|  |
| --- |
| Федеральное государственное бюджетное образовательноеучреждение высшего образования Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова |

Физический факультет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

**(межфакультетского учебного курса)**

**Нейронные сети и их применение в научных исследованиях**

**Neural networks and their application to scientific research**

*наименование дисциплины*

**Уровень высшего образования:** бакалавриат, магистратура, специалитет

**Направление подготовки:** все направления

*(код и название направления)*

**Профиль (направленность) ОПОП:** все

*(название направленности)*

Форма обучения: очная

**Авторы:**

к.ф.-м.н., с.н.с. Елизаров Сергей Георгиевич
 к.ф.-м.н., с.н.с. Запуниди Сергей Александрович

Москва 2023

**1. Цель освоения дисциплины – требования к результатам освоения дисциплины:**

Дисциплина направлена на формирование у студента компетенций:

– способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, формулировать научно обоснованные гипотезы, применять методологию научного познания в профессиональной деятельности (УК-1);

– способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки, формировать приоритеты личностного и профессионального развития (УК-7).

**2. Объем дисциплины составляет:**

Объем дисциплины – 1 з.е. / 24 часа, которые составляют контактную работу обучающегося с преподавателем (24 часа – занятия лекционного типа).

Вид промежуточной аттестации – **зачет**.

**3. Тематический план: структура дисциплины по темам с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий (в соответствии с учебным планом)**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Наименование** **разделов и тем дисциплины,****Форма промежуточной** **аттестации по дисциплине** | **Номинальные трудозатраты** **обучающегося**  | **Всего академических часов** | **Форма текущего контроля успеваемости[[1]](#footnote-1) \*** |
| **Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем)****Виды контактной работы, академические часы** | **Самостоя-тельная****работа** **обучаю-****щегося,****академи-****ческие** **часы** |
| **Занятия** **лекционного** **типа** | **Занятия** **семинарского** **типа / (в** **интерактивной форме)** |
| Тема 1. Новая суперспособность науки. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 2. Как учить машины. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 3. Линейные модели. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 4. Свёрточные сети. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 5. Рекуррентные сети. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 6. Трансформеры (1). | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 7. Трансформеры (2). GPT. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 8. Генеративные модели. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 9. Обучение с подкреплением. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 10. Нейрорендеринг и физическое моделирование. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 11. Графовые сети. | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Тема 12. Финал | 2 | - | - | 2 | КО, Т |
| Промежуточная аттестация: **Зачет** |  |  |  |  | КО, Т |
| **Итого** | **24** | **-** | **-** | **24** |  |

**4. Содержание разделов, тем дисциплины: краткое содержание дисциплины (темы** **межфакультетского учебного курса):**

**Тема 1. Новая суперспособность науки.**

1. Искусственный интеллект и его отличие от машинного обучения. Определение нейросети. 2. Узкоспециализированный искусственный интеллект. Примеры использования машинного обучения в повседневной жизни.

3. Применение глубокого машинного обучения в науке.

**Тема 2. Как учить машины.**

1. Алгоритмы и методы обучения.

2. Данные. Модели. Классификация.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 3. Линейные модели.**

1. Линейные модели. Уменьшение размерности. Эмбеддинги слов.

2. Возможность моделирования языка.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 4. Свёрточные сети.**

1. Сверточные нейронные сети. Классификация картинок.

2. Детекция объектов. Transfer learning.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 5. Рекуррентные сети.**

1. Работа с последовательностями. Рекуррентные нейронные сети.

2. Распознавание речи. Работа с текстами.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 6. Трансформеры (1).**

1. Механизм внимания. Трансформеры. Self-supervised learning.

2. Трансформеры для текста. Трансформеры для картинок. Объяснимый искусственный интеллект.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 7. Трансформеры (2). GPT.**

1. Генеративный пред-обученный трансформер (GPT). Few shot-learning.

2. Языковые модели. AlphaFold и связанные модели.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 8. Генеративные модели.**

1. Генеративные модели. Генеративно-состязательные сети (GAN).

2. Мультимодальные модели. CLIP. Семейство моделей Text2Image. Предсказание погоды с помощью генеративных моделей.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 9. Обучение с подкреплением.**

1. Основы обучения с подкреплением (RL). Роботы и их взаимодействие с окружающей средой.

2. Искусственный интеллект в экономике.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 10. Нейрорендеринг и физическое моделирование.**

1. NeRF: нейронные поля. Физические симуляции.

2. Ускорение научных расчетов с помощью нейросетей.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 11. Графовые сети.**

1. Графовые сети (GNN). Графовые свертки (GCNN).

2. GNN на службе социологии. GNN для химии.

3. Примеры из различных научных дисциплин.

**Тема 12. Финал**

1. Дополнительные примеры применения машинного обучения, не вошедшие в основную программу.

2. ML как инструмент для научных исследований.

**5. Перечень вопросов для подготовки к экзамену**

**Тема 1. Новая суперспособность науки.**

1. Объясните три типа искусственного интеллекта.
2. Опишите нейрость для сворачивания белков.
3. Объясните, какие причины способствовали быстрому развитию искусственных нейронных сетей.

**Тема 2. Как учить машины.**

1. Объясните, из каких основных компонентов состоит машинное обучение.
2. Охарактеризуйте, что можно использовать в качестве данных для машинного обучения.
3. Определите, что должно происходить с функцией потерь во время обучения.

**Тема 3. Линейные модели.**

1. Опишите получение вектора эмбеддинг слова.
2. Раскройте форму кодирования классов one-hot-encoding.
3. Объясните, как называется тип нейронных сетей (word)2vec.

**Тема 4. Свёрточные сети.**

1. Определите фильтр, который используется для обработки изображения.
2. Выявите каналы из которых обычно состоит цветное изображение.
3. Охарактеризуйте метод обучения нейросетей Transfer learning.

**Тема 5. Рекуррентные сети.**

1. Опишите конфигурацию RNN под названием Many-to-Many.
2. Опишите проблему затухающего градиента в виде иллюстрации.
3. Дайте оценку и опишите нейросеть Long-Short Term Memory (LSTM).

**Тема 6. Трансформеры (1).**

1. Охарактеризуйте нейросеть с которой началась революция в области NLP.
2. Опишите название модуля, отвечающий за значимость слов и их контекст.
3. Опишите "токен", который используется для того, что бы спрятать слова.

**Тема 7. Трансформеры (2). GPT.**

1. Опишите предсказание нейросети при виде токена [NEXT].
2. Дайте определение Generative Pretrained Transformer.
3. Обоснуйте парадигму обучения Generative Pretrained Transformer.

**Тема 8. Генеративные модели.**

1. Дайте определение типу нейронных сетей Автоэнкодер.
2. Объясните процесс обучения генеративных состязательных сетей (GAN).
3. Дайте определение вектору Latent Vector.

**Тема 9. Обучение с подкреплением.**

1. Объясните взаимодействие среды и агента в процессе обучения с подкреплением.
2. Определите главные проблемы RL.
3. Опишите коллаборативный RL как тип обучения с подкреплением.

**Тема 10. Нейрорендеринг и физическое моделирование.**

1. Раскройте процесс получения изображения по модели с помощью компьютерной программы.
2. Выявите основные проблемы с классическим моделированием физических явлений.
3. Определите, что определяет, как именно отражается свет.

**Тема 11. Графовые сети.**

1. Охарактеризуйте понятие графовые сети.
2. Объясните, почему можно представить изображение в виде графа.
3. Объясните ориентированный граф в виде иллюстрации.

**Тема 12. Финал**

1. Опишите работу системы по распознаванию лиц.
2. Охарактеризуйте работу оценки глубины изображения с помощью одной камеры (monocular depth estimation).
3. Раскройте термин Keypoints, который выражен в виде точек.

**6. Ресурсное обеспечение:** п**еречень основной и дополнительной литературы**

**Основная литература:**

Stokes, Jonathan M. A deep learning approach to antibiotic discovery // Cell. - 2020. - №180.4. - С. 688-702. - Текст : электронный. - URL: [https://www.cell.com/cell/fulltext/S0092-8674(20)30102-1](https://www.cell.com/cell/fulltext/S0092-8674%2820%2930102-1) (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по ссылке.

Traffic prediction with advanced Graph Neural Networks // deepmind. - Текст : электронный. - URL: <https://www.deepmind.com/blog/traffic-prediction-with-advanced-graph-neural-networks> (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по ссылке.

Yu, Junliang Socially-aware self-supervised tri-training for recommendation // Proceedings of the 27th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery. – 2021. - Текст : электронный. - URL: [Socially-Aware Self-Supervised Tri-Training for Recommendation (arxiv.org)](https://arxiv.org/pdf/2106.03569.pdf) (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по ссылке.

Yu, Junliang Self-supervised multi-channel hypergraph convolutional network for social recommendation // Proceedings of the Web Conference 2021. - 2021. - С. 413-424. - Текст : электронный. - URL: [Self-Supervised Multi-Channel Hypergraph Convolutional Network for Social Recommendation | Proceedings of the Web Conference 2021 (acm.org)](https://dl.acm.org/doi/abs/10.1145/3442381.3449844) (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по подписке.

Zhang, Chunrui Inferring Users’ Social Roles with a Multi-Level Graph Neural Network Model // Entropy. - 2021. - №23. - С. 413-424 - Текст : электронный. - URL: [Entropy | Free Full-Text | Inferring Users’ Social Roles with a Multi-Level Graph Neural Network Model (mdpi.com)](https://www.mdpi.com/1099-4300/23/11/1453) (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по ссылке.

**Дополнительная литература:**

Lovro Vrček, Petar Veličković, Mile Šikić A step towards neural genome assembly // NeurIPS. - 2020. - С. 1-5. - Текст : электронный. - URL: [[2011.05013] A step towards neural genome assembly (arxiv.org)](https://arxiv.org/abs/2011.05013) (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по ссылке.

Choukroun, Yoni, Lior Wolf Geometric Transformer for End-to-End Molecule Properties Prediction // arXiv preprint. – 2021. - Текст : электронный. - URL: [2110.13721v1.pdf (arxiv.org)](https://arxiv.org/pdf/2110.13721v1.pdf) (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по ссылке.

Gainza, Pablo Deciphering interaction fingerprints from protein molecular surfaces using geometric deep learning // Nature Methods. - 2020. - №17. - С. 184-192. - Текст : электронный. - URL: <https://www.nature.com/articles/s41592-019-0666-6> (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по подписке.

Herrero-Vidal, Pedro, Dmitry Rinberg, Cristina Savin Across-animal odor decoding by probabilistic manifold alignment // NeurIPS. - 2021. - Текст : электронный. - URL: <https://proceedings.neurips.cc/paper/2021/hash/aad64398a969ec3186800d412fa7ab31-Abstract.html> (дата обращения: 16.09.2022). – Режим доступа: по подписке.

**7. Преподаватели дисциплины:**

к.ф.-м.н., с.н.с. Елизаров Сергей Георгиевич

к.ф.-м.н., с.н.с. Запуниди Сергей Александрович

1. Формы текущего контроля успеваемости – это: проверка конспектов лекций и первоисточников (статьи, монографии, учебника, книги и пр.) (ПК); контрольный (устный / письменный) опрос (КО); контрольная работа (КР); правовой диктант (ПД); презентация доклада, выступления, реферата (П); тестирование (решение тестовых заданий) (Т); коллоквиум (К); решение кейсов (конкретных практических ситуационных заданий) (РК); разработка исследовательского мини-проекта, отчет по нему (ИП); аналитический обзор официальной и исследовательской статистики и аналитики (АО); деловая игра (ДИ); выступление на научно-практической конференции (ВК). Формы текущего контроля успеваемости по всем темам дисциплины сопровождаются устными индивидуальными выступлениями (В) и групповой дискуссией (обсуждение противоречивых, проблемных тем и вопросов) обучающихся (Д). [↑](#footnote-ref-1)