# Нейронные сети (NN) с элементами Deep Learning

Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра статистического моделирования

18 октября 2025

# Что такое нейронные сети?

- Нейронные сети — это семейство моделей машинного обучения, которые стали доминирующим подходом во многих областях с 2012 года.
- Идея была предложена еще в 1970-х, но технические возможности для обучения больших сетей появились только в начале 2010-х.
- Совокупность нейросетевых подходов называется **глубинным обучением** (Deep Learning).

# Две ключевые идеи Deep Learning

**End-to-end обучение**

- Переход от сложных пайплайнов, где каждая часть решает свою подзадачу, к обучению всей системы как единого целого.
- Например, вся модель от сырых данных до конечного ответа обучается совместно.

**Обучение представлений (Representation Learning)**

- Автоматическое создание информативных признаков из данных, часто неразмеченных.
- Это позволяет отказаться от ручного конструирования признаков экспертами.

# Полносвязные нейросети

- Самая простая архитектура нейронных сетей.
- Состоит из слоев, в каждом из которых есть **нейроны**.
- Нейроны одного слоя соединены со всеми нейронами следующего слоя.

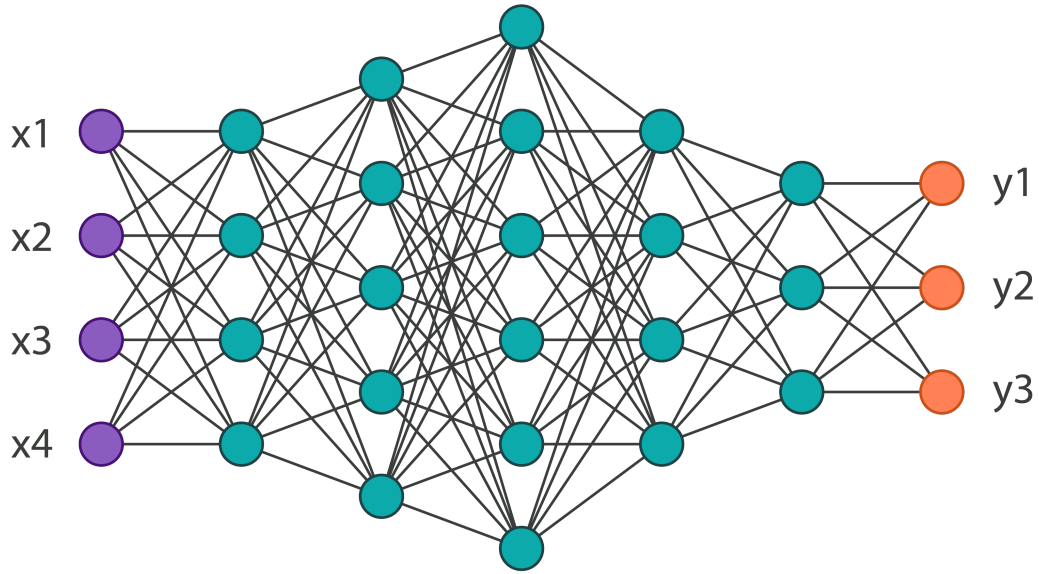



Рис.: Пример структуры полносвязной нейронной сети.

# Из чего состоит нейрон?

- **Входы ($x_i$)**: значения, поступающие от предыдущего слоя.
- **Веса ($w_i$)**: параметры, которые показывают важность каждого входа.
- **Смещение ($b$)**: дополнительный обучаемый параметр.
- **Сумматор**: вычисляет взвешенную сумму входов: $z = \sum_i w_i x_i + b$.
- **Функция активации ($f(z)$)**: нелинейная функция, которая определяет выходной сигнал нейрона. Примеры: Sigmoid, ReLU.

# Что такое нейрон? Математическая модель

Нейрон — это базовая вычислительная единица сети. Он выполняет два последовательных действия:

1. **Аффинное преобразование**: вычисляет взвешенную сумму своих входов $(x_i)$ с весами $(w_i)$ и добавляет смещение $(b)$. Это называется **логитом**.
2. **Нелинейное преобразование**: применяет к результату **функцию активации** $f(z)$.


Логит: $z = w_1x_1 + w_2x_2 + \cdots + w_nx_n + b = \sum_{i=1}^{n} w_ix_i + b$
Выход нейрона: $a = f(z) = f\left(\sum_{i=1}^{n} w_ix_i + b\right)$

# Векторная форма для нейрона

Для удобства и эффективности вычислений операции записываются в векторной форме.

- Входные данные: вектор $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$
- Веса: вектор $\mathbf{w} = [w_1, w_2, \ldots, w_n]^T$
- Смещение: скаляр $b$

Логит: $z = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$
Выход: $a = f(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$

**Ключевая идея**

Обучение нейрона — это подбор таких векторов весов $\mathbf{w}$ и смещений $b$, которые минимизируют ошибку на обучающих данных.

# Полносвязный слой: Матричная форма

Слой из $k$ нейронов, принимающий на вход $n$ значений, можно представить в виде матричных операций.

- **Матрица весов** $W$: размер $k \times n$. Каждая строка — это вектор весов $\mathbf{w}_j^T$ для $j$-го нейрона.
- **Вектор входов** $\mathbf{x}$: размер $n \times 1$.
- **Вектор смещений** $\mathbf{b}$: размер $k \times 1$.
- **Вектор логитов** $\mathbf{z}$: размер $k \times 1$.
- **Вектор активаций** $\mathbf{a}$: размер $k \times 1$.

$$\mathbf{z} = W\mathbf{x} + \mathbf{b}$$
$$\mathbf{a} = f(\mathbf{z})$$

# Роль функций активации

**Зачем нужна нелинейность?** Без нелинейных функций активации любая глубокая нейронная сеть была бы эквивалентна одному линейному слою.

- Пусть $f(z) = z$ (линейная активация).
- Выход первого слоя: $a_1 = W_1 x + b_1$.
- Выход второго слоя: $a_2 = W_2 a_1 + b_2 = W_2(W_1 x + b_1) + b_2$.
- Раскрыв скобки, получаем: $a_2 = (W_2 W_1)x + (W_2 b_1 + b_2)$.
- Это эквивалентно одному слою с весами $W' = W_2 W_1$ и смещением $b' = W_2 b_1 + b_2$.

**Вывод**

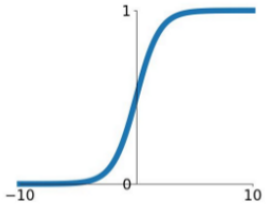
Именно нелинейность позволяет сети аппроксимировать сложные, нелинейные зависимости в данных.

# Популярные функции активации

**Сигмоида (Sigmoid)** Проблема: затухание градиента.
**ReLU (Rectified Linear Unit)** Стандарт де-факто для скрытых слоев.

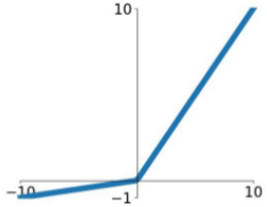
**Sigmoid**

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



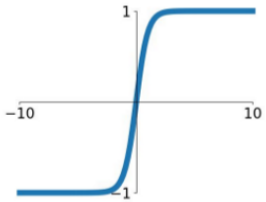

**Leaky ReLU**

$$\max(0.1x, x)$$




**tanh**

$$\tanh(x)$$

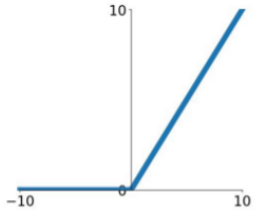



**Maxout**

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

**ReLU**

$$\max(0, x)$$




**ELU**

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

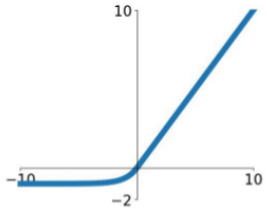



Рис.: Различные функции активации

# Функция потерь (Loss Function)

Чтобы обучать сеть, нам нужна мера того, насколько она ошибается в предсказании. Эту меру называют функцией потерь $L(\hat{y}, y)$, где:

- $\hat{y}$ — предсказание сети.
- $y$ — истинное значение.

**Примеры:**

- **Для регрессии**: Среднеквадратичная ошибка (MSE)

$$L_{MSE} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left( \hat{y}^{(i)} - y^{(i)} \right)^2$$

- **Для бинарной классификации**: Бинарная кросс-энтропия

$$L_{BCE} = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[ y^{(i)} \log \left( \hat{y}^{(i)} \right) + \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - \hat{y}^{(i)} \right) \right]$$

# Градиентный спуск

Наша цель — найти такие параметры сети (веса $W$ и смещения $b$), которые минимизируют функцию потерь $L$.

- **Идея**: двигаться в направлении, противоположном градиенту функции потерь (т.е. в сторону наискорейшего убывания).
- **Градиент** $\nabla L$ — это вектор частных производных $L$ по всем параметрам сети.

Правило обновления весов для одного параметра $w$:

$$w := w - \eta \frac{\partial L}{\partial w}$$

где $\eta$ — **скорость обучения** (learning rate).

# Backpropagation

Как эффективно посчитать производную $\frac{\partial L}{\partial w}$ для веса, который находится в глубоком слое сети?

**Метод обратного распространения ошибки (Backpropagation)** — это, по сути, рекурсивное применение **цепного правила** (chain rule) из матанализа для вычисления градиентов.

## Идея

1. Сначала вычисляется производная ошибки по выходу последнего слоя.
2. Затем эта ошибка движется назад, от слоя к слою.
3. На каждом слое вычисляется градиент по его параметрам и градиент по его входу, который передается дальше назад.

# Однослойный случай: градиент для одного нейрона

Пусть $L = \frac{1}{2}(\hat{y} - y)^2$, $\hat{y} = \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x} + b)$.

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \frac{d\hat{y}}{dz} \frac{\partial z}{\partial \boldsymbol{w}} = (\hat{y} - y)\, \sigma'(z)\, \boldsymbol{x}.$$

Аналогично:

$$\frac{\partial L}{\partial b} = (\hat{y} - y)\, \sigma'(z).$$

# Многослойный случай

Рассмотрим производную потерь $L$ по весу $w_{ij}^{[l]}$ в слое $l$.

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{[l]}} = \frac{\partial L}{\partial a^{[L]}} \frac{\partial a^{[L]}}{\partial z^{[L]}} \cdots \frac{\partial z^{[l+1]}}{\partial a^{[l]}} \frac{\partial a^{[l]}}{\partial z^{[l]}} \frac{\partial z^{[l]}}{\partial w_{ij}^{[l]}}$$

Это выглядит сложно, но на практике вычисляется последовательно:

1. **Forward Pass**: Вычисляем все активации $a^{[l]}$ до самого конца.
2. **Backward Pass**:
   - Вычисляем градиент для последнего слоя $\frac{\partial L}{\partial z^{[L]}}$.
   - Рекурсивно вычисляем $\frac{\partial L}{\partial z^{[l]}}$ через $\frac{\partial L}{\partial z^{[l+1]}}$.
   - Используя $\frac{\partial L}{\partial z^{[l]}}$, находим градиенты по параметрам этого слоя: $\frac{\partial L}{\partial W^{[l]}}$ и $\frac{\partial L}{\partial b^{[l]}}$.

# Аппроксимация в конкретном классе функций

Пусть $\mathcal{F}$ — класс функций (например, все функции, реализуемые нейросетью фиксированной архитектуры).

**Аппроксимация функции** $f(x)$ в $\mathcal{F}$ означает нахождение $\hat{f} \in \mathcal{F}$, минимизирующей ошибку:

$$\hat{f} = \arg\min_{g \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_{x \sim P_X} \left[ (g(x) - f(x))^2 \right].$$

Если $f$ не принадлежит $\mathcal{F}$, мы подбираем ближайшую (по метрике потерь) функцию из этого класса. **Пример:** аппроксимация нелинейной зависимости $f(x) = \sin x$ линейной функцией.

# Простой случай: однослойная сеть

Для одной скрытой прослойки:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j \, \sigma(\boldsymbol{w}_j^\top x + b_j).$$

Здесь:

- $\sigma$ — фиксированная нелинейная функция (например, сигмоида или ReLU),
- параметры $(\alpha_j, \boldsymbol{w}_j, b_j)$ настраиваются по данным.

Такая сеть реализует класс функций $\mathcal{F}_m$ — все линейные комбинации $m$ базисных нелинейных элементов. При увеличении $m$ класс $\mathcal{F}_m$ становится богаче.

# Теорема универсальной аппроксимации

**Теорема (Цыбеноко(1989), Хорник(1991)):**

Для любой непрерывной функции $f$ на компактном множестве $K \subset \mathbb{R}^n$ и любого $\varepsilon > 0$ существует сеть с одним скрытым слоем и конечным числом нейронов $m$, такая, что

$$\forall x \in K : \quad |f(x) - \hat{f}(x)| < \varepsilon.$$

**Следствие:** класс функций, реализуемых нейросетями с нелинейной активацией, — *универсальный аппроксиматор*.

# Эпоха и батчи

- **Эпоха (epoch)** — один полный проход по всей обучающей выборке. После каждой эпохи параметры сети обновлены столько раз, сколько было мини-батчей.
- **Batch (батч)** — подмножество обучающих примеров, обрабатываемое за один шаг оптимизации.

## Почему обучение идёт батчами

- Слишком большой объём данных не помещается в память.
- Мини-батч даёт стохастическую оценку градиента $\nabla_\theta J(\Theta)$.
- Это снижает вычислительные затраты и служит регуляризацией.

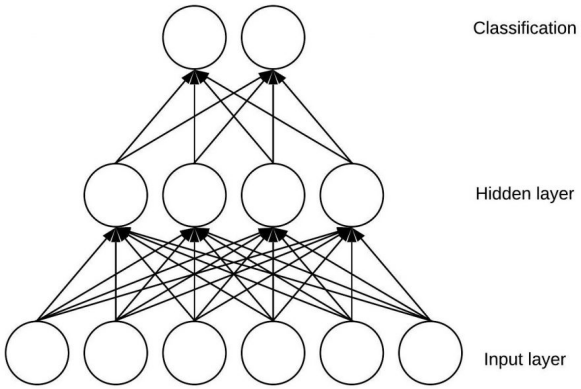
# Инициализация весов

Значимую роль играет начальная инициализация весов сети.

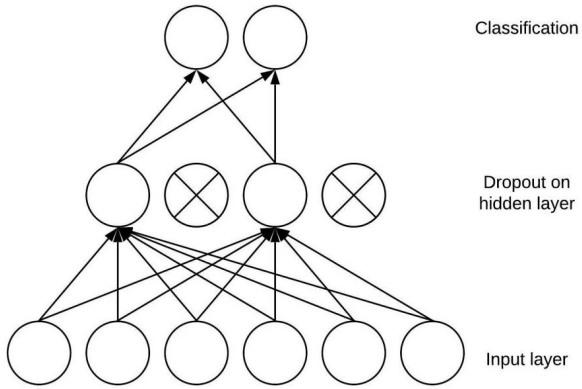
- Плохая инициализация $\Rightarrow$ затухание/взрыв градиентов.
- Эвристический подход: случайные числа.
- Классические схемы: **Xavier/Glorot** (для tanh): распределение с дисперсией $\sim \frac{2}{n_{in}+n_{out}}$.
- **Kaiming He** (для ReLU): дисперсия $\sim \frac{2}{n_{in}}$.

# Регуляризация

- $L_2$ (или $L_1$) весовая регуляризация: добавить $\frac{\lambda}{2}\sum_\ell \|W^{(\ell)}\|_F^2$ в цель $\rightarrow$ дополнительный член $\lambda W^{(\ell)}$ в градиенте.
- Dropout (случайное зануление нейронов на обучении) и Batch normalization (контроль над средним и дисперсией).
- Ранняя останова (early stopping) по валидационной выборке.




**Without Dropout**




**With Dropout**

# Оптимизаторы стохастического спуска

- SGD — простой стохастический градиентный спуск.
- Моменты: $v \leftarrow \beta v + (1 - \beta)\nabla_\theta J$, $\theta \leftarrow \theta - \eta v$.
- Адаптивные методы: AdaGrad, RMSProp, Adam.