Inhalte der Vorlesung

- Wiederholung Neuronale Netze (NN)
- Einführung spezieller Architekturen Neuronaler Netze
- Anwendung von Neuronalen Netzen zur Lösung zur Datenanalyse
- Verschiedene Architekturen Neuronaler Netze

Ziele der Vorlesung - Welche Fragen sollen beantwortet werden?

- Was genau machen Neuronale Netze?
- Wie kann ich mir das vorstellen?
- Was ist überhaupt ”Deep Learning”?
- Welche verschiedenen Architekturen neuronaler Netze gibt es?
- Muss es immer Deep Learning sein?

[https://xkcd.com/2451/]

Mathematischer Refresher – Vektoren und Matrizen

- **Vektor**: Spaltenvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ mit d Komponenten

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \\ x_d \end{pmatrix} \tag{1}$$

- **Zeilenvektor**: $\mathbf{x}^T = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ (Transponiert)
- **Matrix**: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit m Zeilen und n Spalten

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{2}$$

Mathematischer Refresher – Grundoperationen

- **Skalarprodukt** (Dot Product): Für $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$

$$\mathbf{x}^T\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{d} x_i y_i \tag{3}$$

- **Matrix-Vektor-Multiplikation**: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m, \quad y_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \tag{4}$$

- **Matrix-Matrix-Multiplikation**: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times k}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{k \times n}$

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad c_{ij} = \sum_{\ell=1}^{k} a_{i\ell} b_{\ell j} \tag{5}$$

- **Elementweise Operationen**: Hadamard-Produkt $\mathbf{A} \odot \mathbf{B}$

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B})_{ij} = a_{ij} \cdot b_{ij} \tag{6}$$

Mathematischer Refresher – Normen und Abstände

- **Euklidische Norm**: $||\mathbf{x}||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} x_i^2}$ (Länge des Vektors)
- **L1-Norm**: $||\mathbf{x}||_1 = \sum_{i=1}^{d} |x_i|$ (Manhattan-Distanz)
- **Unendlich-Norm**: $||\mathbf{x}||_\infty = \max_i |x_i|$ (Maximum-Norm)
- **Frobenius-Norm** (für Matrizen): $||\mathbf{A}||_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2}$
- **Einheitsvektor**: $\mathbf{u}$ mit $||\mathbf{u}||_2 = 1$
- **Orthogonale Vektoren**: $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$ wenn $\mathbf{x}^T\mathbf{y} = 0$
- **Linearkombination**: $\mathbf{y} = \alpha_1\mathbf{x}_1 + \alpha_2\mathbf{x}_2 + \ldots + \alpha_k\mathbf{x}_k$

Mathematischer Refresher – Differentiation und Gradienten

- **Partielle Ableitung**: Für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x})}{h} \tag{7}$$

- **Gradient**: Vektor aller partiellen Ableitungen

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \\ \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{8}$$

- **Kettenregel**: Für $f(g(x))$

$$\frac{d}{dx} f(g(x)) = f'(g(x)) \cdot g'(x) \tag{9}$$

- **Multivariable Kettenregel**: Für $f(\mathbf{u}(\mathbf{x}))$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_j \frac{\partial f}{\partial u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \nabla_{\mathbf{u}} f \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \tag{10}$$

Mathematischer Refresher – Wichtige Funktionen und Eigenschaften

- **Exponentialfunktion**: e^x, Ableitung: $\frac{d}{dx}e^x = e^x$
- **Logarithmus**: $\ln(x)$, Ableitung: $\frac{d}{dx}\ln(x) = \frac{1}{x}$
- **Sigmoid-Funktion**: $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$

$$\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x)) \tag{11}$$

- **Quadratische Funktion**: $f(x) = ax^2 + bx + c$, Ableitung: $f'(x) = 2ax + b$
- **Produktregel**: $(fg)' = f'g + fg'$
- **Summenregel**: $(f + g)' = f' + g'$
- **Konstante Faktoren**: $(cf)' = cf'$ für Konstante c

Mathematische Notation – Überblick für diese Vorlesung

- **Skalare**: Kleinbuchstaben a, b, c, x, y, z
- **Vektoren**: Fettgedruckte Kleinbuchstaben $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{w}, \mathbf{b}$
- **Matrizen**: Fettgedruckte Großbuchstaben $\mathbf{A}, \mathbf{W}, \mathbf{X}$
- **Mengen**: Kalligrafische Buchstaben D, M, X
- **Funktionen**: f, g, h, L (Verlustfunktion)
- **Aktivierungsfunktionen**: $\sigma, \mathrm{ReLU}, \tanh$
- **Indizes**:
  - i, j, k: Datenindizes, Neuron-Indizes
  - (ℓ): Schicht-Index, z.B. $\mathbf{W}^{(\ell)}$
  - (t): Zeit-/Iterationsindex, z.B. $\mathbf{w}^{(t)}$
- **Wahrscheinlichkeiten**: $P, p, \mathbb{E}[\cdot]$ (Erwartungswert)
- **Approximation**: $\approx$, Proportionalität: $\propto$

Was sind Neuronale Netze und was ist Deep Learning?

- Abstrakt: Verkettung nichtlinearer Abbildungen
- Die Parameter dieser Abbildungen wird mit vorhandenen Daten "gelernt"
- Verschiedene Optimierungsverfahren zur Festlegung der "besten" Parameter

[https://xkcd.com/1838/]

Warum funktionieren Neuronale Netze? – Mathematische Intuition

- **Grundproblem**: Finde eine Funktion $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^k$, die Eingaben $\mathbf{x}$ auf gewünschte Ausgaben $\mathbf{y}$ abbildet
- **Funktionsapproximation**: Neuronale Netze sind universelle Funktionsapproximatoren
- **Komposition einfacher Funktionen**:

$$f(\mathbf{x}) = f_L \circ f_{L-1} \circ \ldots \circ f_2 \circ f_1(\mathbf{x}) \tag{12}$$

- Jede Schicht f_i führt eine **affine Transformation** gefolgt von **Nichtlinearität** aus:

$$f_i(\mathbf{x}) = \sigma_i(\mathbf{W}_i\mathbf{x} + \mathbf{b}_i) \tag{13}$$

- **Warum Nichtlinearität wichtig ist**: Ohne sie wäre das gesamte Netz nur eine lineare Transformation

$$\mathbf{W}_L(\mathbf{W}_{L-1}(\ldots(\mathbf{W}_1\mathbf{x}))) = (\mathbf{W}_L\mathbf{W}_{L-1}\ldots\mathbf{W}_1)\mathbf{x} = \mathbf{W}_{\text{eff}}\mathbf{x} \tag{14}$$

Warum funktionieren Neuronale Netze? – Universal Approximation Theorem

- **Universal Approximation Theorem** [1, 2]:
- Ein Feedforward-Netz mit einer versteckten Schicht kann jede stetige Funktion auf einem kompakten Definitionsbereich beliebig genau approximieren
- **Mathematische Formulierung**: Sei $\sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine nicht-konstante, beschränkte und monotone Aktivierungsfunktion. Dann kann für jede stetige Funktion $g : [0, 1]^d \to \mathbb{R}$ und $\epsilon > 0$ eine Funktion

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \sigma(\mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + b_i) \tag{15}$$

gefunden werden, sodass $|F(\mathbf{x}) - g(\mathbf{x})| < \epsilon$ für alle $\mathbf{x} \in [0, 1]^d$
- **Praktische Bedeutung**:
  - Theoretisch können neuronale Netze jede Funktion lernen
  - Problem: Anzahl der benötigten Neuronen kann exponentiell wachsen
  - Deep Learning: Mehr Schichten können effizienter sein als breitere Netze

Die Mathematik des Lernens – Warum Gradientenabstieg funktioniert

- **Optimierungsproblem**: Minimiere Verlustfunktion $L(\theta)$ über Parameter θ
- **Gradientenabstieg basiert auf Taylor-Entwicklung**:

$$L(\theta + \Delta\theta) \approx L(\theta) + \nabla L(\theta)^T \Delta\theta \tag{16}$$

- Um L zu minimieren, wähle $\Delta\theta = -\eta \nabla L(\theta)$ (mit $\eta > 0$)
- **Warum funktioniert das?** Für kleine η:

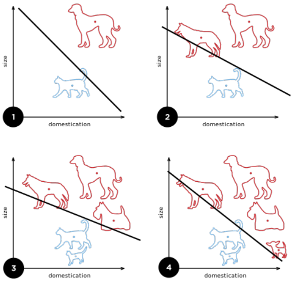
$$L(\theta - \eta \nabla L(\theta)) \approx L(\theta) - \eta ||\nabla L(\theta)||^2 \leq L(\theta) \tag{17}$$

- **Konvergenz-Eigenschaften**:
  - Für konvexe Funktionen: Garantierte Konvergenz zum globalen Minimum
  - Für nicht-konvexe Funktionen (neuronale Netze): Konvergenz zu lokalen Minima
  - **Überraschung**: Lokale Minima sind oft ”gut genug” für praktische Anwendungen

Konstruktion von Neuronalen Netzen: Single-Layer-Perceptron

- Einfacher binärer Klassifikator mit Aktivierungsfunktion

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b \geq \theta, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{18}$$



- mit dem Gewichtsvektor $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$, Eingabevektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, Bias $b \in \mathbb{R}$ und Schwellwert θ
- Das Skalarprodukt: $\mathbf{w}^T\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{d} w_i x_i$
- Entscheidungsgrenze im 2D-Fall ($d = 2$): Gerade mit Gleichung

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = \theta \tag{19}$$

$$x_2 = -\frac{w_1}{w_2} x_1 - \frac{b - \theta}{w_2} \tag{20}$$

- Geometrische Interpretation: Hyperebene teilt den $\mathbb{R}^d$ in zwei Halbräume
- Linear separierbare Probleme: Klassen können durch Hyperebene getrennt werden

Training von Neuronalen Netzen: Single-Layer-Perceptron

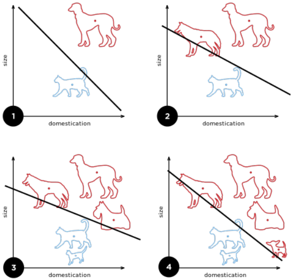
- Gegeben: Trainingsdatensatz $D = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$ mit $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \{-1, +1\}$
- Perceptron-Lernregel [3]:

$$\mathbf{w}^{(t+1)} = \mathbf{w}^{(t)} + \eta \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in M^{(t)}} y_i \mathbf{x}_i \tag{21}$$

- Fehlklassifizierungen: $M^{(t)} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : y_i(\mathbf{w}^{(t)T}\mathbf{x}_i + b) \leq 0\}$
- Verlustfunktion (Perceptron-Verlust):

$$L(\mathbf{w}, b) = \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in M} -y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b) \tag{22}$$

- Konvergenz-Theorem: Für linear separierbare Daten konvergiert der Algorithmus in endlich vielen Schritten
- Margin $\gamma = \min_i \frac{y_i(\mathbf{w}^{*T}\mathbf{x}_i + b^*)}{||\mathbf{w}^*||_2}$ bestimmt Konvergenzgeschwindigkeit



Training von Neuronalen Netzen: Gradientenabstieg

- **Gradientenabstieg** (Gradient Descent) - allgemeines Optimierungsverfahren
- Iterative Aktualisierung der Parameter:

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \eta \nabla_\theta L(\theta^{(t)}) \tag{23}$$

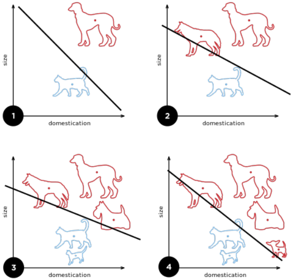
- $\eta > 0$: Lernrate (Schrittweite), $\boldsymbol{\theta}$: Parametervektor
- Gradient einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T \tag{24}$$

- Gradient zeigt in Richtung des steilsten Anstiegs $\Rightarrow$ $-\nabla f$ zeigt zum lokalen Minimum
- Für Perceptron-Verlust:

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in M} -y_i x_{ij} \tag{25}$$

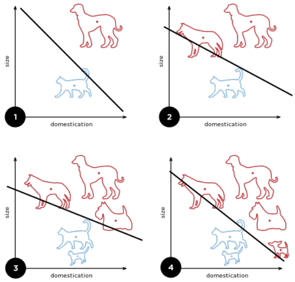
$$\nabla_{\mathbf{w}} L = - \sum_{(\mathbf{x}_i, y_i) \in M} y_i \mathbf{x}_i \tag{26}$$



Training von Neuronalen Netzen: Single-Layer-Perceptron

- Daraus folgt:

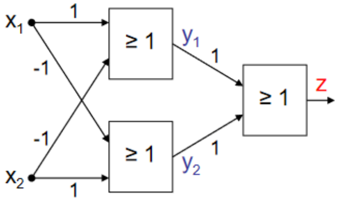
$$\nabla f(w) = \left(-\sum_{x \in F(w)} x_1, -\sum_{x \in F(w)} x_2, \ldots, -\sum_{x \in F(w)} x_n \right) = -\sum_{x \in F(w)} x \qquad (27)$$



Grenzen des Single-Layer-Perceptrons – Das XOR-Problem

- **Fundamentale Limitation**: Perceptron kann nur linear separierbare Probleme lösen
- **XOR-Problem** [4]:

x_1	x_2	XOR
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0



- **Mathematischer Beweis der Unmöglichkeit**:
- Angenommen, es existiert $\mathbf{w} = (w_1, w_2)$ und b, sodass:

$$w_1 \cdot 0 + w_2 \cdot 1 + b > 0 \quad \text{(für (0,1))} \tag{28}$$

$$w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 0 + b > 0 \quad \text{(für (1,0))} \tag{29}$$

$$w_1 \cdot 0 + w_2 \cdot 0 + b \leq 0 \quad \text{(für (0,0))} \tag{30}$$

$$w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1 + b \leq 0 \quad \text{(für (1,1))} \tag{31}$$

- Aus (1) und (3): $w_2 > -b \geq 0 \Rightarrow w_2 > 0$

Konstruktion von Neuronalen Netzen: Multi-Layer-Perceptron

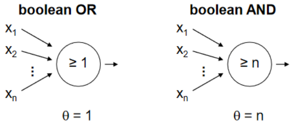
- **Lösung des XOR-Problems**: Mehrschichtige Netze!
- **Komposition von Hyperebenen**:
  - Erste Schicht: Erzeugt mehrere lineare Entscheidungsgrenzen
  - Zweite Schicht: Kombiniert diese zu komplexeren Formen
- **Mathematische Intuition für XOR**:

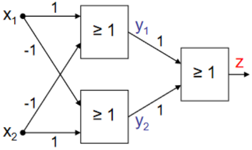
$$h_1 = \sigma(x_1 + x_2 - 0.5) \quad \text{(OR-Gate)} \tag{32}$$

$$h_2 = \sigma(-x_1 - x_2 + 1.5) \quad \text{(NAND-Gate)} \tag{33}$$

$$\text{XOR} = \sigma(h_1 + h_2 - 1.5) \tag{34}$$

- **Universal Approximation**: Mit einer versteckten Schicht können beliebige stetige Funktionen approximiert werden
- **Tiefe vs. Breite**: Tiefere Netze können effizienter sein als breitere





Training von Neuronalen Netzen: Multi-Layer-Perceptron

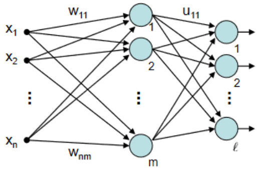
- **Multilayer Perceptron (MLP)**: Neuronales Netz mit versteckten Schichten
- Forward-Pass für 2-Schicht-Netz:

$$\mathbf{z}^{(1)} = \mathbf{W}^{(1)}\mathbf{x} + \mathbf{b}^{(1)} \quad \text{(lineare Transformation)} \tag{35}$$

$$\mathbf{a}^{(1)} = \sigma(\mathbf{z}^{(1)}) \quad \text{(Aktivierung)} \tag{36}$$

$$\mathbf{z}^{(2)} = \mathbf{W}^{(2)}\mathbf{a}^{(1)} + \mathbf{b}^{(2)} \tag{37}$$

$$\hat{\mathbf{y}} = \sigma(\mathbf{z}^{(2)}) \tag{38}$$



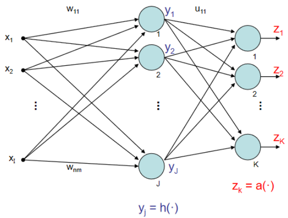
- Mean Squared Error (MSE) Loss:

$$L(\mathbf{W}, \mathbf{b}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} ||\hat{\mathbf{y}}_i - \mathbf{y}_i||_2^2 \tag{39}$$

- Problem der Heaviside-Funktion: $H(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$ nicht differenzierbar
- Lösung: Glatte Aktivierungsfunktionen (Sigmoid, Tanh, ReLU)

Training von Neuronalen Netzen: Multi-Layer-Perceptron

- $$f(w) = \sum_{x \in B} ||g(w; x) - g^*(x)||^2 \quad \rightarrow \min \tag{40}$$
- mit dem Output des Netzes $g(w; x)$ und dem erwarteten Output $g^*(x)$
- $$u^{(t+1)} = u^t - \gamma \nabla_u f(w_t, u_t) \tag{41}$$
  $$w^{(t+1)} = w^t - \gamma \nabla_w f(w_t, u_t) \tag{42}$$
  (43)



- x_i: Inputs
- y_j: Werte nach dem ersten Layer
- z_k: Werte nach dem zweiten Layer

Backpropagation-Algorithmus: Mathematische Grundlagen

- **Backpropagation** [5]: Effizienter Algorithmus zur Berechnung von Gradienten in neuronalen Netzen
- Anwendung der Kettenregel der Differentiation:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(l)}} = \frac{\partial L}{\partial z_j^{(l)}} \cdot \frac{\partial z_j^{(l)}}{\partial w_{ij}^{(l)}} \tag{44}$$

- Definition der **lokalen Gradienten** (Deltas):

$$\delta_j^{(l)} = \frac{\partial L}{\partial z_j^{(l)}} \tag{45}$$

- Rekursive Berechnung (rückwärts durch das Netz):

$$\delta_j^{(L)} = \frac{\partial L}{\partial a_j^{(L)}} \cdot \sigma'(z_j^{(L)}) \quad \text{(Output-Schicht)} \tag{46}$$

$$\delta_j^{(l)} = \left(\sum_k \delta_k^{(l+1)} w_{jk}^{(l+1)}\right) \sigma'(z_j^{(l)}) \quad \text{(versteckte Schichten)} \tag{47}$$

- Gradientenberechnung:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(l)}} = \delta_j^{(l)} \cdot a_i^{(l-1)} \tag{48}$$

Training von Neuronalen Netzen: Multi-Layer-Perceptron

- analog zum SLP nutzen wir den Gradienten zur Minimierung des Fehlers

$$\nabla f(w,u) = \sum_{x,z^* \in B} \nabla f(w,u;x,z^*)$$

$$\frac{\partial f(w,u)}{\partial u_{jk}} = \sum_{x,z^* \in B} \frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial u_{jk}}$$

$$\frac{\partial f(w,u)}{\partial w_{ij}} = \sum_{x,z^* \in B} \frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial w_{ij}}$$

- mit den Sigmoid-Aktivierungsfunktionen:

$$a(x) = h(x) = \frac{1}{1+e^{-x}} \text{ mit der Ableitung: } \frac{\mathrm{d}a(x)}{\mathrm{d}x} = a(x) \cdot (1 - a(x))$$

- mit der Kettenregel für Ableitungen:

$$[p(q(x))]' = p'(q(x)) \cdot q'(x)$$

- ergibt sich für den Gradienten von f:

$$f(w,u;x,z^*) = \sum_{k=1}^{K} [a(u_k y) - z_k^*]^2$$

Training von Neuronalen Netzen: Multi-Layer-Perceptron

- ergibt sich für den Gradienten von f:

$$f(w,u;x,z^*) = \sum_{k=1}^{K} [a(u_k y) - z_k^*]^2$$

$$\frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial u_{jk}} = \sum_{x,z^* \in B} \frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial u_{jk}}$$

$$= 2[a(u'_k y) - z_k^*] \cdot a'(u'_k y) \cdot y_j$$

$$= 2[a(u'_k y) - z_k^*] \cdot a(u'_k y \cdot (1 - a(u'_k y))) \cdot y_j$$

$$= \underbrace{2[z_k - z_k^*] \cdot z_k \cdot (1 - z_k)}_{\text{Fehlerterm } \delta_k} \cdot y_j$$

$$\frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial w_{ij}} = 2 \sum_{k=1}^{K} (a(u'_k y) - z_k^*) \cdot a'(u'_k y) \cdot u_{jk} \cdot h'(w'_j x) x_i$$

$$= 2 \sum_{k=1}^{K} (z_k - z_k^*) \cdot z_k \cdot (1 - z_k) \cdot u_{jk} \cdot y_j (1 - y_j) x_i$$

$$= x_i y_j (1 - y_j) \underbrace{2 \sum_{k=1}^{K} (z_k - z_k^*) \cdot z_k \cdot (1 - z_k)} \cdot u_{jk} \cdot y_j$$

Verallgemeinerung Training von Neuronalen Netzen: M-Layer-Perceptron

- bei einem Neuronalen Netz mi L Layern $S_1, S_2, ..., S_L$
- den Gewichten w_{ij} in der Matrix W
- dem output eines Neurons o_j
- ist der Fehlerterm:

$$\delta_j = \begin{cases} o_j \cdot (1 - o_j) \cdot (o_j - z_j*) & \text{if } j \in S_L, \text{output Neuron} \\ o_j \cdot (1 - o_j) \cdot \sum_{k \in S_{m+1}} \delta_k \cdot w_{jk} & \text{if } j \in S_m \text{and } m < L \end{cases}$$

- Der Korrekturterm für die einzelnen Gewichte ist dann:

$$w_{ij}^{(t+1)} = w_{ij}^{t} - \gamma \cdot o_i \cdot \delta_j \quad (50)$$

Fortgeschrittene Optimierungsalgorithmen

- **Momentum**: Beschleunigung in konsistente Richtungen

$$\mathbf{v}^{(t+1)} = \beta \mathbf{v}^{(t)} + \eta \nabla L(\theta^{(t)}) \tag{51}$$
$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \mathbf{v}^{(t+1)} \tag{52}$$

- **ADAM** [6] (Adaptive Moment Estimation) - Kombination aus Momentum und RMSprop:

$$m_w^{(t+1)} = \beta_1 m_w^{(t)} + (1 - \beta_1)\nabla_w L^{(t)} \quad \text{(1. Moment)} \tag{53}$$
$$v_w^{(t+1)} = \beta_2 v_w^{(t)} + (1 - \beta_2)(\nabla_w L^{(t)})^2 \quad \text{(2. Moment)} \tag{54}$$
$$\hat{m}_w^{(t)} = \frac{m_w^{(t+1)}}{1 - \beta_1^{t+1}} \quad \text{(Bias-Korrektur)} \tag{55}$$
$$\hat{v}_w^{(t)} = \frac{v_w^{(t+1)}}{1 - \beta_2^{t+1}} \quad \text{(Bias-Korrektur)} \tag{56}$$
$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_w^{(t)}} + \epsilon} \hat{m}_w^{(t)} \tag{57}$$

- Typische Hyperparameter: $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$, $\epsilon = 10^{-8}$

Warum "Deep" Learning? – Mathematische Rechtfertigung für tiefe Netze

- **Representation Learning**: Tiefere Netze lernen hierarchische Merkmalsdarstellungen
- **Mathematischer Vorteil**: Exponentiell weniger Parameter für dieselbe Expressivität
- **Beispiel - Parität-Funktion**: Prüfe, ob eine ungerade Anzahl von Bits gesetzt ist
  - Flaches Netz: Benötigt $O(2^n)$ versteckte Neuronen
  - Tiefes Netz: Benötigt nur $O(n)$ Neuronen in $O(\log n)$ Schichten
- **Kompositionelle Struktur**: Viele reale Funktionen haben hierarchische Struktur

$$f(\mathbf{x}) = g_L(g_{L-1}(\ldots g_2(g_1(\mathbf{x}))\ldots)) \tag{58}$$

- **Feature Learning**: Jede Schicht ℓ lernt Features der Form:

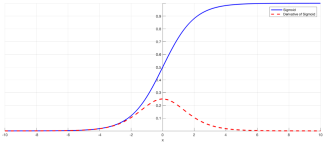
$$\mathbf{h}^{(\ell)} = \sigma(\mathbf{W}^{(\ell)}\mathbf{h}^{(\ell-1)} + \mathbf{b}^{(\ell)}) \tag{59}$$

- **Intuition**:
  - Untere Schichten: Einfache Features (Kanten, Texturen)
  - Mittlere Schichten: Kombinationen (Formen, Teile)
  - Obere Schichten: Komplexe Konzepte (Objekte, Semantik)

Das Vanishing Gradient Problem – Warum tiefe Netze schwer zu trainieren sind

- **Problem**: Bei tiefen Netzen werden Gradienten exponentiell kleiner
- **Mathematische Analyse**: Für Sigmoid-Aktivierung $\sigma'(x) \leq 0.25$
- Gradient in Schicht ℓ proportional zu:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}^{(\ell)}} \propto \prod_{i=\ell+1}^{L} \mathbf{W}^{(i)} \sigma'(\mathbf{z}^{(i)}) \tag{60}$$



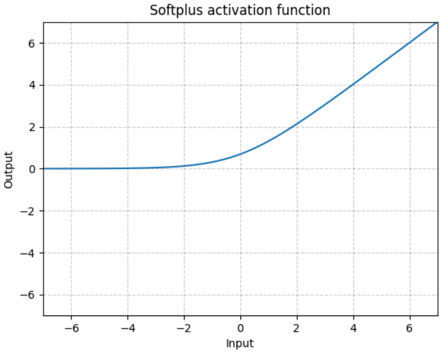
- Für $L - \ell$ Schichten: Faktor $\leq (0.25)^{L-\ell}$
- **Beispiel**: Bei 10 Schichten kann Gradient um Faktor 10^{-6} schrumpfen!
- **Lösungsansätze**:
  - ReLU-Aktivierungen: $\mathrm{ReLU}'(x) = 1$ für $x > 0$
  - Residual Connections (ResNets)
  - Normalization (BatchNorm, LayerNorm)
  - Bessere Initialisierung (Xavier, He)

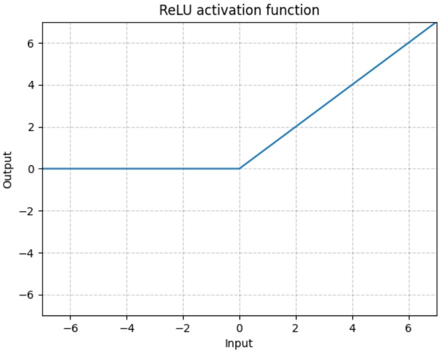
Aktivierungsfunktionen – Mathematische Eigenschaften und Warum sie wichtig sind

- **Sigmoid-Funktion**: $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$, Ableitung: $\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$
  - Glatt und differenzierbar, Ausgabe in $(0, 1)$
  - **Problem**: Vanishing Gradients für $|x| >> 0$: $\sigma'(x) \to 0$
- **Tanh-Funktion**: $\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$, Ableitung: $\tanh'(x) = 1 - \tanh^2(x)$
  - Ausgabe in $(-1, 1)$, zero-centered (bessere Konvergenz)
  - Ebenfalls Vanishing Gradient Problem
- **ReLU-Funktion** [7]: $\text{ReLU}(x) = \max(0, x)$, Ableitung: $\text{ReLU}'(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}$
  - Löst Vanishing Gradient Problem für $x > 0$
  - Computationally efficient, führt zu sparse representations
  - **Problem**: "Dying ReLU" - Neuronen können "sterben" wenn $x \leq 0$
- **Warum Nichtlinearität essentiell ist**:

$$\text{Ohne } \sigma : f(\mathbf{x}) = \mathbf{W}_2(\mathbf{W}_1\mathbf{x}) = (\mathbf{W}_2\mathbf{W}_1)\mathbf{x} = \mathbf{W}_{\text{linear}}\mathbf{x} \tag{61}$$

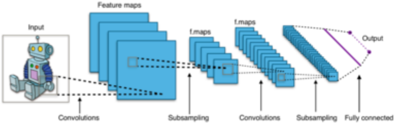
Häufige Aktivierungsfunktionen – Visualisierung

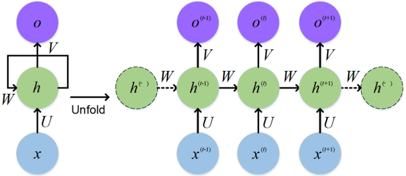




Weitere Netzwerk Architekturen

- spezielle Datenstrukturen profitieren von speziellen Architekturen
- Bilderkennung →Convolutional Neural Network (CNN)
- sequentielle Daten →Recurrent Neural Networks (RNN)
- im speziellen um Kausalität/Kontext herzustellen →Long Short Term Memory (LSTM)





Warum funktionieren CNNs? – Mathematische Prinzipien

- **Drei Schlüsselprinzipien von CNNs**:
- **1. Lokale Konnektivität**: Jedes Neuron ist nur mit lokalem Bereich verbunden

$$y_{i,j}^{(\ell)} = \sigma\left(\sum_{m=-k}^{k}\sum_{n=-k}^{k} w_{m,n}^{(\ell)} \cdot x_{i+m,j+n}^{(\ell-1)} + b^{(\ell)}\right) \tag{62}$$

- **2. Parameter Sharing**: Derselbe Filter $\mathbf{W}$ wird über gesamte Feature-Map verwendet
  - Reduziert Parameter von $O(H \cdot W \cdot d^2)$ auf $O(k^2 \cdot d)$
  - Erzwingt Translationsinvarianz
- **3. Equivarianz zu Translationen**: Wenn Input um $\mathbf{t}$ verschoben wird, verschiebt sich Output ebenfalls um $\mathbf{t}$

$$\text{Conv}(T_{\mathbf{t}}[\mathbf{x}]) = T_{\mathbf{t}}[\text{Conv}(\mathbf{x})] \tag{63}$$

- **Pooling** führt zu begrenzter Translationsinvarianz:

$$\text{MaxPool}(\mathbf{X})_{i,j} = \max_{(p,q)\in N_{i,j}} \mathbf{X}_{p,q} \tag{64}$$

- **Hierarchische Feature-Extraktion**: Einfache → Komplexe Features

Spezielle Netzwerkarchitekturen: CNN – Implementierung

- **Convolutional Neural Networks** [8]: Spezialisiert auf gitterförmige Daten (Bilder)

- **Faltungsoperation** (2D-Convolution):

$$(\mathbf{I} * \mathbf{K})_{i,j} = \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} \mathbf{I}_{i+m,j+n} \cdot \mathbf{K}_{m,n} \tag{65}$$

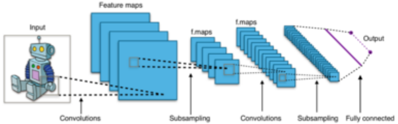
- $\mathbf{I}$: Input-Feature-Map, $\mathbf{K}$: Kernel (Filter) der Größe $M \times N$

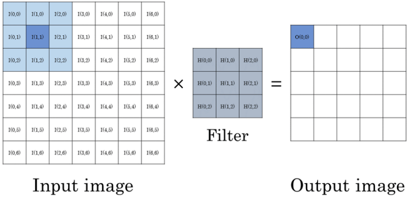
- **Pooling**: Dimensionsreduktion, z.B. Max-Pooling:

$$\mathrm{MaxPool}(\mathbf{X})_{i,j} = \max_{p,q \in P_{i,j}} \mathbf{X}_{p,q} \tag{66}$$

- **Parameter Sharing**: Derselbe Filter wird über gesamte Feature-Map angewendet

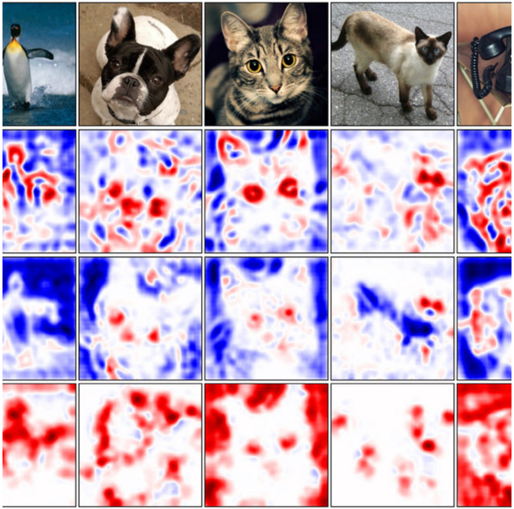
- **Translation Invariance**: Robustheit gegenüber Verschiebungen





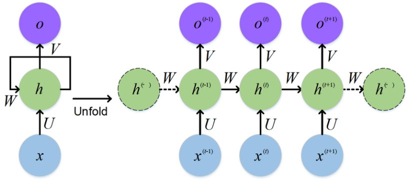
Spezielle Netzwerkarchitekturen: CNN

- Anschaulich: Formen werden erkannt
- Katzenohren sind anders als Hundeohren
- Verallgemeinerbar für andere Objektklassifizierungen

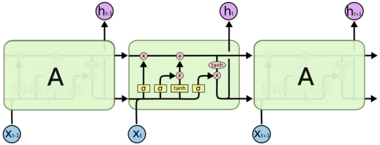


Spezielle Netzwerkarchitekturen: RNN

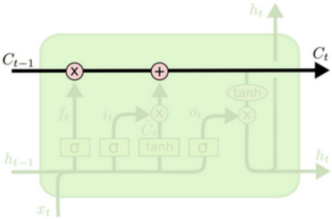
- Anschaulich: Schleife in Netzwerk ”merkt” sich voherige Zustände
- funktioniert für kurze Zeiträume
- Entfaltung eines RNN →viele zu trainierende Gewichte
- Problem: langfristige Zusammenhänge werden nicht erfasst
- Problem: Verschwindende Gradienten



Spezielle Netzwerkarchitekturen: LSTM



- **Long Short-Term Memory** [9]: Lösung des Vanishing Gradient Problems in RNNs
- **Cell State** $\mathbf{C}_t$: Langzeit-Gedächtnis der LSTM-Zelle
- **Hidden State** $\mathbf{h}_t$: Kurzzeit-Output der Zelle
- Drei Gating-Mechanismen kontrollieren Informationsfluss:
  - Forget Gate: Welche Informationen vergessen?
  - Input Gate: Welche neuen Informationen speichern?
  - Output Gate: Welche Teile des Cell States ausgeben?



LSTM: Mathematische Formulierung

- **Forget Gate**: Entscheidet, welche Informationen aus $\mathbf{C}_{t-1}$ gelöscht werden

$$\mathbf{f}_t = \sigma(\mathbf{W}_f \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_f) \tag{67}$$

- **Input Gate**: Bestimmt neue Informationen für Cell State

$$\mathbf{i}_t = \sigma(\mathbf{W}_i \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_i) \tag{68}$$

$$\tilde{\mathbf{C}}_t = \tanh(\mathbf{W}_C \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_C) \tag{69}$$

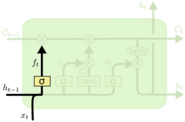
- **Cell State Update**:

$$\mathbf{C}_t = \mathbf{f}_t * \mathbf{C}_{t-1} + \mathbf{i}_t * \tilde{\mathbf{C}}_t \tag{70}$$

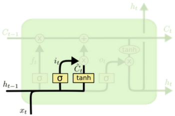
- **Output Gate** und **Hidden State**:

$$\mathbf{o}_t = \sigma(\mathbf{W}_o \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_o) \tag{71}$$

$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t * \tanh(\mathbf{C}_t) \tag{72}$$



$$f_t = \sigma\left(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_f\right)$$

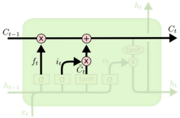


$$i_t = \sigma\left(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_i\right)$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] \; + \; b_C)$$

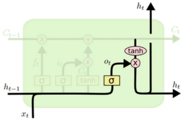
Spezielle Netzwerkarchitekturen: LSTM

- Update des alten Cell states mithilfe des alten und neuen Zustandes



$$C_t = f_t * C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t$$

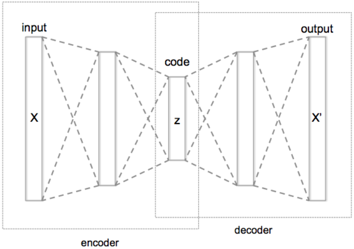
- Output der LSTM Zelle und Erzeugung des neuen hidden states

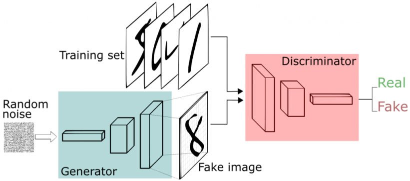


$$o_t = \sigma\left(W_o\ [h_{t-1}, x_t]\ +\ b_o\right)$$
$$h_t = o_t * \tanh\left(C_t\right)$$

Spezielle Netzwerkarchitekturen: Unsupervised Learning

- Autoencoder bzw. Encoder-Decoder Netzwerke
- Versuch den Input wieder zu rekonstruieren →Interessant für unsupervised anomaly detection
- Generative Netzwerk
- Möglichkeit aus ”Noise” komplexe echt aussehende Daten zu erzeugen →mögliche Beschleunigung von (FE-)Simulationen





Was ist Predictive Maintenance?

Grundlegende Ziele

- Prozessüberwachung und eventuelle Steuerung
- Vorhersagen von Maschinen/Produktionsausfällen
- Hilfe/Unterstüzung bei der Wartungsplanung
- Klassifikation von Fehlerzuständen
- ...

Was ist Predictive Maintenance?

- PM ist als Teilbereich der Industrie 4.0 zu verstehen
- (Nah-) Echtzeitdatenanalysen sollen Bedarfsgerechte Wartung ermöglichen
- Großes Potential der Kosteneinsparung

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle

- Automatisierungstechnik liefert Prozessdaten
- zusätzliche Sensorik liefert mehr Daten
- Ein Trend in den Daten deutet auf einen zukünftigen Fehler hin
- Der Fehler wird klassifiziert und eine Handlungsanweisung wird herausgegeben
- Der Fehler kann, bevor er größere Schäden, oder Produktionsausfälle behoben werden
- Wielche Schritte sind dafür Notwendig?

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Outline

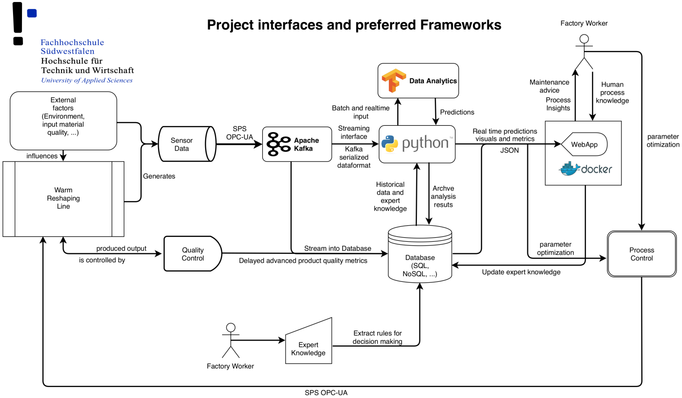
Ausgangslage Industrie 3.0

- Automatisierungstechnik existiert und Daten stehen der Anlagensteuerung zur Verfügung
- Wie werden die Daten weiterverarbeitet? Haben Sie Beispiele aus Ihrem Unternehmen?
- eine Möglichkeit: Auslesen der Daten über eine OPC-UA Schnittstelle
- Weiterleitung dieser Daten über ein schnelle und skalierbare Schnittstelle (MQTT, ApacheKafka, …)
- Empfang dieser Daten auf einem Datenbankserver (MariaDB, TimeseriesDB, ApacheDruid, …)
- Durchführung von Echtzeitanalysen auf einem Edge-Computer, oder in der Cloud

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Warmumformanlage

- Umformung und gleichzeitige Härtung von Stahl im Automobilleichtbau
- Probleme:
- Komplexe Wirkzusammenhänge während des Prozesses
- Verlust von Know-How bei Standortwechseln der Produktion
- Langwierige Prüfverfahren zur Qualitätssicherung → hohes Schadenspotential bei unentdeckten Fehlern

Visualisierung eines möglichen Backends



Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Datensammlung

- Prozessdaten werden mit einer OPC-UA Schnittstelle aus der übergeordneten Steuerung gelesen
- Die Qualitätssicherung liefert verzögert Daten über die gefertigten Bauteile
- Experten geben Know-How über den Prozess in einer strukturiterten Form einer FMEA (Failure Mode and Effects Analysis) ein

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Erste Datenverarbeitung mit einem Broker System

- Die Daten aus der Anlagensteuerung werden mit einem ”Producer” an einen Broker geschickt, der den Datenstrom verwaltet
- Ein Brokersystem wie ApacheKafka oder MQTT kontrolliert den Datenfluss
- Clients können dem Broker ”folgen” (subscriben)
- Ein sogenannter Consumer erhält diesen nun bei jedem neuen erzeugten Datenpunkt
- Diese Datenpunkte können dann mit einem Machine Learning Framework (sci-kit-learn, TensorFlow, PyTorch) analysiert werden
- Vorteil: Parallelisierung des Datenflusses möglich
- Gleichzeitiges Speichern der Daten in einer Datenbank und Echtzeitverarbeitung im Datenanalyse Framework und darstellung auf

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Darstellung der Daten für einen Maschinenoperator

- Eine vereinfachte visuelle Darstellung der Maschinenparameter kann z.B. in einem Dashboard ausgegeben werden
- Erfahrene Operatoren können aus diesen Daten und ersten Analysen Schlussfolgerungen ziehen
- mögliche Parameteranpassungen im Prozess können durch diesen Operator durchgeführt werden

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Direkte Handlungsanweisungen an einen Operator

- Vorhersagen des trainierten Machine Learning Modells werden mit einer FMEA abgeglichen
- eine FMEA enthält die häufigsten Fehler und Defekte einer Analage
- Problemlösungen werden hier strukturiert skizziert
- unerfahrene Operatoren können hier durch das gesammelte Expertenwissen Entscheidungen treffen
- Operatoren können für den Vorhergesagten Zeitpunkt Mechaniker zur Wartung der Maschine anfordern

Fallbeispiel: Vollautomatisierte Produktionszelle – Direkte Handlungsanweisungen an die Prozessteuerung (Dangerzone)

- Mögliche kritische Zustände können direkt zu einem Stop der Produktion führen
- Anpassung der Prozessparameter direkt durch die Software →vollständig autonomes System
- Mensch wird nur noch zum Eintragen von Know-How benötigt

Andere Beispiele: Wo ist PM finanziell besonders sinnvoll?

- Kraftfahrzeuge: Sensorik in Verschleißteilen kann Totalausfälle vermeiden
- Luftfahrt: Der Ausfall von Passagier- oder Luftfrachtflügen kann mit guten Ausfallvorhersagen verhindert werden
- Schinenverkehr

References I

- G. Cybenko, "Approximation by superpositions of a sigmoidal function," Mathematics of control, signals and systems, vol. 2, no. 4, pp. 303–314, 1989.
- K. Hornik, "Approximation capabilities of multilayer feedforward networks," Neural networks, vol. 4, no. 2, pp. 251–257, 1991.
- F. Rosenblatt, "The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain," Psychological review, vol. 65, no. 6, pp. 386–408, 1958.
- M. Minsky and S. Papert, Perceptrons: An introduction to computational geometry. MIT press, 1969.
- D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, "Learning representations by back-propagating errors," Nature, vol. 323, no. 6088, pp. 533–536, 1986.
- D. P. Kingma and J. Ba, "Adam: A method for stochastic optimization," arXiv preprint arXiv:1412.6980, 2014.
- V. Nair and G. E. Hinton, "Rectified linear units improve restricted boltzmann machines," in Proceedings of the 27th international conference on machine learning (ICML-10), pp. 807–814, 2010.
- Y. LeCun, L. Bottou, Y. Bengio, and P. Haffner, "Gradient-based learning applied to document recognition," Proceedings of the IEEE, vol. 86, no. 11, pp. 2278–2324, 1998.

References II

S. Hochreiter and J. Schmidhuber, “Long short-term memory,” Neural computation, vol. 9, no. 8, pp. 1735–1780, 1997.