МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

**Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»**

# 

**Институт интеллектуальных кибернетических систем**

**КАФЕДРА КИБЕРНЕТИКИ**

### БДЗ

**по курсу "Теория нейронных сетей"**

**студента группы Б21-504**

**Мандрова Александра**

#### Вариант № 6

**Оценка: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

##### Подпись: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

2024 г.

ОТЧЕТ № 1

по теме «Многослойные нейронные сети»

Вариант №\_\_\_\_\_\_\_\_

ФИО студента \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Группа \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Оценка: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Подпись:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Результаты обучения многослойной нейронной сети:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Метод обучения | Параметры метода обучения | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *E*обуч | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| GD |  |  |  |  |
| GDM |  |  |  |  |
| NAG |  |  |  |  |
| SGD |  |  |  |  |
| Fletcher-Reeeves |  |  |  |  |
| Polak-Ribiere |  |  |  |  |
| AdaGrad |  |  |  |  |
| RMSProp |  |  |  |  |
| AdaDelta |  |  |  |  |
| RProp |  |  |  |  |
| LM |  |  |  |  |
| BFGS |  |  |  |  |
| Stochastic GD |  |  |  |  |

Выводы:

|  |
| --- |
|  |

ОТЧЕТ № 2

по теме «Решение прикладных задач обработки данных на нейронных сетях»

Вариант №\_\_\_\_\_\_\_\_

ФИО студента \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Группа \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Оценка: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Подпись:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Показатели качества обученной нейросетевой модели:

**Для задач регрессии**: привести диаграммы рассеяния в пространстве «выход модели – желаемый выход» для обучающей и тестовой выборок, изобразить линейные регрессии выхода модели на желаемый выход по данным: а) обучающей выборки; б) тестовой выборки. Указать коэффициенты детерминации построенных линейных регрессионных моделей.

**Для задач классификации**: привести матрицы ошибок (confusion matrix) нейросетевого классификатора и показатели качества классификации на обучающей и тестовой выборках.

|  |
| --- |
|  |

Выводы:

|  |
| --- |
|  |

I. Исходные данные

*1.1.Описание исходных данных*

**Источник:** [Wine Quality - UCI Machine Learning Repository](https://archive.ics.uci.edu/dataset/186/wine+quality)

Два набора данных из источника относятся к красному и белому вариантам португальского вина "Vinho Verde". Из-за проблем конфиденциальности и логистики доступны только физико-химические (входные данные) и сенсорные (выходные данные) переменные (например, отсутствуют данные о сортах винограда, марке вина, отпускной цене вина и т. д.).

**Задача:** определить качество вина по физико-химическом данным. Тип задачи – классификация

**Описание признаков:**

Объем выборки: 6497 – всего, 1599 – красного, 4898 – белого

Количество повторов: 1177 – всего, 240 – в красном, 937 – в белом

Количество признаков: 11 – входных признаков, 1 – выходной признак

Входные признаки: fixed\_acidity (g(tartaric acid)/dm3), volatile\_acidity (g(acetic acid)/dm3), citric\_acid (g/dm3), residual\_sugar (g/dm3), chlorides (g(sodium chloride)/dm3), free\_sulfur\_dioxide (mg/dm3), total\_sulfur\_dioxide (mg/dm3), density (g/cm3), pH, sulphates (g(potassium sulphate)/dm3), alcohol (vol.%)

Выходные признаки: quality

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Признаки | Тип признака | Кол-во пропусков |
| fixed\_acidity | Вещественный | 0 |
| volatile\_acidity | Вещественный | 0 |
| citric\_acid | Вещественный | 0 |
| residual\_sugar | Вещественный | 0 |
| chlorides | Вещественный | 0 |
| free\_sulfur\_dioxide | Вещественный | 0 |
| total\_sulfur\_dioxide | Вещественный | 0 |
| density | Вещественный | 0 |
| pH | Вещественный | 0 |
| sulphates | Вещественный | 0 |
| alcohol | Вещественный | 0 |
| quality | Категориальный (от 0 до 10) | 0 |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Признаки | Белое | | | | Красное | | | |
| Мин. | Среднее | Макс. | Ср. кв. откл. | Мин. | Среднее | Макс. | Ср. кв. откл. |
| fixed\_acidity | 3.8 | 6.855 | 14.2 | 0.844 | 4.6 | 8.32 | 15.9 | 1.741 |
| volatile\_acidity | 0.08 | 0.278 | 1.1 | 0.1 | 0.12 | 0.528 | 1.58 | 0.179 |
| citric\_acid | 0 | 0.334 | 1.66 | 0.121 | 0 | 0.271 | 1 | 0.195 |
| residual\_sugar | 0.6 | 6.391 | 65.8 | 5.072 | 0.9 | 2.539 | 15.5 | 1.409 |
| chlorides | 0.009 | 0.046 | 0.346 | 0.022 | 0.012 | 0.087 | 0.611 | 0.047 |
| free\_sulfur\_dioxide | 2 | 35.308 | 289 | 17.007 | 1 | 15.875 | 72 | 10.46 |
| total\_sulfur\_dioxide | 9 | 138.361 | 440 | 42.498 | 6 | 46.467 | 289 | 32.895 |
| density | 0.987 | 0.994 | 1.039 | 0.003 | 0.99 | 0.997 | 1.004 | 0.002 |
| pH | 2.72 | 3.188 | 3.82 | 0.151 | 2.74 | 3.311 | 4.01 | 0.154 |
| sulphates | 0.22 | 0.49 | 1.08 | 0.114 | 0.33 | 0.658 | 2 | 0.169 |
| alcohol | 8 | 10.514 | 14.2 | 1.231 | 8.4 | 10.423 | 14.9 | 1.066 |

*1.2.Визуальный анализ исходных данных*

*а) Гистограммы распределения и диаграммы Box-and-Whisker*

Для красного вина:

*Гистограммы распределений:*

Изображение выглядит как прямоугольный, Прямоугольник, снимок экрана, Красочность

Автоматически созданное описание

*Диаграммы Box-and-Whisker:*

Изображение выглядит как снимок экрана, Прямоугольник, прямоугольный, Параллельный

Автоматически созданное описание

* Распределение признаков “density” и “pH” похоже на нормальное распределение.
* Распределение признаков “fixed\_acidity”, “sulphates”, “alcohol” похоже на распределение хи-квадрат
* Распределение признаков “residual\_sugar”, “total\_sulfur\_dioxide”, похоже на экспоненциальное распределение
* Все признаки кроме признаков “alcohol”, “citric\_acid”, имеют большое количество выбросов.

Для белого вина:

*Гистограмма распределения:*

Изображение выглядит как прямоугольный, Прямоугольник, снимок экрана, линия

Автоматически созданное описание

*Диаграмма Box-and-Whisker:*

Изображение выглядит как прямоугольный, снимок экрана, Прямоугольник, Параллельный

Автоматически созданное описание

* Распределение признаков “volatile\_acidity”, “sulphates” похоже на распределение хи-квадрат
* Распределение признаков “pH” похоже на нормальное распределение
* Все признаки кроме признаков “alcohol”, “density”, “ residual\_sugar” имеют большое количество выбросов. При чем “alcohol” не имеет выбросов

*б) Корреляционная матрица признаков*

Для красного вина:

Изображение выглядит как снимок экрана, прямоугольный, Прямоугольник, шаблон

Автоматически созданное описание

Значимая связь между признаками:

* “volatile\_acidity” и “citric\_acid”: -0.6
* “pH” и “citric\_acid”: -0.5
* “density” и “alcohol”: -0.5

Тесная связь между другими признаками:

* “fixed\_acidity” и “citric\_acid”: 0.7
* “fixed\_acidity” и “density”: 0.7
* “fixed\_acidity” и “pH”: 0.7
* “free\_sulfur\_dioxide” и “total\_sulfur\_dioxide”: 0.7

Для белого вина:

Изображение выглядит как снимок экрана, прямоугольный, Прямоугольник, Красочность

Автоматически созданное описание

Значимая связь между признаками:

* “residual\_sugar” и “alcohol”: -0.5
* “free\_sulfur\_dioxide” и “total\_sulfur\_dioxide”: 0.6
* “density” и “total\_sulfur\_dioxide”: -0.5

Тесная связь между другими признаками:

* “residual\_sugar” и “density”: 0.8
* “alcohol” и “density”: -0.8

*в) Диаграммы рассеяния*

Для красного вина:

|  |  |
| --- | --- |
| Изображение выглядит как снимок экрана  Автоматически созданное описание | Изображение выглядит как снимок экрана  Автоматически созданное описание |

* Графики подтверждают небольшую связь среди признаков, в которых была обнаружена умеренная связь
* Графики подтверждают тесную связь среди признаков, в которых была обнаружена тесная связь, а также подтверждают наличие выбросов в признаке “ total\_sulfur\_dioxide”

Для белого вина:

|  |  |
| --- | --- |
| Изображение выглядит как карта, снимок экрана, Графика  Автоматически созданное описание | Изображение выглядит как снимок экрана  Автоматически созданное описание |

* Графики подтверждают наличие выбросов у признаков “residual\_sugar”, “free\_sulfur\_dioxide”, “density”
* Графики подтверждают небольшую связь среди признаков, в которых была обнаружена тесная связь

*1.3.Выводы*

1. Распределение классов в признаке “quality” не сбалансированно. Много “нормальных” вин и мало примеров “плохих” и “отличных вин”
2. Данные имеют большое количество выбросов
3. Связи между признаками у красного и белого вина отличаются
4. Присутствуют признаки с тесной связью между собой

II. Предобработка данных

*2.1. Очистка данных*

*а) Обнаружение и устранение дубликатов*

Для обнаружения дубликатов была использована функция из библиотеки “Pandas”: drop\_duplicates()

Количество повторов: 1177 – всего, 240 – в красном, 937 – в белом

Объём выборки после удаления повторов: 5320 – всего, 1359 – в красном, 3961 – в белом

Формирование обучающей, валидационной и тестовой выборок для красного вина:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Обучающая | Валидационная | Тестовая | Всего |
| % | 60 | 30 | 10 | 100 |
| Объём выборки | 816 | 407 | 136 | 1359 |

Формирование обучающей, валидационной и тестовой выборок для белого вина:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Обучающая | Валидационная | Тестовая | Всего |
| % | 60 | 30 | 10 | 100 |
| Объём выборки | 2378 | 1187 | 396 | 3961 |

(Дальше диаграммы приводятся для обучающей выборки)

*б) Обнаружение и устранение выбросов*

В источнике указано, что данные могут быть не релевантными, следовательно нужно сократить количество выбросов.

Для обнаружения выбросов использовался метод межквартильного диапазона. Но так как данные в признаке “quality” несбалансированны, то наблюдения с “quality” меньше 5 или больше 6 не удалялись.

Количество выбросов: 89– всего, 29 – в красном, 60 – в белом

Объём обучающей выборки после удаления выбросов: 3105– всего, 787– в красном, 2318– в белом

*в) Пропущенные значения*

В данных не обнаружено пропусков

*г) Визуальный анализ очищенных данных*

Для красного вина:

*Гистограмма распределения:*

Изображение выглядит как прямоугольный, снимок экрана, линия, Прямоугольник

Автоматически созданное описание

*Диаграммы Box-and-Whisker:*

Изображение выглядит как Прямоугольник, прямоугольный, снимок экрана, Параллельный

Автоматически созданное описание

*Диаграммы рассеяния:*

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Для белого вина:

*Гистограмма распределения:*

Изображение выглядит как прямоугольный, Прямоугольник, снимок экрана, линия

Автоматически созданное описание

*Диаграммы Box-and-Whisker:*

Изображение выглядит как Прямоугольник, снимок экрана, прямоугольный, Параллельный

Автоматически созданное описание

*Диаграммы рассеяния:*

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Количество выбросов для некоторых признаков сократилось значительно, но некоторые признаки до сих пор имеют огромное количество выбросов

*д) Выводы*

1. Данные были разделены на обучающую, валидационную, тестовую выборку
2. Значительное количество потенциальных выбросов осталось.
3. Некоторые признаки после очистки до сих пор имеют большое количество выбросов. Это может быть связано с несовершенством метода обнаружения выбросов или с тем, что наблюдения, попавшие в группу выбросов, соответствуют редким классам признака “quality” (то есть эти наблюдения важны)

*2.2. Преобразование данных*

*а) Преобразование входов*

Признак “pH” был стандартизирован, так как предположительно имеет нормальное распределение. Стандартизация осуществлена с помощью StandardScaler из библиотеки “sklearn.preprocessing” с параметрами по умолчанию.

Так как остальные признаки предположительно имеют распределение отличное от нормального и неизвестно максимально и минимально возможные значения признаков, то использовалось RobustScaler из библиотеки “sklearn.preprocessing” с параметрами по умолчанию. Данный метод осуществляет смещение на медиану и масштабирует на интерквартильный размах.

*б) Преобразование выходов*

1. Классы выходного признака были сгруппированы в связи с сильным дисбалансом классов. Группировка: [0, 1, 2, 3, 4] => ‘0-4’, [5] => ‘5’, [6] => ‘6’, [7] => ‘7’, [8, 9, 10] => ‘8-10’.
2. Затем было произведено one-hot кодирование выходного признака.

*в) Визуальный анализ преобразованных данных*

Для красного вина:

*Гистограмма распределения:*

*Изображение выглядит как прямоугольный, Прямоугольник, снимок экрана, линия

Автоматически созданное описание*

*Box-and-Whisker:*

Изображение выглядит как Прямоугольник, снимок экрана, прямоугольный, Параллельный

Автоматически созданное описание

*Диаграммы рассеяния:*

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Для белого вина:

*Гистограмма распределения:*

Изображение выглядит как прямоугольный, Прямоугольник, снимок экрана, Красочность

Автоматически созданное описание

*Диаграммы Box-and-Whisker:*

Изображение выглядит как снимок экрана, Прямоугольник, прямоугольный, Параллельный

Автоматически созданное описание

*Диаграммы рассеяния:*

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

После преобразования признаков распределение признаков сохранилось. Связь между признаками также сохранилась. Количество выбросов также осталось на том же уровне.

*2.3.Выводы*

1. После преобразования масштаб всех входных признаков стал примерно одинаковым: от -2 до 2.
2. После преобразования распределение признаков примерно сохранилось.

III. Формирование признаков

*3.1. Сокращение числа признаков*

Из-за отсутствия пропусков, небольшого количества данных, отсутствия сильных корреляционных связей между признаками – сокращение признаков не проводилось

*3.2. Конструирование новых признаков*

Формирование новых признаков не проводилось

*3.3. Выводы*

Количество признаков не изменилось

IV. Построение и исследование нейросетевых моделей

*4.1. Параметры архитектуры и обучения многослойной нейронной сети*

|  |  |
| --- | --- |
| Параметр | Значение |
| Функция потерь | Categorical cross-entropy |
| Число входов сети | 11 |
| Число выходов сети | 5 |
| Число скрытых слоев сети\* | 2 |
| Число и АХ нейронов 1-го скрытого слоя\* | 10, logistic |
| Число и АХ нейронов 2-го скрытого слоя\* | 10, logistic |
| Число и АХ нейронов 3-го скрытого слоя\* | - |
| АХ нейронов выходного слоя | SoftMax |
| Кросс-валидация | Holdout (60/30/10) |
| Объёмы обучающей / валидационной / тестовой выборок | 3105 (787 + 2318 ) / 1545 (396+ 1149) / 519 (134 + 385) |
| Режим обучения\* | Mini-batch, bs = 50 |
| Метод инициализации весов | метод Хавьера |
| Критерий останова | Ошибка растет на валидационной выборке 5 эпох подряд |
| Ранний останов | да |

\* Определяется вариантом задания.

*4.2. Исследование простого градиентного метода обучения*

*а) Исследование влияния параметра скорости обучения на качество обучения*

*Изображение выглядит как снимок экрана, текст, линия, диаграмма

Автоматически созданное описание*

*Изображение выглядит как снимок экрана, текст, линия, График

Автоматически созданное описание*

*Изображение выглядит как снимок экрана, текст, линия, График

Автоматически созданное описание*

*Изображение выглядит как текст, снимок экрана, дисплей, линия

Автоматически созданное описание*

*Изображение выглядит как текст, снимок экрана, линия, Шрифт

Автоматически созданное описание*

**Указание**: обучение каждый раз начинать из одной и той же начальной точки.

*б) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Скорость обучения, α | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | 0.2 | 103 | 1.254 | 1.267 |
| 2 | 0.1 | 152 | 1.264 | 1.268 |
| 3 | 0.05 | 232 | 1.284 | 1.270 |
| 4 | 0.0005 | 1000 | 1.607 | 1.508 |
| 5 | 0.5 | 56 | 1.241 | 1.299 |

**Указание**: все ошибки указываются для обученной сети.

*в) Выводы*

1. При разной скорости обучения ранний останов срабатывает в разное время
2. По итогам эксперимента лучшей скоростью обучения является 0.1

*4.3. Исследование методов GDM и NAG*

*а) Исследование влияния параметра момента на качество обучения*

*(GDM слева, NAG справа)*

|  |  |
| --- | --- |
| Изображение выглядит как снимок экрана, линия, текст, График  Автоматически созданное описание | Изображение выглядит как снимок экрана, текст, линия, График  Автоматически созданное описание |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

**Указание**: параметр скорости обучения выбрать наилучшим по результатам исследований п. 4.2.

*б) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Момент, μ | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | GDM | 0 | 140 | 1.274 | 1.269 |
| 2 | NAG | 116 | 1.286 | 1.272 |
| 3 | GDM | 0.1 | 140 | 1.266 | 1.269 |
| 4 | NAG | 211 | 1.228 | 1.255 |
| 5 | GDM | 0.05 | 139 | 1.272 | 1.269 |
| 6 | NAG | 119 | 1.282 | 1.272 |
| 7 | GDM | 0.5 | 151 | 1.215 | 1.271 |
| 8 | NAG | 191 | 1.188 | 1.288 |

*в) Выводы*

1. При обучении с моментом равным 0.1 методом NAG был получен лучший результат, который превосходит обычный градиентный спуск
2. При обучении с моментом равным 0.5 предположительно начинается переобучение

*4.4. Исследование методов наискорейшего спуска и сопряжённых градиентов*

*а) Сравнение кривых обучения*

Изображение выглядит как текст, снимок экрана, дисплей, программное обеспечение

Автоматически созданное описание

Изображение выглядит как текст, снимок экрана, линия

Автоматически созданное описание

Изображение выглядит как снимок экрана, линия, диаграмма, График

Автоматически созданное описание

*б) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | SGD | 10 | 1.849 | 1.786 |
| 2 | Fletcher-Reeeves | 100 | 1.582 | 1.482 |
| 3 | Polak-Ribiere | 100 | 1.280 | 1.266 |

*в) Выводы*

1. Метод сопряженного градиентного спуска с алгоритмом Fletcher-Reeeves имеет плохие результаты обучения относительно остальных методов
2. Метод сопряженного градиентного спуска с алгоритмом Polak-Ribiere имеет лучшие результаты обучения по сравнению с обычным градиентным спуском

*4.5. Исследование метода AdaGrad*

*а) Кривые обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей, валидационной и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения).

**Указание**: базовую скорость обучения выбрать наилучшей по результатам исследований п. 4.2.

*б) Исследование динамики скорости обучения*

Построить графики зависимости скорости обучения отдельных синаптических коэффициентов сети (выбрать произвольно из разных слоёв сети) от времени обучения, а также графики зависимости минимальной, максимальной и средней (по всем настраиваемым параметрам сети) скорости обучения от времени обучения.

*в) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | AdaGrad |  |  |  |

*г) Выводы*

Сделать выводы о качестве обучения по методу AdaGrad.

*4.6. Исследование методов RMSProp и AdaDelta*

*а) Сравнение кривых обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей, валидационной и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения) при различных значениях параметра сглаживания ρ (значения указать в таблице ниже) для методов RMSProp и AdaDelta.

**Указание**: базовую скорость обучения в методе RMSProp выбрать наилучшей по результатам исследований п. 4.2.

*б) Исследование динамики скорости обучения*

При различных значениях параметра сглаживания построить графики зависимости скорости обучения отдельных синаптических коэффициентов сети (выбрать произвольно из разных слоёв сети) от времени обучения, а также графики зависимости минимальной, максимальной и средней (по всем настраиваемым параметрам сети) скорости обучения от времени обучения для методов RMSProp и AdaDelta.

*в) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Параметр сглаживания, ρ | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | RMSProp | 0 |  |  |  |
| 2 | AdaDelta |  |  |  |
| 3 | RMSProp |  |  |  |  |
| 4 | AdaDelta |  |  |  |
| 5 | RMSProp |  |  |  |  |
| 6 | AdaDelta |  |  |  |
| 7 | RMSProp |  |  |  |  |
| 8 | AdaDelta |  |  |  |

*г) Выводы*

Сделать выводы о влиянии параметра сглаживания в методах RMSProp и AdaDelta на качество обучения.

*4.7. Исследование метода Adam*

*а) Сравнение кривых обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей, валидационной и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения) при различных значениях параметров сглаживания β1, β2 (значения указать в таблице ниже).

**Указание 1**: базовую скорость обучения выбрать наилучшей по результатам исследований п. 4.2.

**Указание 2**: в одном из экспериментов выбрать β1 и β2 равными наилучшему значению параметра ρ по результатам исследований п. 4.6.

*б) Исследование динамики скорости обучения*

При различных значениях параметров сглаживания построить графики зависимости скорости обучения отдельных синаптических коэффициентов сети (выбрать произвольно из разных слоёв сети) от времени обучения, а также графики зависимости минимальной, максимальной и средней (по всем настраиваемым параметрам сети) скорости обучения от времени обучения.

*в) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | β1 | β2 | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 |  |  |  |  |  |
| 2 |  |  |  |  |  |
| 3 |  |  |  |  |  |
| 4 |  |  |  |  |  |
| 5 |  |  |  |  |  |
| 6 |  |  |  |  |  |

*г) Выводы*

Сделать выводы о влиянии параметров сглаживания в методе Adam на качество обучения.

*4.8. Исследование метода RProp*

*а) Кривые обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей, валидационной и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения).

*б) Исследование динамики приращений весов*

Построить графики зависимости приращений отдельных синаптических коэффициентов сети (выбрать произвольно из разных слоёв сети) от времени обучения, а также графики зависимости минимального, максимального и среднего (по всем настраиваемым параметрам сети) приращения от времени обучения.

*в) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | RProp |  |  |  |

*г) Выводы*

Сделать выводы о качестве обучения по методу RProp.

*4.9. Исследование методов Левенберга-Маркардта и BFGS*

*а) Кривые обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей, валидационной и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения) для: 1) метода Левенберга-Маркардта; 2) метода BFGS.

*б) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | LM |  |  |  |
| 2 | BFGS |  |  |  |

*в) Выводы*

Сделать выводы о качестве обучения по методам Левенберга-Маркардта и BFGS.

*4.10. Исследование метода стохастического градиента*

*а) Сравнение кривых обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей, валидационной и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения) при различных размерах mini-batch’ей (указаны в таблице ниже).

**Указание**: параметр скорости обучения простого градиентного метода выбрать наилучшим по результатам исследований п. 4.2.

*б) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Метод | Размер mini-batch’а | Число эпох обучения | Ошибка на обучающей выборке, *Eобуч* | Ошибка на тестовой выборке, *Eтест* |
| 1 | GD | 1 |  |  |  |
| 2 | GD | 20 |  |  |  |
| 3 | GD | 100 |  |  |  |
| 4 | GD | равен объёму выборки \_\_\_\_ |  |  |  |

*в) Исследование влияния размера mini-batch’а на качество обучения*

Построить графики зависимости ошибок обученной сети на обучающей и тестовой выборках от размера mini-batch’а.

*г) Выводы*

Сделать выводы о влиянии размера mini-batch’а в методе стохастического градиента на качество обучения.

*4.11. Сравнение методов обучения*

*а) Сравнение числа эпох обучения*

Построить столбиковую диаграмму числа эпох обучения (по горизонтальной оси – метод обучения (значения параметров методов взять наилучшими по результатам соответствующего исследования), по вертикальной оси – число эпох обучения).

*б) Сравнение качества обученных нейросетевых моделей*

Построить столбиковую диаграмму ошибок обученной сети на обучающей и тестовой выборках (по горизонтальной оси – метод обучения (значения параметров методов взять наилучшими по результатам соответствующего исследования), по вертикальной оси – ошибки обученной сети).

*в) Выводы*

Сделать выводы по результатам сравнения методов обучения (GD, GDM, NAG, SGD, Fletcher-Reeeves, Polak-Ribiere, AdaGrad, RMSProp, AdaDelta, RProp, LM, BFGS, Stochastic GD).

*4.12. Исследование влияния способа инициализации весов на качество обучения*

*а) Исследование прямого информационного потока в сети*

Для произвольно взятых нейронов из каждого слоя построить графики зависимости среднего значения и с.к.о. (по примерам обучающей выборки) выходов при инициализации весов сети случайными числами, распределёнными по нормальному закону *N*(0; σ), от значения с.к.о. σ. Отметить на графике значения σ, рассчитанные по методу Хавьера для различных слоёв сети.

*б) Исследование обратного информационного потока в сети*

Для тех же нейронов построить графики зависимости среднего значения и с.к.о. (по примерам обучающей выборки) двойственных потенциалов при инициализации весов сети случайными числами, распределёнными по нормальному закону *N*(0; σ), от значения с.к.о. σ. Отметить на графике значения σ, рассчитанные по методу Хавьера для различных слоёв сети.

*в) Исследование распределений выходов и двойственных потенциалов нейронов*

Построить гистограммы распределения выходов и двойственных потенциалов (по примерам обучающей выборки) тех же нейронов, получаемые: 1) при слишком малых значениях σ; 2) при значениях σ, рассчитанных по методу Хавьера; 3) при слишком больших значениях σ.

*г) Кривые обучения*

Построить графики зависимости ошибки сети на обучающей и тестовой выборках от времени обучения (кривые обучения) при инициализации весов сети случайными числами, распределёнными по нормальному закону *N*(0; σ): 1) при слишком малых значениях σ; 2) при значениях σ, рассчитанных по методу Хавьера; 3) при слишком больших значениях σ.

**Указание**: для обучения использовать простой градиентный метод, параметр скорости обучения выбрать наилучшим по результатам исследований п. 4.2.

*д) Заполнить таблицу по результатам обучения*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Распределение начальных весов | С.к.о. начальных весов | Средняя ошибка на обучающей выборке ± с.к.о., | Средняя ошибка на тестовой выборке ± с.к.о., |
| 1 | Равномерное |  |  |  |
| 2 | Нормальное |  |  |
| 3 | Усеченное нормальное |  |  |
| 4 | Равномерное |  |  |  |
| 5 | Нормальное |  |  |
| 6 | Усеченное нормальное |  |  |
| 7 | Равномерное |  |  |  |
| 8 | Нормальное |  |  |
| 9 | Усеченное нормальное |  |  |

**Указание 1**: для обучения использовать простой градиентный метод, параметр скорости обучения выбрать наилучшим по результатам исследований п. 4.2.

**Указание 2**: для расчета среднего значения и с.к.о. ошибки обученной сети проводить многократное (не менее 10 раз) обучение из различных начальных точек.

*е) Выводы*

Сделать выводы о влиянии способа инициализации весов на качество обучения.

*4.13. Методы кросс-валидации*

*а) Заполнить таблицу по результатам кросс-валидации различными методами*

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Метод кросс-валидации | Число запусков обучения | Средняя ошибка на обучающей выборке ± с.к.о., | Средняя ошибка на тестовой выборке ± с.к.о., |
| Монте-Карло | 10 |  |  |
| Holdout 60/30/10 | 1 |  |  |
| 10-fold |  |  |  |
| LOOCV |  |  |  |

**Указание 1**: для обучения использовать простой градиентный метод, параметр скорости обучения выбрать наилучшим по результатам исследований п. 4.2.

**Указание 2**: инициализацию сети провести один раз наилучшим методом по результатам исследований п. 4.12, запуски процедуры обучения каждый раз проводить из одной и той же начальной точки.

**Указание 3**: Внутри каждого фолда кросс-валидации разбивать обучающие данные на обучающую и валидационную выборки в отношении 70/30.

*б) Исследование k-fold кросс-валидации*

Построить графики зависимости среднего значения и с.к.о. (по фолдам) ошибки обученной сети на обучающей и тестовой выборках от числа фолдов *k*.

*в) Выводы*

Сделать выводы по результатам исследований различных способов кросс-валидации.

*4.14. Исследование различных архитектур нейронных сетей*

*а) Исследование зависимости качества обучения от числа нейронов в скрытых слоях*

Провести обучение нейронных сетей с различным числом нейронов в скрытых слоях. По результатам обучения заполнить таблицу.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № п/п | Число нейронов в скрытых слоях | Средняя ошибка на обучающей выборке ± с.к.о., | Средняя ошибка на тестовой выборке ± с.к.о., |
| 1 |  |  |  |
| 2 |  |  |  |
| 3 |  |  |  |
| 4 |  |  |  |
| 5 |  |  |  |
| 6 |  |  |  |

**Указание 1**: при выполнении пп. а)–б) для обучения использовать метод сопряженных градиентов, Левенберга-Маркардта или BFGS.

**Указание 2**: при выполнении пп. а)–б) среднее значение и с.к.о. ошибок на обучающей и тестовой выборках считать по результатам 10-fold кросс-валидации, внутри каждого фолда разбивать обучающие данные на обучающую и валидационную выборки в отношении 70/30.

*б) Исследование зависимости качества обучения от активационных характеристик нейронов*

Для наилучшей архитектуры, найденной в п. а), провести обучение сети при различных активационных характеристиках нейронов скрытых слоёв. По результатам обучения заполнить таблицу.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| АХ нейронов  скрытых слоёв | Средняя ошибка на обучающей выборке ± с.к.о., | Средняя ошибка на тестовой выборке ± с.к.о., |
| logistic |  |  |
| tanh |  |  |
| linear |  |  |
| softsign |  |  |
| softplus |  |  |

*4.15. L1 и L2 регуляризация весов*

*а) Исследование зависимости качества обученной сети от параметра регуляризации*

Построить график зависимости ошибки обученной сети на обучающей и тестовой выборках от значения параметра λ: 1) при *L*1-регуляризации весов; 2) при *L*2-регуляризации весов.

**Указание**: исследования в пп. а)–в) проводить для лучшей архитектуры, найденной в п. 4.14, для обучения использовать один из градиентных методов с адаптивным шагом, параметры метода выбрать наилучшими по результатам исследований пп. 4.5–4.7.

*б) Исследование зависимости нормы вектора синаптических коэффициентов от параметра регуляризации*

Построить графики зависимости *L*1 и *L*2 нормы вектора синаптических коэффициентов обученной сети от параметра λ: 1) при *L*1‑регуляризации; 2) при *L*2-регуляризации.

*в) Сравнение кривых обучения при различных значениях параметра регуляризации*

При фиксированных значениях параметра λ (λ ≈ 0, λ > 0, λ >> 0) построить графики зависимости *L*1 и *L*2 нормы вектора синаптических коэффициентов сети от времени обучения.

*г) Выводы*

Сделать выводы по результатам использования *L*1 и *L*2 регуляризации весов.

*4.16. Инъекция шума*

*а) Исследование зависимости качества обученной сети от параметра зашумления*

Построить графики зависимости ошибки обученной сети на обучающей и тестовой выборках от с.к.о. σ шума при: 1) зашумлении входов; 2) зашумлении градиентов.

**Указание 1**: шум генерировать из нормального распределения *N*(0; σ).

**Указание 2**: исследования в пп. а)–б) проводить для лучшей архитектуры, найденной в п. 4.14, для обучения использовать один из градиентных методов с адаптивным шагом, параметры метода выбрать наилучшими по результатам исследований пп. 4.5–4.7.

*б) Сравнение кривых обучения*

Построить кривые обучения на обучающей, валидационной и тестовой выборках при обучении: 1) без зашумления; 2) с зашумлением входов; 3) с зашумлениемградиентов; 4) с зашумлениемвходов иградиентов.

**Указание**: шум генерировать из нормального распределения *N*(0; σ), использовать с.к.о. шума σ, при котором наблюдается наименьшая ошибка сети (по результатам исследований в п. а)) либо задать произвольно.

*в) Выводы*

Сделать выводы по результатам использования инъекции шума.

V. Исследование обученной нейросетевой модели

**Указание:** среди всех построенных в пп. 4.2–4.16 нейросетевых моделей выбрать модель с наименьшими значениями ошибок на обучающей и валидационной выборках.

*5.1.Исследование качества обученной модели*

**Для задач регрессии**: построить диаграммы рассеяния в пространстве «выход модели – желаемый выход» для обучающей и тестовой выборок, построить линейные регрессии выхода модели на желаемый выход, рассчитать коэффициенты детерминации линейных регрессионных моделей для обучающей и тестовой выборок. Построить гистограммы распределения ошибок сети на примерах обучающей и тестовой выборок.

**Для задач классификации**: построить матрицы ошибок (confusion matrix) нейросетевого классификатора и рассчитать ошибки классификации (отношение числа неправильно классифицированных примеров к общему числу примеров) на обучающей и тестовой выборках.

*5.2. Оценка важности признаков*

Визуализировать матрицу синаптических коэффициентов 1-го слоя обученной сети (использовать heatmap). Сделать предположения о важности используемых признаков для решения поставленной задачи по результатам визуального анализа.

*5.3. Выводы*

Сделать выводы о качестве и применимости построенной нейросетевой модели для решения рассматриваемой задачи.