Neuronale Netze

Volker Tresp

Einführung

- Der Entwurf eines guten Klassifikators/Regressionsmodells hängt entscheidend von geeigneten Basisfunktion en ab
- Manchmal sind geeignete Basisfunktionen (Merkmalsextraktoren) anwendungsspezifisch nahe liegend
- Generische Basisfunktionen wie Polynome, RBFs haben das Problem, dass die benötigte Anzahl mit der Eingangsdimension rapide ansteigt (“Fluch der Dimension”)
- Es sollte doch möglich sein, geeignete Basisfunktionen zu erlernen
- Dies ist genau die Grundidee hinter Neuronalen Netzen
- Bei Neuronalen Netzen kommen ganz spezielle Basisfunktionen zum Einsatz: sigmoide Basisfunktionen

Neuronale Netze: wesentliche Vorteile

- Neuronale Netze sind universelle Approximatoren: jede stetige Funktion kann beliebig genau approximiert werden (mit genügend vielen sigmoiden Basisfunktionen)
- Entscheidender Vorteil Neuronaler Netze: mit **wenigen** Basisfunktionen einen sehr guten Fit zu erreichen bei gleichzeitiger hervorragender Generalisierungseigenschaften
- Besondere Approximationseigenschaften Neuronaler Netze in hohen Dimensionen

Flexiblere Modelle: Neuronale Netze

- Auch bei einem Neuronalen Netz besteht der Ausgang (bzw. die Aktivierungsfunktion $h(x)$ im Falle eines Perzeptrons) aus der linear-gewichteten Summation von Basisfunktionen

$$\widehat{y}_i = f(\mathbf{x}_i) = \sum_{h=0}^{H-1} w_h \mathsf{sig}(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h)$$

- Beachte, dass neben den Ausgangsgewichten $\mathbf{w}$ das Neuronale Netz auch innere Gewichte $\mathbf{v}_h$ enthält

Neuronale Basisfunktionen

- Spezielle Form der Basisfunktionen

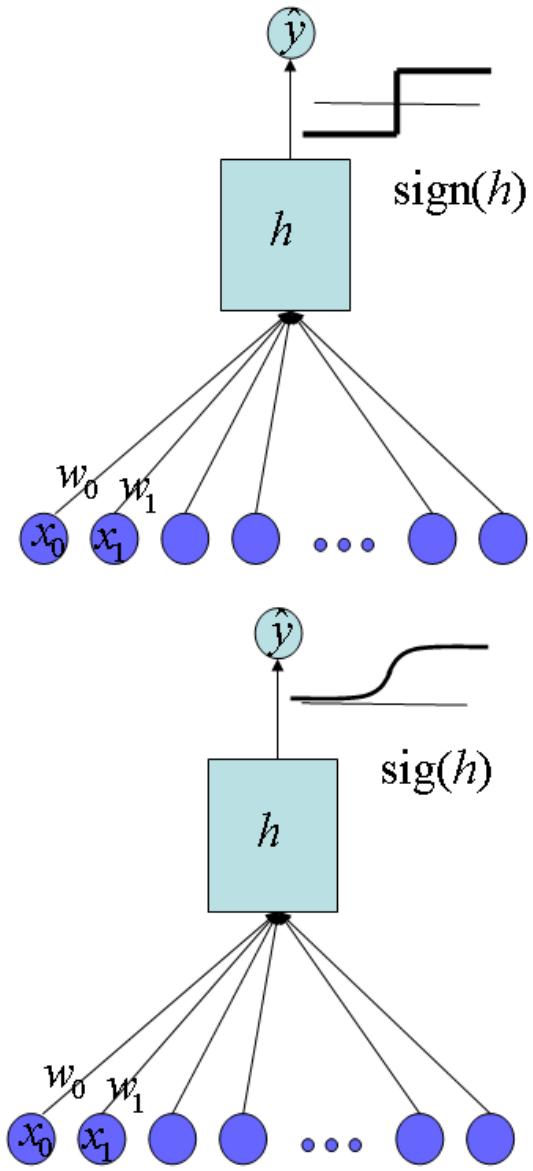
$$z_i = \mathsf{sig}(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h) = \mathrm{sig}\left(\sum_{j=0}^{M-1} v_{h,j} x_{i,j}\right)$$

mit

$$\mathrm{sig}(in) = \frac{1}{1 + \exp(-in)}$$

- Adaption der inneren Parameter $v_{h,j}$ der Basisfunktionen!

Harte und weiche (sigmoide) Übertragungsfunktion



- Zunächst wird die Aktivierungsfunktion als gewichtete Summe der Eingangsgrößen x_i berechnet zu

$$h(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j x_{i,j}$$

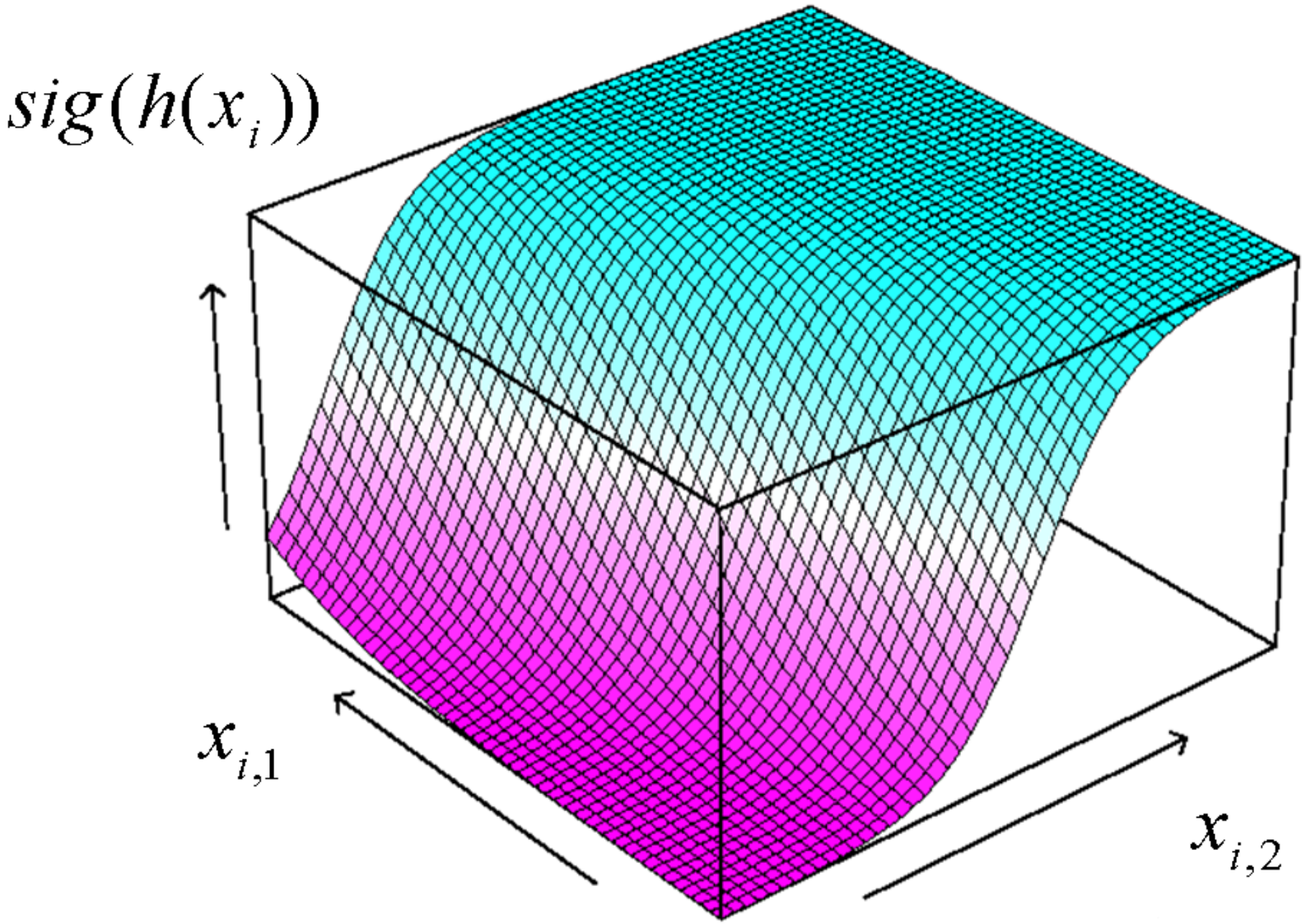
(beachte: $x_{i,0} = 1$ ist ein konstanter Eingang, so dass w_0 dem Bias entspricht)

- Das sigmoide Neuron unterscheidet sich vom Perzeptron durch die Übertragungsfunktion

$$\textbf{Perceptron}: \quad \hat{y}_i = \textbf{sign}(h(\mathbf{x}_i))$$

$$\textbf{SigmoidesNeuron}: \quad \hat{y}_i = \text{sig}(h(\mathbf{x}_i))$$

Transferfunktion



Charakteristische Hyperebene

- Definiere die Hyperebene

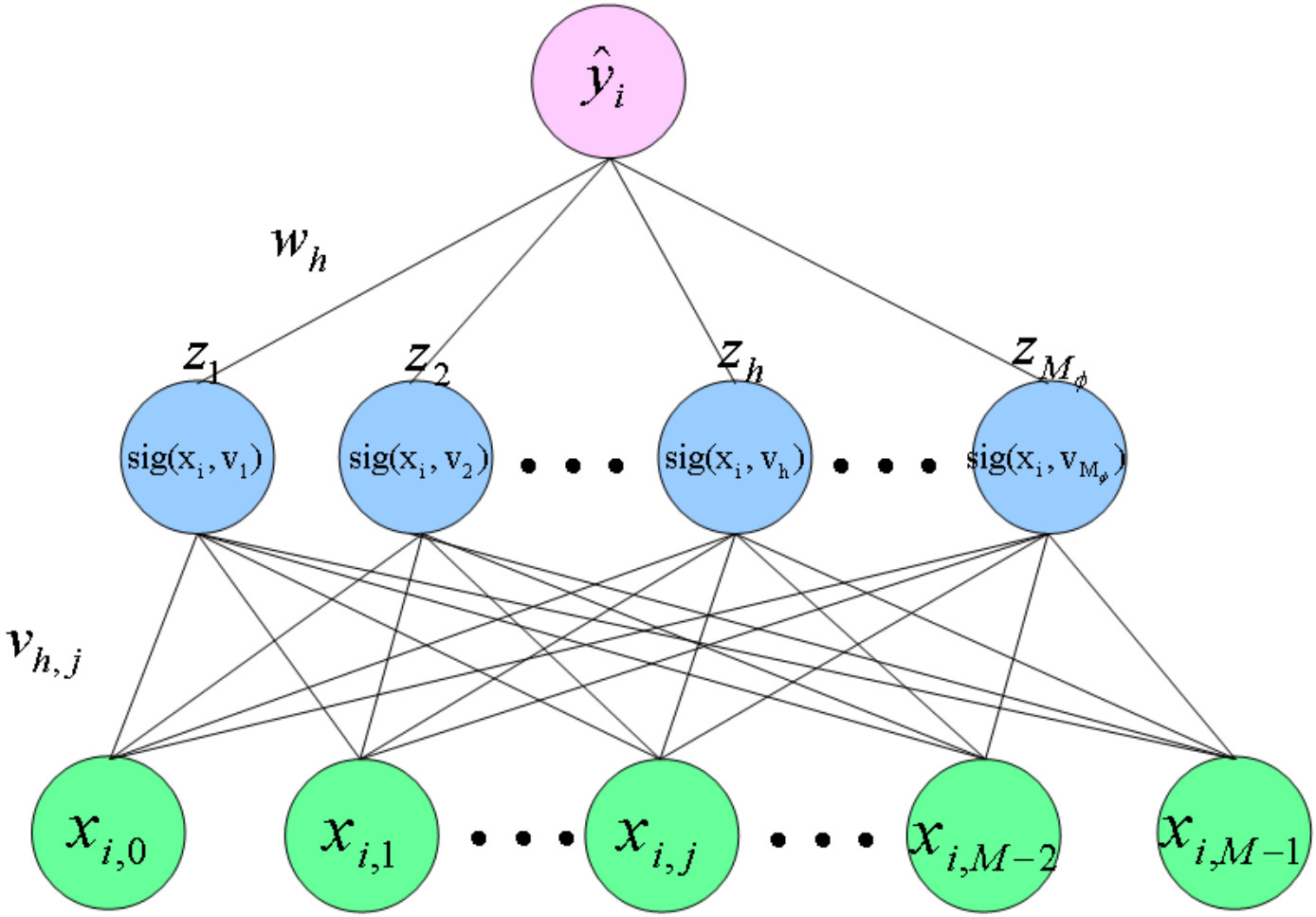
$$\text{sig}\left(\sum_{j=0}^{M-1} v_{h,j} x_{i,j}\right) = 0.5$$

  Identisch mit:

$$\sum_{j=0}^{M-1} v_{h,j} x_{i,j} = 0$$

- "Teppich über einer Stufe"

Architektur eines Neuronalen Netzes



Varianten

- Will man einen binären Klassifikator lernen, dann wendet man manchmal die sigmoide Transferfunktion auch auf das Ausgabeneuron an und berechnet als Ausgang

$$\widehat{y}_i = f(\mathbf{x}_i) = \mathbf{sig}(\mathbf{z}_i, \mathbf{w})$$

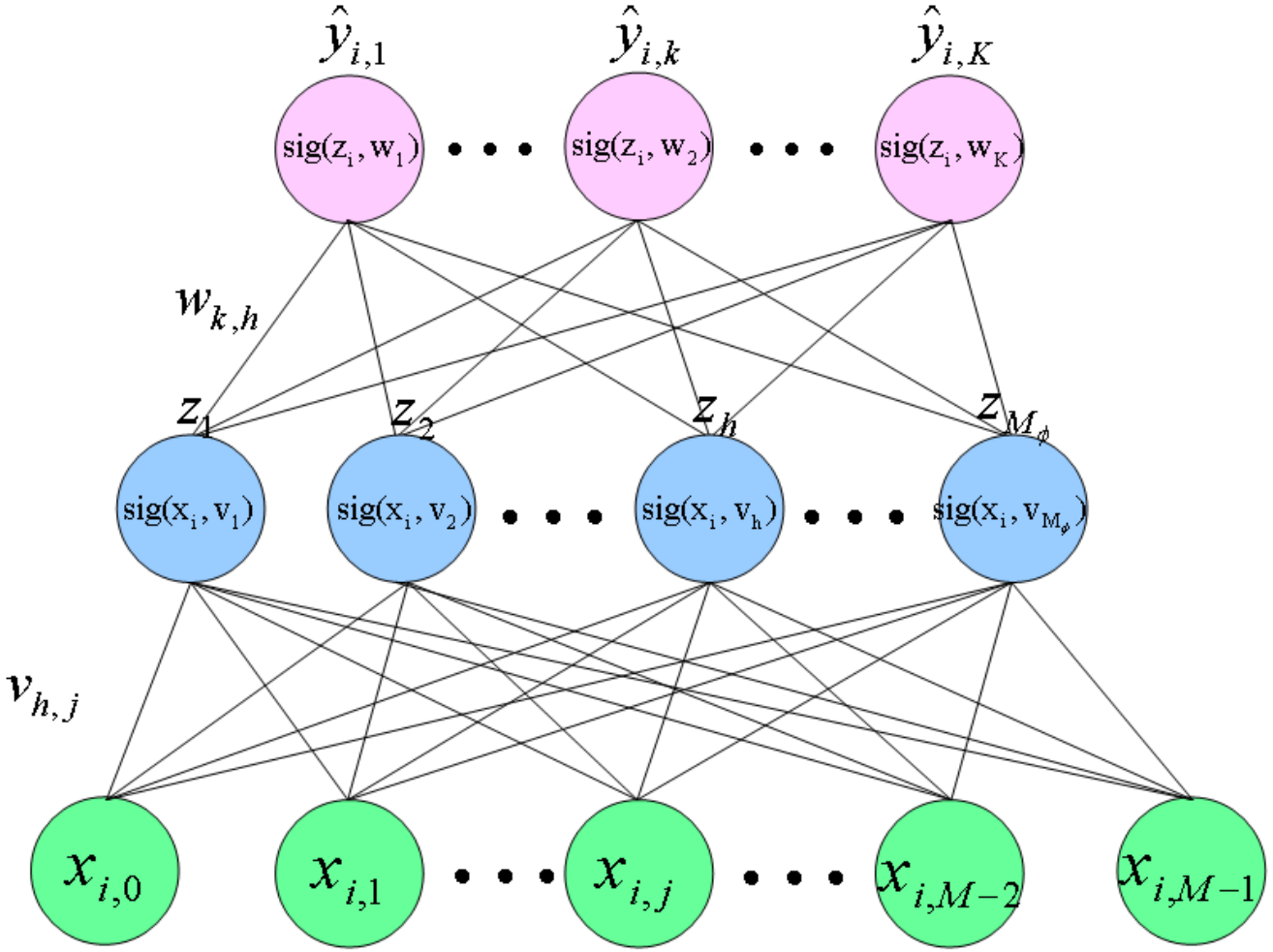
- Bei Problemen mit mehr Klassen, führt man mehrere Ausgangsneuronen ein. Zum Beispiel, um die K Ziffern zu klassifizieren

$$\widehat{y}_{i,k} = f_k(\mathbf{x}_i) = \mathbf{sig}(\mathbf{z}_i, \mathbf{w}_k) \quad k = 1, 2, \ldots, K$$

und man entscheidet sich für die Klasse l, so dass $l = \arg\max_k(\widehat{y}_{i,k})$

- Das vorgestellte Neuronale Netz wird Multi Layer Perceptron (MLP) genannt

Architektur eines Neuronalen Netzes mit mehreren Ausgängen



Lernen mit mehreren sigmoiden Ausgängen

- Ziel ist wieder die Minimierung des quadratischen Fehlers über alle Ausgänge

$$\text{cost}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} (y_{i,k} - f_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}, \mathbf{v}))^2$$

- Die least–squares Lösung für $\mathbf{v}$ kann nicht geschlossen formuliert werden
- Typischerweise werden sowohl $\mathbf{w}$ als auch $\mathbf{v}$ durch Gradientenabstieg optimiert

Adaption der Ausgangsgewichte

- Für die Gradienten der Kostenfunktion nach den Ausgangsgewichten ergibt sich für Muster i:

$$\frac{\partial \mathsf{cost}(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}, \mathbf{v})}{\partial w_{k,h}} = -2\delta_{i,k} z_{i,h}$$

  wobei

$$\delta_{i,k} = \mathsf{sig}'(\mathbf{z}_i, \mathbf{w}_k)(y_{i,k} - f_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}, \mathbf{v}))$$

  das zurückpropagierte Fehlersignal ist (error backpropagation).

- Entsprechende beim ADALINE ergibt sich für den musterbasierter Gradientenabstieg:

$$w_{k,h} \leftarrow w_{k,h} + \eta \delta_{i,k} z_{i,h}$$

Ableitung der sigmoiden Übertragungsfunktion nach dem Argument

Es lässt sich hierbei elegant schreiben

$$\mathrm{sig}'(in) = \frac{\exp(-in)}{(1+\exp(-in))^2} = \mathrm{sig}(in)(1-\mathrm{sig}(in))$$

Adaption der Eingangsgewichte

- Für die Gradienten der Kostenfunktion nach den Eingangsgewichten ergibt sich für Muster i:
- $$\frac{\partial \mathsf{cost}(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}, \mathbf{v})}{\partial v_{h,j}} = -2\delta_{i,h} x_{i,j}$$

  wobei der zurückpropagierte Fehler ist

$$\delta_{i,h} = \mathsf{sig}'(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h) \sum_{k=1}^{K} w_{k,h}\delta_{i,k}$$

- Entsprechende beim ADALINE ergibt sich für den musterbasierter Gradientenabstieg:

$$v_{h,j} \leftarrow v_{h,j} + \eta\delta_{i,h} x_{i,j}$$

Musterbasiertes Lernen

- Iteriere über alle Trainingsdaten
- sei $\mathbf{x}_i$ der aktuelle Datenpunkt
  - $\mathbf{x}_i$ wird angelegt und man berechnet $\mathbf{z}_i, \mathbf{y}_i$ (Vorwärtspropagation$\leftarrow$)
  - Durch Fehler-Rückpropagation (*error backpropagation*) werden die $\delta_{i,h}, \delta_{i,k}$ berechnet
  - Adaptiere

$$w_{k,h} \leftarrow w_{k,h} + \eta \delta_{i,k} z_{i,h}$$

$$v_{h,j} \leftarrow v_{h,j} + \eta \delta_{i,h} x_{i,j}$$

- Alle Operationen lokal: biologisch plausibel

Neuronales Netz und Überanpassung

- Im Vergleich zu konventionellen statistischen Modellen hat ein Neuronales Netz sehr viele freie Parameter, was zu Überanpassung führen kann
- Die beiden gebräuchlichsten Methoden damit umzugehen sind Regularisierung und Stopped-Training
- Wir diskutieren zunächst Regularisierung

Neuronale Netze: Regularisierung

- Wir führen Regularisierungsterme ein und erhalten

$$\text{cost}^{pen}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} (y_{i,k} - f_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}, \mathbf{v})^2 + \lambda_1 \sum_{h=0}^{M_\phi - 1} w_h^2 + \lambda_2 \sum_{h=0}^{H-1} \sum_{j=0}^{M} v_{h,j}^2$$

- Die Adaptionsregeln ändern sich zu (mit *weight decay term*)

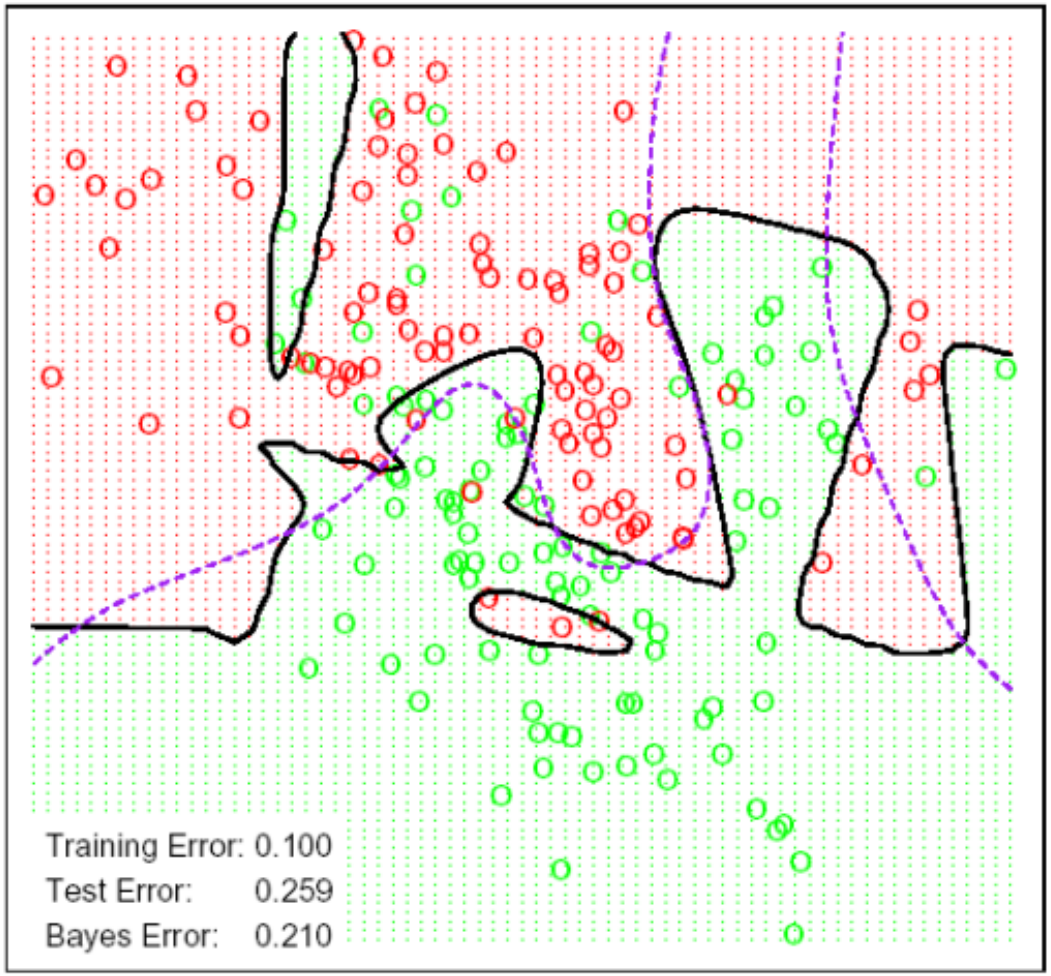
$$w_{k,h} \leftarrow w_{k,h} + \eta \left(\delta_{i,k} z_{i,h} - \lambda_1 w_{k,h} \right)$$

$$v_{h,j} \leftarrow v_{h,j} + \eta \left(\delta_{i,h} x_{i,j} - \lambda_2 v_{h,j} \right)$$

Künstliches Beispiel

- Daten von zwei Klassen (rote, grüne Kringel) werden generiert
- Die Klassen überlappen
- Die optimale Klassifikationsgrenze ist gestrichelt gezeigt
- Beim Neuronalen Netz ohne Regularisierung sieht man Überanpassung (stetige Kurve)

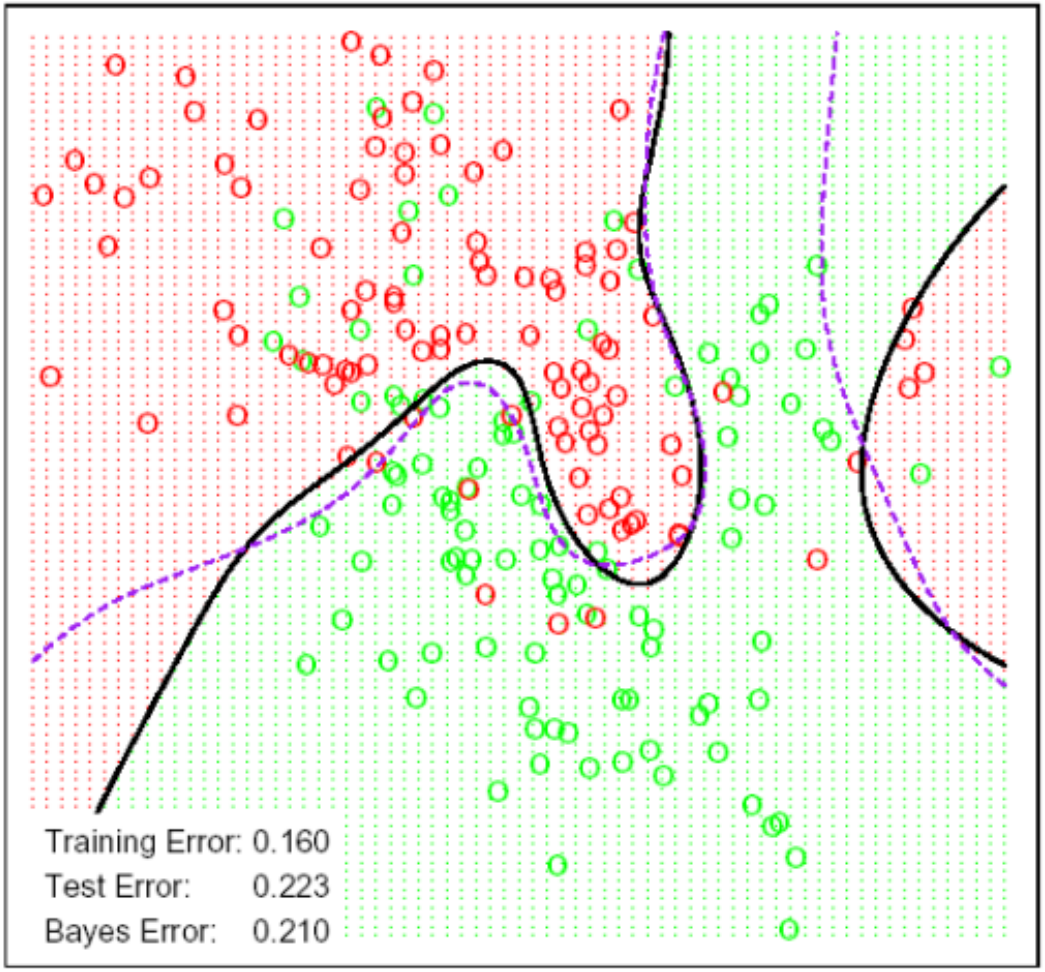
Neural Network - 10 Units, No Weight Decay



Künstliches Beispiel mit Regularisierung

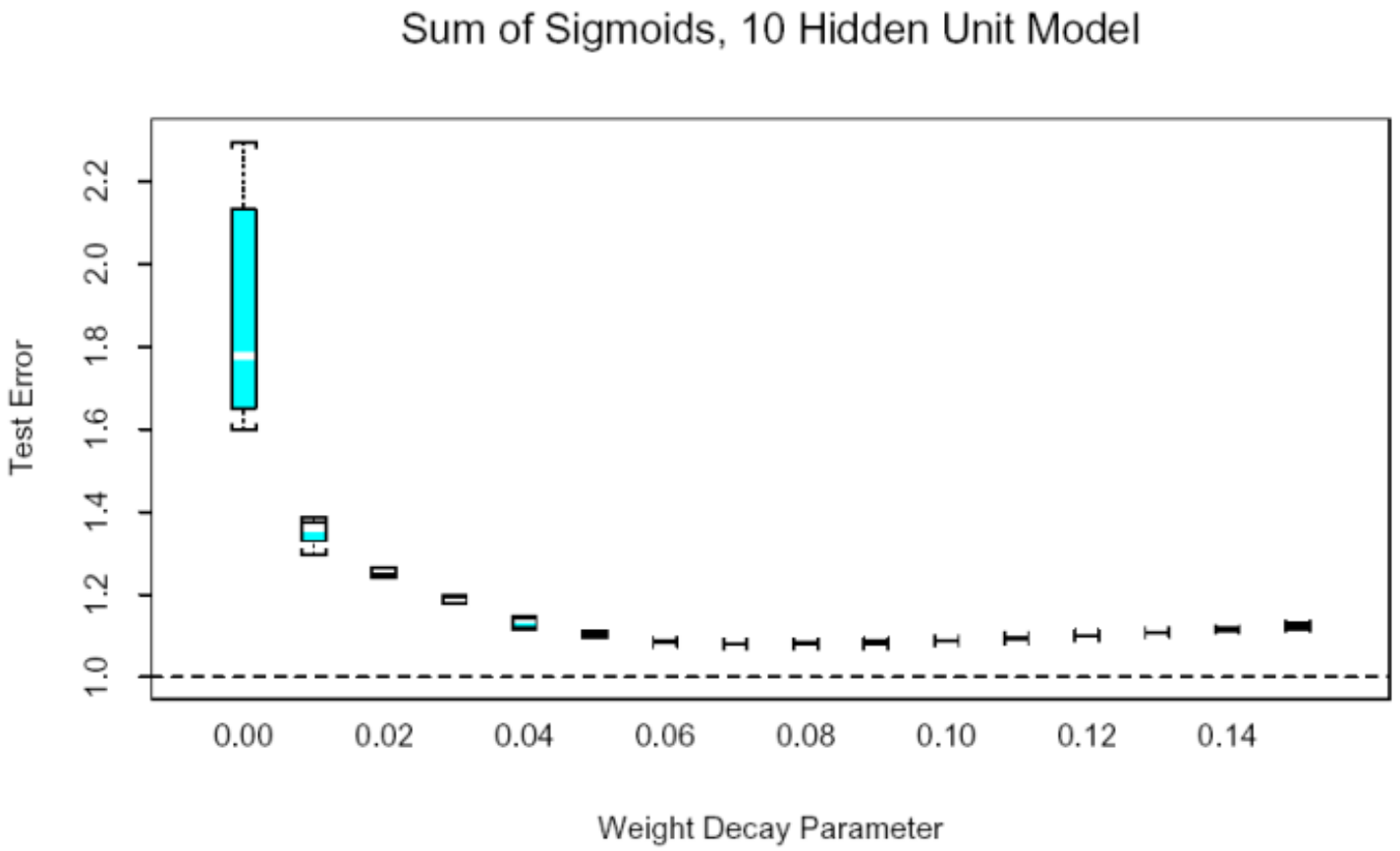
- Mit Regularisierung ($\lambda_1 = \lambda_2 = 0.2$) werden die wahren Klassengrenzen besser getroffen
- Der Trainingsfehler ist beim unregularisierten Netz kleiner, der Testfehler ist allerdings beim regularisierten Netz kleiner!

Neural Network - 10 Units, Weight Decay=0.02

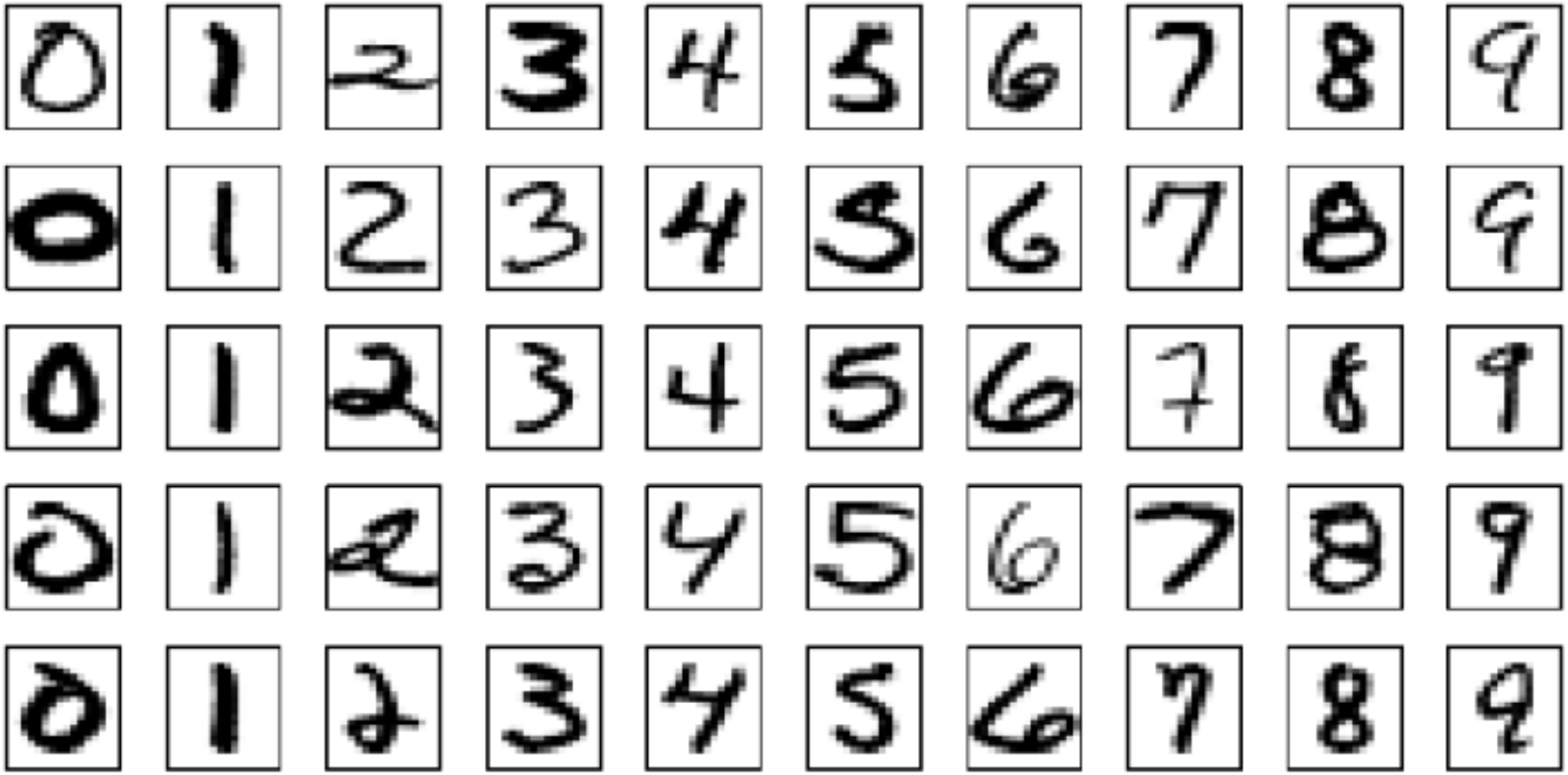


Optimaler Regularisierungsparameter

- Der Regularisierungsparameter wird zwischen 0 und 0.15 variiert
- Die vertikale Axe zeigt den Testfehler für viele unabhängige Experimente
- Der beste Testfehler wird bei einem Regularisierungsparameter von 0.07 erzielt
- Die Variation im Testfehler wird mit größerem Regularisierungsparameter geringer

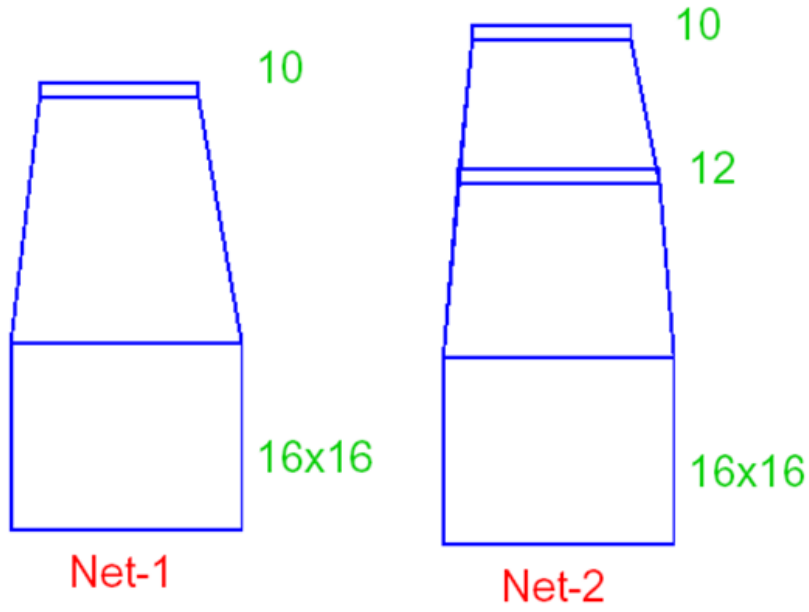

Sum of Sigmoids, 10 Hidden Unit Model
Test Error
1.0
1.2
1.4
1.6
1.8
2.0
2.2
0.00
0.02
0.04
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
Weight Decay Parameter

Erkennung handgeschriebener Ziffern



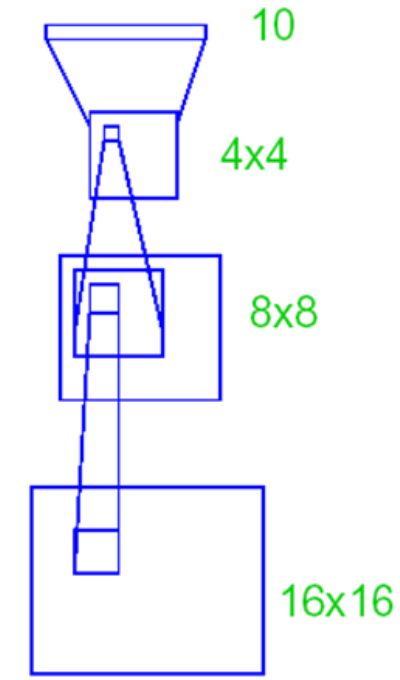
Erkennung handgeschriebener Ziffern mit Neuronalen Netzen

- Im Beispiel hier: 16×16 grauwertige Bilder; 320 Ziffern im Trainingssatz, 160 Ziffern im Testsatz
- Net-1: Keine versteckte Schicht: entspricht in etwa 10 Perzeptrons, eines für jede Ziffer
- Net-2: Eine versteckte Schicht mit 12 Knoten; voll-vernetzt (normales Neuronales Netz mit einer versteckten Schicht)


10
16x16
Net-1
10
12
16x16
Net-2

Neuronale Netze mit lokaler Verbindungsstruktur: Net-3

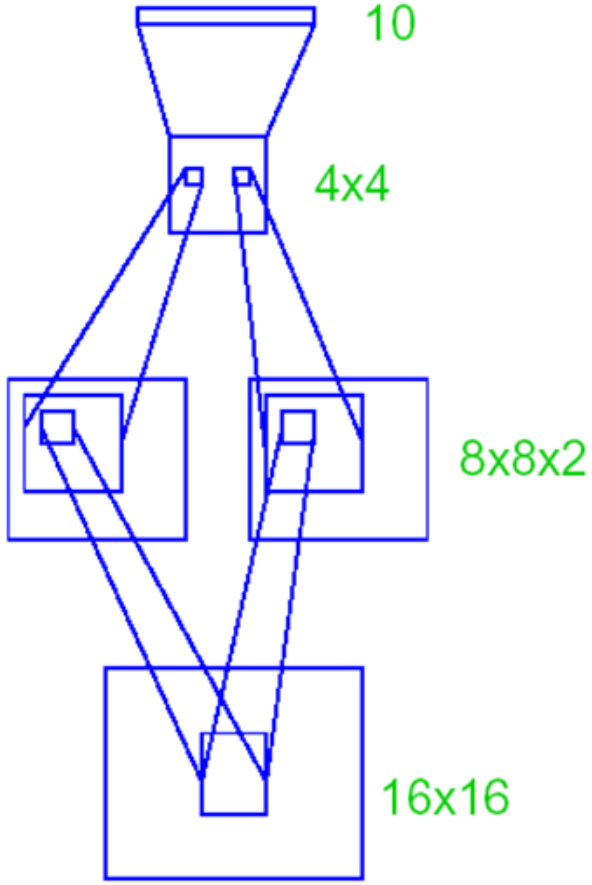
- Bei weiteren Varianten wurde die Komplexität anwendungsspezifisch eingeschränkt
- Net-3: Zwei versteckte Schichten mit lokaler Verbindungsstruktur: orientiert an den lokalen rezeptiven Feldern im Gehirn
  - Jedes der 8×8 Neuronen in der ersten versteckten Schicht ist nur mit 3×3 Eingangsneuronen verbunden aus einem rezeptivem Feld verbunden
  - In der zweiten versteckten Schicht ist jedes der 4×4 Neuronen mit 5×5 Neuronen der ersten versteckten Schicht verbunden
  - Net-3 hat weniger als 50% der Gewichte als Net-2 aber mehr Neuronen



Net-3
Local Connectivity

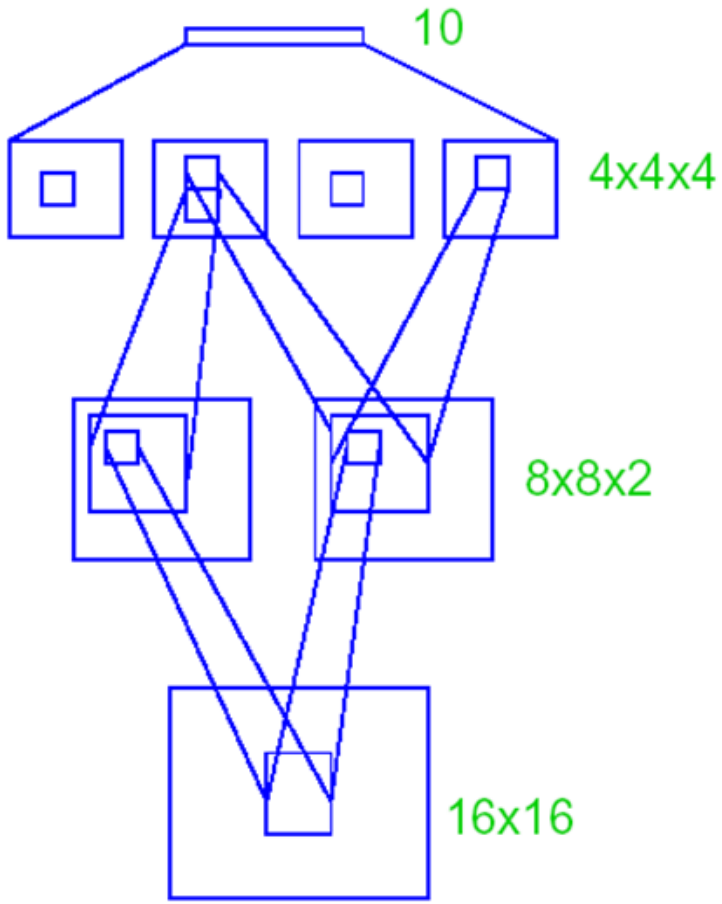
Neuronale Netze mit Weight-Sharing (Net-4)

- Net-4: Zwei versteckte Schichten mit lokaler Verbindungsstruktur und *weight-sharing*
- Alle rezeptiven Felder im linken 8×8 Block haben die gleichen Gewichte; ebenso alle rezeptiven Felder im rechten 8×8 Block
- Der 4×4 Block in der zweiten versteckten Schicht wie zuvor


10
4x4
8x8x2
16x16

Neuronale Netze mit Weight-Sharing (Net-5)

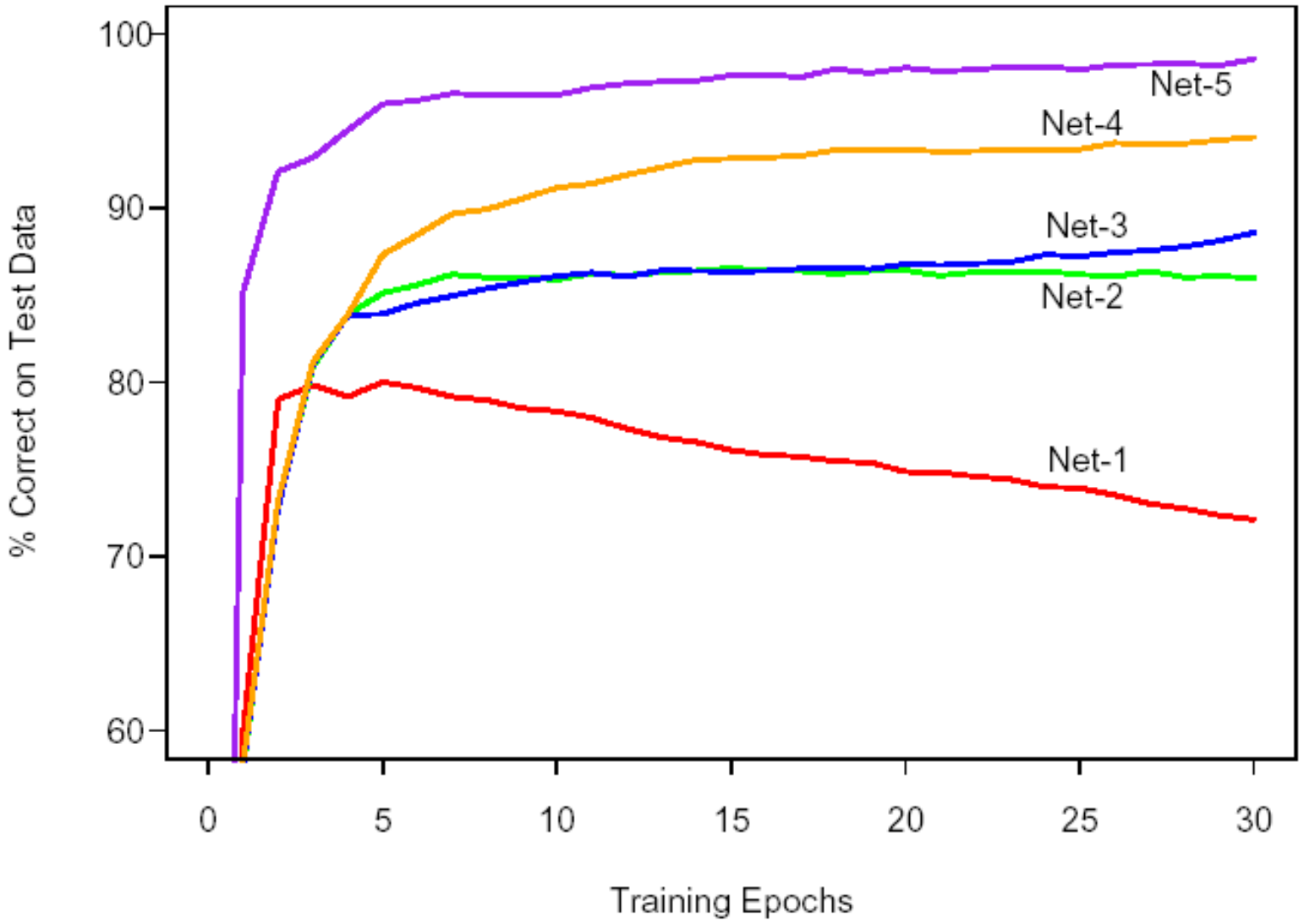
- Net-5: Zwei versteckte Schichten mit lokaler Verbindungsstruktur und zwei Ebenen von *weight-sharing*



Net-5

Lernkurven

- Ein Trainingsepoch bezeichnet den einmaligen Durchgang durch alle Daten
- Die nächste Abbildung zeigt die Performanz auf Testdaten
- Net-1: Man sieht die Überanpassung mit zunehmenden Trainingsiterationen
- Net-5: Zeigt die besten Resultate und zeigt keine Überanpassung


100
90
80
70
60
% Correct on Test Data
0
5
10
15
20
25
30
Training Epochs
Net-5
Net-4
Net-3
Net-2
Net-1

Statistiken

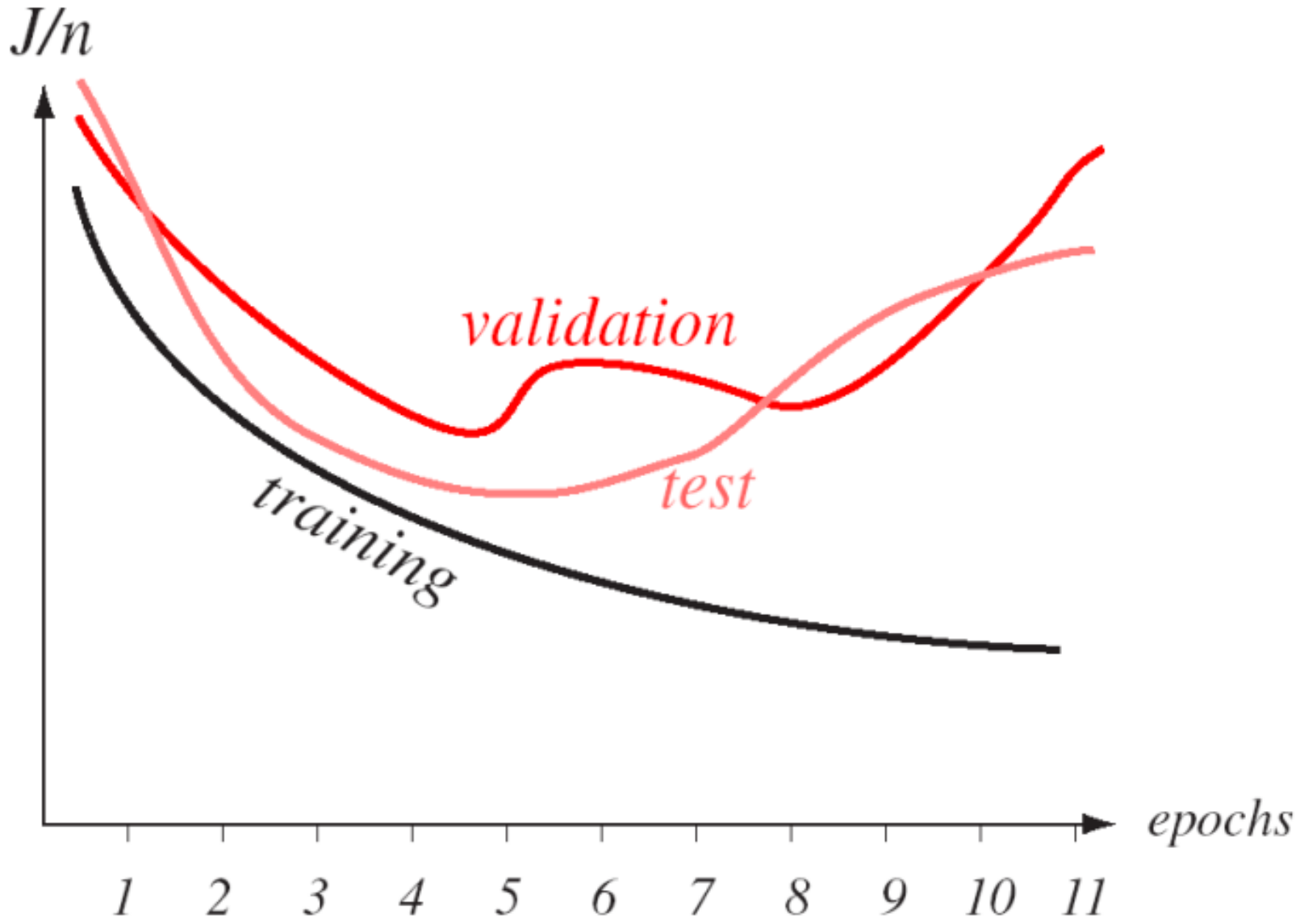
- Net-5 hat die beste Performanz. Die Anzahl der freien Parameter (1060) ist viel geringer als die Anzahl der Parameter (5194)

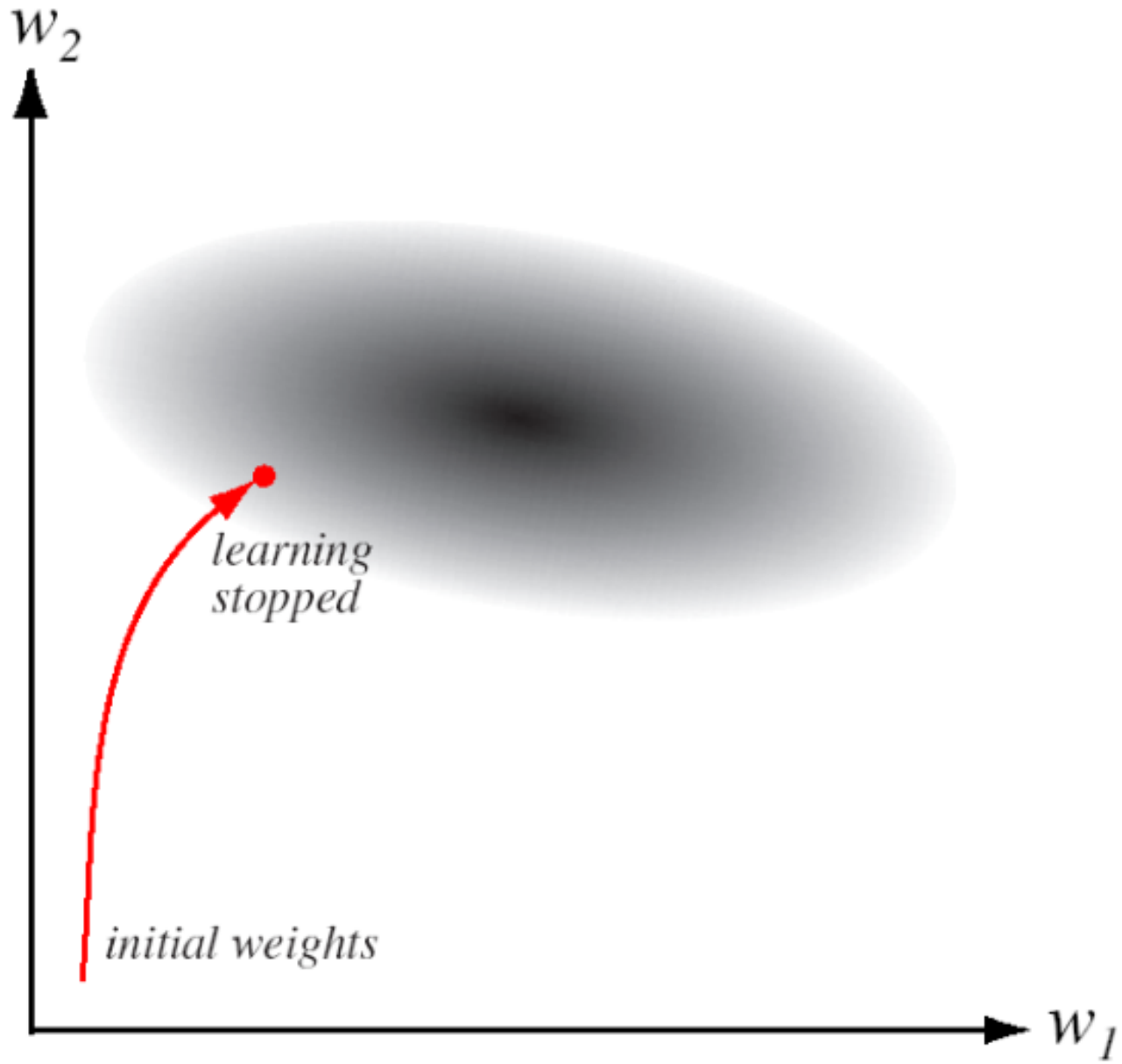
TABLE 11.1. *Test set performance of five different neural networks on a handwritten digit classification example (Le Cun, 1989).*

	Network Architecture	Links	Weights	% Correct
Net-1:	Single layer network	2570	2570	80.0%
Net-2:	Two layer network	3214	3214	87.0%
Net-3:	Locally connected	1226	1226	88.5%
Net-4:	Constrained network 1	2266	1132	94.0%
Net-5:	Constrained network 2	5194	1060	98.4%

Regularisierung mit Stopped-Training

- In der nächsten Abbildung sieht man typische Verläufe für Trainingssatz und Testsatz als Funktion der Trainingsiterationen
- Wie zu erwarten nimmt der Trainingsfehler mit der Trainingszeit stetig ab
- Wie zu erwarten nimmt zunächst der Testfehler ebenso ab; etwas überraschend gibt es ein Minimum und der Testfehler nimmt dann wieder zu
- Erklärung: Im Laufe des Trainings nehmen die Freiheitsgrade im Neuronalen Netz zu; wenn zu viele Freiheitsgrade zur Verfügung stehen, sieht man Überanpassung
- Man kann ein Neuronales Netz dadurch sinnvoll regularisieren, in dem man das Training rechtzeitig beendet (Regularisierung durch Stopped-Training)


J/n
validation
test
training
epochs
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11


w_2
learning
stopped
initial weights
w_1

Optimierung der Lernrate η

- Die Konvergenz kann durch die Größe von η beeinflusst werden
- In der nächsten Abbildung sieht man, dass wenn die Lernrate zu klein gewählt wird, es sehr lange dauern kann, bis das Optimum erreicht wird
- Wird die Lernrate zu gross gewählt, sieht an oszillatorisches Verhalten oder sogar instabiles Verhalten

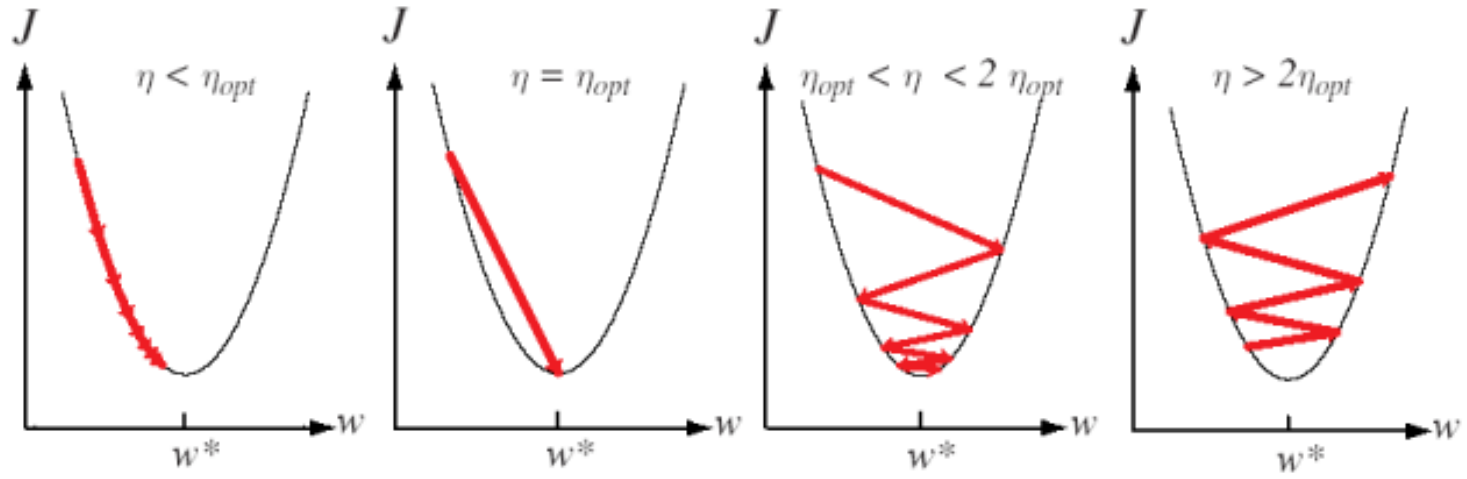


FIGURE 6.16. Gradient descent in a one-dimensional quadratic criterion with different learning rates. If $\eta < \eta_{opt}$, convergence is assured, but training can be needlessly slow. If $\eta = \eta_{opt}$, a single learning step suffices to find the error minimum. If $\eta_{opt} < \eta < 2\eta_{opt}$, the system will oscillate but nevertheless converge, but training is needlessly slow. If $\eta > 2\eta_{opt}$, the system diverges. From: Richard O. Duda, Peter E. Hart, and David G. Stork, *Pattern Classification*. Copyright © 2001 by John Wiley & Sons, Inc.

Zusammenfassung

- Neuronale Netze sind sehr leistungsfähig mit hoher Performanz
- Das Training ist aufwendig, aber man kann mit einiger Berechtigung sagen, dass das Neuronale Netz tatsächlich etwas "lernt", nämlich die optimale Repräsentation der Eingangsdaten in der versteckten Schicht
- Die Vorhersage ist schnell berechenbar
- Neuronale Netze sind universelle Approximatoren
- Neuronale Netze besitzen sehr gute Approximationseigenschaften
- Nachteil: das Training hat etwas von einer Kunst; eine Reihe von Größen müssen bestimmt werden (Anzahl der versteckten Knoten, Lernraten, Regularisierungsparameter, ...)
- Nachteil: Ein trainiertes Netz stellt ein lokales Optimum dar; Nicht-Eindeutigkeit der Lösung

- Aber: In einem neueren Benchmarktest hat ein (Bayes'sches) Neuronales Netz alle konkurrierenden Ansätze geschlagen!

Zeitreihenmodellierung

- Die nächste Abbildung zeigt eine Finanzdatenzeitreihe (DAX)
- Andere Zeitreihen von Interesse: Energiepreise, Stromverbrauch, Gasverbrauch, ...

DAX Performance-Index

01.06.07 17:45 Uhr • 7.987,85 +1,33 % [+104,81]	Enthaltene Werte: **30** Tages-Vol.: **9,12 Mrd.**	Typ: **Index** Börse: XETRA

Neuronale Netze in der Zeitreihenmodellierung

- Sei $x_t, t = 1, 2, \ldots$ die zeitdiskrete Zeitreihe von Interesse (Beispiel: DAX)
- Sei $u_t, t = 1, 2, \ldots$ eine weitere Zeitreihe, die Informationen über x_t liefert (Beispiel: Dow Jones)
- Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass x_t und u_t skalar sind; Ziel ist die Vorhersage des nächsten Werts der Zeitreihe
- Wir nehmen ein System an der Form

$$x_t = f(x_{t-1}, \ldots, x_{t-M_x}, u_{t-1}, \ldots, u_{t-M_u}) + \epsilon_t$$

mit i.i.d. Zufallszahlen $\epsilon_t, t = 1, 2, \ldots$. Diese modellieren unbekannte Störgrößen

Neuronale Netze in der Zeitreihenmodellierung (2)

- Wir modellieren durch ein Neuronales Netz

$$f(x_{t-1}, \ldots, x_{t-M_x}, u_{t-1}, \ldots, u_{t-M_u})$$

$$\approx f_{NN}(x_{t-1}, \ldots, x_{t-M_x}, u_{t-1}, \ldots, u_{t-M_u})$$

  und erhalten als Kostenfunktion

$$\text{cost} = \sum_{t=1}^{N} (x_t - f_{NN}(x_{t-1}, \ldots, x_{t-M_x}, u_{t-1}, \ldots, u_{t-M_u}))^2$$

- Das Neuronale Netz kann nun wie zuvor mit Backpropagation trainiert werden
- Das beschriebene Modell ist ein NARX Modell: **N**onlinear **A**uto **R**egressive Model with e**x**ternal inputs. Andere Bezeichnung: TDNN (time-delay neural network)

Rekurrente Neuronale Netze

- Wenn x_t nicht direkt gemessen werden kann, sondern nur verrauschte Messungen zur Verfügung stehen (Verallgemeinerung des linearen Kalman Filters), reicht einfaches Backpropagation nicht mehr aus, sondern man muss komplexere Lernverfahren verwenden:
- Backpropagation through time (BPTT)
- Real-Time Recurrent Learning (RTRL)
- Dynamic Backpropagation

APPENDIX

Appendix: Approximationsgenauigkeit Neuronaler Netze

- Dies ist der entscheidende Punkt: *wie viele* innere Knoten sind notwendig, um eine vorgegebene Approximationsgenauigkeit zu erreichen?
- Die Anzahle der inneren Knoten, die benötigt werden, um eine vorgegebene Approximationsgenauigkeit zu erreichen, hängt von der Komplexität der zu approximierenden Funktion ab.
- Barron führt für das Maß der Komplexität der zu approximierenden Funktion $f(x)$ die Größe C_f ein, welche definiert ist als

$$\int_{\Re^d} |w||\tilde{f}(w)|\, dw = C_f,$$

  wobei $\tilde{f}(w)$ die Fouriertransformation von $f(x)$ ist. C_f bestraft im Besonderen hohe Frequenzanteile.
- Die Aufgabe des Neuronalen Netzes ist es, eine Funktion $f(x)$ mit Komplexitätsmaß C_f zu approximieren.

- Der Eingangsvektor x ist aus $\Re^d$, das Neuronale Netz besitzt n innere Knoten und die Netzapproximation bezeichnen wir mit $f_n(x)$

- Wir definieren als Approximationsfehler AF den mittleren quadratischen Fehler zwischen $f(x)$ und $f_n(x)$

$$AF = \int_{B_r} (f(x) - f_n(x))^2 \mu(dx). \tag{1}$$

  μ ist ein beliebiges Wahrscheinlichkeitsmaß auf der Kugel $B_r = \{x : |x| \leq r\}$ mit Radius $r > 0$

- Barron hat nun gezeigt, dass für jede Funktion, für welche C_f endlich ist und für jedes $n \geq 1$ ein Neuronales Netz mit einer inneren Schicht existiert, so dass für den nach letzten Gleichung definierten Approximationsfehler AF_{Neur} gilt

$$AF_{Neur} \leq \frac{(2rC_f)^2}{n}. \tag{2}$$

- Dieses überraschende Resultat zeigt, dass die Anzahl der inneren Knoten *unabhängig* von der Dimension d des Eingangsraumes ist.

- Man beachte, dass für konventionelle Approximatoren mit festen Basisfunktionen der Approximationsfehler AF_{kon} exponentiell mit der Dimension ansteigt :

$$AF_{kon} \propto (1/n)^{2/d}.$$

- Für gewisse Funktionenklassen kann C_f exponentiell schnell mit der Dimension anwachsen, und es wäre somit nicht viel gewonnen. Barron zeigt jedoch, dass C_f für große Klassen von Funktionen nur recht langsam mit der Dimension (z.B. proportional) wächst.

- Quellen: Tresp, V. (1995). Die besonderen Eigenschaften Neuronaler Netze bei der Approximation von Funktionen. *Künstliche Intelligenz,* Nr. 4.

  A. Barron. Universal Approximation Bounds for Superpositions of a Sigmoidal Function. *IEEE Trans. Information Theory,* Vol. 39, Nr. 3, Seite 930-945, Mai 1993.