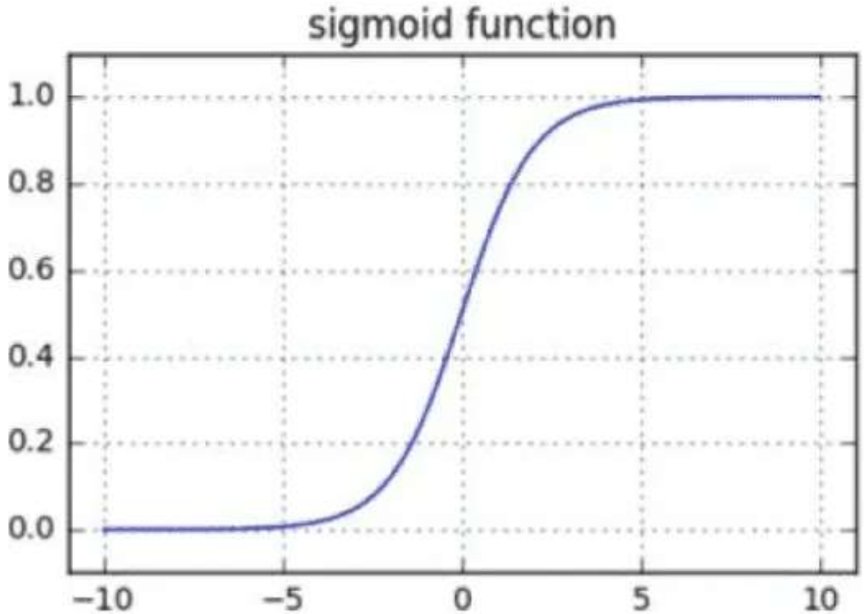
$$\begin{cases} x & x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & x < 0 \end{cases}$$

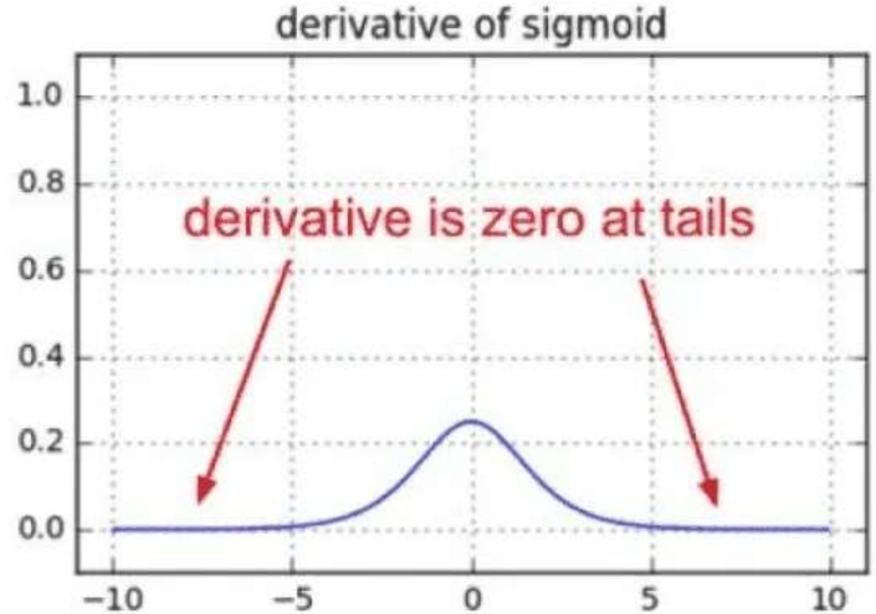


- Затухание градиента (vanishing gradient, паралич сети) – значение градиента настолько малое (приближается к нулю), что веса практически не изменяются и обучение НС фактически останавливается
- Признаки:

- точность модели растет медленно или вообще не растет

- веса модели экспоненциально уменьшаются во время обучения либо стремятся к нулю

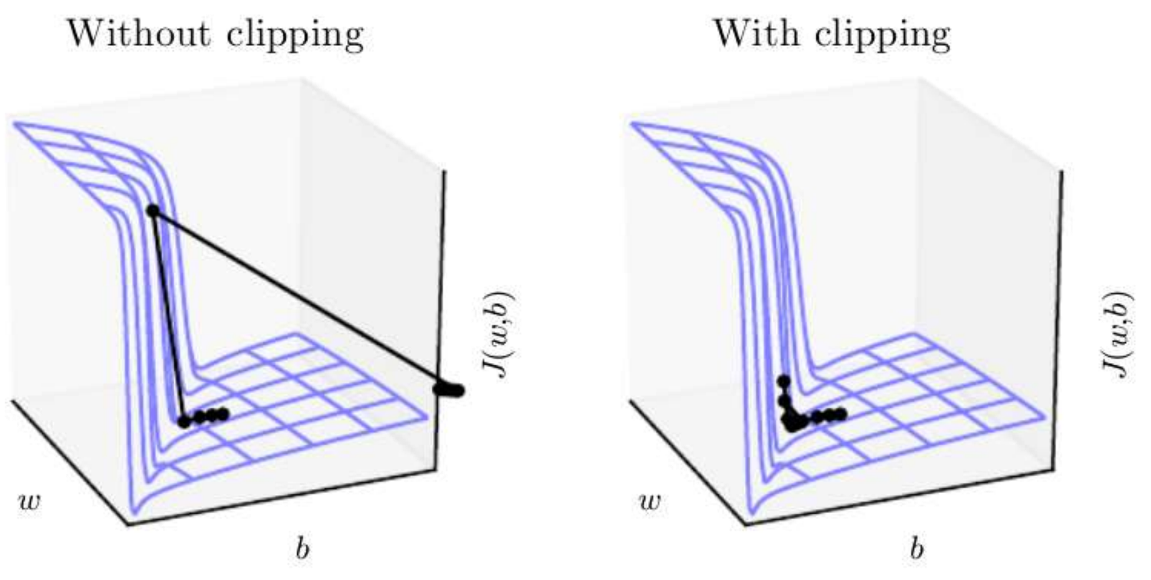




- Взрыв градиента (gradient exploding) – «взрывной рост» градиента
- Признаки:

- модель плохо обучается на данных, функция потерь имеет высокие значения
- функция потерь меняется скачкообразно
- веса модели растут экспоненциально, принимают значение NaN

- Для решения проблемы можно применить эвристику Gradien Clipping: если $\|g\| > \theta,$ то $g \coloneqq g\theta/\|g\|$



- Rectified linear unit (ReLU):

\+ простота вычисления активации и производной, достаточно сравнить значение производной с нулем, за счет этого быстрее, чем сигмоида

\- область значений является смещенной относительно нуля

\- для отрицательных значений производная равна нулю, что может привести к затуханию градиента

- Leaky ReLU и Parametric ReLU (PReLU) - позволяет получить более симметричную относительно нуля область значений за счет гиперпараметра α, обеспечивающего наклон слева от нуля
- Exponential ReLU (ELU) – гладкая аппроксимация ReLU, но так как надо считать экспоненту, редко используется на практике
- Sigmoid – исторически одна из первых функций активации, рассматривалась как гладкая аппроксимация пороговой функции, эмулирующая активацию естественного нейрона. На практике используется в задачах бинарной классификации

\- область значений смещена относительно нуля

\- на хвостах обладает практически нулевой производной, что может привести к затуханию градиента

\- максимальное значение производной составляет 0.25, что так же приводит к затуханию градиента

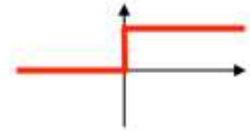
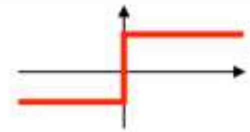
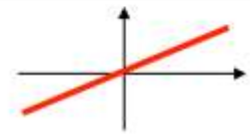
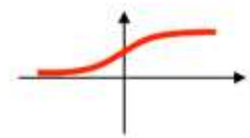
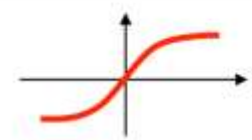
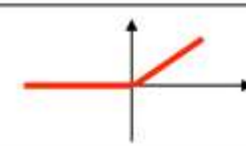
- Гиперболический тангенс, Tanh:

+ имеет ограниченную область значений, как и сигмоида
+ эта область значений симметрична, в отличии от сигмоиды

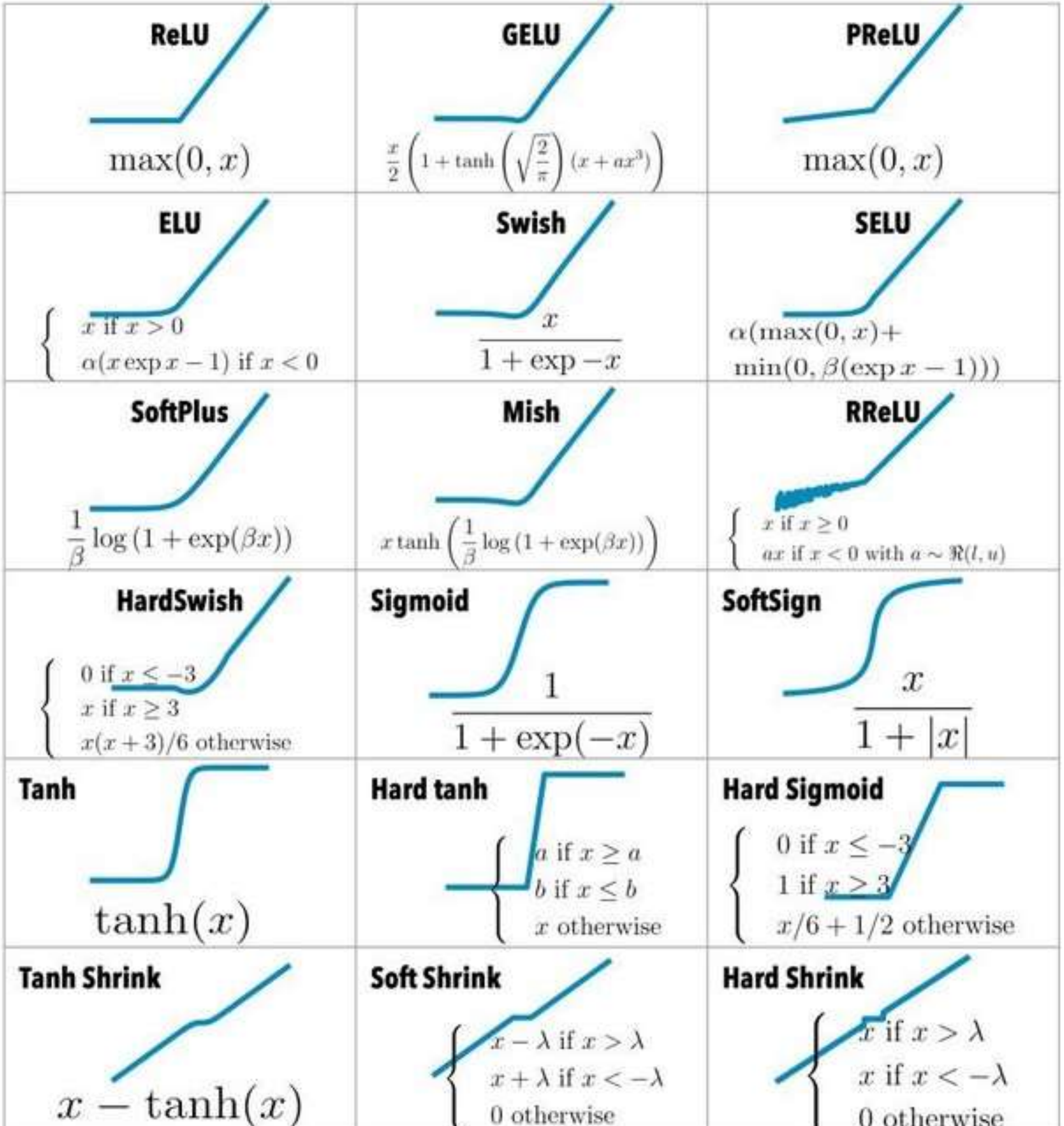
- требуется вычисление экспоненты, что является достаточно сложной вычислительной операцией
- на хвостах производная близка к нулю, что может привести к затуханию градиента

Как выбрать функцию активации?

- Для задач классификации - Sigmoid (бинарная) или Softmax (многоклассовая), если хотим получить вероятности классов в качестве выходных данных
- Для задач регрессии - используйте ReLU или его модификации, такие как LeakyReLU или ELU. Эти функции обычно дают лучшую производительность в задачах регрессии
- Для моделей глубокого обучения, ReLU является общим выбором для скрытых слоев, так как она может ускорить обучение, но можно также использовать другие функции, например, PReLU
- Для рекуррентных нейронных сетей, обычно используются функции активации Tanh.
- Если не уверены, какую функцию активации использовать – начинаем с ReLU, так как она быстро считается, затем подбираем в процессе валидации. Не забываем оценивать значения градиента и отслеживать взрыв или затухание, а так же значение функции потерь

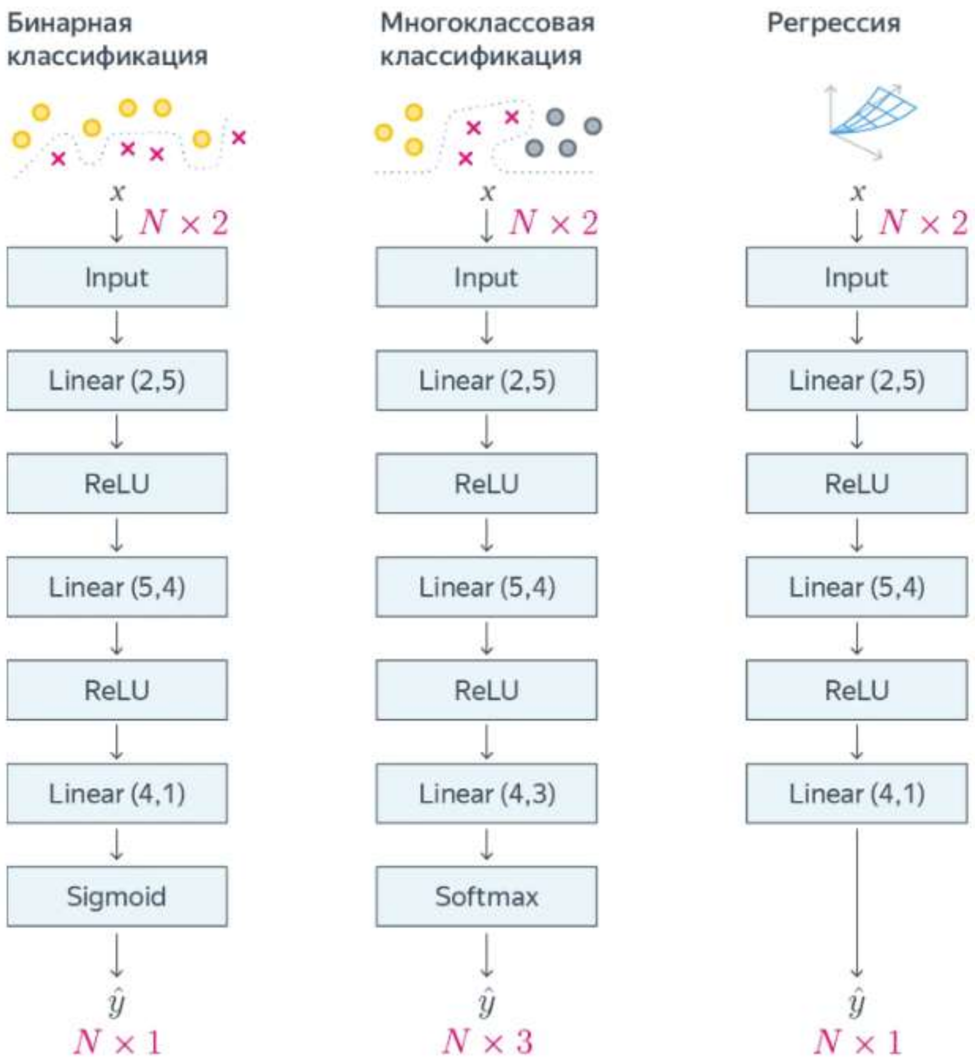
Activation function	Equation	Example	1D Graph
Unit step (Heaviside)	$\phi(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ 0.5, & z = 0, \\ 1, & z > 0, \end{cases}$	Perceptron variant	
Sign (Signum)	$\phi(z) = \begin{cases} -1, & z < 0, \\ 0, & z = 0, \\ 1, & z > 0, \end{cases}$	Perceptron variant	
Linear	$\phi(z) = z$	Adaline, linear regression	
Piece-wise linear	$\phi(z) = \begin{cases} 1, & z \geq \frac{1}{2}, \\ z + \frac{1}{2}, & -\frac{1}{2} < z < \frac{1}{2}, \\ 0, & z \leq -\frac{1}{2}, \end{cases}$	Support vector machine	
Logistic (sigmoid)	$\phi(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$	Logistic regression, Multi-layer NN	
Hyperbolic tangent	$\phi(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$	Multi-layer Neural Networks	
Rectifier, ReLU (Rectified Linear Unit)	$\phi(z) = max(0, z)$	Multi-layer Neural Networks	
Rectifier, softplus	$\phi(z) = \ln(1 + e^z)$	Multi-layer Neural Networks	

Neural Network Activation Functions: a small subset!



Почему Deep Learning?

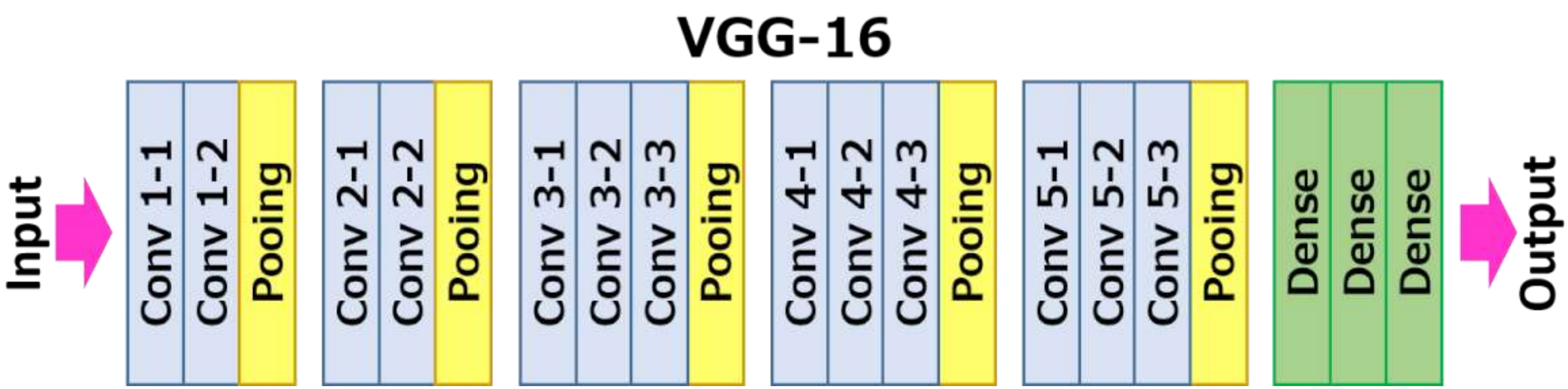
- Архитектура НС – структура слоев и связей между ними, позволяющая наделять сеть нужными свойствами



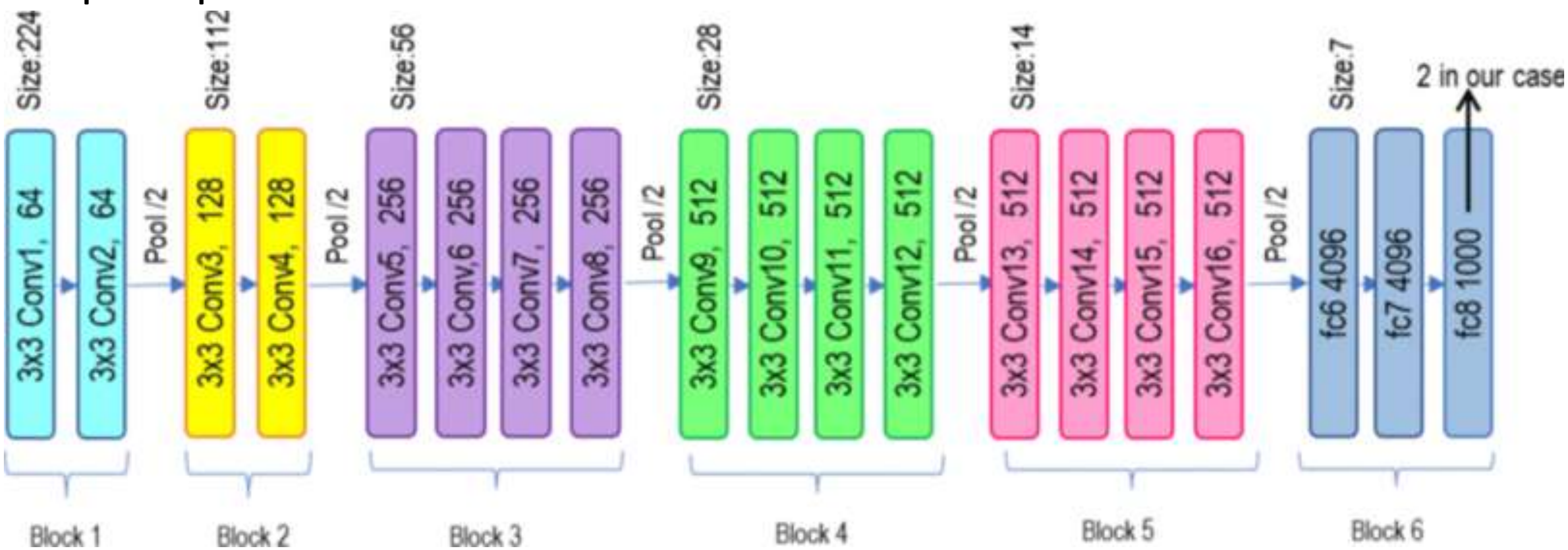
Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/pervoe-znakomstvo-s-polnosvyaznymi-nejrosetyami

Почему Deep Learning?

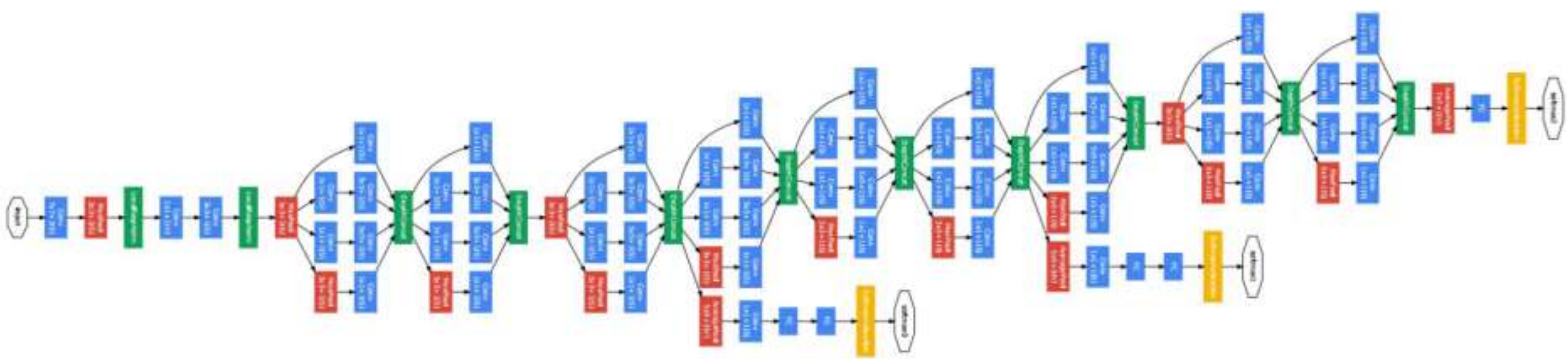
- Глубокие НС – это сети с несколькими слоями между входным и выходным слоем. Чем больше слоев, тем глубже сеть. Иногда говорят, что НС с более чем 3 скрытыми слоями уже может считаться глубокой, но общепринятого мнения нет
- Глубина (L слоев) важнее ширины (H нейронов в каждом слое)
- Глубокие НС позволяют принимать на входе и генерировать на выходе сложно структурированные данные
- Пример: VGG16 – одна из самых известных НС, топ-5 при тестировании на ImageNet (14 миллионов изображений из 1000 классов) с точностью 92.7% на соревновании ILSVRC-2014



- Пример: VGG19



- Пример: GoogLeNet (Inception-v1) – SotA на ILSVRC 2014



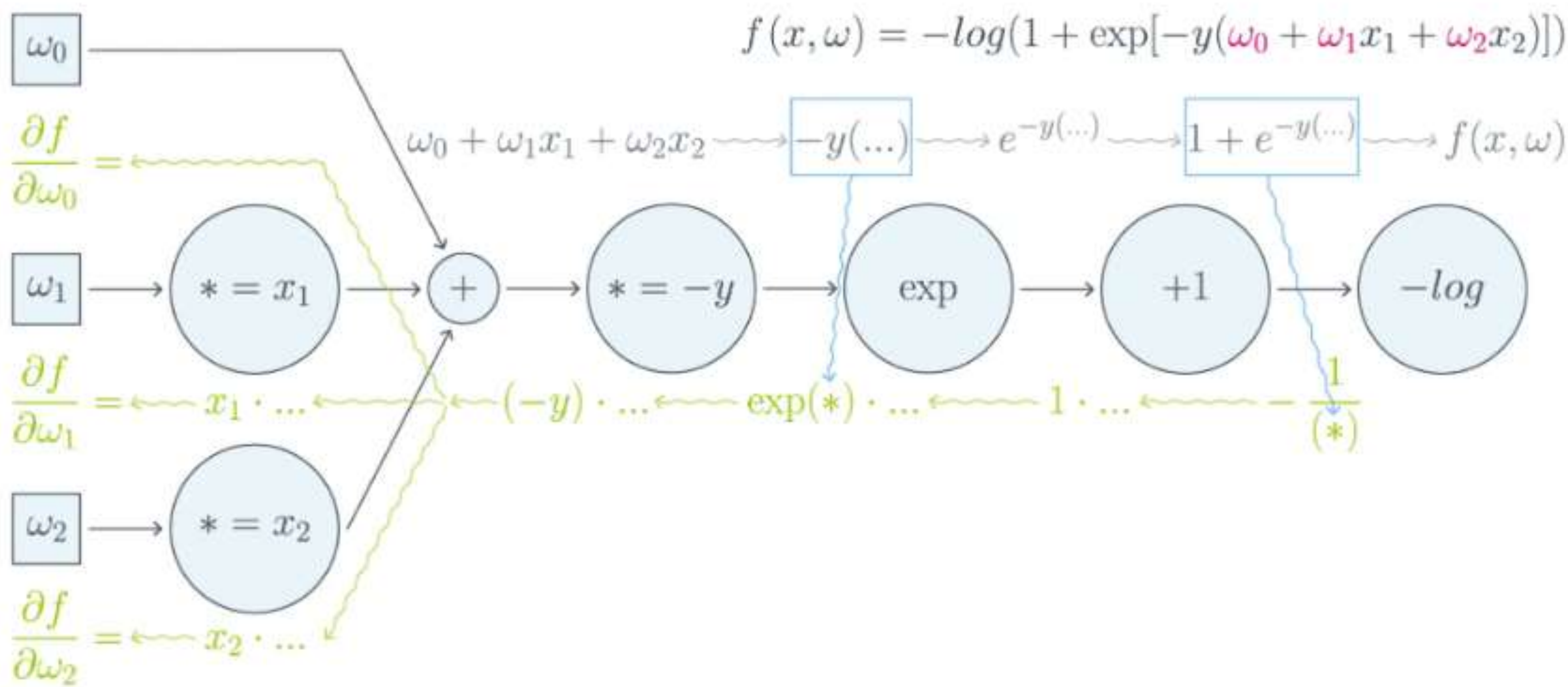
Обучение нейронной сети

- Метод обратного распространения ошибки (error backward propagation, BackProp) – метод вычисления градиента, который используется при обновлении весов НС.
- Был предложен в 1986 году Дэвидом Э. Руммельхартом, Джеффри Э. Хинтоном и Рональдом Дж. Вильямсом, а также независимо и одновременно красноярскими математиками С.И. Барцевым и В.А. Охониным
- Суть метода: исходя из формулы производного сложной функции (chain rule) градиенты можно вычислять последовательно в ходе обратного прохода, умножая каждый раз на частные производные предыдущего слоя

$$f(x) = g_m\left(g_{m-1}\left(\ldots\left(g_1(x)\right)\ldots\right)\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial g_m}{\partial g_{m-1}} \frac{\partial g_m}{\partial g_{m-1}} \ldots \frac{\partial g_2}{\partial g_1} \frac{\partial g_1}{\partial x}$$

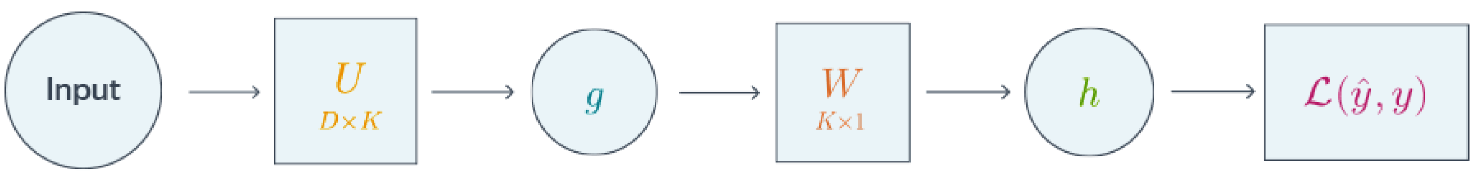
- BackProp в одномерном случае на примере функции потерь логистической регрессии на одном объекте:



- Сначала выполняем прямой проход (forward propagation) для вычисления всех промежуточных значений, которые необходимо хранить в памяти
- Затем выполняется backprop, на котором за один проход вычисляются все градиенты

Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/metod-obratnogo-rasprostraneniya-oshibki

- BackProp в общем виде:
- Инициализируем значения весов W_0^i, выделяем X – мини-батч
- Сначала выполняем прямой проход (forward propagation) вычисляя и сохраняя все промежуточные представления $X = X^0, X^1, \dots X^m = \hat{y}$
- Вычисляем все градиенты с помощью backprop
- С помощью градиентов совершаем шаг SGD



Источник: https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/metod-obratnogo-rasprostraneniya-oshibki

Вход: выборка $(x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$, архитектура $(H_l)_{l=1}^{L}$, параметры η, λ;
Выход: вектор весов всех слоёв $w = (W^1, \dots, W^L)$;
инициализировать веса w;
повторять

выбрать объект x_i из X^ℓ (например, случайно);
прямой ход: для всех $l = 1..L$, $h = 1..H_l$

$$S_{ih}^{l} := \sum_{k=0}^{H_{l-1}} w_{kh}^{l} x_{ik}^{l-1};\;\; x_{ih}^{l} := \sigma_h^l(S_{ih}^{l});\;\; z_{ih}^{l} := (\sigma_h^l)'(S_{ih}^{l});$$

$$\varepsilon_{hi}^{L} := \frac{\partial \mathscr{L}_i(w)}{\partial x_h^L},\;\; h = 1..H_L;$$

обратный ход: для всех $l = L..2$, $k = 0..H_{l-1}$

$$\varepsilon_{ik}^{l-1} = \sum_{h=0}^{H_l} \varepsilon_{ih}^{l} z_{ih}^{l} w_{kh}^{l};$$

градиентный шаг: для всех $l = 1..L$, $k = 0..H_{l-1}$, $h = 1..H_l$

$$w_{kh}^{l} := w_{kh}^{l} - \eta\, \varepsilon_{ih}^{l} z_{ih}^{l} x_{ik}^{l-1};$$

пока значения Q и/или веса w не стабилизируются;

Автоматическое дифференцирования выражений (autograd) реализовано во всех основных библиотеках – PyTorch, TensorFlow и т.д.

Источник: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/e/e1/Voron-ML-ANN-slides.pdf

- Регуляризация нейронных сетей

- Изменение функции потерь:
- Изменение структуры сети
- Изменение данных

- Регуляризация через изменение функции потерь:

Weight Decay – штраф за высокие значения весов НС с коэффициентом регуляризации λ:

$$L_{regularization} = L_{original} + \lambda \|W\|_2$$

Для задачи классификации можно использовать энтропия распределения предсказаний:

$$L_{regularization} = L_{original} - \lambda \sum_k \widehat{p_k} \, log \widehat{p_k}$$

$$\hat{p} - \text{предсказанные вероятности}$$

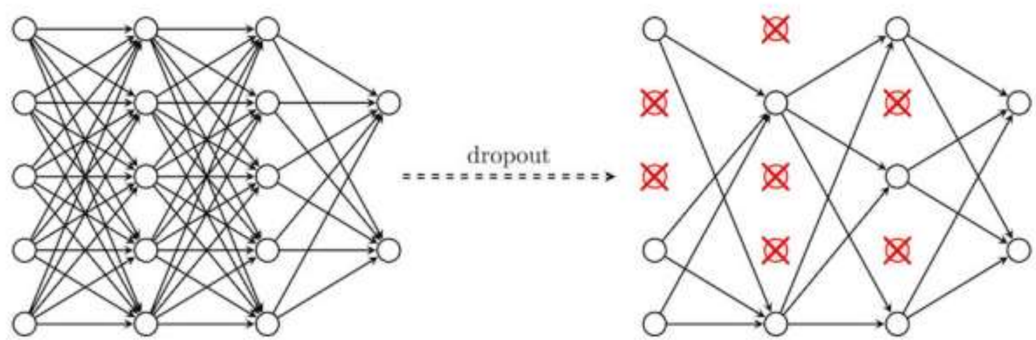
- Регуляризация через ограничение структуры модели:
- Dropout – случайным образом (с заданной вероятностью) «выключаем» доступ к некоторым координатам внутренних представлений на этапе обучения

Этап обучения: делая градиентный шаг $\mathscr{L}_i(w) \to \min\limits_w$,
отключаем h-ый нейрон l-го слоя с вероятностью p_l:

$$x_{hi}^l = \xi_h^l \sigma_h^l \Big(\sum_k w_{kh}^l x_{ki}^{l-1}\Big), \qquad \mathsf{P}(\xi_h^l = 0) = p_l$$

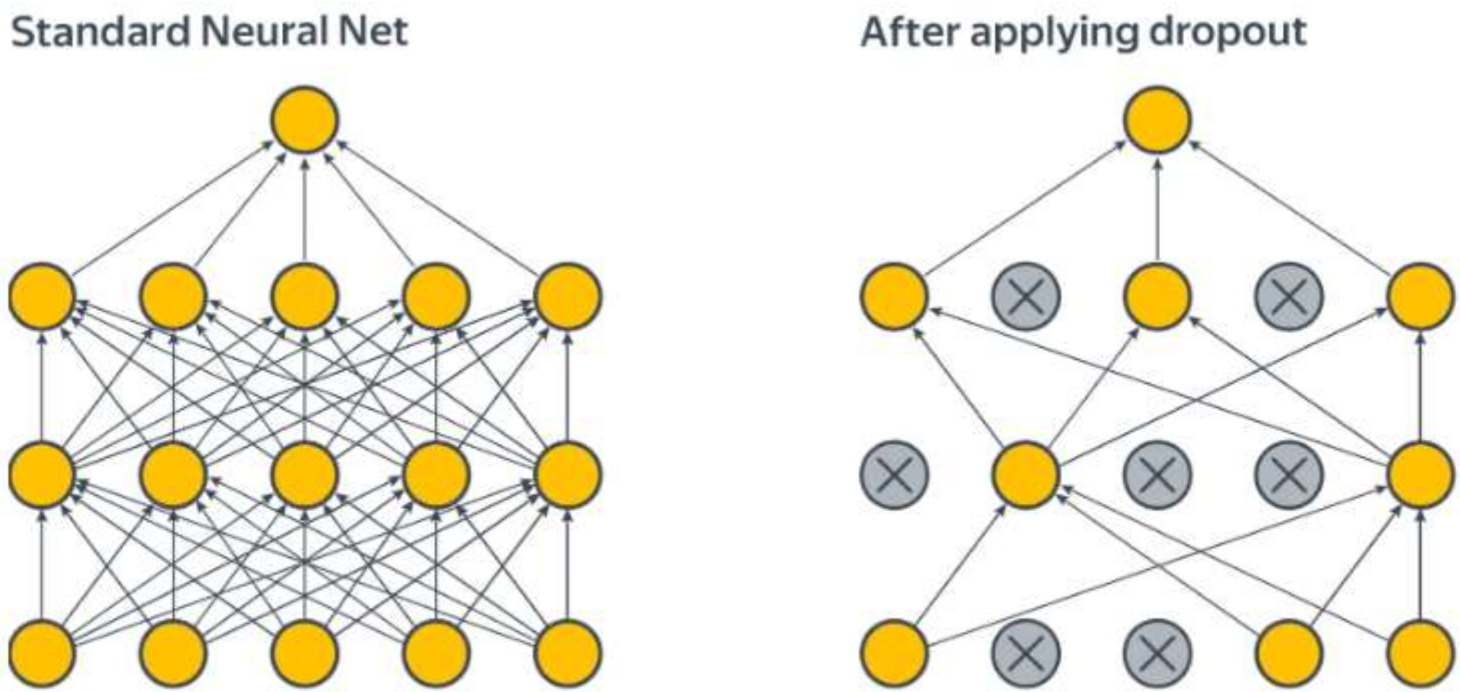
Этап применения: включаем все нейроны, но с поправкой:

$$x_{hi}^l = (1 - p_l)\sigma_h^l \Big(\sum_k w_{kh}^l x_{ki}^{l-1}\Big)$$



N.Srivastava, G.Hinton, A.Krizhevsky, I.Sutskever, R.Salakhutdinov.
Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. 2014.

- Dropout можно применять и к входным данным – первым ставим слой dropout, это равносильно отбору признаков. Например, если в данных множество мультиколлинеарных признаков, или данные сильно зашумлены, или сильно разрежены, применение dropout в качестве первого слоя может приводить к получении более качественных результатов



- Batch normalization (batchNorm) – добавления слоя batch normalization, на котором текущий батч приводится к нулевому среднему и единичной дисперсии:

$$X^{k+1} = \frac{X^k - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \epsilon}}$$

Input: Network N with trainable parameters Θ; subset of activations $\{x^{(k)}\}_{k=1}^K$
Output: Batch-normalized network for inference, $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{inf}}$

1: $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}} \leftarrow N$ // Training BN network
2: **for** $k = 1 \ldots K$ **do**
3: Add transformation $y^{(k)} = \mathrm{BN}_{\gamma^{(k)},\beta^{(k)}}(x^{(k)})$ to $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ (Alg. 1)
4: Modify each layer in $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ with input $x^{(k)}$ to take $y^{(k)}$ instead
5: **end for**
6: Train $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ to optimize the parameters $\Theta \cup \{\gamma^{(k)}, \beta^{(k)}\}_{k=1}^K$
7: $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{inf}} \leftarrow N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{tr}}$ // Inference BN network with frozen // parameters
8: **for** $k = 1 \ldots K$ **do**
9: // For clarity, $x \equiv x^{(k)}, \gamma \equiv \gamma^{(k)}, \mu_{\mathcal{B}} \equiv \mu_{\mathcal{B}}^{(k)}$, etc.
10: Process multiple training mini-batches $\mathcal{B}$, each of size m, and average over them:

$$\mathrm{E}[x] \leftarrow \mathrm{E}_{\mathcal{B}}[\mu_{\mathcal{B}}]$$
$$\mathrm{Var}[x] \leftarrow \frac{m}{m-1}\mathrm{E}_{\mathcal{B}}[\sigma_{\mathcal{B}}^2]$$

11: In $N_{\mathrm{BN}}^{\mathrm{inf}}$, replace the transform $y = \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x)$ with $y = \frac{\gamma}{\sqrt{\mathrm{Var}[x]+\epsilon}} \cdot x + \left(\beta - \frac{\gamma\,\mathrm{E}[x]}{\sqrt{\mathrm{Var}[x]+\epsilon}}\right)$
12: **end for**

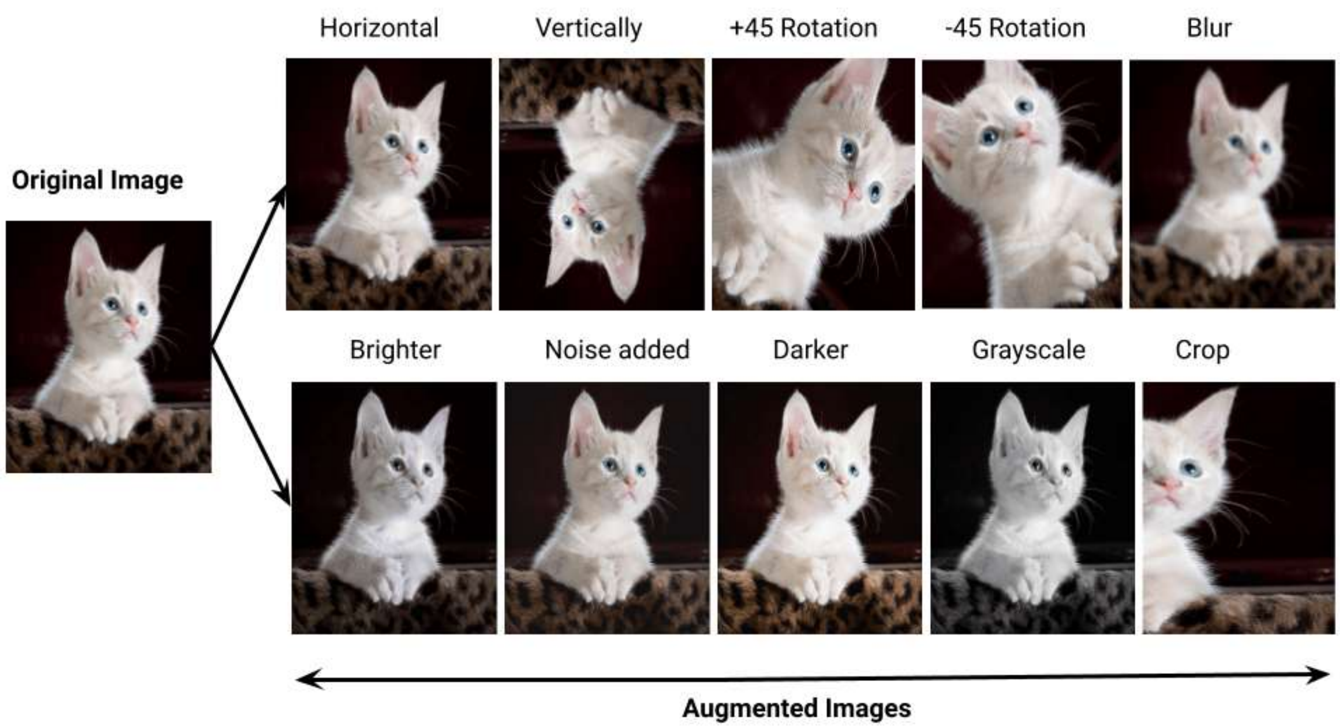
Algorithm 2: Training a Batch-Normalized Network

Источник: https://arxiv.org/abs/1502.03167

- Регуляризация через изменение данных

Внесение изменений в данные (аугментация данных) позволяет увеличить объем обучающей выборки и дают понять модели, какие преобразования являются допустимыми. На примере изображений:

- Поворот и отражения
- Изменение масштаба
- Изменение яркости, контраста и насыщенности
- Добавление шума, искажений
- Обрезка (crop)
- Размытие



Источник: https://github.com/albumentations-team/albumentations

PyTorch example

```
import torch
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F


class Net(nn.Module):
    def __init__(self):
      super(Net, self).__init__()

      # First 2D convolutional layer, taking in 1 input channel (image),
      # outputting 32 convolutional features, with a square kernel size of 3
      self.conv1 = nn.Conv2d(1, 32, 3, 1)
      # Second 2D convolutional layer, taking in the 32 input layers,
      # outputting 64 convolutional features, with a square kernel size of 3
      self.conv2 = nn.Conv2d(32, 64, 3, 1)

      # Designed to ensure that adjacent pixels are either all 0s or all active
      # with an input probability
      self.dropout1 = nn.Dropout2d(0.25)
      self.dropout2 = nn.Dropout2d(0.5)

      # First fully connected layer
      self.fc1 = nn.Linear(9216, 128)
      # Second fully connected layer that outputs our 10 labels
      self.fc2 = nn.Linear(128, 10)

my_nn = Net()
print(my_nn)
```

```python
class Net(nn.Module):
    def __init__(self):
      super(Net, self).__init__()
      self.conv1 = nn.Conv2d(1, 32, 3, 1)
      self.conv2 = nn.Conv2d(32, 64, 3, 1)
      self.dropout1 = nn.Dropout2d(0.25)
      self.dropout2 = nn.Dropout2d(0.5)
      self.fc1 = nn.Linear(9216, 128)
      self.fc2 = nn.Linear(128, 10)

    # x represents our data
    def forward(self, x):
      # Pass data through conv1
      x = self.conv1(x)
      # Use the rectified-linear activation function over x
      x = F.relu(x)

      x = self.conv2(x)
      x = F.relu(x)

      # Run max pooling over x
      x = F.max_pool2d(x, 2)
      # Pass data through dropout1
      x = self.dropout1(x)
      # Flatten x with start_dim=1
      x = torch.flatten(x, 1)
      # Pass data through ``fc1``
      x = self.fc1(x)
      x = F.relu(x)
      x = self.dropout2(x)
      x = self.fc2(x)

      # Apply softmax to x
      output = F.log_softmax(x, dim=1)
      return output
```

Источник: https://pytorch.org/tutorials/recipes/recipes/defining_a_neural_network.html

```
import numpy as np
import torch
import torch.nn as nn
import torch.optim as optim

# load the dataset, split into input (X) and output (y) variables
dataset = np.loadtxt('pima-indians-diabetes.csv', delimiter=',')
X = dataset[:,0:8]
y = dataset[:,8]

X = torch.tensor(X, dtype=torch.float32)
y = torch.tensor(y, dtype=torch.float32).reshape(-1, 1)

# define the model
model = nn.Sequential(
    nn.Linear(8, 12),
    nn.ReLU(),
    nn.Linear(12, 8),
    nn.ReLU(),
    nn.Linear(8, 1),
    nn.Sigmoid()
)
print(model)

# train the model
loss_fn   = nn.BCELoss()  # binary cross entropy
optimizer = optim.Adam(model.parameters(), lr=0.001)

n_epochs = 100
batch_size = 10

for epoch in range(n_epochs):
    for i in range(0, len(X), batch_size):
        Xbatch = X[i:i+batch_size]
        y_pred = model(Xbatch)
        ybatch = y[i:i+batch_size]
        loss = loss_fn(y_pred, ybatch)
        optimizer.zero_grad()
        loss.backward()
        optimizer.step()
    print(f'Finished epoch {epoch}, latest loss {loss}')

# compute accuracy (no_grad is optional)
with torch.no_grad():
    y_pred = model(X)
accuracy = (y_pred.round() == y).float().mean()
print(f"Accuracy {accuracy}")
```

Model definition

Train loop

Источник:https://machinelearningmastery.com/develop-your-first-neural-network-with-pytorch-step-by-step/

- Summary:

- Нейрон это линейная модель классификации или регресии
- Нейронная сеть это суперпозиция нейронов с нелинейной функцией активации
- Универсальная теорема аппроксимации – теоретически, двух-трех слоев достаточно для решения широкого класса задач
- Глубокие нейронные сети автоматизируют выделение признаков из сложно структурированных данных
- BackProp это быстрое дифференцирование суперпозиций (НС), метод позволяет обучать сети практически любой архитектуры
- Некоторые эвристики по улучшению сходимости: регуляризация, функции активации, модификации градиентного спуска