Введение в нейронные сети

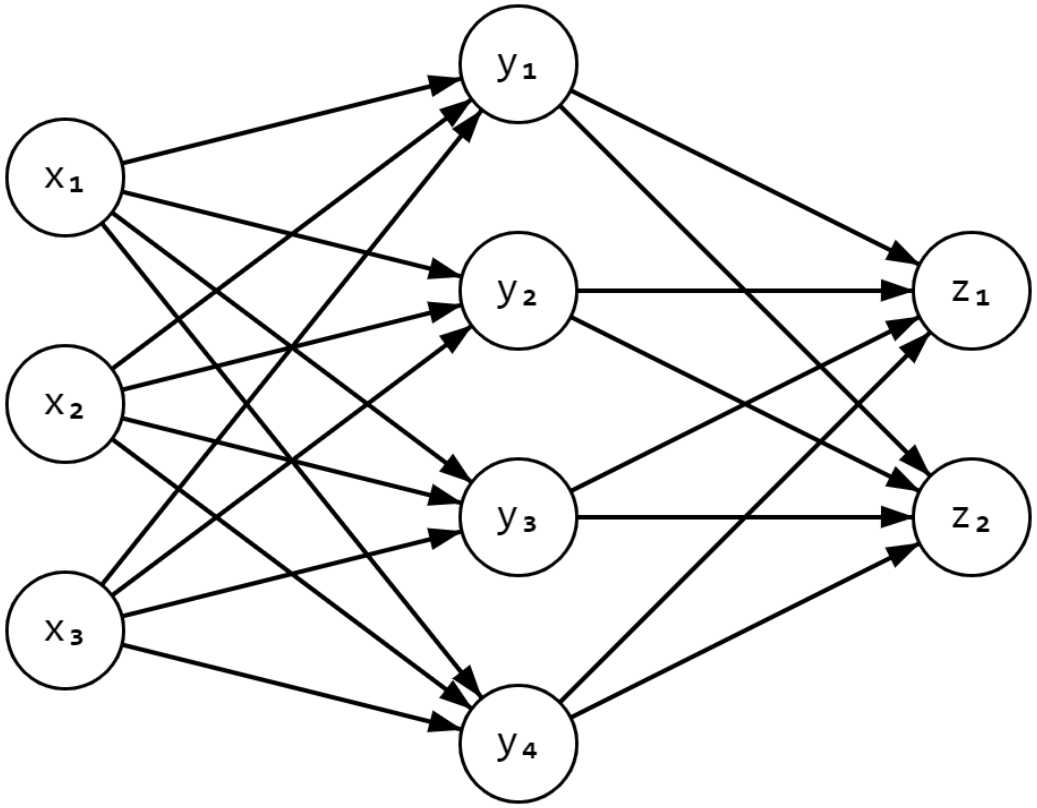
Перминов Андрей

24 сентября 2025

ИСП РАН

ИСП РАН

Нейронные сети – алгоритмы машинного обучения, активно используемые для решения задач автоматической обработки различных данных (текстов, изображений, аудио, видео, …)



Обучение с учителем

ИСП РАН

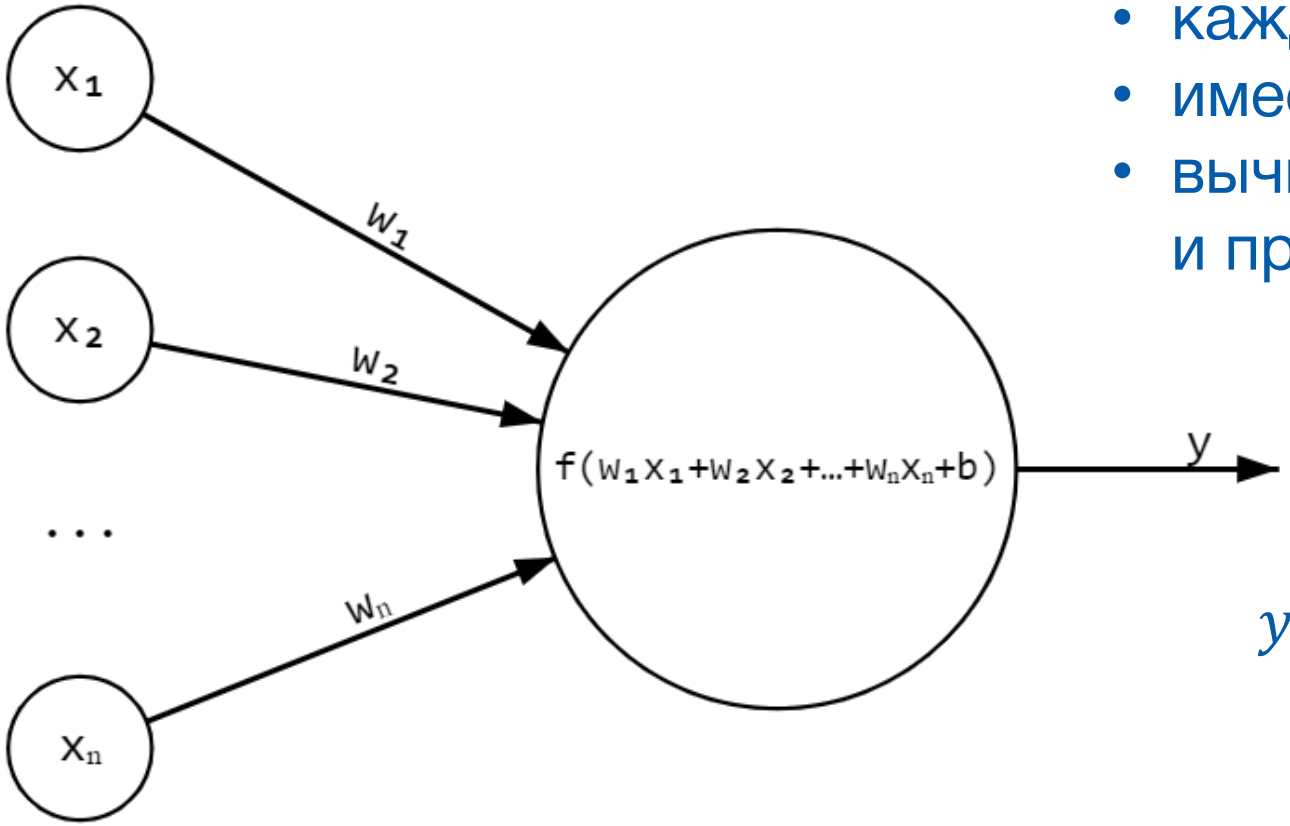
Пусть:
X — множество объектов
Y — множество ответов
$\check{y}: X \to Y$ — неизвестная зависимость

Дано:
$\{x_1, \dots, x_n\} \subset X$ — обучающая выборка
$\check{y}_i = \check{y}(x_i) \in Y$ — ответы на обучающей выборке

Найти:
$y: X \to Y$ — решающую функцию, приближающую $\check{y}$ на всем множестве X

Простейшая нейронная сеть – искусственный нейрон

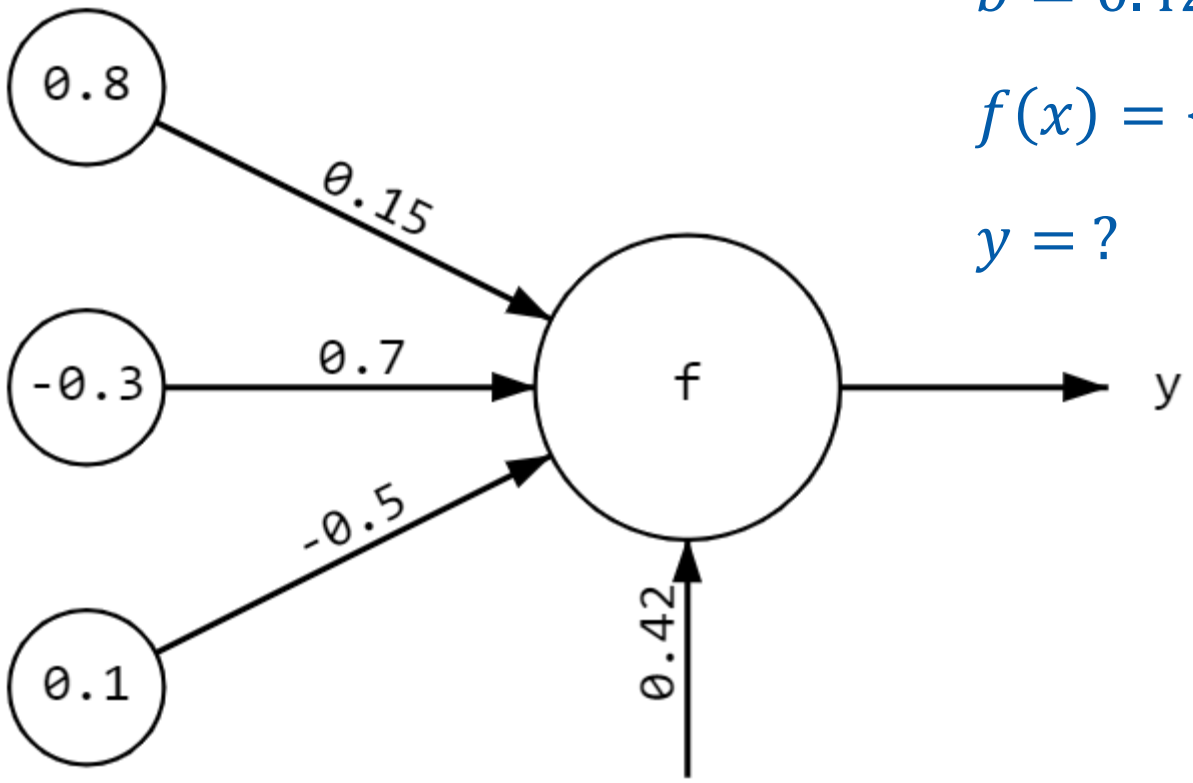
ИСП РАН



- имеет n входов $(x_1, \dots, x_n)$ и один выход (y)
- каждый вход имеет вес $(w_1, \dots, w_n)$
- имеется дополнительный вес смещения (b)
- вычисляет линейную комбинацию входов и применяет к ней функцию активации:

$$y = f\left(\sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i + b\right) = f(w^T \cdot x + b)$$

Искусственный нейрон. Пример



$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$

$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$

$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

$y = ?$

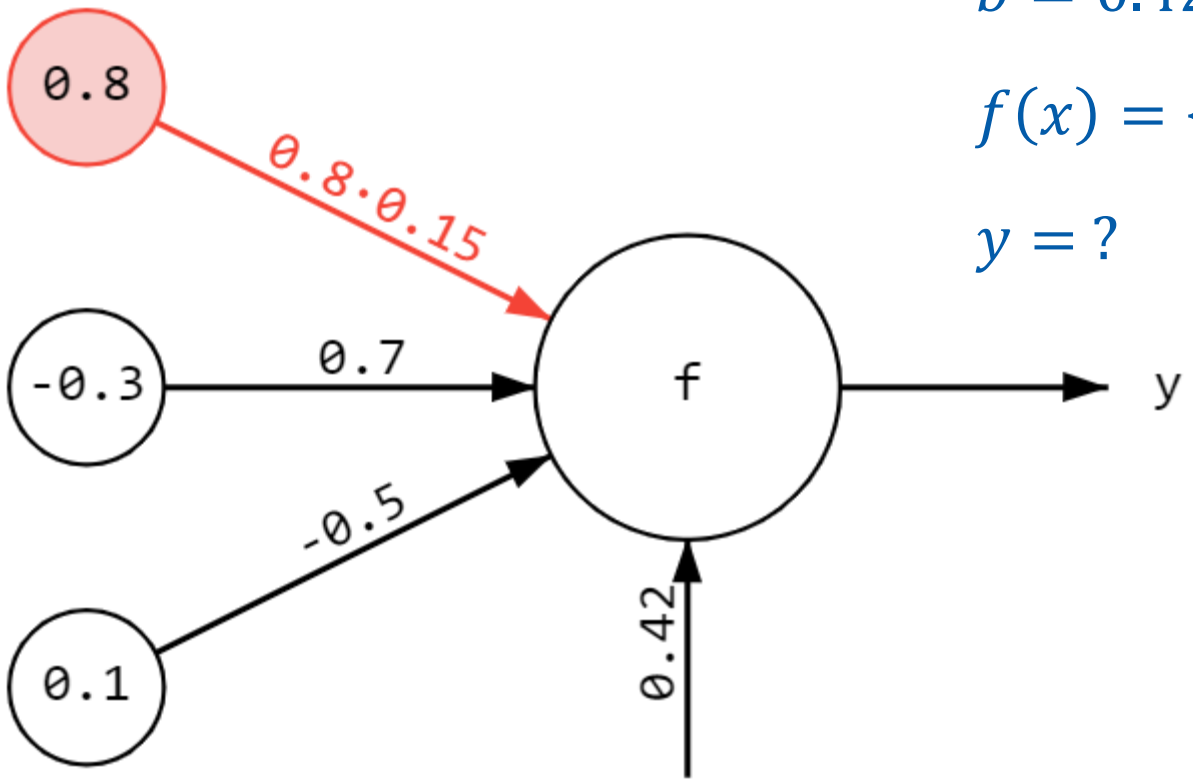
Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$
$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$
$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

$y = ?$



$$y = f(0.8 \cdot 0.15 +$$

Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

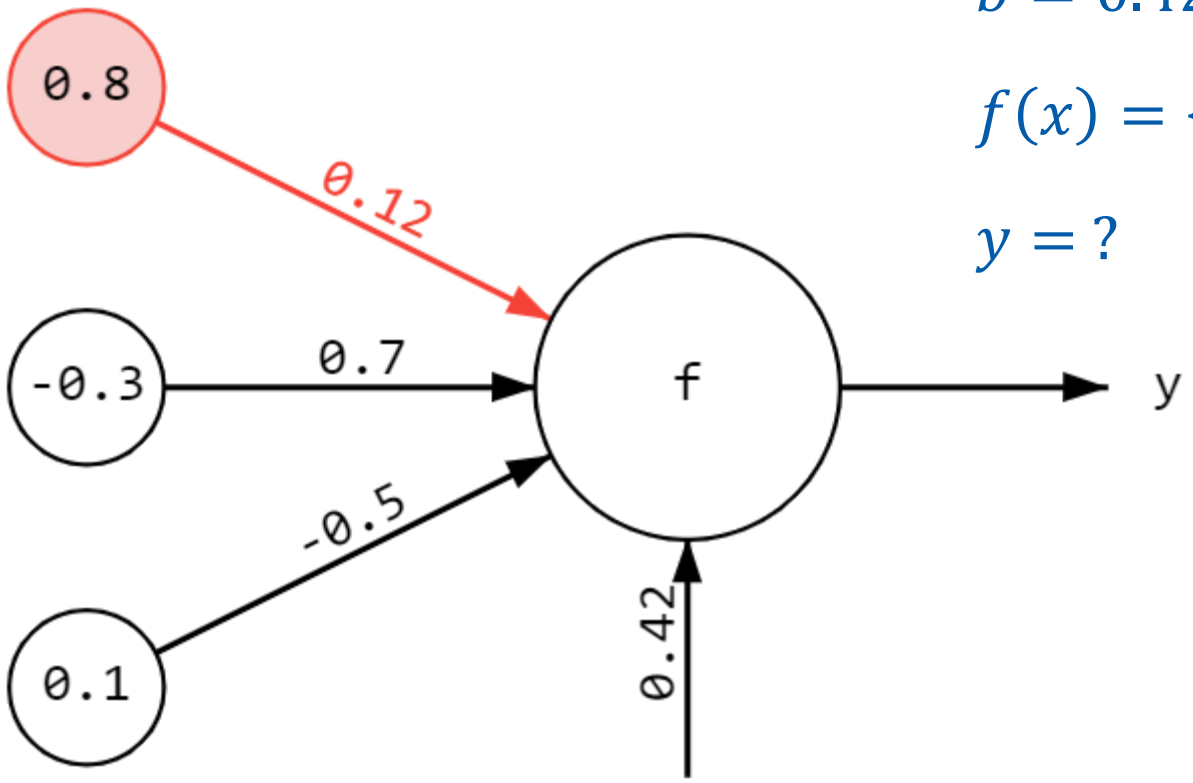
$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$

$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$

$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

$y = ?$



$y = f(0.12 +$

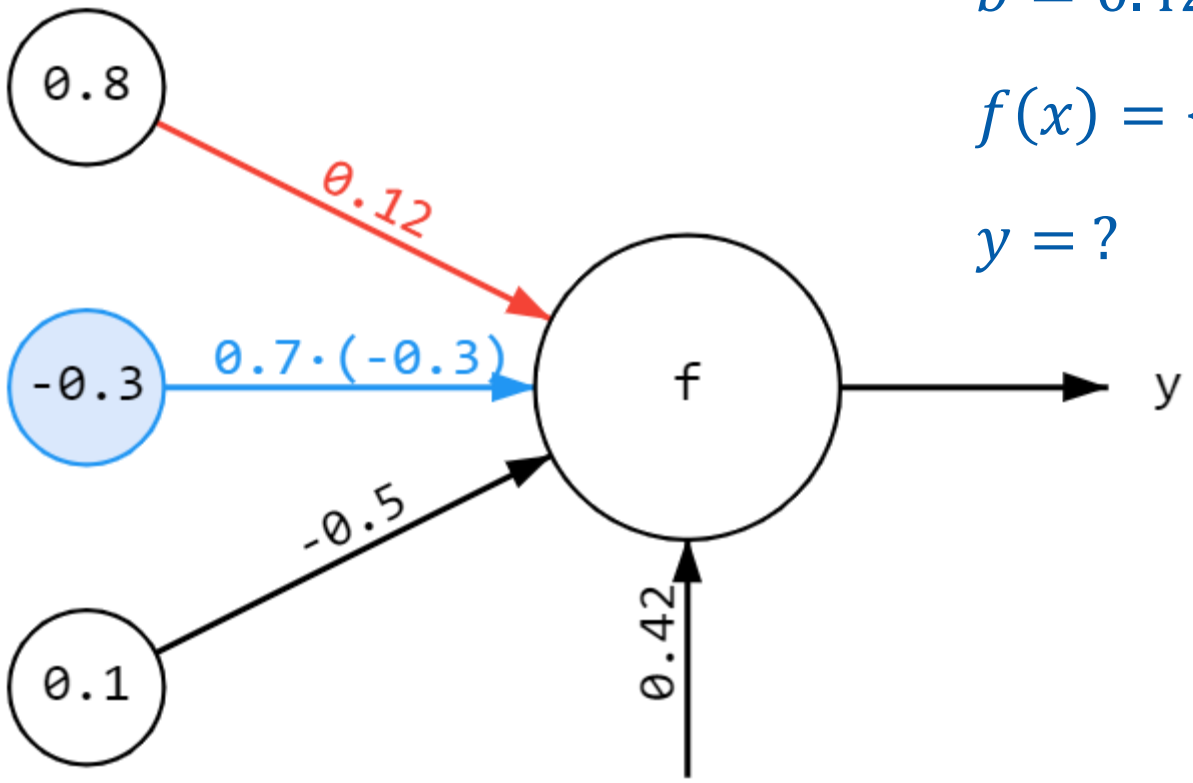
Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$
$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$
$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

$y = ?$



$$y = f(0.12 + 0.7 \cdot (-0.3) +$$

Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

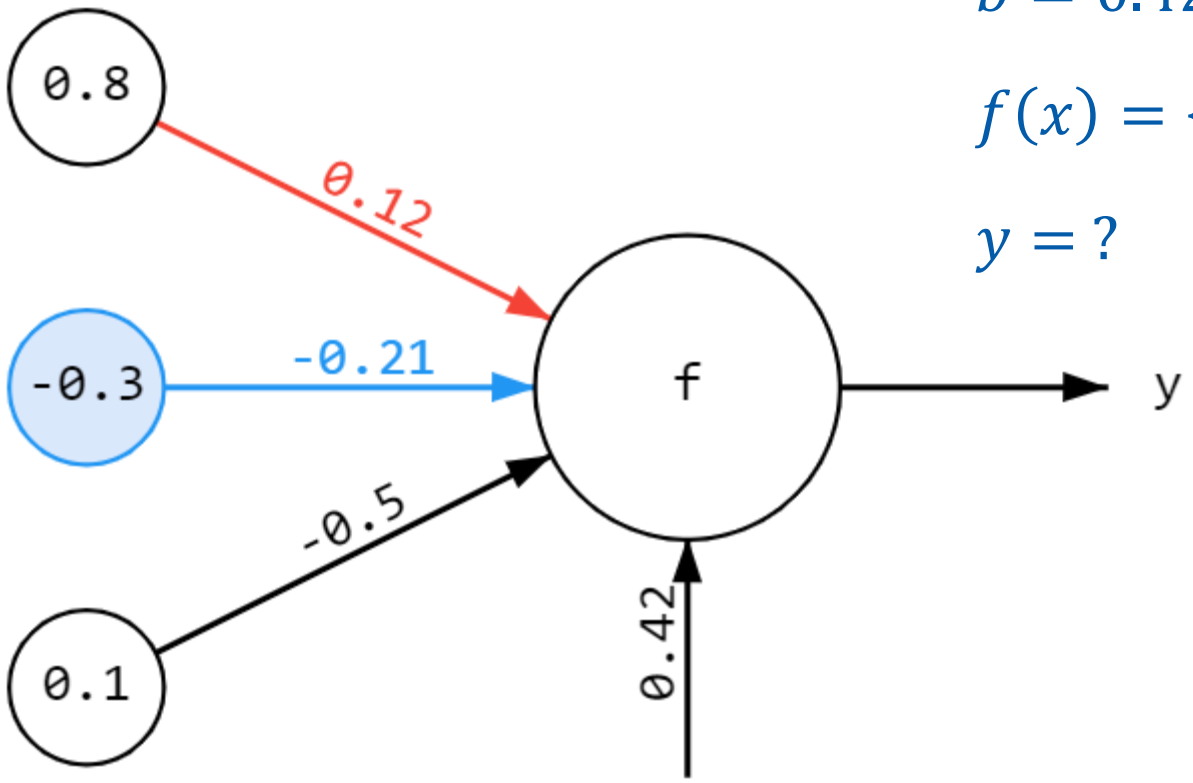
$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$

$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$

$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

$y = ?$



$y = f(0.12 - 0.21 +$

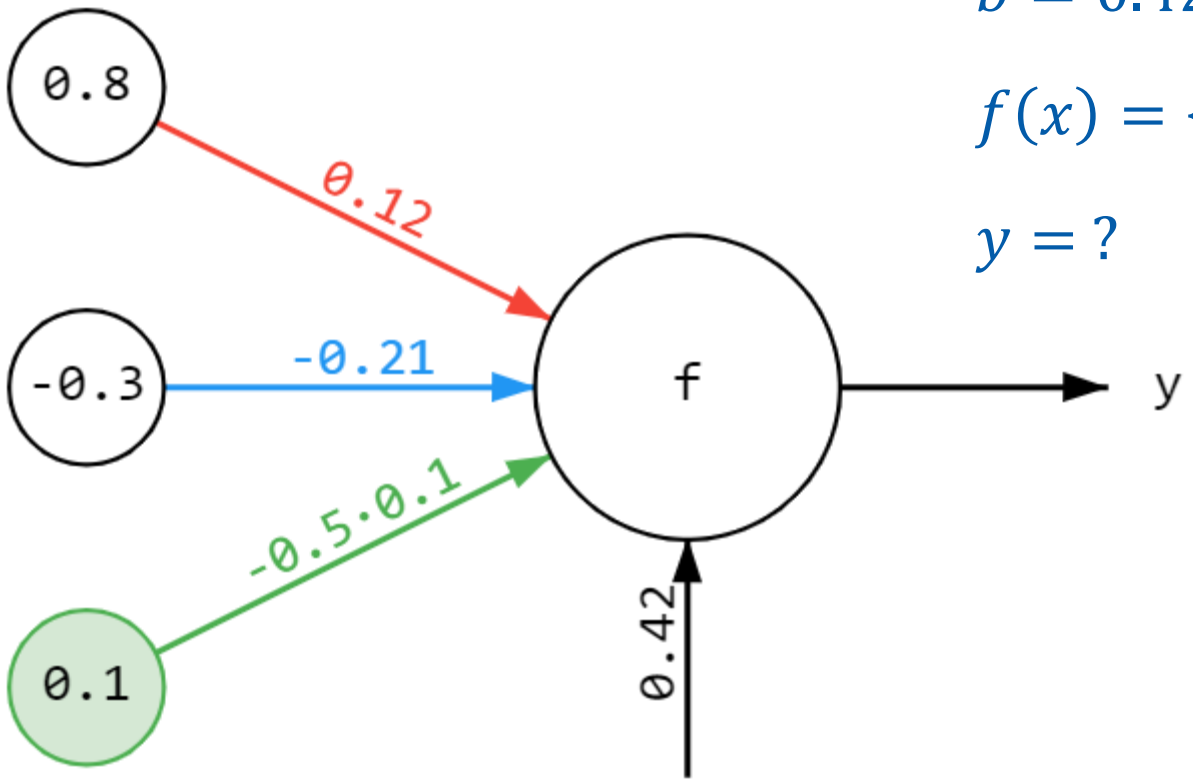
Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$
$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$
$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

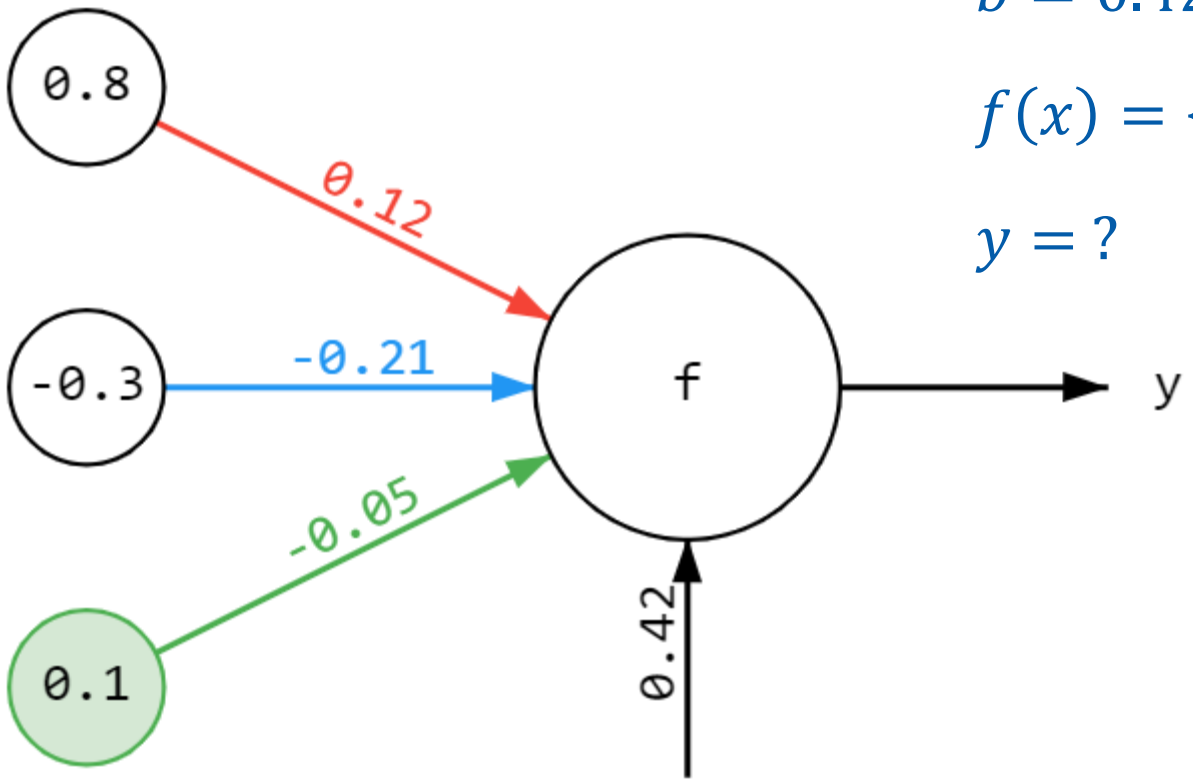
$y = ?$



$$y = f(0.12 - 0.21 + (-0.5) \cdot 0.1 +$$

Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН



$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$

$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$

$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

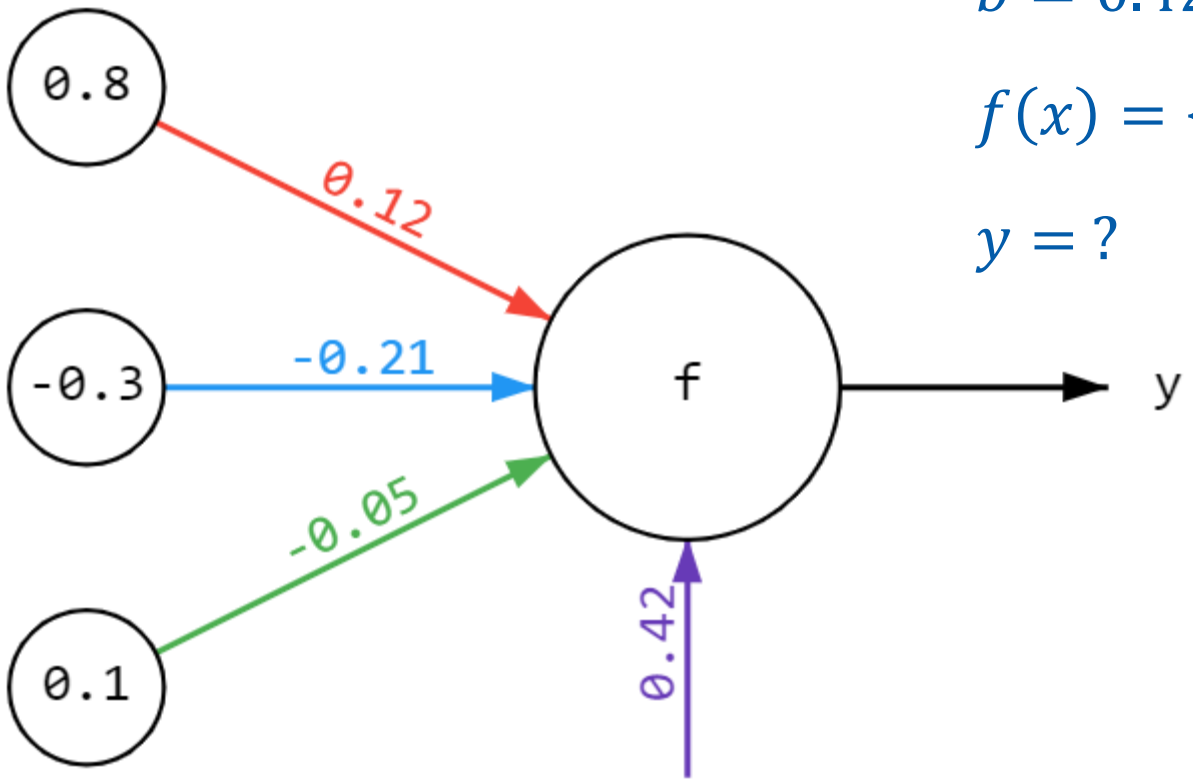
$y = ?$

$$y = f(0.12 - 0.21 - 0.05 +$$

Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$
$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$
$b = 0.42$
$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$
$y = ?$



$y = f(0.12 - 0.21 - 0.05 + 0.42)$

Искусственный нейрон. Пример

ИСП РАН

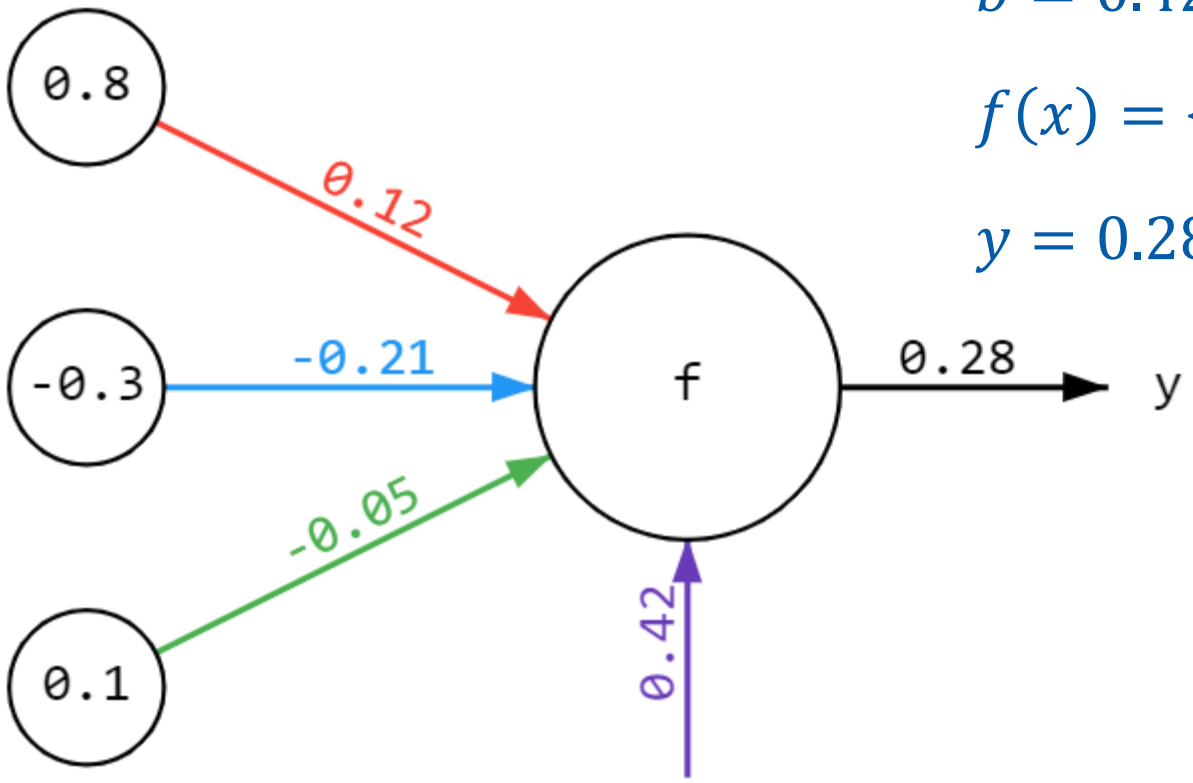
$x_1 = 0.8, x_2 = -0.3, x_3 = 0.1$

$w_1 = 0.15, w_2 = 0.7, w_3 = -0.5$

$b = 0.42$

$$f(x) = \begin{cases} x, x > 0 \\ 0, x \leq 0 \end{cases}$$

$y = 0.28$



$y = f(0.28)$

Функции активации

ИСП РАН

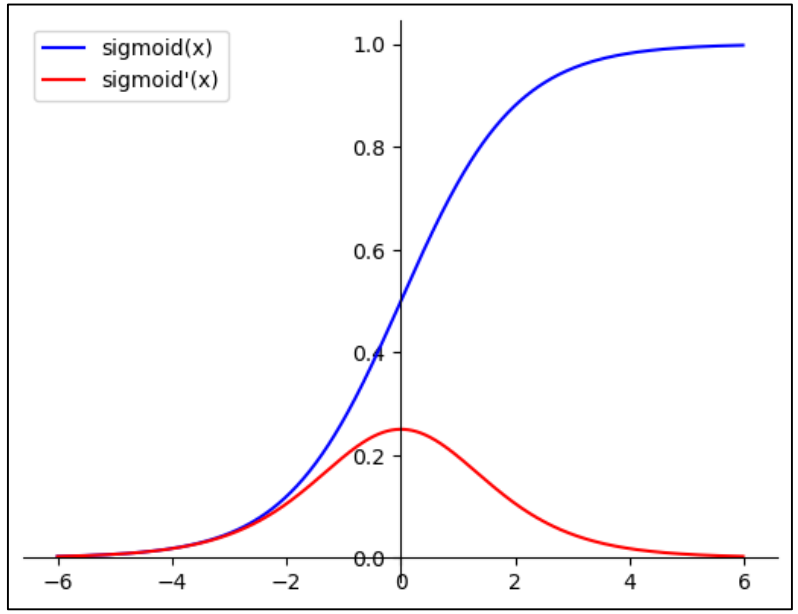
Функция активации – это некоторая дифференцируемая функция (обычно нелинейная), применяемая к линейной комбинации входных значений.

Наиболее распространённые функции активации:

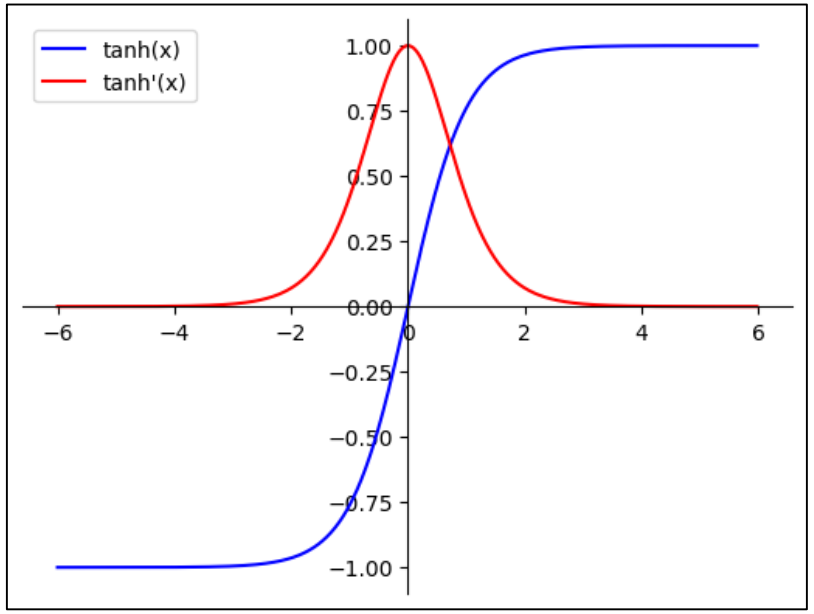
Название	Функция	Производная	Область значений
Сигмоидальная (sigmoid)	$\frac{1}{1+e^{-x}}$	$f(x)\big(1-f(x)\big)$	$(0,1)$
Гиперболический тангенс (tanh)	$\tanh(x)$	$1-f^2(x)$	$(-1,1)$
Выпрямитель (ReLU)	$f(x)=\begin{cases}x, x>0\\0, x\le 0\end{cases}$	$f'(x)=\begin{cases}1, x>0\\0, x\le 0\end{cases}$	$[0,+\infty)$

Вопрос: почему функции активации обычно нелинейные? Чем плоха линейная функция?

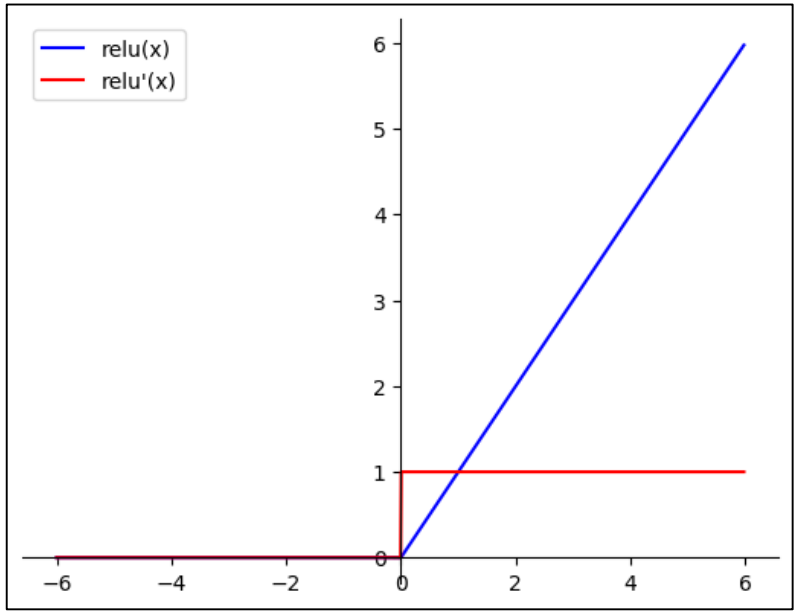
Функции активации



$sigmoid$



$tanh$



$ReLU$

Логистическая регрессия

ИСП РАН

Дано:

$\{x_1, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ – обучающая выборка

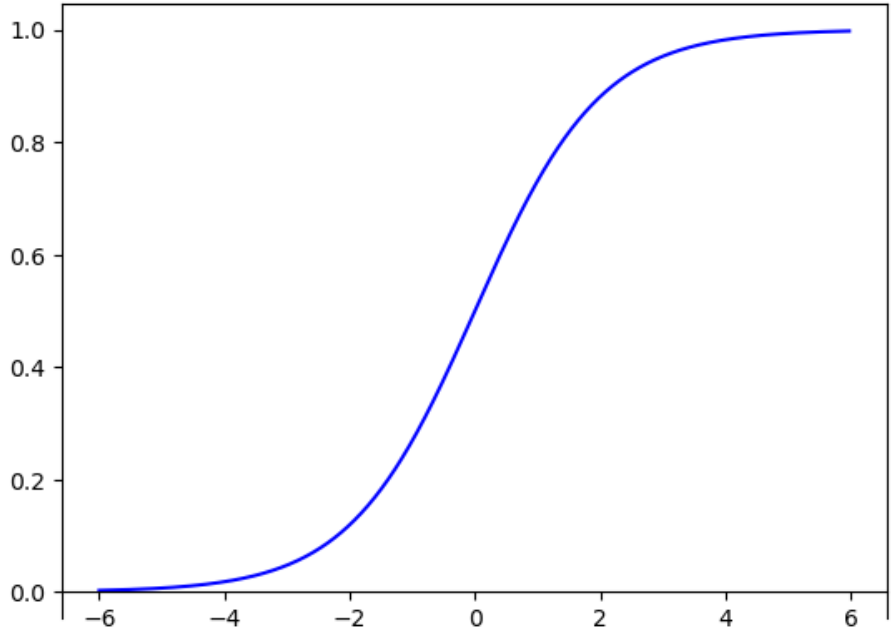
$\tilde{y}_i = \tilde{y}(x_i) \in \{0,1\}$ – ответы на обучающей выборке

Решение:

$$y = \sigma(w^T \cdot x) = \frac{1}{1 + e^{-w^T \cdot x}} \in (0,1)$$

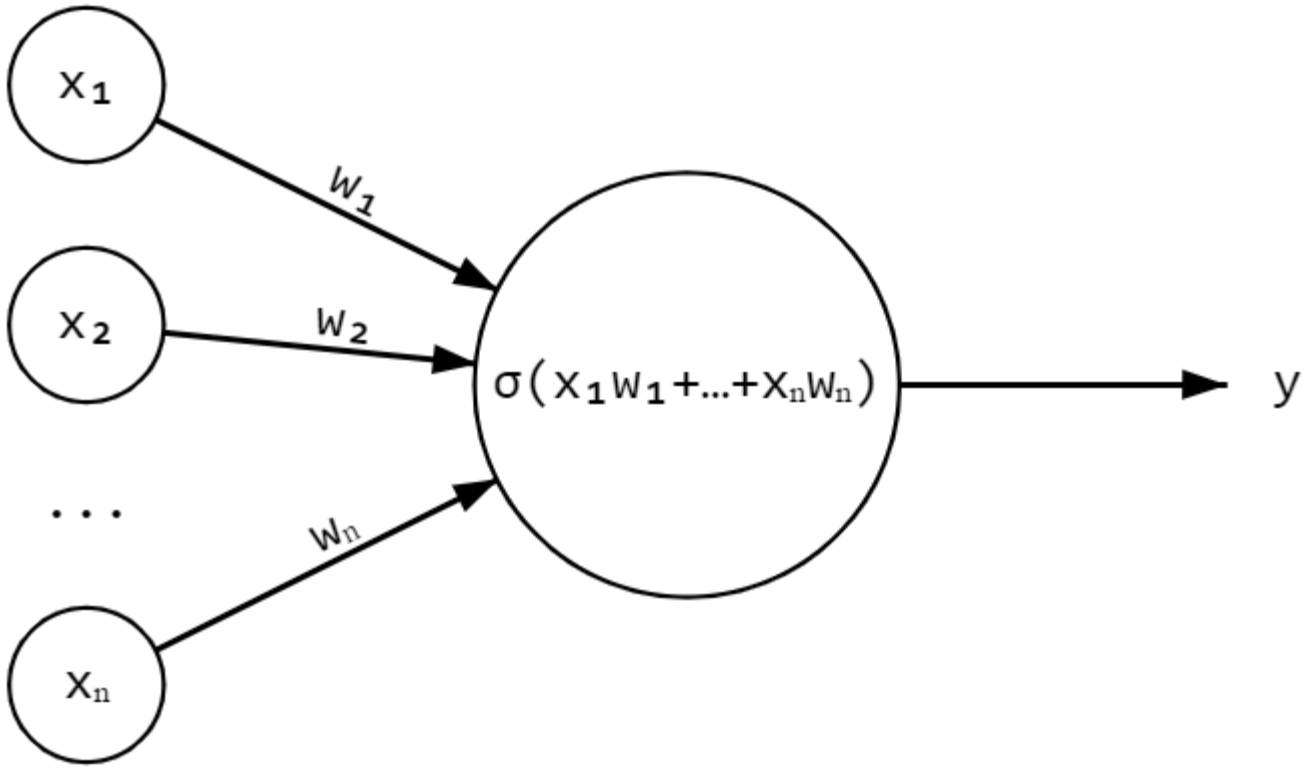
$$w = argmin_w \, L(y, \tilde{y})$$

$$L(y, \tilde{y}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \tilde{y}_i \log y(x_i) + (1 - \tilde{y}_i) \log\big(1 - y(x_i)\big)$$



Логистическая функция (сигмоида)

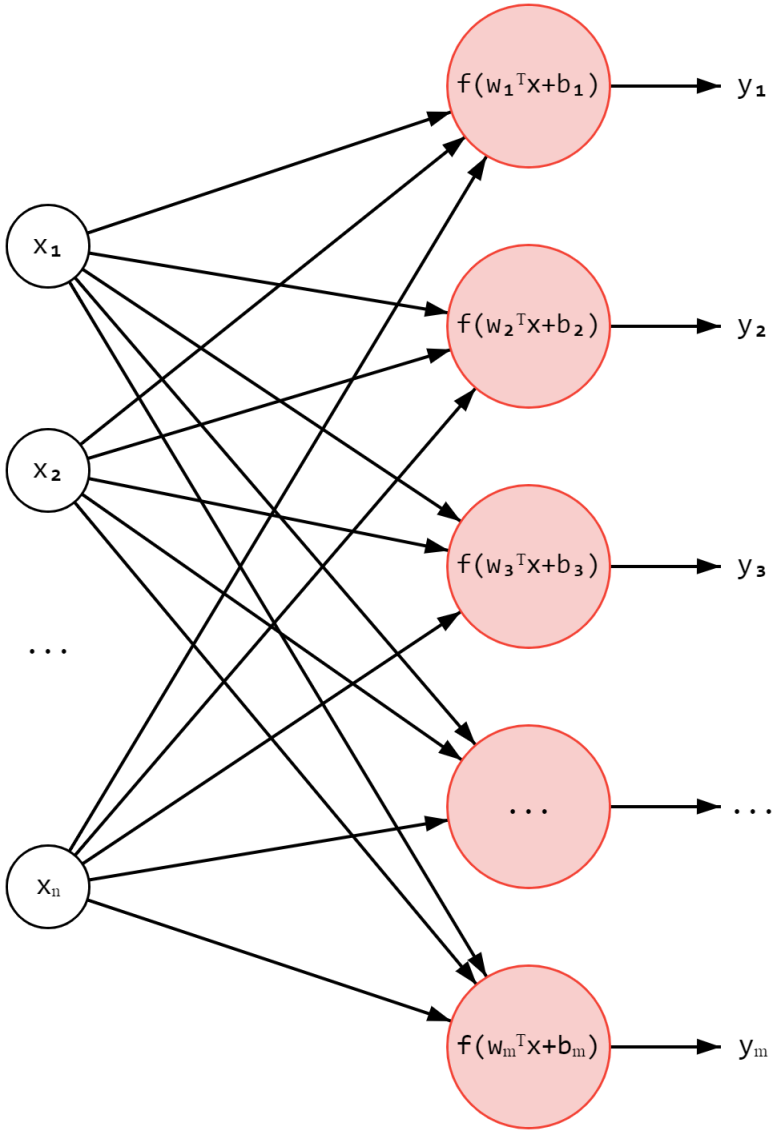
Логистическая регрессия – это нейрон



$$y = \sigma(w^T \cdot x) = \frac{1}{1 + e^{-w^T \cdot x}}$$

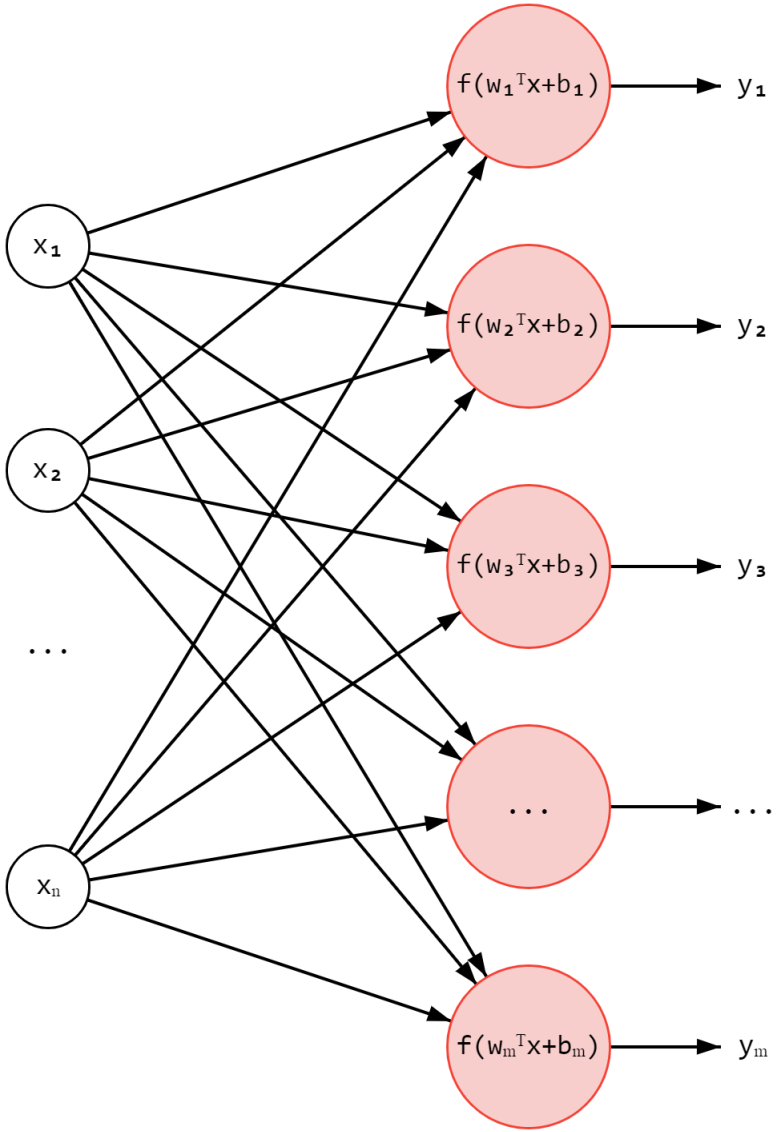
Оптимизируя функцию потерь методом градиентного спуска, находим параметры $w_1, \dots w_n$.

Полносвязный слой. Персептрон



- состоит из m независимых нейронов
- функция активации у каждого нейрона обычно общая для всего слоя
- соответствующие входы нейронов соединены между собой – слой содержит n входов
- имеет $(n+1) \cdot m$ весовых коэффициентов
- выходом слоя является вектор, а не число, в отличие от одного нейрона

Полносвязный слой. Персептрон



Удобно представлять слой в виде матриц весов:

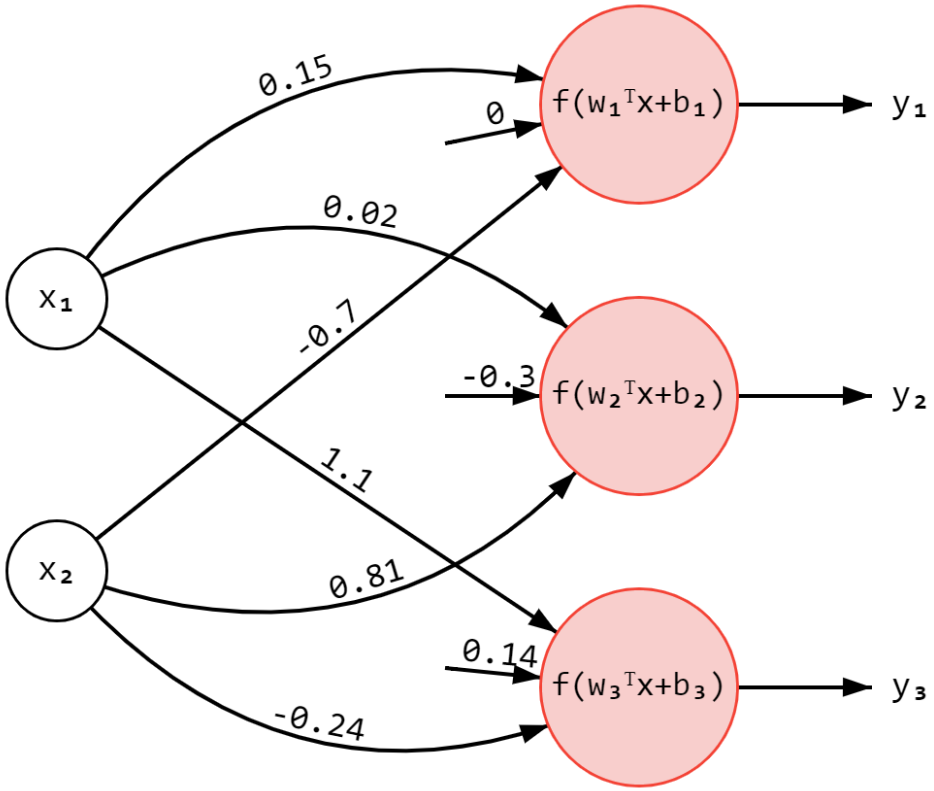
$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{m1} & w_{m2} & \dots & w_{mn} \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Вход слоя – такой же вектор, как для нейрона

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Выходное значение слоя вычисляется аналогично нейрону: $y = f(Wx + b)$

Полносвязный слой. Пример



Пусть слой имеет 2 входа и 3 выхода, функция активации – tanh, а весовые коэффициенты и входной сигнал такие:

$$W = \begin{bmatrix} 0.15 & -0.7 \\ 0.02 & 0.81 \\ 1.1 & -0.24 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.3 \\ 0.14 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 0.5 \\ -0.3 \end{bmatrix}$$

$$Wx + b = \begin{bmatrix} 0.15 & -0.7 \\ 0.02 & 0.81 \\ 1.1 & -0.24 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.5 \\ -0.3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -0.3 \\ 0.14 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.285 \\ -0.533 \\ 0.762 \end{bmatrix}$$

$$y = f(Wx + b) = \begin{bmatrix} \tanh(0.285) \\ \tanh(-0.533) \\ \tanh(0.762) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.277 \\ -0.487 \\ 0.642 \end{bmatrix}$$

Softmax функция активации

ИСП РАН

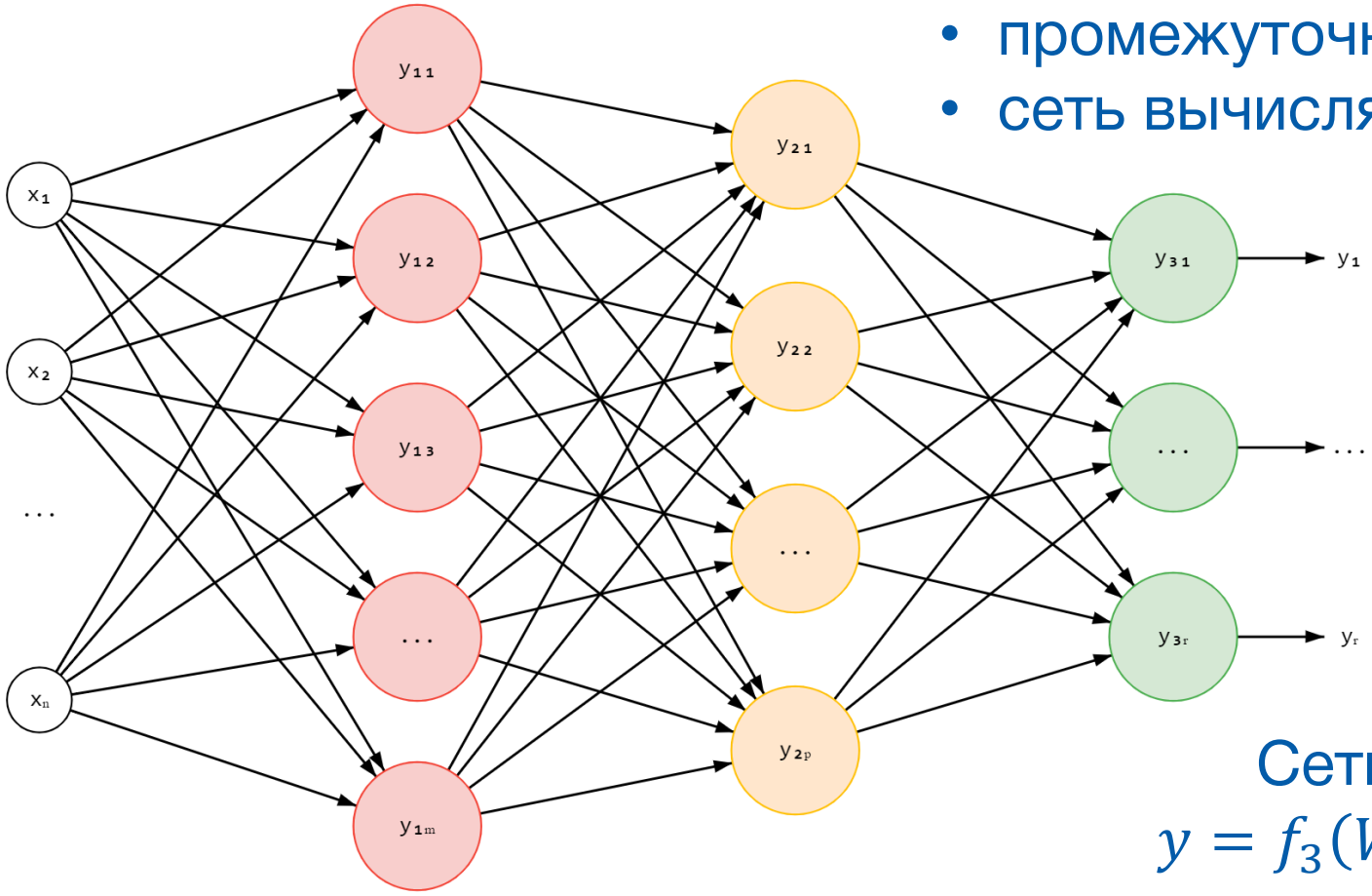
Функция $softmax(z)$ преобразует вектор z размерности n в вектор той же размерности, где каждая координата полученного вектора представлена вещественным числом в интервале [0,1] и сумма координат равна 1.

$$softmax(z)_i = \frac{e^{z_i}}{\sum_{i=1}^{n} e^{z_i}}$$

Используется для классификации на 2 и более классов.

Пример:
Пусть $z = [1, 0, 0.5, -1, 1]$
Тогда $softmax(z) \approx [0.322, 0.118, 0.195, 0.043, 0.322]$

Многослойная нейронная сеть



- каждый слой – линейный
- выход слоя является входом следующего слоя
- последний слой называют **выходным**
- промежуточные слои называют **скрытыми**
- сеть вычисляет выход следующим образом:

$$\text{Слой } 1: y_1 = f_1(W_1 x + b_1)$$
$$\text{Слой } 2: y_2 = f_2(W_2 y_1 + b_2)$$
$$\dots$$
$$\text{Слой } i: y_i = f_i(W_i y_{i-1} + b_i)$$
$$\text{Выходной слой: } y = f_n(W_n y_{n-1} + b_n)$$

Сеть моделирует следующую функцию:

$$y = f_3(W_3 \cdot f_2(W_2 \cdot f_1(W_1 x + b_1) + b_2) + b_3) \dots$$

Обучение нейронной сети с учителем

ИСП РАН

$(x_i, y_i), i \in 1..n$ – обучающая выборка, где x_i – объекты, y_i – правильные ответы
$f(x, \theta)$ – дифференцируемая нейронная сеть с параметрами θ

Процесс обучения заключается в поиске таких параметров θ, при которых нейронная сеть будет выдавать «близкие» к правильным ответам на элементах обучающей выборки.

Для оценки «близости» ответов используются различные функции ошибки (потерь) $L(y,\ t)$, где y – выход сети, а t – ожидаемое значение, например:

$$MSE: (y - t)^2$$
$$MAE: |y - t|$$
$$BCE: -t \ln y - (1 - t) \cdot \ln(1 - y)$$

Обучение нейронной сети с учителем

ИСП РАН

Чтобы обучить сеть, применяем её ко всем элементам входной выборки, сравниваем получаемые ответы с правильными и строим функционал качества:

$$L = L(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l(f(x_i, \theta), y_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l_i$$

Так как $L(\theta)$ - дифференцируемая функция, то, оптимизируя её параметры с помощью градиентного спуска, можно попытаться попасть в локальный минимум:

$$\theta^{i+1} = \theta^{i} - \alpha \cdot \nabla L\left(\theta^{i}\right)$$

Самая сложная часть – вычисление градиента $\nabla L(\theta^{i})$

Стохастический градиентный спуск (SGD)

ИСП РАН

Вычисление L при больших n – трудоёмкая задача.

Решение – стохастический градиентный спуск:

- каждую итерацию выбирается случайный элемент из обучающей выборки (x_j)
- рассчитывается функция потерь $l_j = l\left(f\left(x_j, \theta^i\right), y_j\right)$
- обновляются параметры: $\theta^{\mathrm{i}+1} = \theta^{\mathrm{i}} - \alpha \cdot \nabla l_j\left(\theta^{\mathrm{i}}\right)$

Недостатки:

- подвержен выбросам, из-за чего необходимо использовать малое значение α, что приводит к большому числу шагов для сходимости
- невозможно распараллелить вычисление ошибки по элементам обучающей выборки

Пакетный градиентный спуск (miniBatch SGD)

ИСП РАН

- каждую итерацию произвольно выбирается m $(1 < m \ll n)$ примеров из обучающей выборки
- вычисляется суммарная функция потерь на выбранных примерах:

$$l_{batch} = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} l\left(f\left(x_j, \theta^i\right), y_j\right)$$

- обновляются параметры:

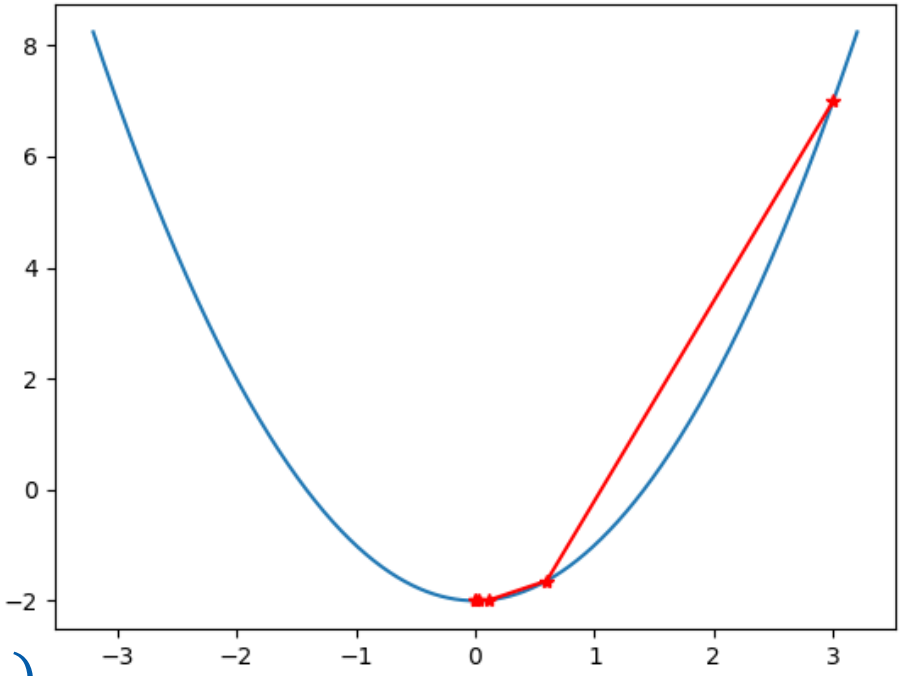
$$\theta^{\mathrm{i}+1} = \theta^{\mathrm{i}} - \alpha \cdot \nabla\left[\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} l\left(f\left(x_j, \theta^i\right), y_j\right)\right]$$

Более устойчив к выбросам, так что можно выбирать больший шаг α
Ошибку l_{batch} можно считать параллельно

Градиентный спуск. Пример

ИСП РАН

Найти минимум функции $f(x) = x^2 - 2$ с помощью градиентного спуска.
В качестве начальной точки возьмём $x_0 = 3$
Шаг спуска выберем $\alpha = 0.4$
Градиент функции равен $\nabla f(x) = 2x$



Запустим итерационный процесс: $x_{i+1} = x_i - \alpha \cdot \nabla f(x_i)$

$x_1 = x_0 - \alpha \cdot \nabla f(x_0) = 3 - 0.4 \cdot 2 \cdot 3 = 0.6, f(x_1) = -1.64$

$x_2 = x_1 - \alpha \cdot \nabla f(x_1) = 0.6 - 0.4 \cdot 2 \cdot 0.6 = 0.12, f(x_2) = -1.9856$

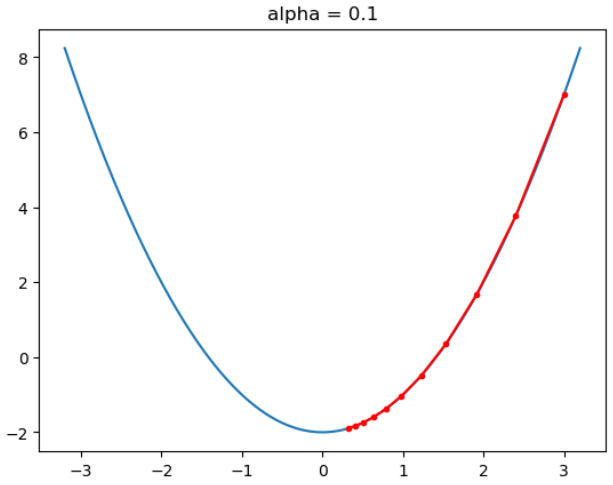
$x_3 = x_2 - \alpha \cdot \nabla f(x_2) = 0.12 - 0.4 \cdot 2 \cdot 0.12 = 0.024, f(x_3) = -1.9994$

$x_4 = x_3 - \alpha \cdot \nabla f(x_3) = 0.024 - 0.4 \cdot 2 \cdot 0.024 = 0.0048, f(x_4) = -1.9997$

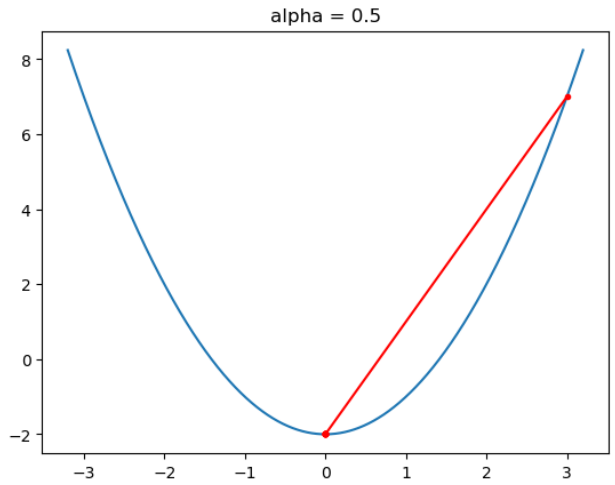
$x_5 = x_4 - \alpha \cdot \nabla f(x_4) = 0.0048 - 0.4 \cdot 2 \cdot 0.0048 = 0.00096, f(x_4) = -1.9999$

Градиентный спуск. Шаг имеет значение

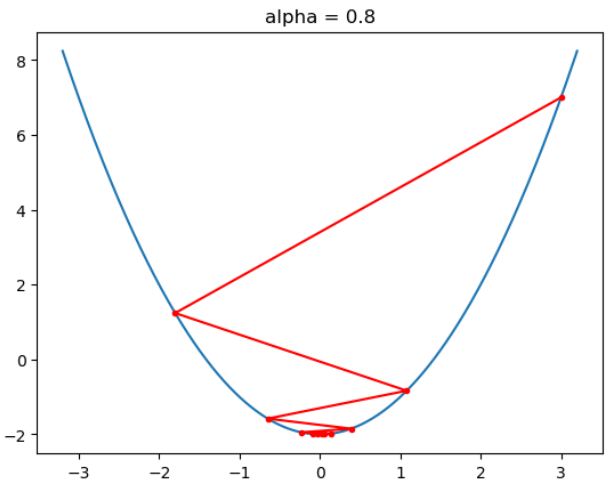
ИСП РАН



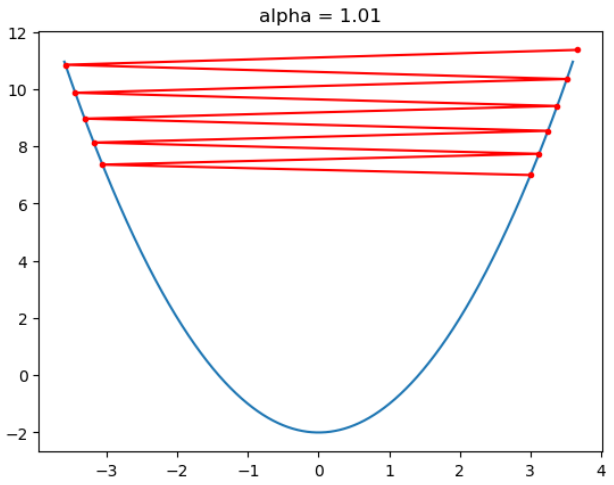
Шаг слишком мал
Долгая сходимость



Идеальный шаг
Моментальная сходимость



Большой шаг
Плохая сходимость,
градиент постоянно
меняет знак

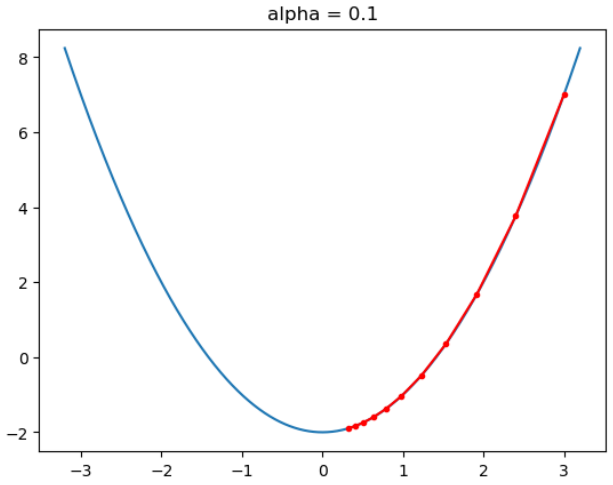


Очень большой шаг
Расходимость

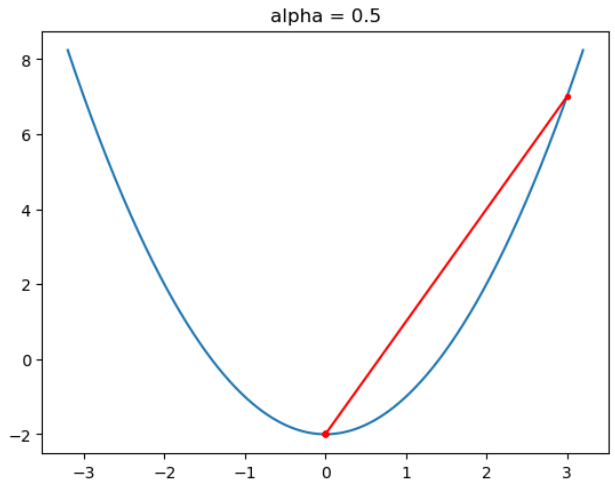
Как выбирать оптимальный шаг?

Градиентный спуск. Шаг имеет значение

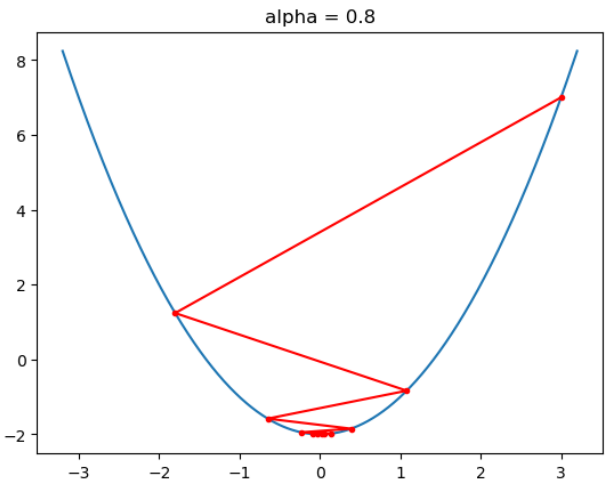
ИСП РАН



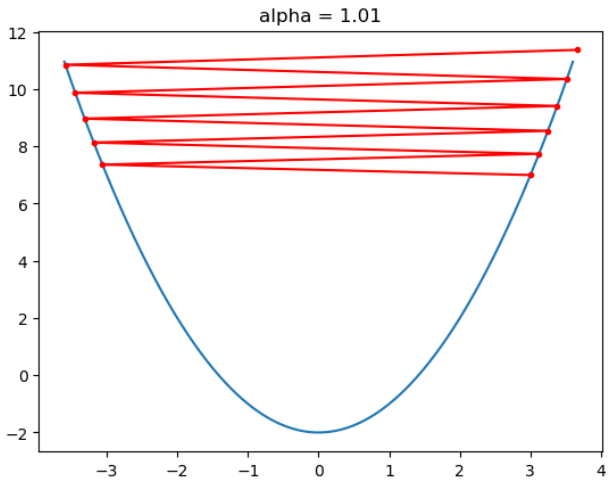
Шаг слишком мал
Долгая сходимость



Идеальный шаг
Моментальная сходимость



Большой шаг
Плохая сходимость,
градиент постоянно
меняет знак



Очень большой шаг
Расходимость

Как выбирать оптимальный шаг – эксперименты!

Обучение сети методом градиентного спуска

ИСП РАН

Обучение выполняется некоторое количество «эпох» - полных итераций по всей обучающей выборке. Иногда обучение останавливают раньше, если на валидационной выборке качество перестаёт улучшаться (early stopping).

Поскольку выбор шага довольно сложная задача, обычно используются адаптивные методы градиентного спуска, такие как SGD with momentum, Adam, Adagrad, RMSprop и тд. Зачастую эти методы используют информацию о градиенте на прошлых итерациях и подстраивают шаг при каждом обновлении.

Вопрос: как вычислять градиент $\nabla L(\theta^{\mathrm{i}})$ по каждому параметру θ_j^{i} глубокой нейронной сети (сложной дифференцируемой функции)?

Оптимизаторы градиентного спуска

ИСП РАН

SGD с моментом:

$$m_t = \beta m_{t-1} + \eta \cdot \nabla \mathrm{L}(\theta)$$
$$\theta = \theta - m_t$$

Nesterov accelerated gradient:

$$v_t = \beta v_{t-1} + \eta \cdot \nabla \mathrm{L}(\theta - \beta v_{t-1})$$
$$\theta = \theta - v_t$$

Adagrad:

$$G_t = G_{t-1} + \nabla \mathrm{L}(\theta)^2$$
$$\theta = \theta - \eta \frac{\nabla \mathrm{L}(\theta)}{\sqrt{G_t + \epsilon}}$$

SGD:

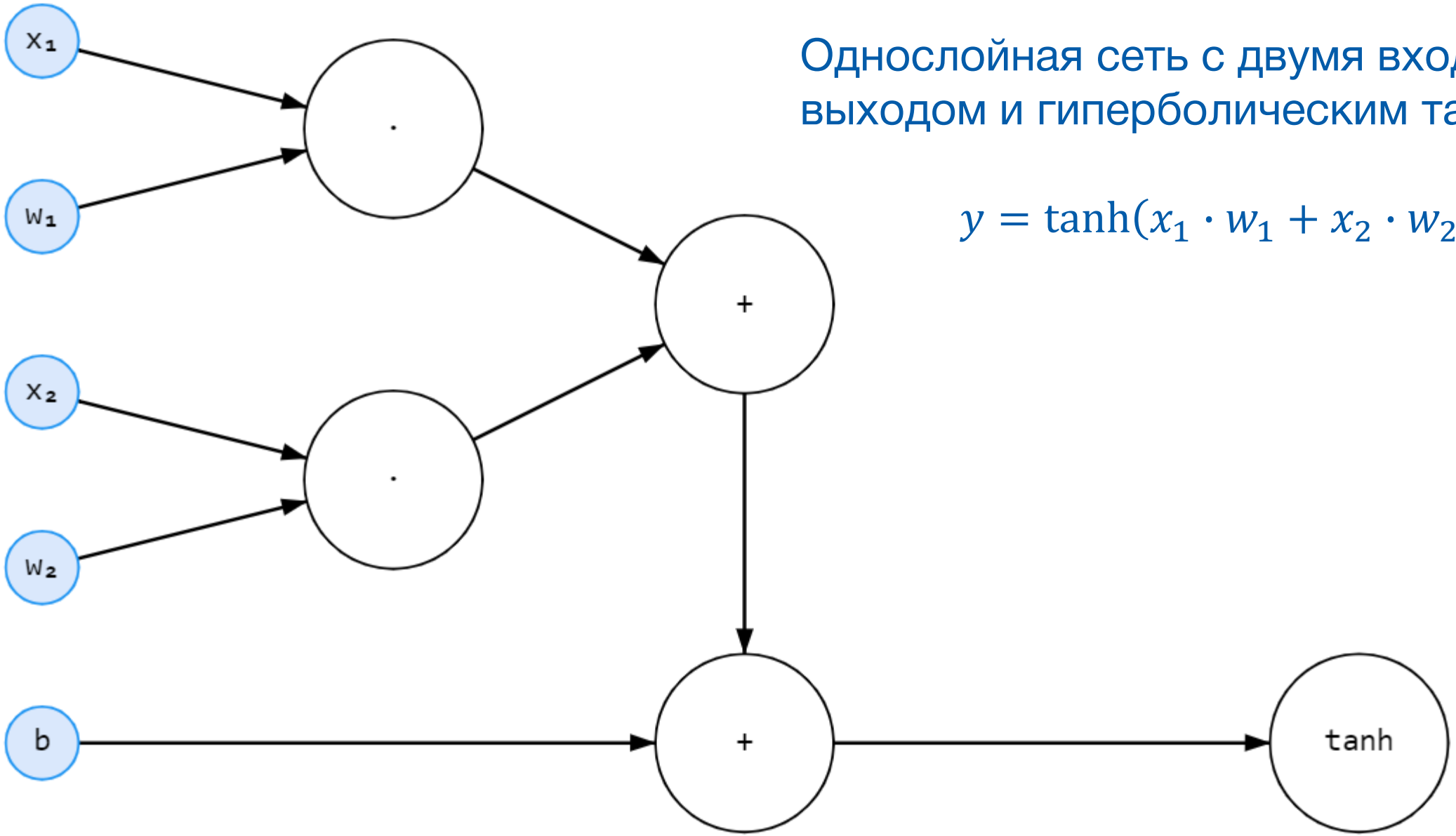
$$\theta = \theta - \eta \cdot \nabla \mathrm{L}(\theta)$$

Adam:

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) \cdot \nabla \mathrm{L}(\theta)$$
$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) \cdot \nabla \mathrm{L}(\theta)^2$$
$$\widehat{m_t} = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}, \qquad \widehat{v_t} = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$
$$\theta = \theta - \eta \frac{\widehat{m_t}}{\sqrt{\widehat{v_t} + \epsilon}}$$

Вопрос: как вычислять градиент $\nabla L(\theta)$ по каждому параметру θ_i глубокой нейронной сети (сложной дифференцируемой функции)?

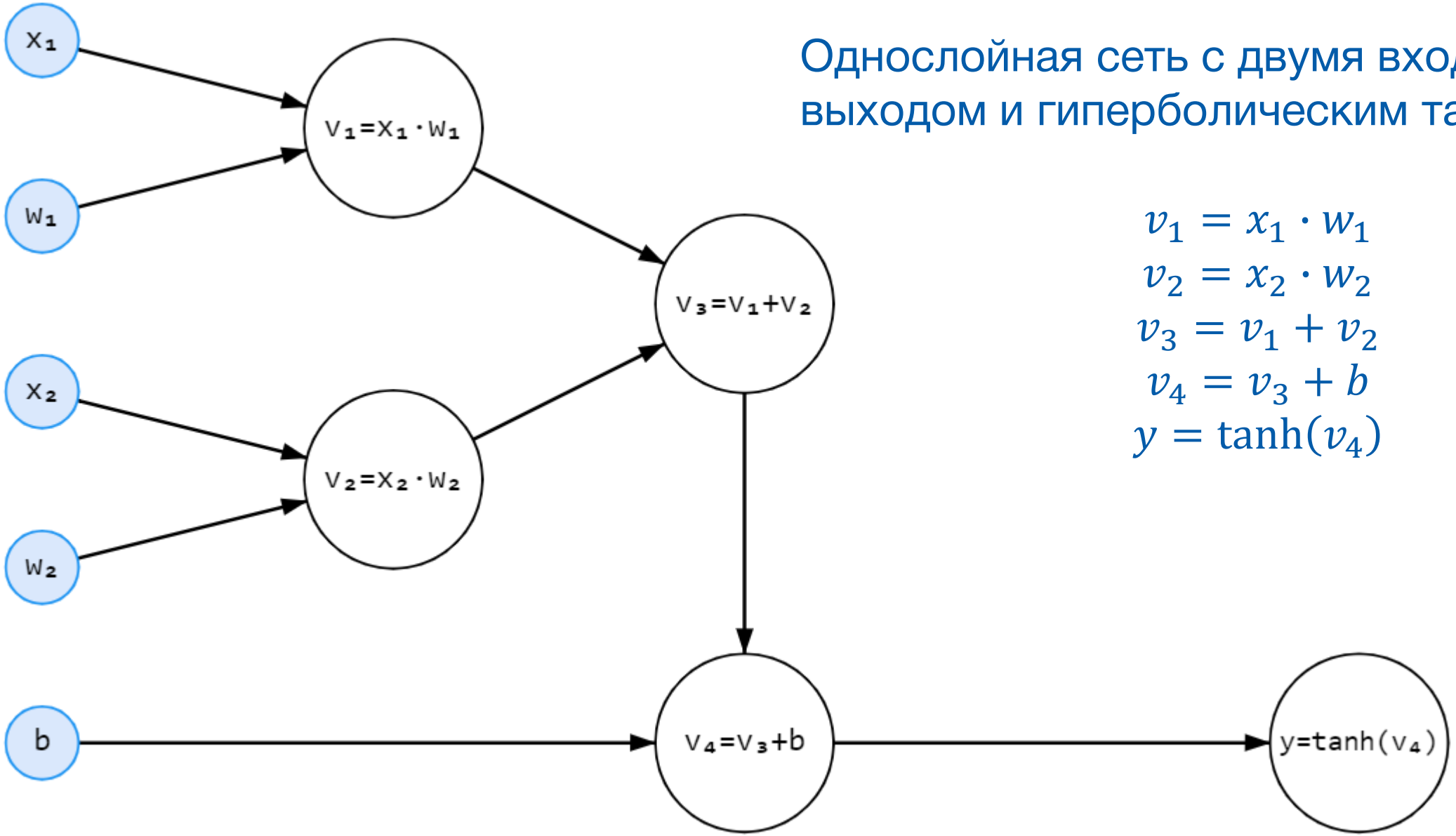
Граф вычислений



Однослойная сеть с двумя входами, одним выходом и гиперболическим тангенсом:

$$y = \tanh(x_1 \cdot w_1 + x_2 \cdot w_2 + b)$$

Граф вычислений



Однослойная сеть с двумя входами, одним выходом и гиперболическим тангенсом:

$$v_1 = x_1 \cdot w_1$$
$$v_2 = x_2 \cdot w_2$$
$$v_3 = v_1 + v_2$$
$$v_4 = v_3 + b$$
$$y = \tanh(v_4)$$

Обратное распространение ошибки

ИСП РАН

Обратное распространение ошибки (backpropagation) – алгоритм, позволяющий вычислить частные производные на произвольном графе вычислений. Состоит из двух этапов:

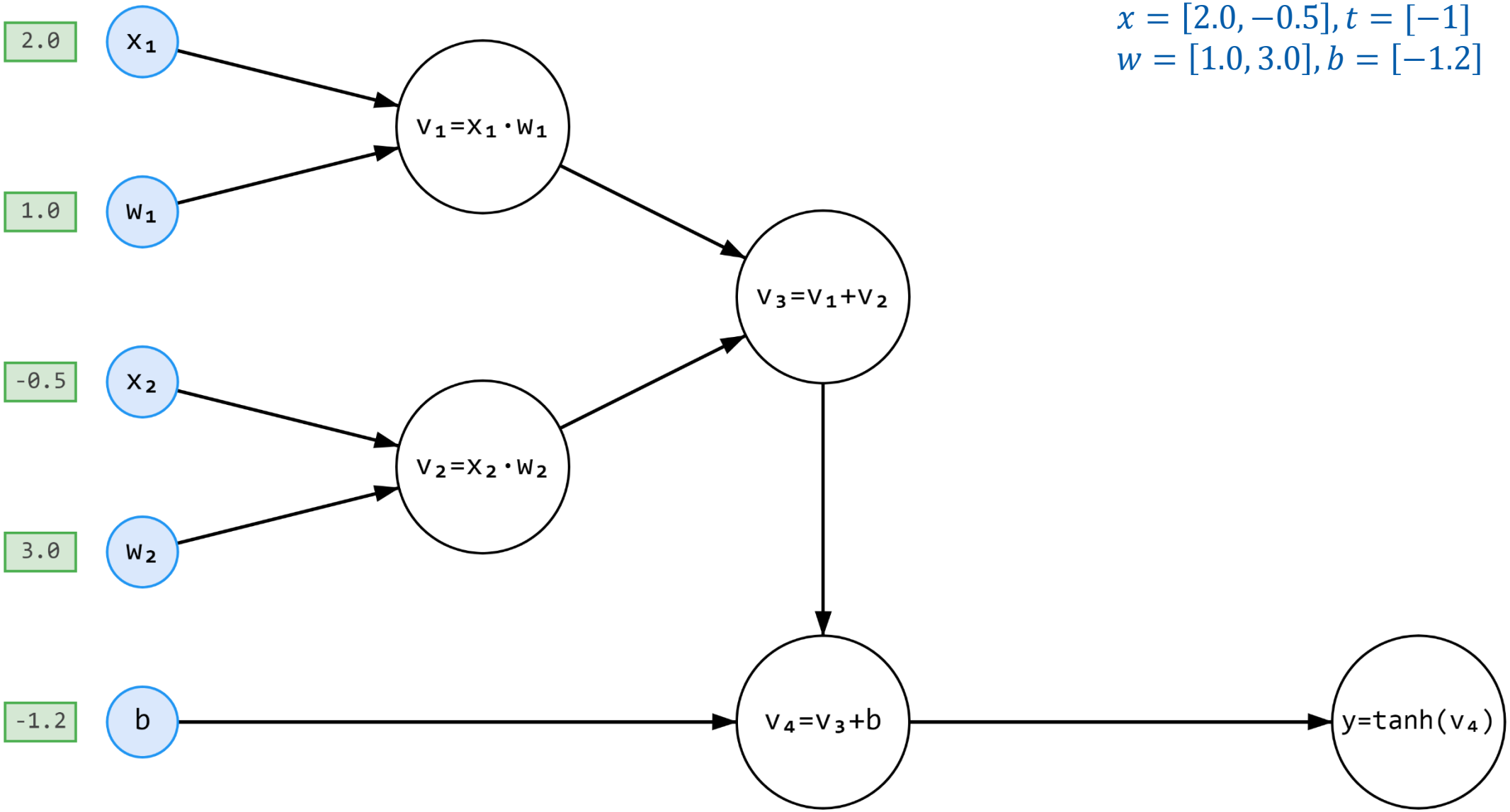
Прямое распространение (forward pass): входные сигналы проходят по графу через каждый узел и сохраняют выходные значения и частные производные узлов.

Обратное распространение (backward pass): на основе вычисленных значений при прямом проходе вычисляются частные производные реализуемой функции по каждому из её аргументов – входных узлов графа.

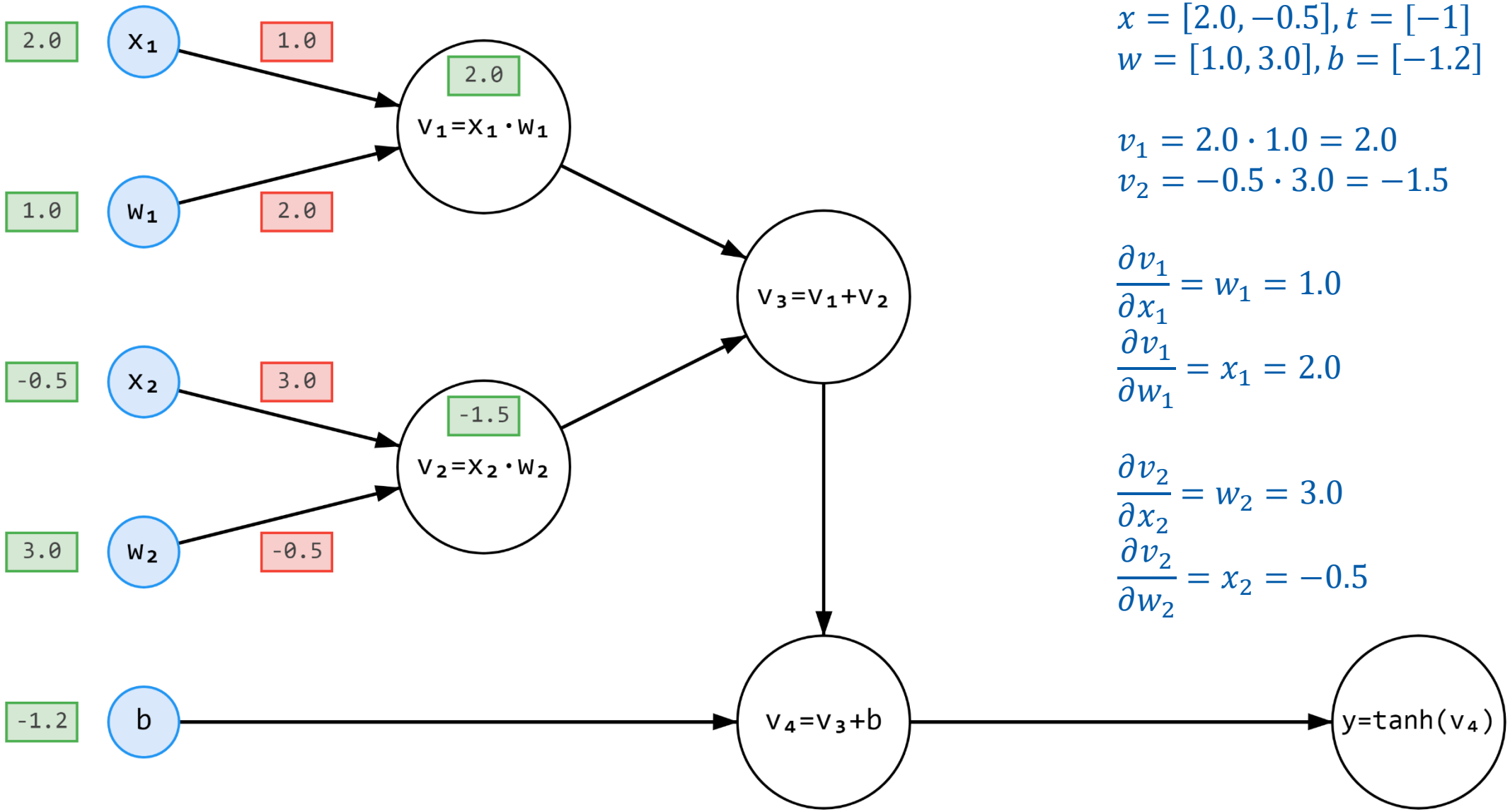
Прямое распространение

ИСП РАН

$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$



Прямое распространение



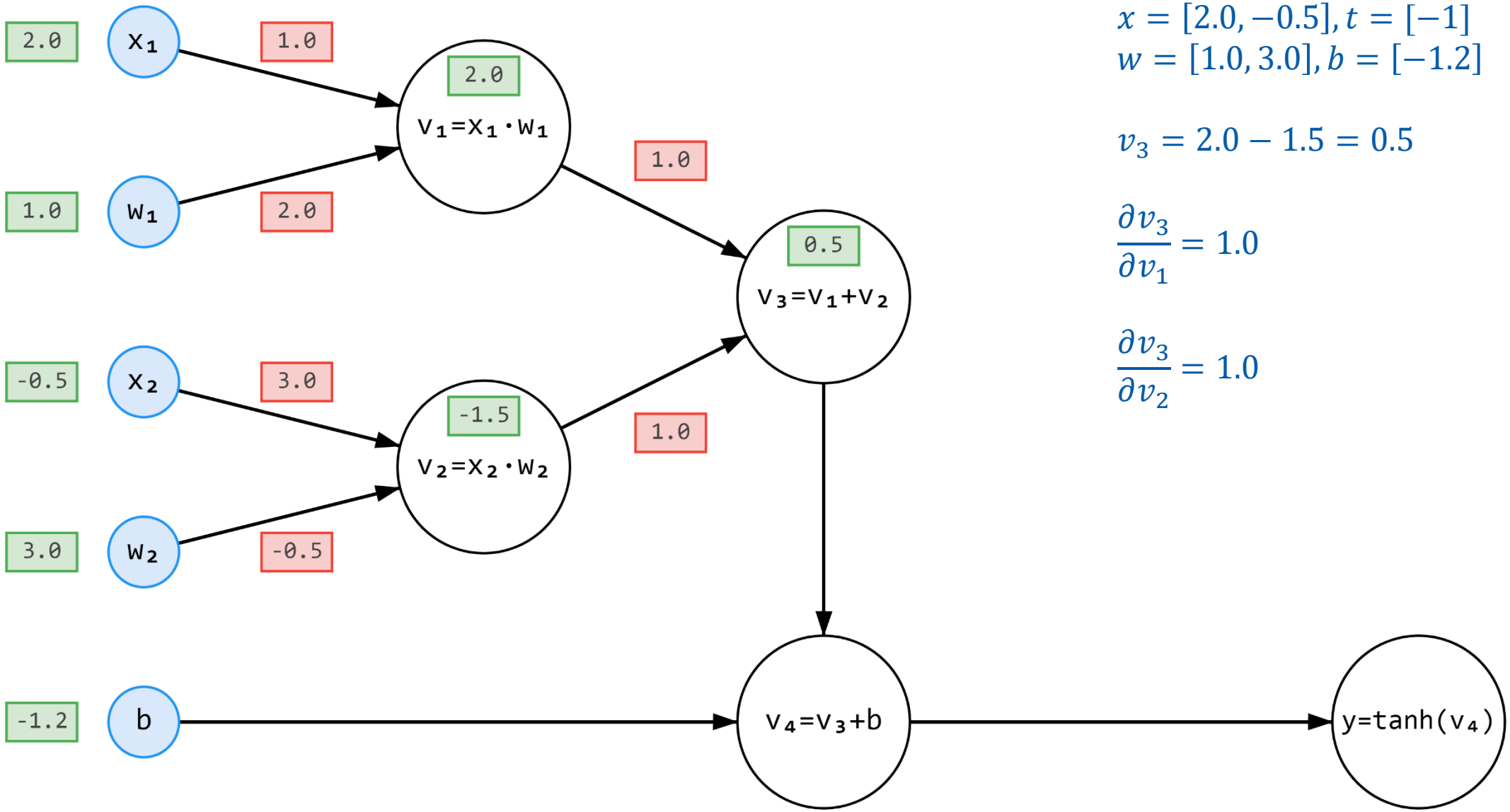
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$

$v_1 = 2.0 \cdot 1.0 = 2.0$
$v_2 = -0.5 \cdot 3.0 = -1.5$

$\frac{\partial v_1}{\partial x_1} = w_1 = 1.0$
$\frac{\partial v_1}{\partial w_1} = x_1 = 2.0$

$\frac{\partial v_2}{\partial x_2} = w_2 = 3.0$
$\frac{\partial v_2}{\partial w_2} = x_2 = -0.5$

Прямое распространение



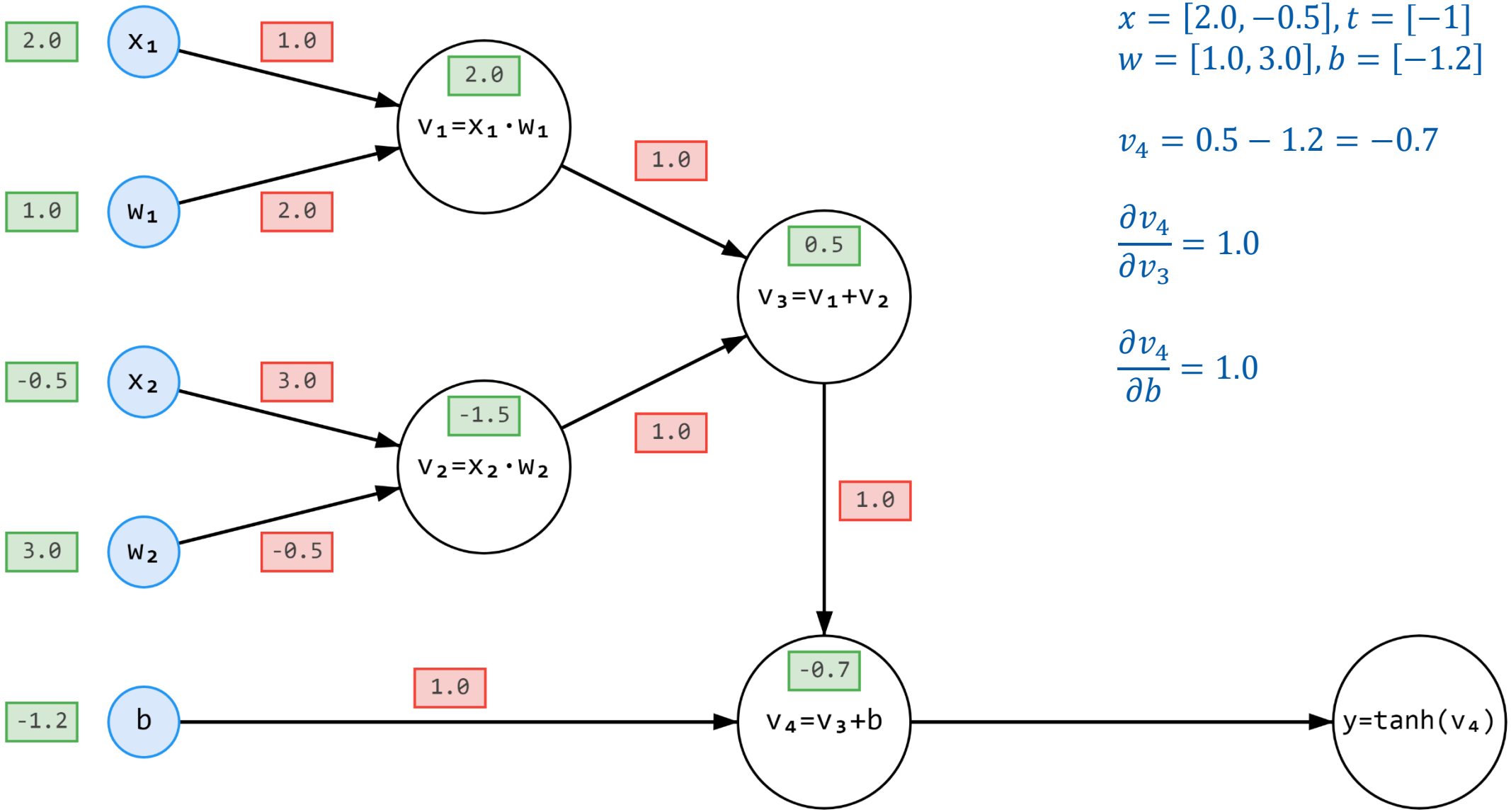
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$

$v_3 = 2.0 - 1.5 = 0.5$

$\frac{\partial v_3}{\partial v_1} = 1.0$

$\frac{\partial v_3}{\partial v_2} = 1.0$

Прямое распространение



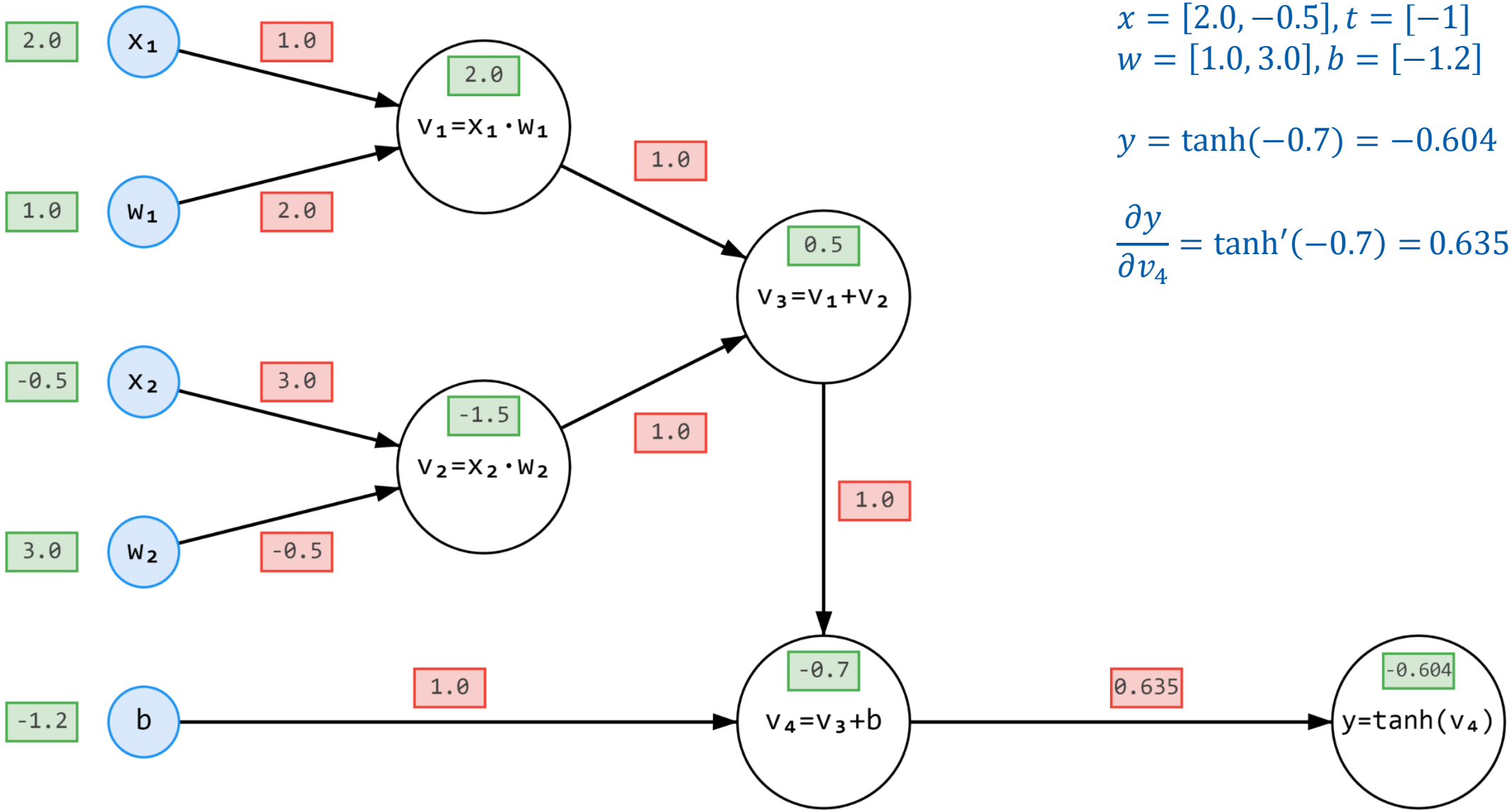
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$

$v_4 = 0.5 - 1.2 = -0.7$

$\frac{\partial v_4}{\partial v_3} = 1.0$

$\frac{\partial v_4}{\partial b} = 1.0$

Прямое распространение

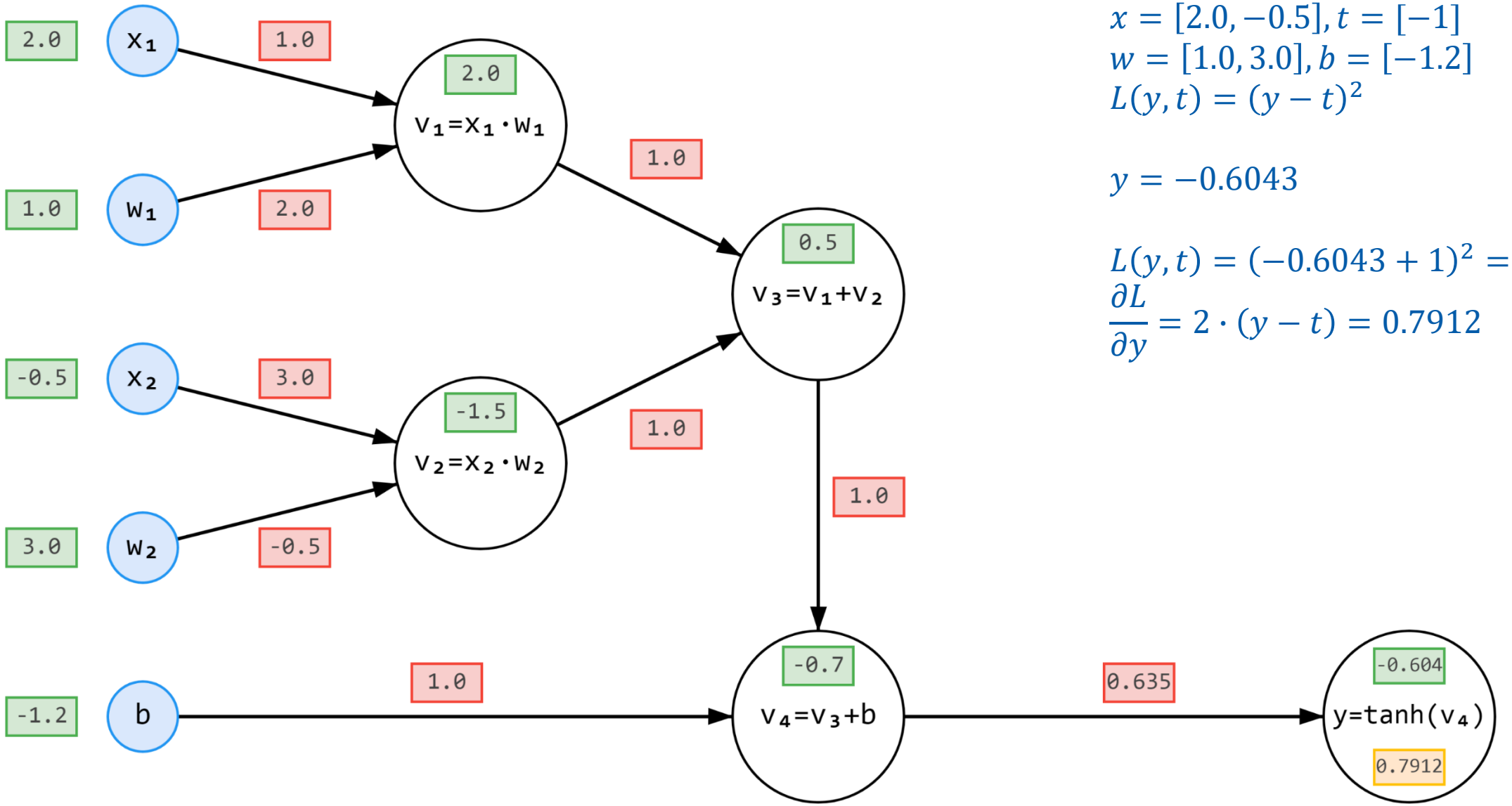


$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$

$y = \tanh(-0.7) = -0.604$

$\frac{\partial y}{\partial v_4} = \tanh'(-0.7) = 0.635$

Обратное распространение

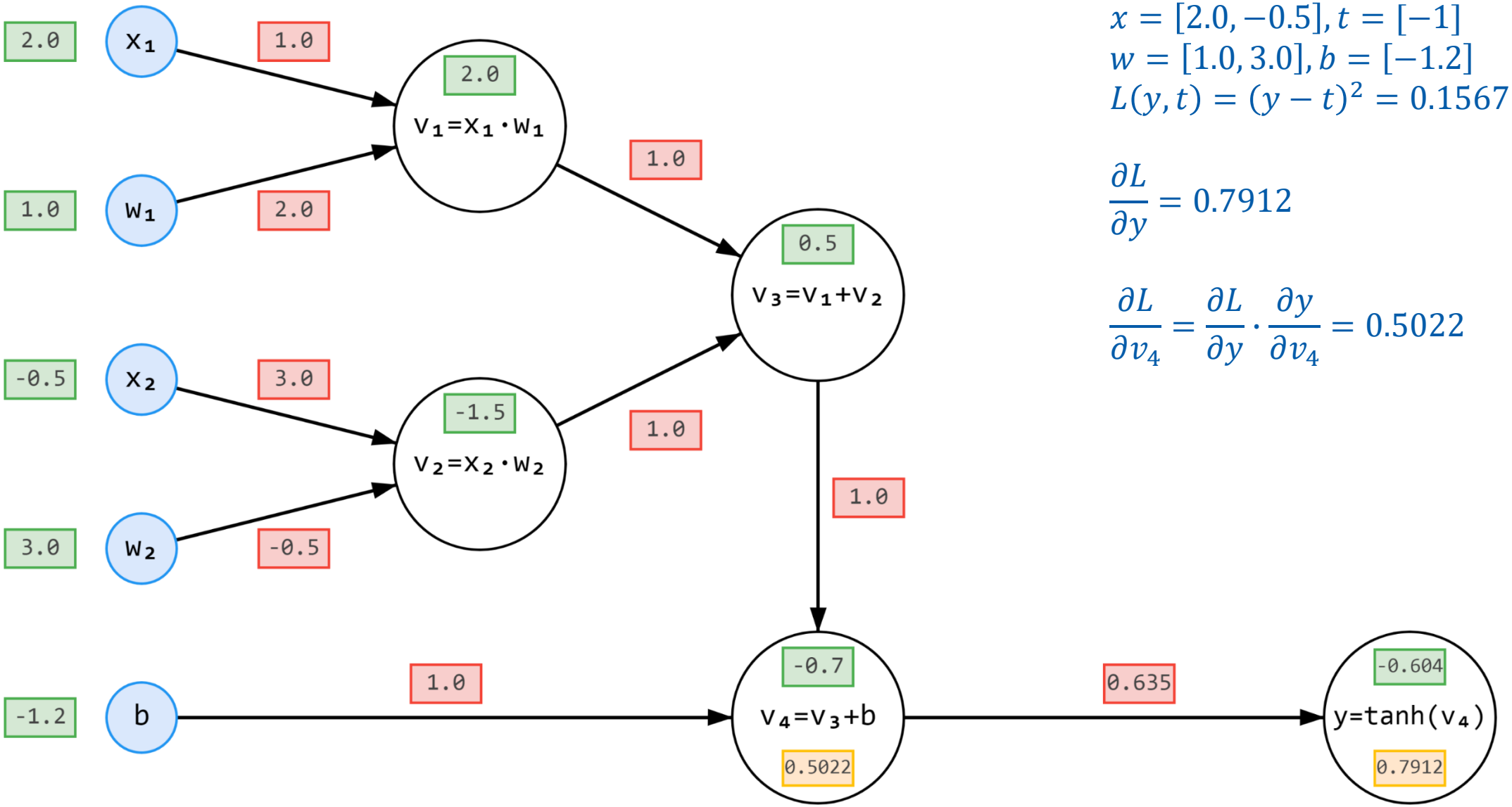


$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$
$L(y,t) = (y-t)^2$

$y = -0.6043$

$L(y,t) = (-0.6043 + 1)^2 = 0.1567$
$\frac{\partial L}{\partial y} = 2 \cdot (y-t) = 0.7912$

Обратное распространение

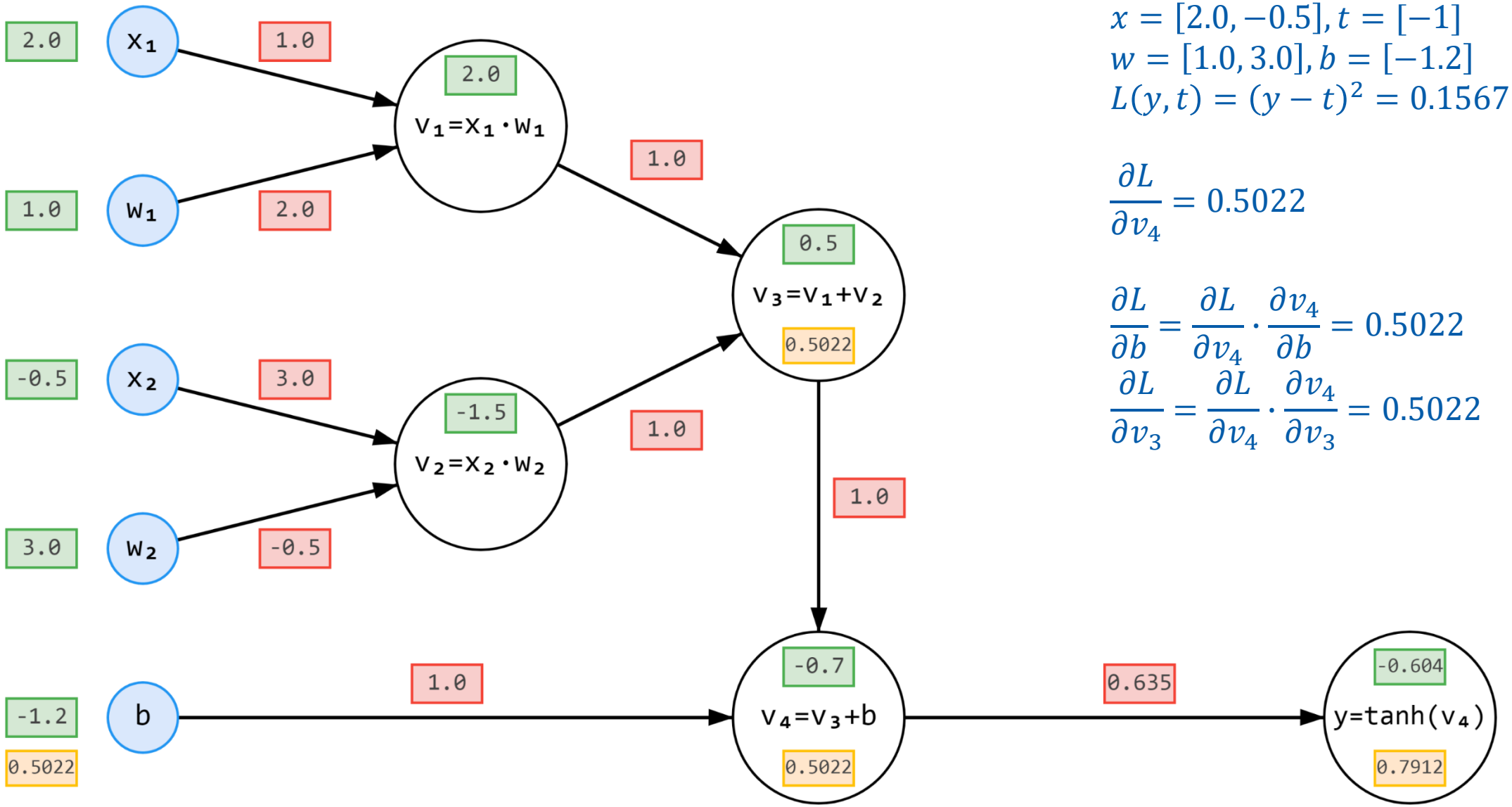


$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$
$L(y,t) = (y-t)^2 = 0.1567$

$$\frac{\partial L}{\partial y} = 0.7912$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_4} = \frac{\partial L}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial v_4} = 0.5022$$

Обратное распространение



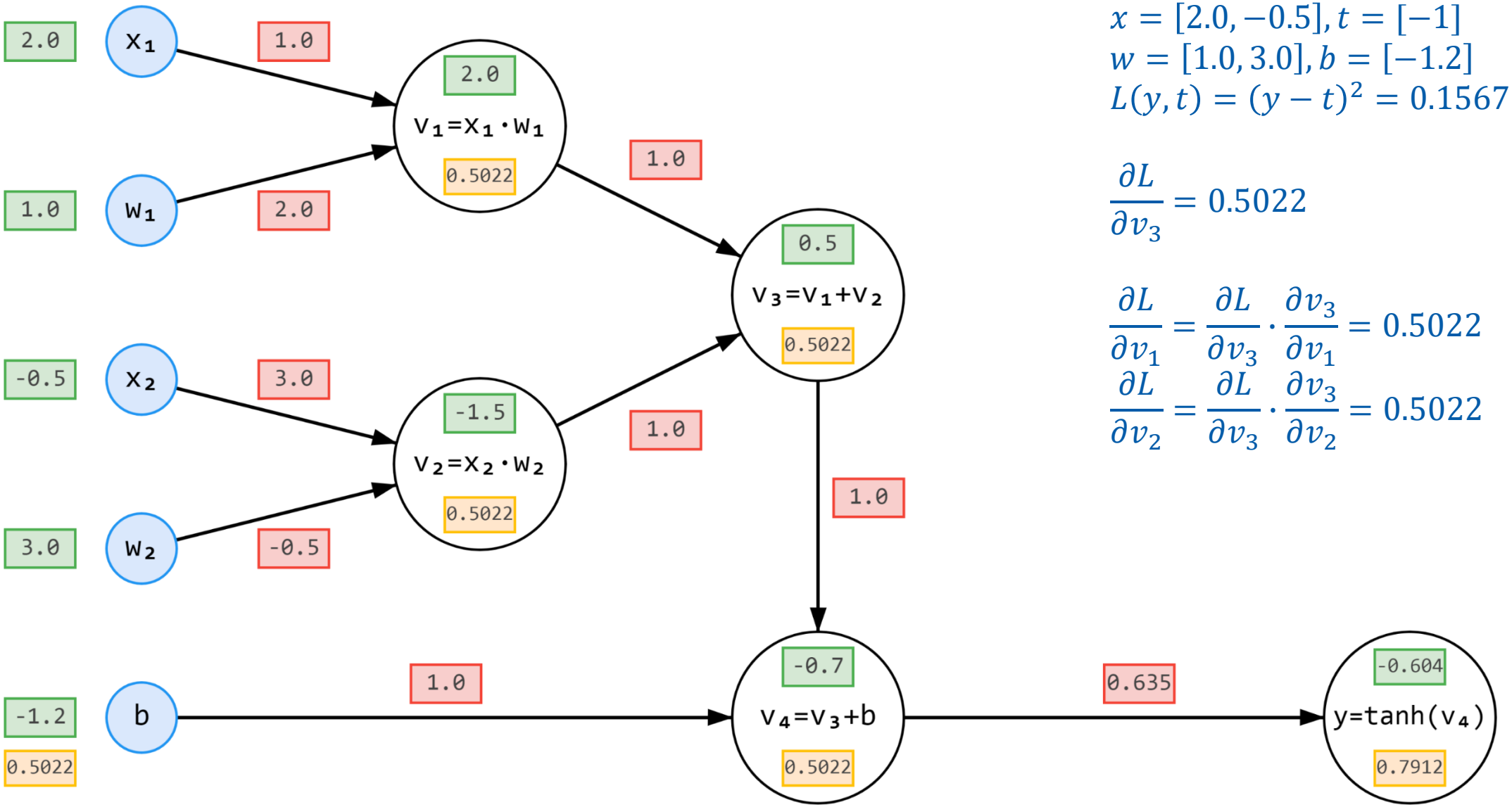
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$
$L(y,t) = (y-t)^2 = 0.1567$

$$\frac{\partial L}{\partial v_4} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \frac{\partial L}{\partial v_4} \cdot \frac{\partial v_4}{\partial b} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_3} = \frac{\partial L}{\partial v_4} \cdot \frac{\partial v_4}{\partial v_3} = 0.5022$$

Обратное распространение



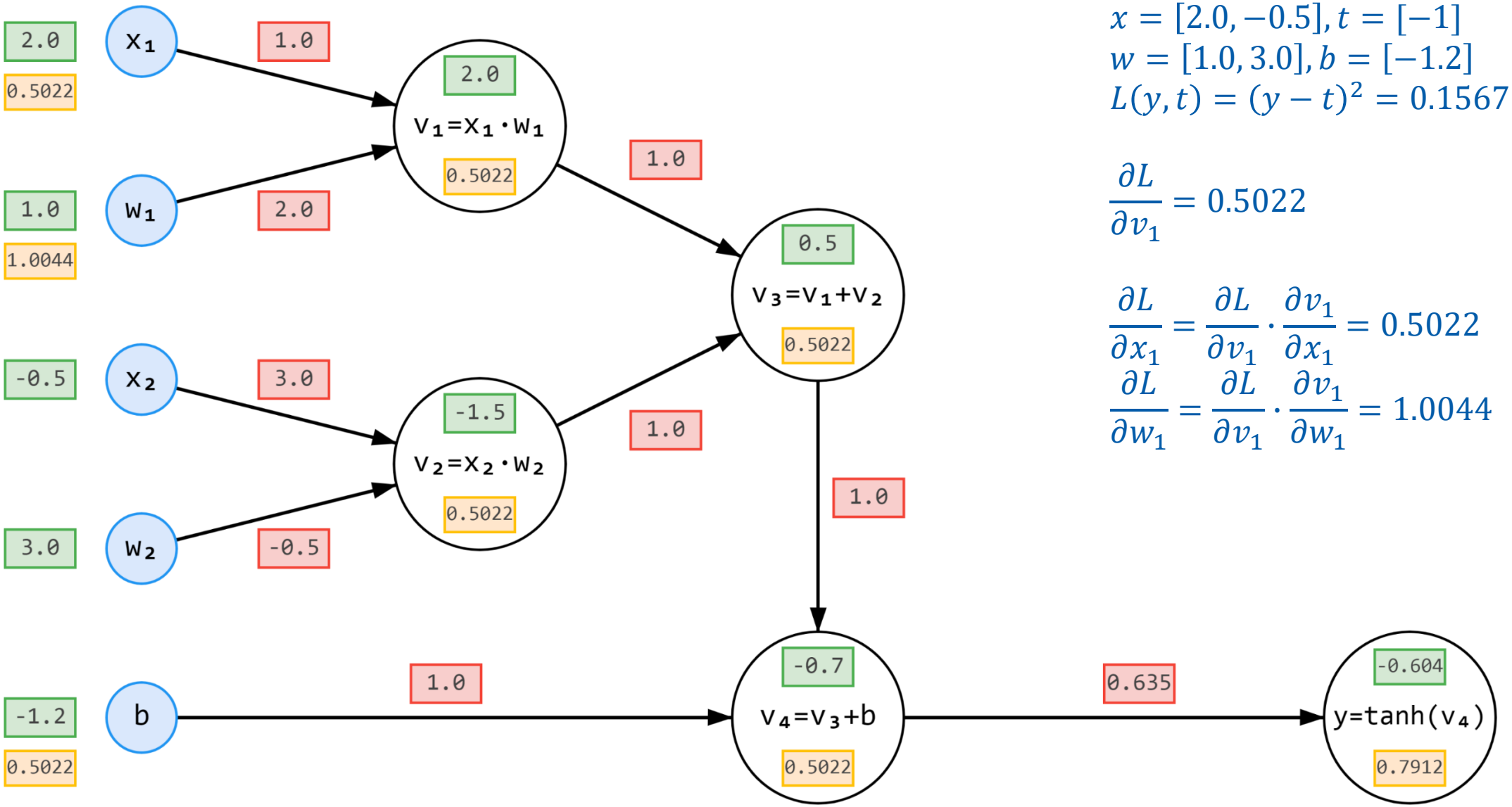
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$
$L(y,t) = (y-t)^2 = 0.1567$

$$\frac{\partial L}{\partial v_3} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_1} = \frac{\partial L}{\partial v_3} \cdot \frac{\partial v_3}{\partial v_1} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_2} = \frac{\partial L}{\partial v_3} \cdot \frac{\partial v_3}{\partial v_2} = 0.5022$$

Обратное распространение



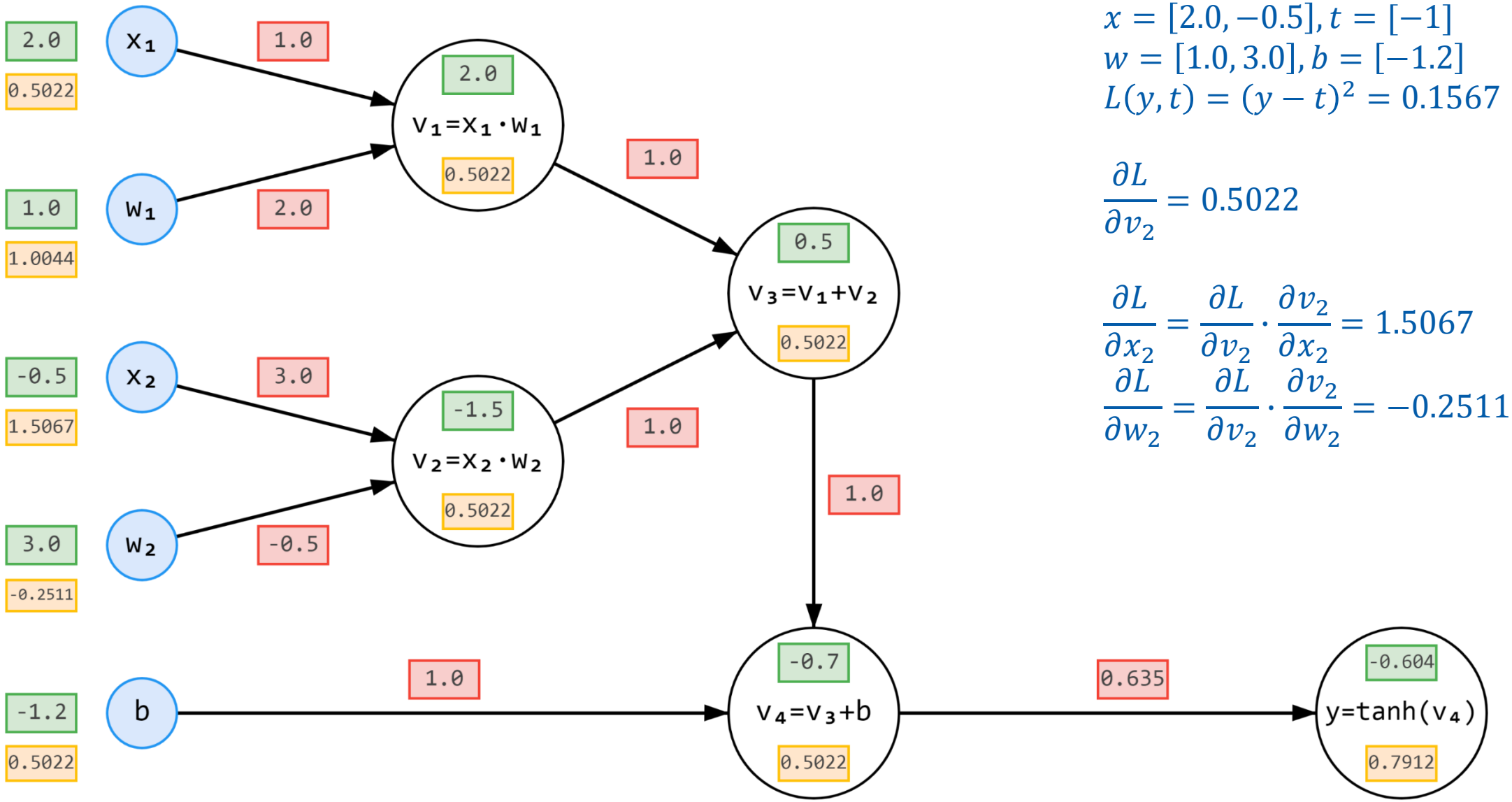
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$
$L(y,t) = (y-t)^2 = 0.1567$

$$\frac{\partial L}{\partial v_1} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = \frac{\partial L}{\partial v_1} \cdot \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_1} = \frac{\partial L}{\partial v_1} \cdot \frac{\partial v_1}{\partial w_1} = 1.0044$$

Обратное распространение



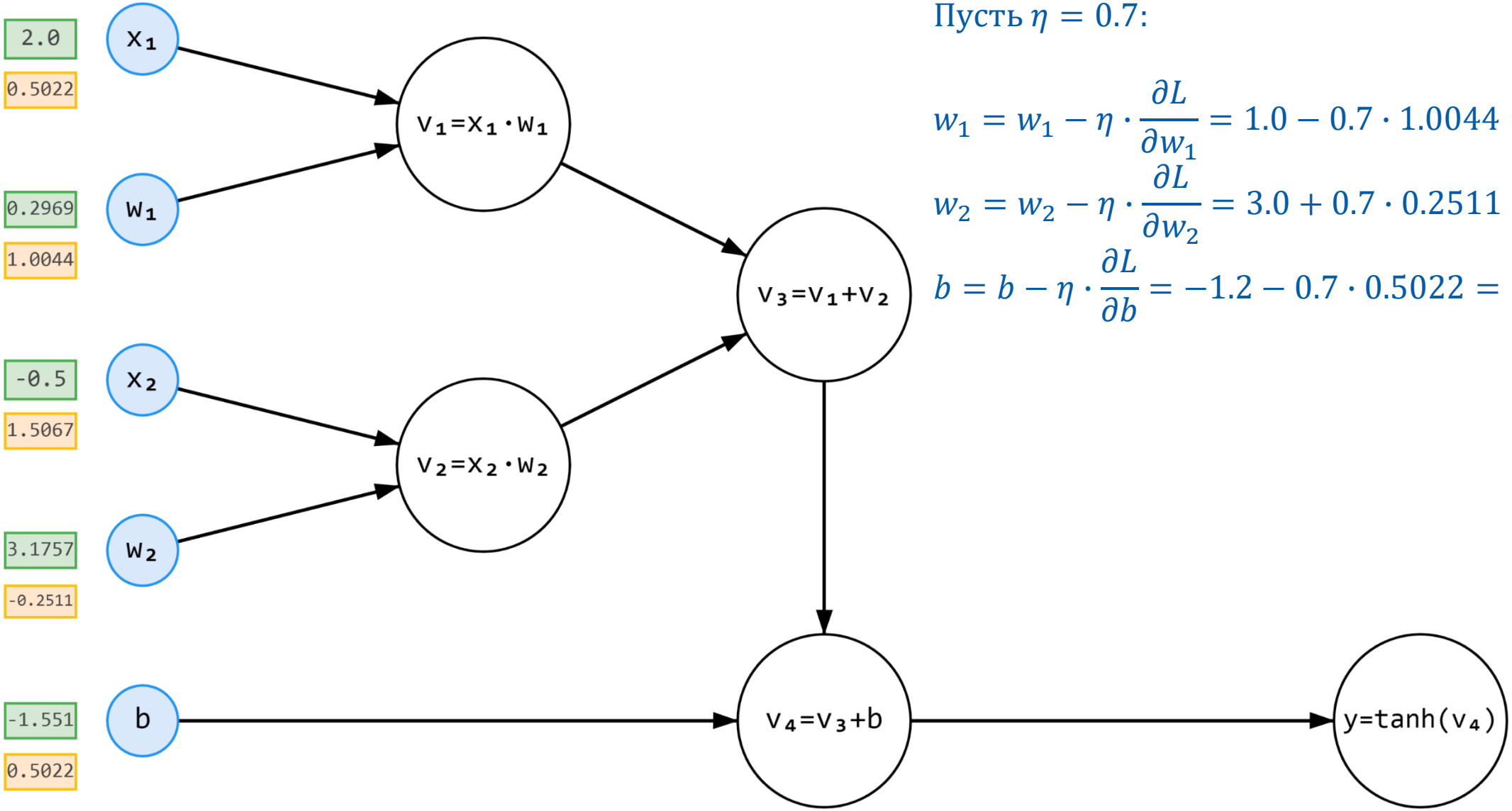
$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [1.0, 3.0], b = [-1.2]$
$L(y,t) = (y-t)^2 = 0.1567$

$$\frac{\partial L}{\partial v_2} = 0.5022$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = \frac{\partial L}{\partial v_2} \cdot \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = 1.5067$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_2} = \frac{\partial L}{\partial v_2} \cdot \frac{\partial v_2}{\partial w_2} = -0.2511$$

Обновление весовых коэффициентов



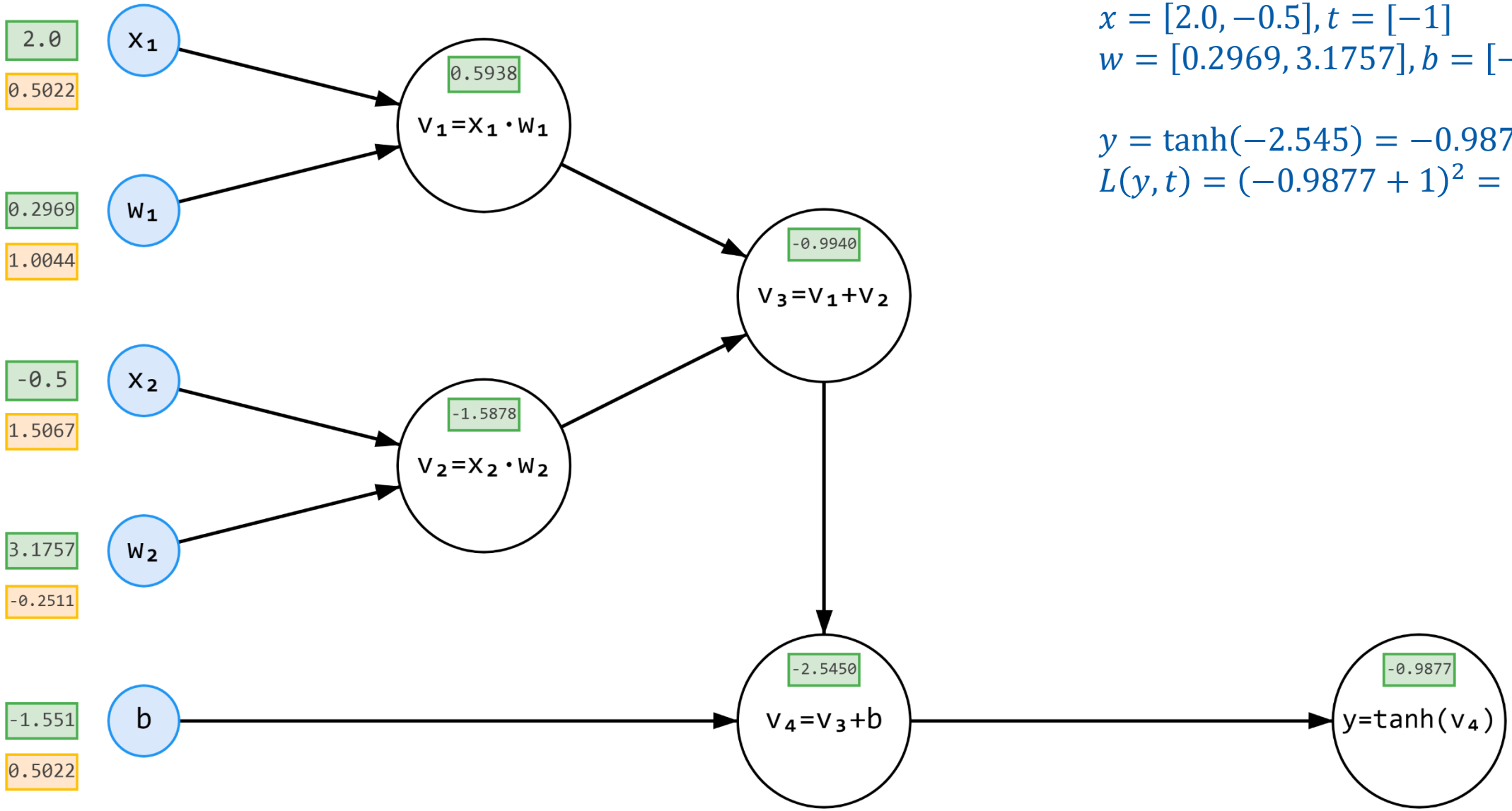
Пусть $\eta = 0.7$:

$$w_1 = w_1 - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial w_1} = 1.0 - 0.7 \cdot 1.0044 = 0.2969$$

$$w_2 = w_2 - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial w_2} = 3.0 + 0.7 \cdot 0.2511 = 3.1757$$

$$b = b - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial b} = -1.2 - 0.7 \cdot 0.5022 = -1.5515$$

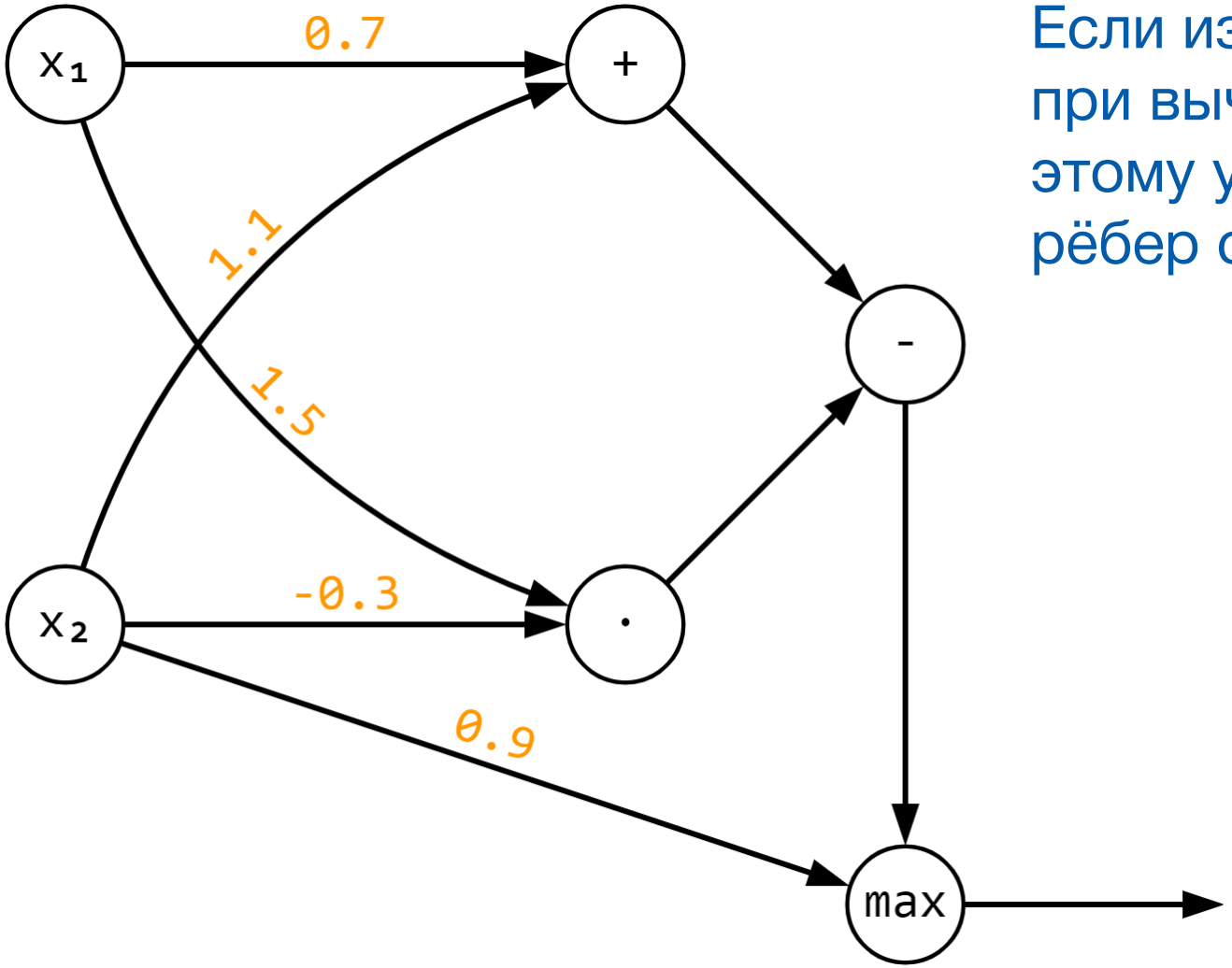
Прямое распространение (here we go again)



$x = [2.0, -0.5], t = [-1]$
$w = [0.2969, 3.1757], b = [-1.551]$

$y = \tanh(-2.545) = -0.9877$
$L(y,t) = (-0.9877 + 1)^2 = 0.00015$

А если переменная участвует в нескольких местах?

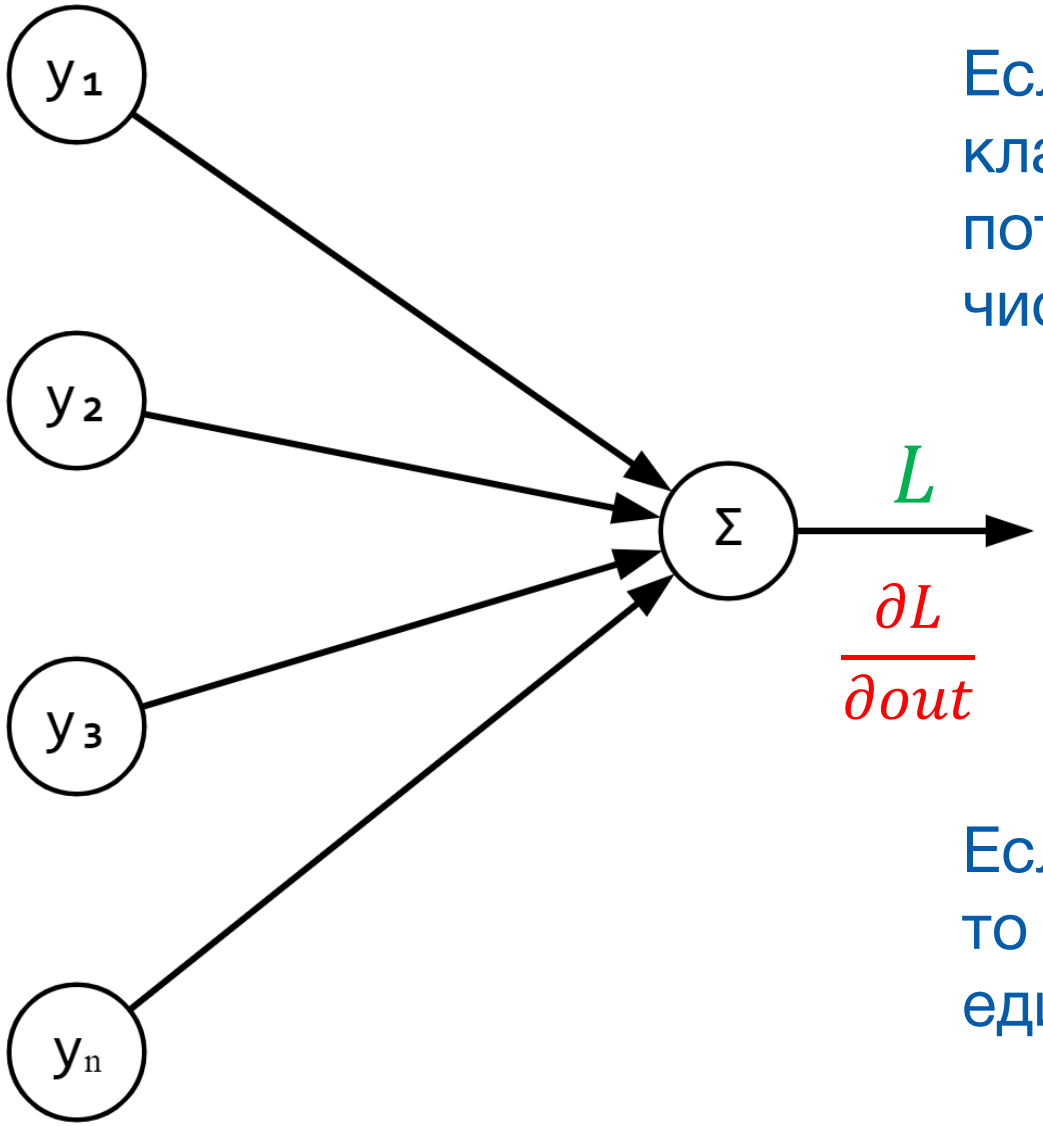


Если из узла выходит несколько рёбер, то при вычислении частной производной по этому узлу, все частные производные рёбер суммируются:

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 0.7 + 1.5 = 2.2$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = 1.1 - 0.3 + 0.9 = 1.7$$

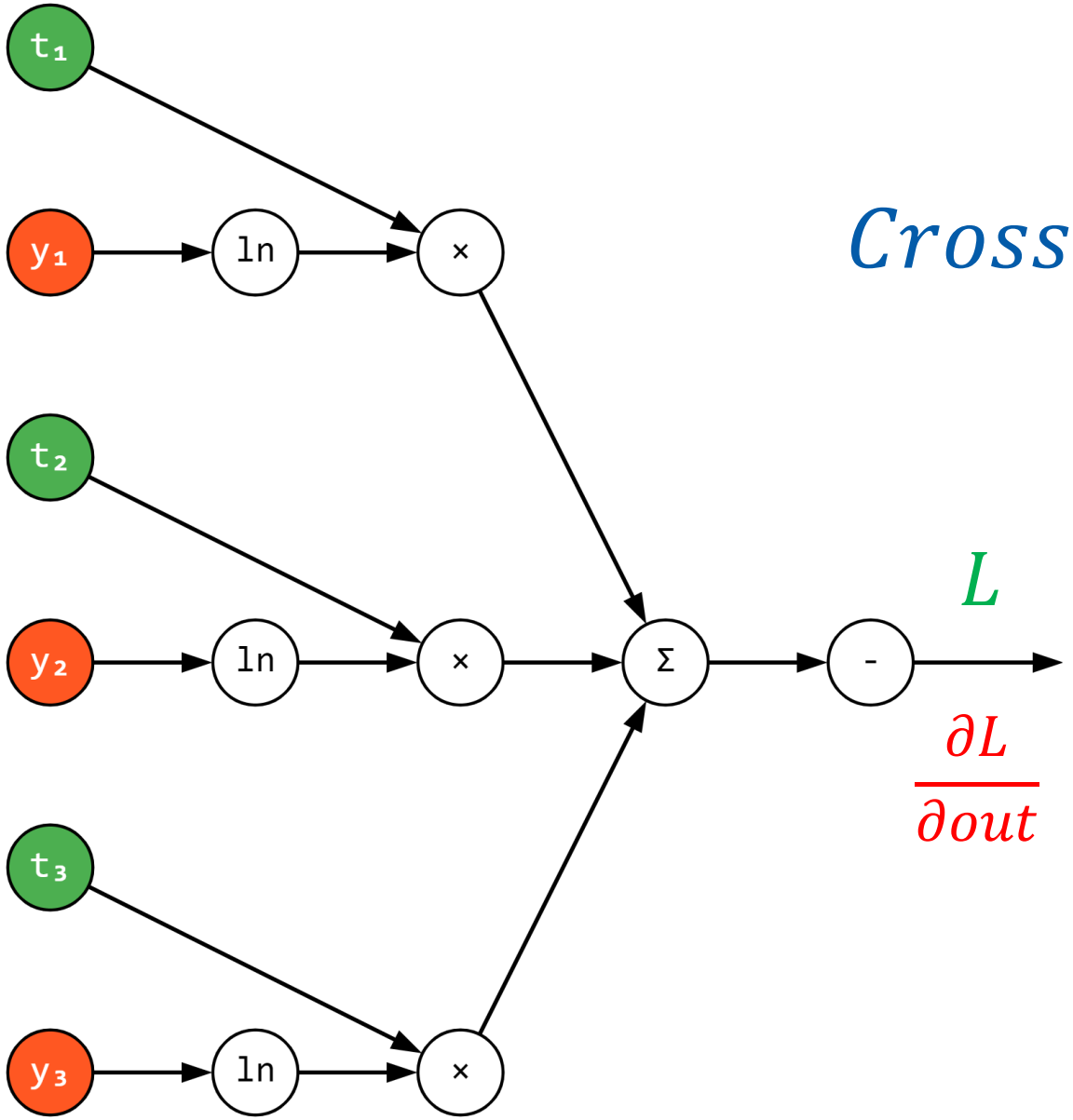
А если выходов много?



Если граф имеет несколько выходов (например, классификация на n классов), то функция потерь L агрегирует выходы в единственное число, например, сумму или среднее.

Если используется несколько функций потерь, то их значения также агрегируются, формируя единственный скаляр.

Пример – граф CrossEntropy loss



$$CrossEntropy = -\sum_{i=1}^{n} t_i \cdot \ln(y_i)$$

Проблема затухающего градиента

ИСП РАН

При backpropagation в глубокой нейронной сети градиент на первых слоях может быть очень маленьким из-за последовательного умножения на $\left|\frac{\partial z}{\partial y}\right| \ll 1$, поэтому эти слои будут обновляться «слабо».

Чтобы с этим бороться, выбирают специальные функции активации и разрабатывают специальные архитектуры, распространяющие градиент на первые слои (skip / residual connections).

Начальная инициализация

ИСП РАН

Перед обучением нейронной сети нужно проинициализировать ее параметры θ. Обычно используется нормальное распределение с нулевым средним и среднеквадратичным отклонением обратнопропроциональным количеству коэффициентов: $W \sim N\left(0, \frac{1}{\dim(W)}\right)$.

Существуют техники, учитывающие функции активации и размеры слоя (He, Xavier).

Нужно аккуратно подбирать начальную инициализацию весов, функции активации, размеры и количество слоев на валидационной выборке – проблемы недообучения / переобучения

Вопрос: почему бы не инициализировать все веса нулём? А константой?

Где используются полносвязные сети

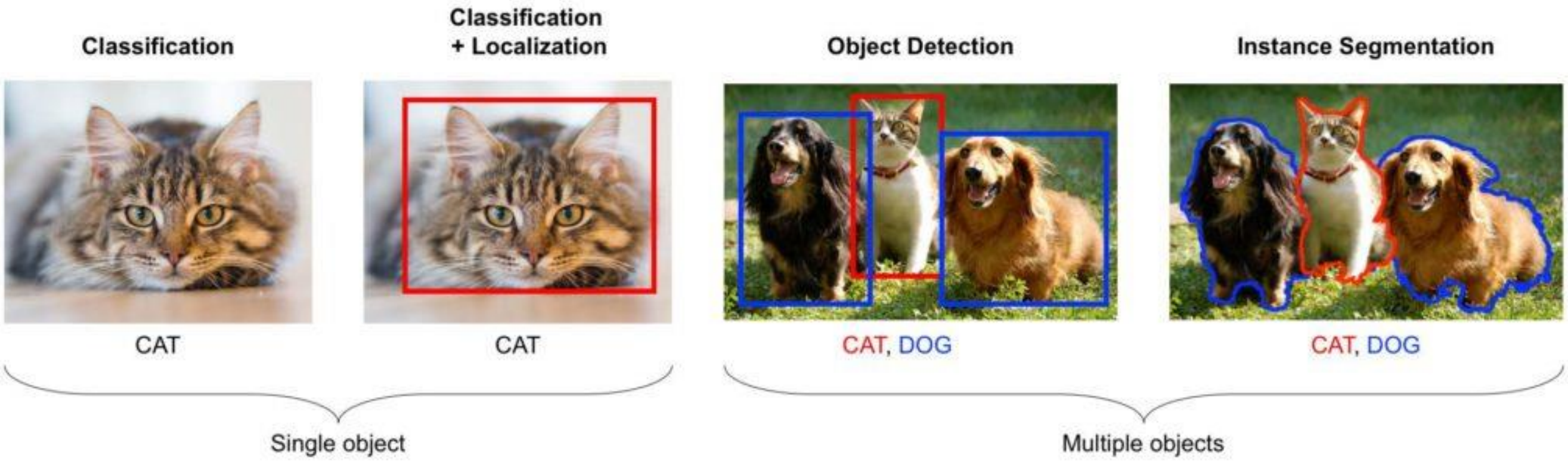
ИСП РАН

В настоящее время многослойные персептроны редко применяются напрямую для решения задач машинного обучения. Предпочитают использовать более стабильные и простые в обучении методы градиентного бустинга над деревьями, SVM и линейные модели.

Концепция персептрона лежит в основе более сложных нейронных сетей. Кроме того, его зачастую используют в качестве слоя нелинейного преобразования.

Работа с изображениями

ИСП РАН

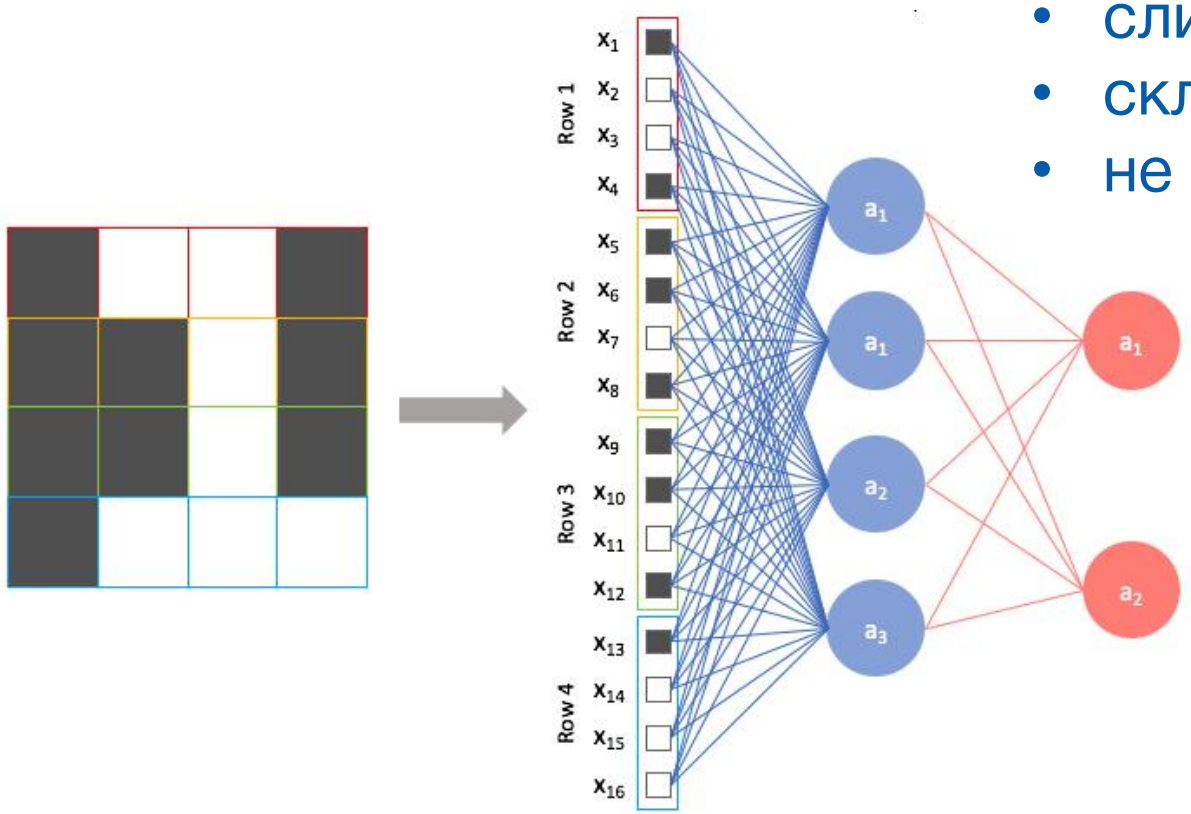


Почему полносвязная сеть не лучший выбор

ИСП РАН

Черно-белое изображение 32x32 ⇒ вектор признаков размерности 1024.

Возьмем один скрытый слой размерности 1024.
Матрица такого преобразования содержит 1024x1024 = 1048576 параметров.

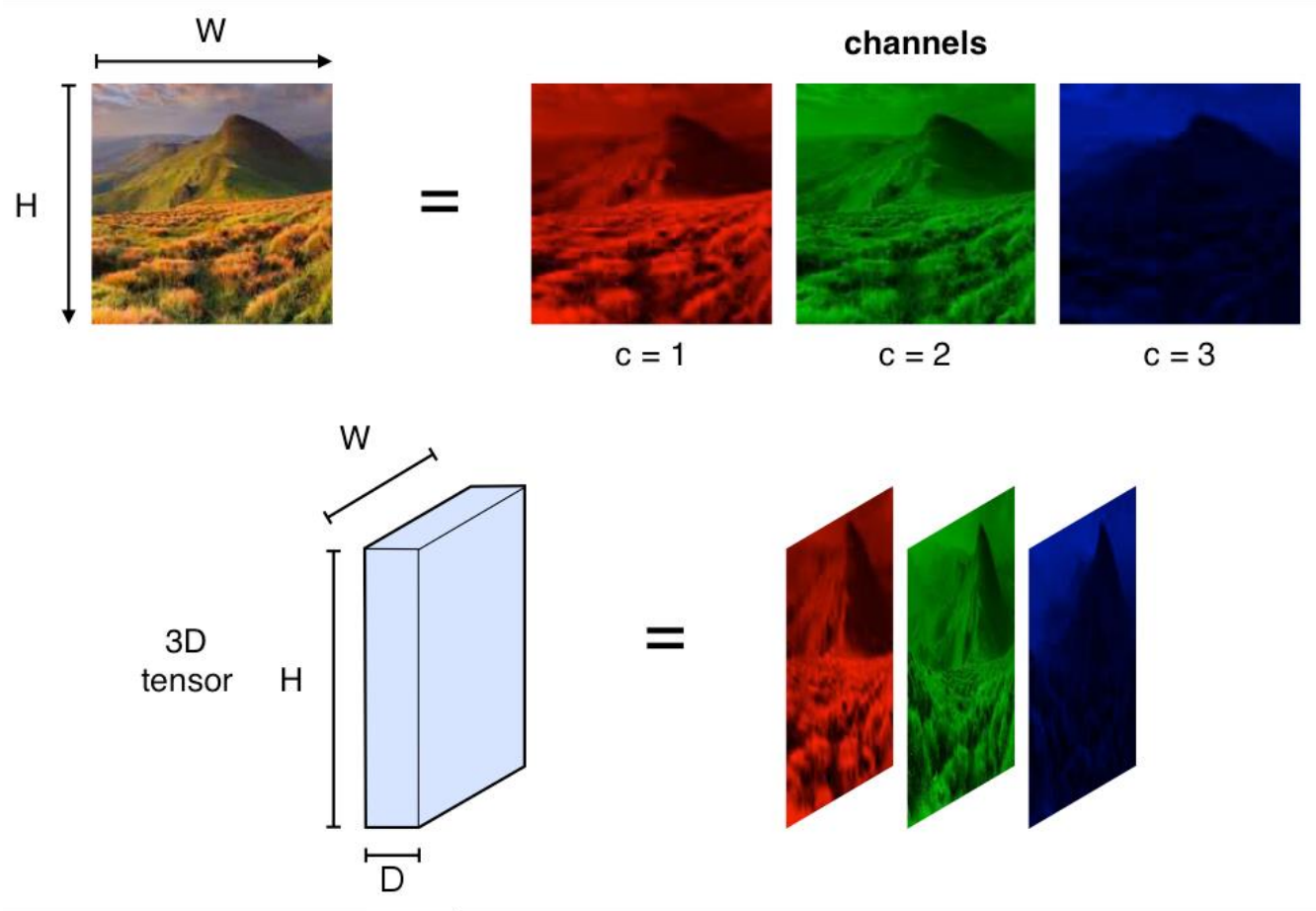


- слишком много параметров
- склонность к переобучению
- не учитывается локальная связь признаков

Вместо векторов – тензоры

ИСП РАН

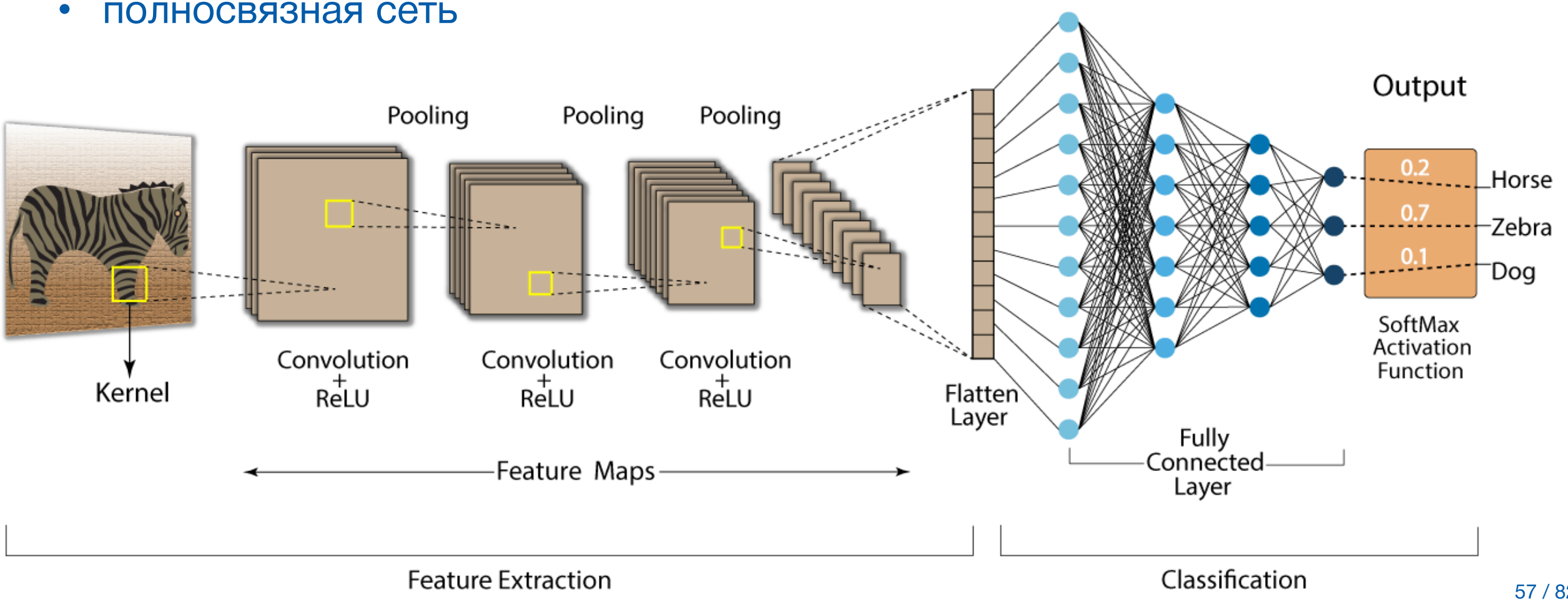
Полносвязные сети работают с векторами. Представлять изображения в виде векторов неразумно, так как теряется пространственная связь между элементами. На смену векторам приходят тензоры.



Свёрточные нейронные сети

Свёрточные сети состоят из следующих частей:

- свертка + активация
- пулинг (понижение размерности)
- полносвязная сеть



Свёртка (convolution)

ИСП РАН

Свёртка – это функция, показывающая «схожесть» одной функции и отражённой и сдвинутой другой. В двумерном случае свёртку можно описать следующей формулой:

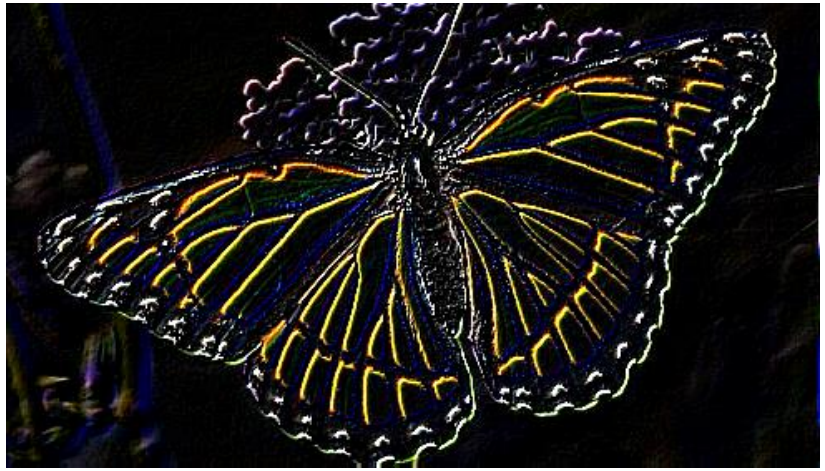
$$\langle input * filter \rangle(i,j) = \sum_{x=0}^{f_w} \sum_{y=0}^{f_h} input(i - x, j - y) \cdot filter(x,y)$$

Примеры свёрточных фильтров

ИСП РАН

0	0	0
0	1	0
0	0	0

Без изменений



-1	-2	-1
-2	4	2
-1	2	-1

Выделение границ

-1	-4	-1
-4	21	-4
-1	-4	-1

Повышение резкости

1/8	1/8	1/8
1/8	1/8	1/8
1/8	1/8	1/8

Размытие

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$6 \cdot 3 + 5 \cdot 2 + 3 \cdot (-1) + 4 \cdot (-1) + 6 \cdot 1 + 2 \cdot 4 + 1 \cdot 1 + 3 \cdot 3 + 6 \cdot 2 = 57$$

6 (3)	5 (2)	3 (-1)	-1	6	7
4 (-1)	6 (1)	2 (4)	4	6	2
1 (1)	3 (3)	6 (2)	0	0	1
5	7	2	1	5	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57			

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$5 \cdot 3 + 3 \cdot 2 + (-1) \cdot (-1) + 6 \cdot (-1) + 2 \cdot 1 + 4 \cdot 4 + 3 \cdot 1 + 6 \cdot 3 + 0 \cdot 2 = 55$$

6	5 (3)	3 (2)	-1 (-1)	6	7
4	6 (-1)	2 (1)	4 (4)	6	2
1	3 (1)	6 (3)	0 (2)	0	1
5	7	2	1	5	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55		

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$3 \cdot 3 + (-1) \cdot 2 + 6 \cdot (-1) + 2 \cdot (-1) + 4 \cdot 1 + 6 \cdot 4 + 6 \cdot 1 + 0 \cdot 3 + 0 \cdot 2 = 33$$

6	5	3 (3)	-1 (2)	6 (-1)	7
4	6	2 (-1)	4 (1)	6 (4)	2
1	3	6 (1)	0 (3)	0 (2)	1
5	7	2	1	5	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55	33	

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$(-1) \cdot 3 + 6 \cdot 2 + 7 \cdot (-1) + 4 \cdot (-1) + 6 \cdot 1 + 2 \cdot 4 + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 3 + 1 \cdot 2 = 14$$

6	5	3	-1 3	6 2	7 -1
4	6	2	4 -1	6 1	2 4
1	3	6	0 1	0 3	1 2
5	7	2	1	5	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55	33	14

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$4 \cdot 3 + 6 \cdot 2 + 2 \cdot (-1) + 1 \cdot (-1) + 3 \cdot 1 + 6 \cdot 4 + 5 \cdot 1 + 7 \cdot 3 + 2 \cdot 2 = 78$$

6	5	3	-1	6	7
4 3	6 2	2 -1	4	6	2
1 -1	3 1	6 4	0	0	1
5 1	7 3	2 2	1	5	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55	33	14
78			

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$6 \cdot 3 + 2 \cdot 2 + 4 \cdot (-1) + 3 \cdot (-1) + 6 \cdot 1 + 0 \cdot 4 + 7 \cdot 1 + 2 \cdot 3 + 1 \cdot 2 = 36$$

6	5	3	-1	6	7
4	6 (3)	2 (2)	4 (-1)	6	2
1	3 (-1)	6 (1)	0 (4)	0	1
5	7 (1)	2 (3)	1 (2)	5	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55	33	14
78	36		

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$2 \cdot 3 + 4 \cdot 2 + 6 \cdot (-1) + 6 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 + 0 \cdot 4 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 3 + 5 \cdot 2 = 17$$

6	5	3	-1	6	7
4	6	2 (3)	4 (2)	6 (-1)	2
1	3	6 (-1)	0 (1)	0 (4)	1
5	7	2 (1)	1 (3)	5 (2)	8

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55	33	14
78	36	17	

Результат свёртки: 2x4

Свёртка (convolution)

ИСП РАН

$$4 \cdot 3 + 6 \cdot 2 + 2 \cdot (-1) + 0 \cdot (-1) + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 4 + 1 \cdot 1 + 5 \cdot 3 + 8 \cdot 2 = 58$$

6	5	3	-1	6	7
4	6	2	4 (3)	6 (2)	2 (-1)
1	3	6	0 (-1)	0 (1)	1 (4)
5	7	2	1 (1)	5 (3)	8 (2)

Изображение 4x6

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

57	55	33	14
78	36	17	58

Результат свёртки: 2x4

Дополнение нулями (padding)

ИСП РАН

С каждой стороны добавляется ряд из P нулей (или другой константы):

0 (3)	0 (2)	0 (-1)	0	0	0	0	0
0 (-1)	6 (1)	5 (4)	3	-1	6	7	0
0 (1)	4 (3)	6 (2)	2	4	6	2	0
0	1	3	6	0	0	1	0
0	5	7	2	1	5	8	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1 → 6x8

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50	37	14	46	61	13
44	57	55	33	14	31
44	78	36	17	58	52
32	13	20	37	35	5

Результат свёртки: 4x6

Шаг (stride)

ИСП РАН

Каждый раз фильтр сдвигается не на stride элементов:

0 (3)	0 (2)	0 (-1)	0	0	0	0	0
0 (-1)	6 (1)	5 (4)	3	-1	6	7	0
0 (1)	4 (3)	6 (2)	2	4	6	2	0
0	1	3	6	0	0	1	0
0	5	7	2	1	5	8	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1, S = 2

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50		

Результат свёртки: 2x3

Шаг (stride)

ИСП РАН

Каждый раз фильтр сдвигается не на stride элементов:

0	0	0 (3)	0 (2)	0 (-1)	0	0	0
0	6	5 (-1)	3 (1)	-1 (4)	6	7	0
0	4	6 (1)	2 (3)	4 (2)	6	2	0
0	1	3	6	0	0	1	0
0	5	7	2	1	5	8	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1, S = 2

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50	14	

Результат свёртки: 2x3

Шаг (stride)

ИСП РАН

Каждый раз фильтр сдвигается не на stride элементов:

0	0	0	0	0 (3)	0 (2)	0 (-1)	0
0	6	5	3	-1 (-1)	6 (1)	7 (4)	0
0	4	6	2	4 (1)	6 (3)	2 (2)	0
0	1	3	6	0	0	1	0
0	5	7	2	1	5	8	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1, S = 2

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50	14	61

Результат свёртки: 2x3

Шаг (stride)

ИСП РАН

Каждый раз фильтр сдвигается не на stride элементов:

0	0	0	0	0	0	0	0
0	6	5	3	-1	6	7	0
0 (3)	4 (2)	6 (-1)	2	4	6	2	0
0 (-1)	1 (1)	3 (4)	6	0	0	1	0
0 (1)	5 (3)	7 (2)	2	1	5	8	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1, S = 2

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50	14	61
44		

Результат свёртки: 2x3

Шаг (stride)

ИСП РАН

Каждый раз фильтр сдвигается не на stride элементов:

0	0	0	0	0	0	0	0
0	6	5	3	-1	6	7	0
0	4	6 (3)	2 (2)	4 (-1)	6	2	0
0	1	3 (-1)	6 (1)	0 (4)	0	1	0
0	5	7 (1)	2 (3)	1 (2)	5	8	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1, S = 2

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50	14	61
44	36	

Результат свёртки: 2x3

Шаг (stride)

Каждый раз фильтр сдвигается не на stride элементов:

0	0	0	0	0	0	0	0
0	6	5	3	-1	6	7	0
0	4	6	2	4 (3)	6 (2)	2 (-1)	0
0	1	3	6	0 (-1)	0 (1)	1 (4)	0
0	5	7	2	1 (1)	5 (3)	8 (2)	0
0	0	0	0	0	0	0	0

Изображение 4x6, P = 1, S = 2

×

3	2	-1
-1	1	4
1	3	2

Фильтр

=

50	14	61
44	36	58

Результат свёртки: 2x3

Понижение размерности (pooling)

ИСП РАН

В настоящее время используется редко. Чаще используется слой свёртки с шагом (stride) больше единицы.

6	5	3	-1	6	7
4	6	2	4	6	2
1	3	6	0	0	1
5	7	2	1	5	8

Пулинг размерности 2x2 с шагом 2

max pooling →

6	4	7
7	6	8

average pooling →

5.25	2	5.25
4	2.25	3.5

sum pooling →

21	8	21
16	9	14

Размерность выхода слоя

ИСП РАН

Если к изображению размера $W_{in} \times H_{in}$ применить свертку / пулинг размера $F_w \times F_h$ с дополнением нулями P и шагом S, то размер выходного изображения будет равен $W_{out} \times H_{out}$, где:

$$W_{out} = \left\lfloor \frac{W_{in} + 2P - F_w}{S} \right\rfloor + 1$$
$$H_{out} = \left\lfloor \frac{H_{in} + 2P - F_h}{S} \right\rfloor + 1$$

Примеры:

$F = 3 \times 3, P = 1, S = 1$:

$$W_{out} = \left\lfloor \frac{W_{in} + 2 - 3}{1} \right\rfloor + 1 = W_{in}$$
$$H_{out} = \left\lfloor \frac{H_{in} + 2 - 3}{1} \right\rfloor + 1 = H_{in}$$

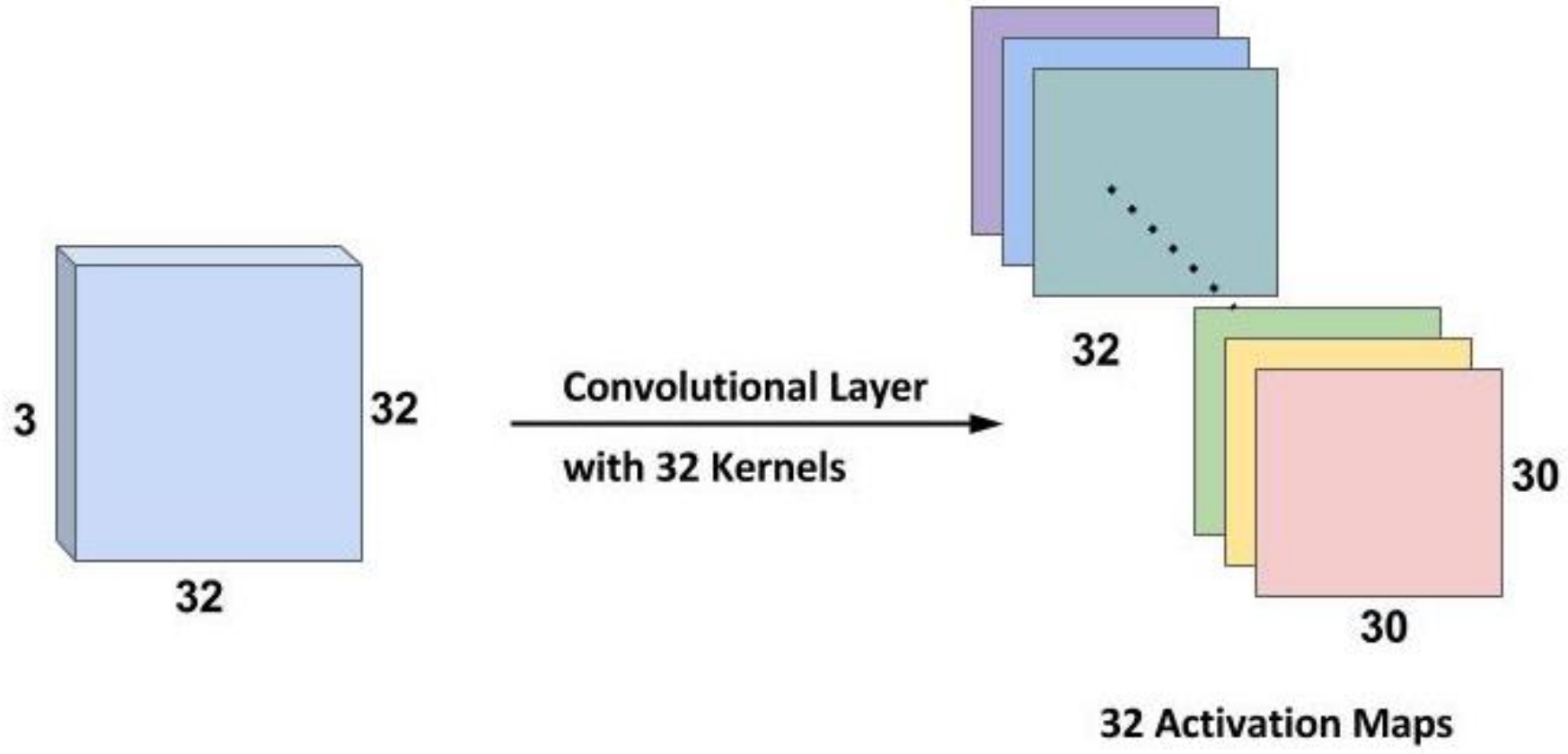
$F = 5 \times 3, P = 3, S = 2$:

$$W_{out} = \left\lfloor \frac{W_{in} + 6 - 5}{2} \right\rfloor + 1 = \left\lfloor \frac{W_{in} + 1}{2} \right\rfloor + 1$$
$$H_{out} = \left\lfloor \frac{H_{in} + 6 - 3}{2} \right\rfloor + 1 = \left\lfloor \frac{H_{in} + 3}{2} \right\rfloor + 1$$

Несколько фильтров

ИСП РАН

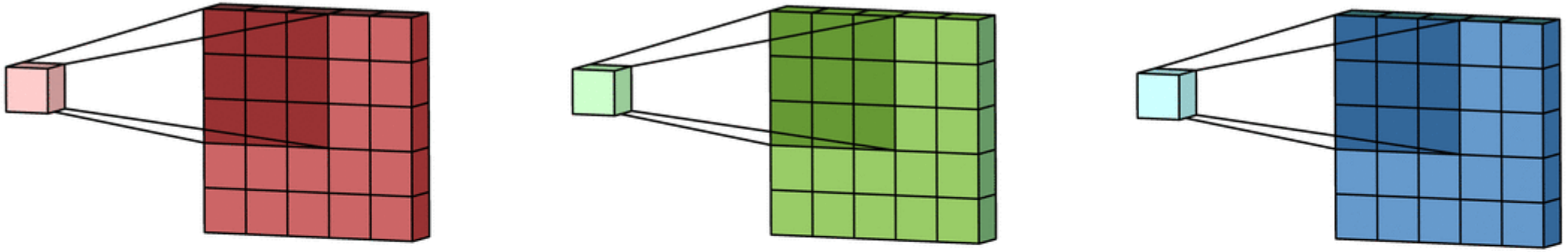
В свёрточном слое находится не один, а сразу несколько фильтров. Каждый из них получает из входного изображения плоскую матрицу, а для получения выходного тензора получаемые матрицы конкатенируются:



Особенность свёрточных фильтров

ИСП РАН

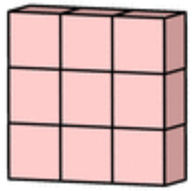
- Обычно входные изображения имеют несколько каналов – $\mathrm{W} \times H \times D$;
- Свёрточные фильтры также имеют третью размерность – $f_w \times f_h \times f_d$;
- Глубина фильтров совпадает с глубиной изображения – $D = f_d$
- При наложении фильтра на изображение, в линейной комбинации участвуют все каналы входного изображения;

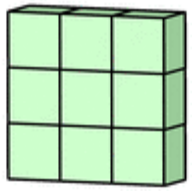


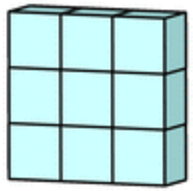
Особенность свёрточных фильтров

ИСП РАН

- Обычно входные изображения имеют несколько каналов – W × H × D;
- Свёрточные фильтры также имеют третью размерность – $f_w \times f_h \times f_d$;
- Глубина фильтров совпадает с глубиной изображения – $D = f_d$
- При наложении фильтра на изображение, в линейной комбинации участвуют все каналы входного изображения;



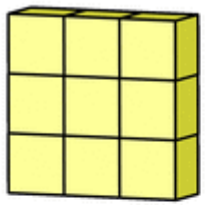




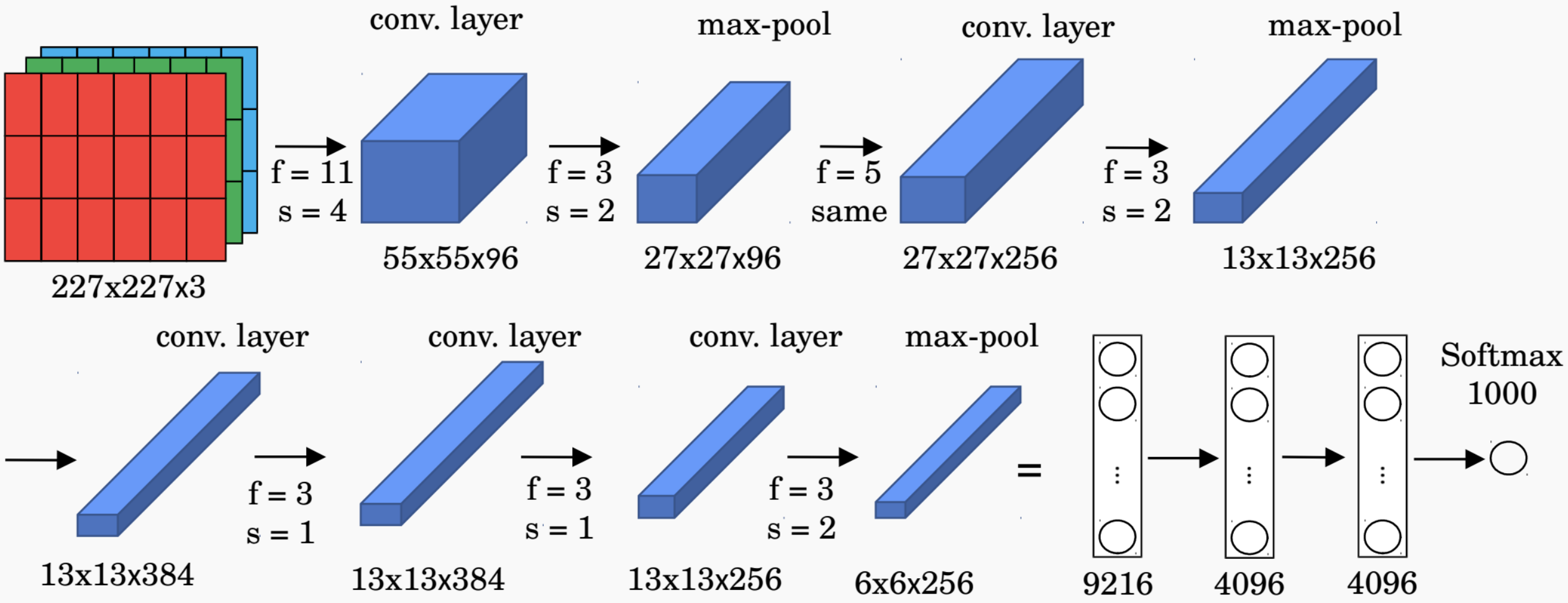
Особенность свёрточных фильтров

ИСП РАН

- Обычно входные изображения имеют несколько каналов – $\mathrm{W} \times H \times D$;
- Свёрточные фильтры также имеют третью размерность – $f_w \times f_h \times f_d$;
- Глубина фильтров совпадает с глубиной изображения – $D = f_d$
- При наложении фильтра на изображение, в линейной комбинации участвуют все каналы входного изображения;



Архитектура AlexNet



Вопросы?