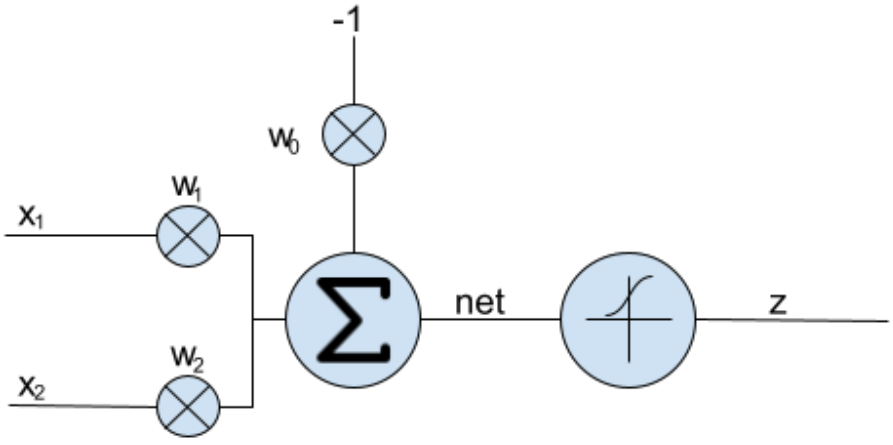
Die Mathematik neuronaler Netze

Eine Einführung

Von
Luca Ritz



2021
No publisher

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einführung

In Anbetracht der Tatsache, dass neuronale Netzwerke in Zukunft eine grössere Rolle spielen, wird in diesem Dokument das Ziel verfolgt, die Mathematik dahinter verständlich zu erklären. Es werden einige Vorkenntnisse im Bereich der neuronalen Netze vorausgesetzt. Dazu gehört das Grundverständnis, wie sich z.B. ein Neuron zusammensetzt, wie sich ein neuronales Netz zusammensetzt und welche Arten es gibt. In diesem Dokument wird sich lediglich einem „fully connected Network“ gewidmet, bei welchem die Neuronen nur in eine Richtung verbunden sind. Für Leser, welche sich im Gebiet der Differentialrechnung und Optimierung noch nicht so gut auskennen, sei hier an dieser Stelle geraten, den Anhang zu lesen.

Grundsätzlich bildet ein neuronales Netz einen gegebenen Input auf einen Output ab, ist also nichts weiteres als eine Funktion. Diese Funktion wiederum ist mehrdimensional, hat also mehrere Input-Variablen und bildet diese wiederum auf einen mehrdimensionalen Output ab $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$. Die Input-Variablen sind die Gewichte, die Output-Werte die Klassen[1]. Es werden nun die Gewichte dieses neuronalen Netzes so trainiert, dass eine gewählte Fehlerfunktion möglichst minimiert wird. Man befindet sich hier im Bereich der Optimierung. In Abbildung 1.1 ist eine solche lineare Funktion (in rot) gegeben, welche die Datenpunkte möglichst optimal annähert.

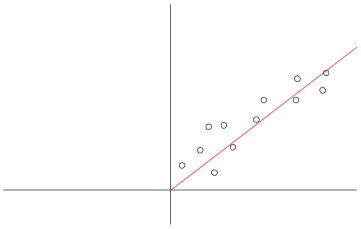


Abbildung 1.1: Annäherung an Datenpunkte über lineare Funktion

Anzumerken sei hier, dass sich der Inhalt des Dokuments teilweise auf den Kursteil „Games and Simulations“ der Vertiefung „Computer Perception & Virtual Reality“ der BFH (Berner Fachhochschule) stützt.

[1] Sollen z.B. in einem Bild Hunde und Katzen erkannt werden, so gibt es zwei Klassen „Hund“ und „Katze“. In dem Fall ist die Output-Dimension zweidimensional.

Kapitel 2

Die Mathematik neuronaler Netze

2.1 Das Perceptron

Zu Beginn steht das Perceptron. Es wird hier wie in Abbildung 2.1 veranschaulicht. Es besteht aus der Summe mehrerer gewichteter Eingabewerte wie auch einem Bias, welcher die Schwelle einer Aktivierung verschiebt. Die Gewichte werden mit w_i, die Eingabewerte mit x_i bezeichnet. Diese Summe, im folgenden als net bezeichnet, wird in eine Aktivierungsfunktion, hier eine Sigmoide, gegeben. Der resultierende Wert wird als z bezeichnet. Der Bias hat den fixen Inputwert -1, er wird wiederum über ein Gewicht w_0 trainiert/eingestellt.

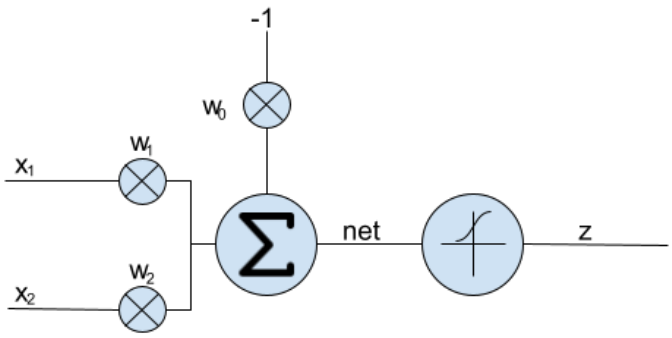


Abbildung 2.1: Das Perceptron

Am Ende dieses Perceptrons steht die Berechnung eines Fehlers. An dieser Stelle wird die quadratische Distanz gewählt. Man berechnet also die quadratische Differenz zwischen dem erwarteten Wert d sowie dem effektiven Wert z.

$$P_{err} = \sum_{i}^{n} (d_i - z_i)^2 \tag{2.1}$$

Im Falle des Perceptrons gibt es nur einen Output-Wert. Daher lässt sich die Fehlerfunktion wie in Gleichung 2.2 darstellen.

$$P_{err} = (d - z)^2 \tag{2.2}$$

2.1.1 Lernverfahren

Um nun die Gewichte entsprechend ihrem Anteil am Fehler zu korrigieren, wird das Gradientenabstiegsverfahren[1] verwendet. Dazu muss die Ableitung der Fehlerfunktion bekannt sein. Um diese Ableitung einfacher zu gestalten, wird die Fehlerfunktion mit einem konstanten Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert. Dieser Faktor hat keinen Einfluss auf Minima oder Maxima, da er an jedem Punkt der Funktion angewendet wird.

$$P_{err} = \frac{1}{2} \cdot (d-z)^2 \tag{2.3}$$

Nun hat eine Maximierung ebenfalls einen vereinfachenden Vorteil aufgrund der Kettenregel bei der Ableitungsbildung, weswegen die Fehlerfunktion gedreht wird. Es ergibt sich die endgültige Fehlerfunktion.

$$P_{err} = -\frac{1}{2} \cdot (d-z)^2 \tag{2.4}$$

Entsprechend lautet die Ableitung unter Anwendung der Kettenregel:

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta z} = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot (d-z) \cdot -1 \tag{2.5}$$

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta z} = (d-z) \tag{2.6}$$

Die Gewichte können anhand des Gradienten korrigiert werden.

$$\begin{pmatrix} w_{0,neu} & w_{1,neu} & w_{2,neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{0,alt} & w_{1,alt} & w_{2,alt} \end{pmatrix} + \lambda \cdot \vec{\nabla} \tag{2.7}$$

Dieser Gradient setzt sich aus der partiellen Ableitungskette der verschiedenen Funktionen nach den einzelnen Gewichten zusammen, welche nacheinander aufgerufen werden und jeweils als Input für die Nächste dienen. Dazu wird das Perceptron aus Abbildung 2.1 von hinten her aufgerollt. Der Gradient lautet demnach:

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\delta P_{err}}{\delta w_0} & \frac{\delta P_{err}}{\delta w_1} & \frac{\delta P_{err}}{\delta w_2} \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

An dieser Stelle wird nun die Ableitungskette für w_0 näher erläutert. In einem ersten Schritt muss also die Ableitung der Fehlerfunktion nach w_0 gebildet werden. Wie bereits erwähnt, werden die Funktionen nacheinander aufgerufen und dienen sich gegenseitig als Input. Von hinten her aufgerollt lautet die Aufrufreihenfolge:

$$P_{err} = (d - z(net(w_0, w_1, w_2))) \tag{2.9}$$

Für z und net gilt:

$$z = \frac{1}{1+e^{-net}} \tag{2.10}$$

$$net = -1 \cdot w_0 + x_1 \cdot w_1 + x_2 \cdot w_2 \tag{2.11}$$

[1] Siehe Kapitel 3.5

Um den Wert des Gradienten für w_0 zu bilden, muss die Funktion P_{err} für w_0 partiell abgeleitet werden. Dies geschieht durch konsequentes Anwenden der Kettenregel.

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta z(w_0)} = (d - z) \tag{2.12}$$

$$\frac{\delta z(w_0)}{\delta net(w_0)} = z(1 - z) \tag{2.13}$$

$$\frac{\delta net(w_0)}{\delta w_0} = -1 \tag{2.14}$$

Die gesamte Ableitungskette nach Anwendung der Kettenregel lautet:

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta w_0} = \frac{\delta P_{err}}{\delta z(w_0)} \cdot \frac{\delta z(w_0)}{\delta net(w_0)} \cdot \frac{\delta net(w_0)}{\delta w_0} \tag{2.15}$$

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta w_0} = (d - z) \cdot z \cdot (1 - z) \cdot -1 \tag{2.16}$$

Mit dem Ausdruck 2.16 lässt sich das Gewicht w_0 in einer Iteration korrigieren. Dasselbe Verfahren wird für die Gewichte w_1 sowie w_2 angewendet, es resultiert:

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta w_1} = (d - z) \cdot z \cdot (1 - z) \cdot x_1 \tag{2.17}$$

$$\frac{\delta P_{err}}{\delta w_2} = (d - z) \cdot z \cdot (1 - z) \cdot x_2 \tag{2.18}$$

2.1.2 Das Problem mit XOR und nichtlinearen Funktionen

Mittels eines Perceptrons kann also eine Funktion implementiert werden, die ab einer gewissen Schwelle den Ausgabewert 1 liefert. Geometrisch kann dies als eine lineare Separation angesehen werden. Es können z.B. logische Operatoren wie „AND“, „OR“ oder auch „NAND“ abgebildet werden. In der Abbildung 2.2 werden die genannten Operatoren gezeigt. Auf den X-Y-Achsen sind jeweils die Input-Variablen angegeben. Die Output-Dimension wird als Kreis dargestellt. Da der Input auf die Paare $(x,y) \longrightarrow (0,0),(1,0),(0,1),(1,1)$ beschränkt ist, befinden sich die Output-Werte ebenfalls nur an diesen Positionen. Wird an einer Stelle als Ausgabe eine 1 erwartet, so ist der Kreis rot ausgefüllt. Wird eine 0 erwartet, ist der Kreis nicht ausgefüllt. In Abbildung 2.2 wird gezeigt, was mit einem Perceptron möglich ist. Es können nur

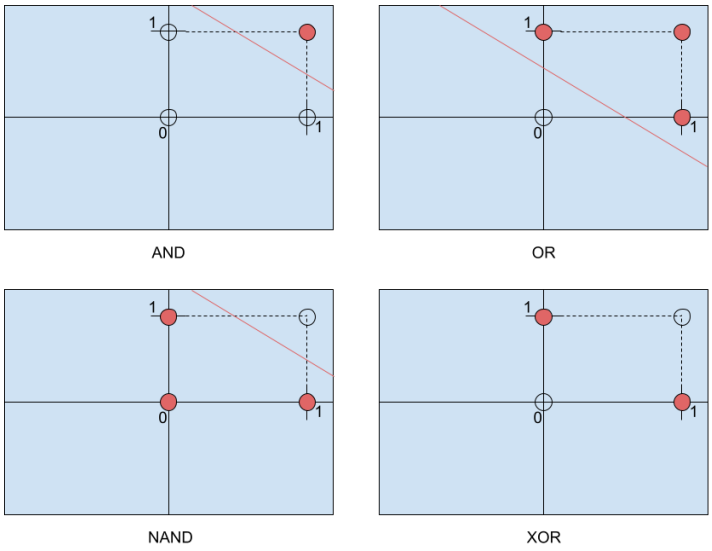


Abbildung 2.2: Logische Operatoren und ihre Separierbarkeit

Funktionen implementiert werden, die die einzelnen Klassen voneinander linear separieren können (durch die eingezeichnete rote Gerade). Dies ist im Falle von „XOR“ nicht möglich. Der Leser kann sich selbst überlegen, wie eine solche Gerade auszusehen vermag, um eine Grenze zu ziehen. Diese Problematik soll durch ein neuronales Netz gelöst werden, wo viele dieser Perceptronen miteinander verbunden sind. Dadurch ergeben sich weitere Möglichkeiten, um die Werte in bestimmten Clustern zu klassifizieren. Es können also auch nichtlineare Funktionen abgebildet werden.

2.2 Neuronale Netze

Ein neuronales Netz ist ein Zusammenschluss aus mehreren Perceptronen in verschiedenen Layern. Als Beispiel sei an dieser Stelle die Abbildung 2.3 gegeben. Diese wird ebenso verwendet, um die Ableitungskette für ein Gewicht in diesem Fall zu zeigen. Anzumerken sei hier, dass die Kombination der gewichteten Summen mit der Aktivierungsfunktion ein Neuron darstellt.

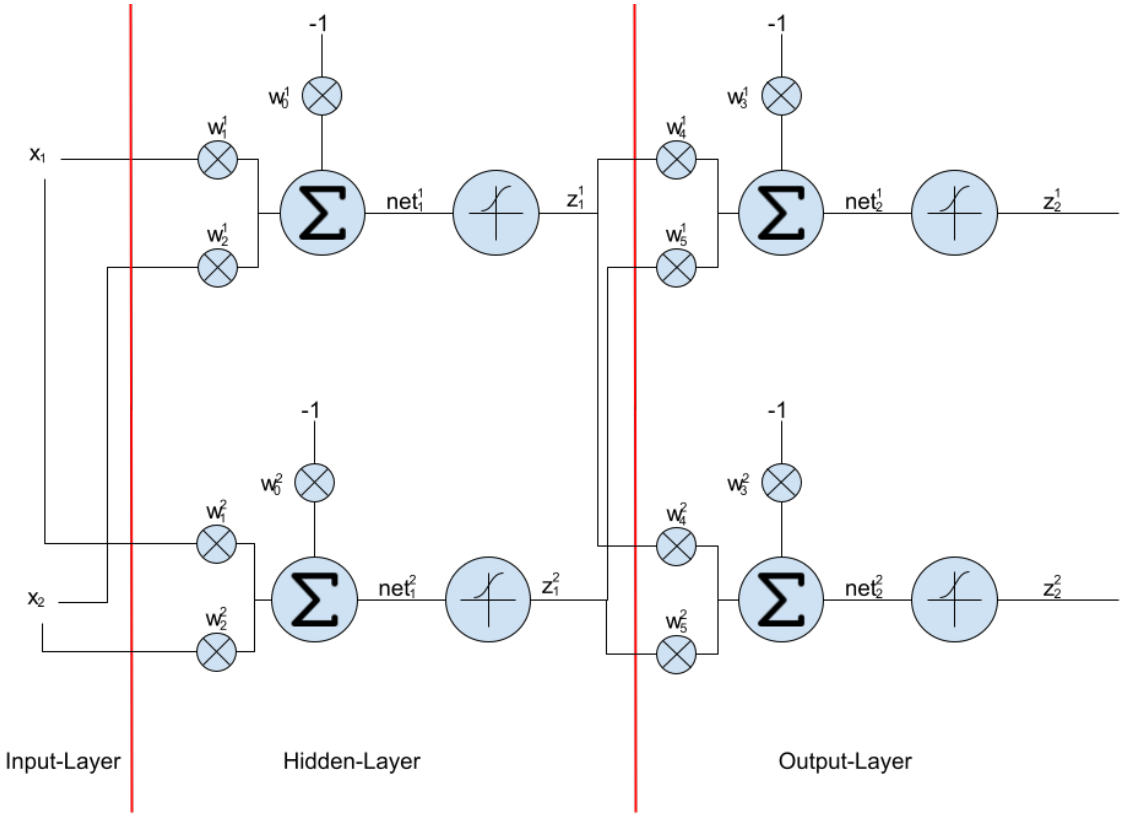


Abbildung 2.3: Ein neuronales Netz mit einem Hidden-Layer

2.2.1 Lernverfahren mit Gradientenabstieg

Wie beim Perceptron auch soll nun an dieser Stelle die Komponente des Gradienten für das Gewicht w_1^1 gezeigt werden. Für dieses Beispiel wird die Abbildung 2.4 hinzugezogen. Die Feh-

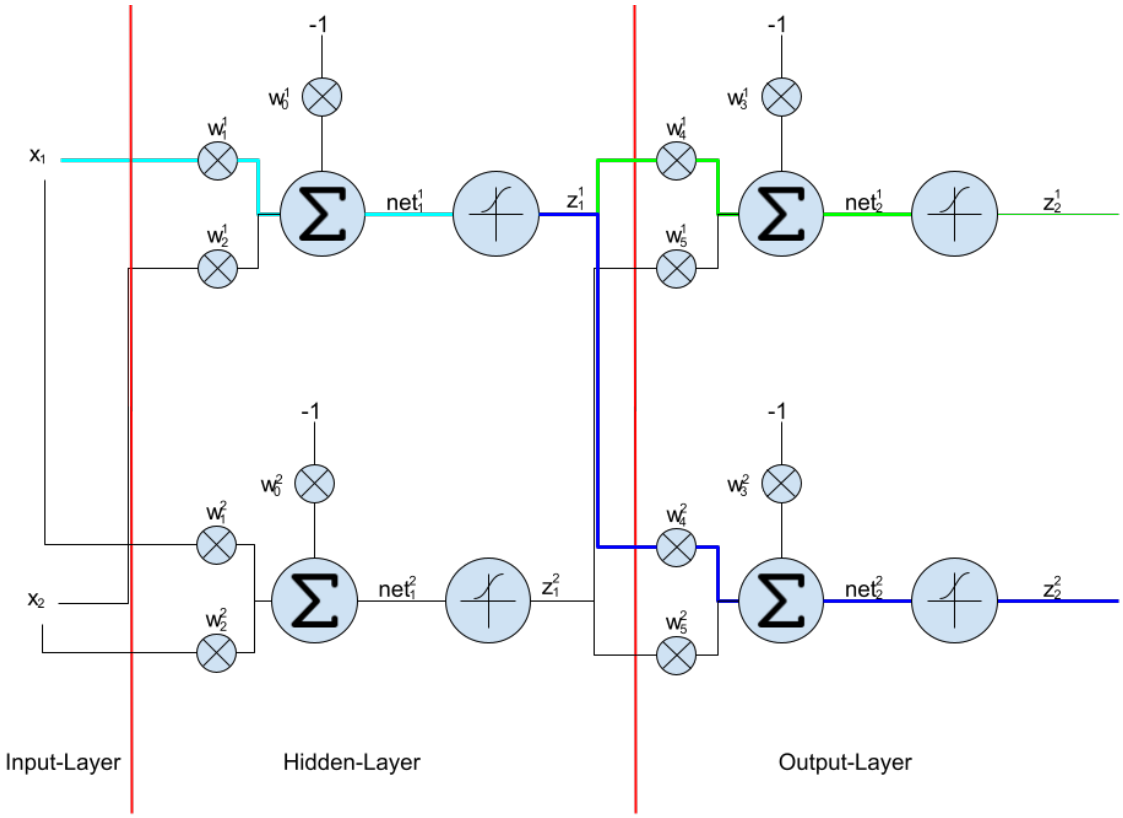


Abbildung 2.4: Der Pfad zum Gewicht w_1^1 im neuronalen Netz

lerfunktion ist wie beim Perceptron dieselbe $P_{err} = -\frac{1}{2} \cdot \sum_i^2 (d^i - z_2^i)^2$. In diesem Fall steht die Komponente i für den Index und die 2 für den Layer. Zur Abbildung 2.4 ist wichtig zu erkennen, dass für die Korrektor des Gewichts w_1^1 mehrere Wege relevant sind. Es kann einmal der grüne sowie der blaue Weg verfolgt werden. Der Teil, welcher bei beiden gleich ist, wird cyan

markiert. Weiterhin sind folgende Werte sind bekannt:

$$P_{err} = -\frac{1}{2} \cdot \sum_{i}^{2} (d^i - z_2^i)^2 \tag{2.19}$$

$$net_1^1 = x_1 \cdot w_1^1 + x_2 \cdot w_2^1 - w_0^1 \tag{2.20}$$

$$z_1^1 = \frac{1}{1 + e^{-net_1^1}} \tag{2.21}$$

$$net_1^2 = x_1 \cdot w_1^2 + x_2 \cdot w_2^2 - w_0^2 \tag{2.22}$$

$$z_1^2 = \frac{1}{1 + e^{-net_1^2}} \tag{2.23}$$

$$net_2^1 = z_1^1 \cdot w_4^1 + z_1^2 \cdot w_5^1 - w_3^1 \tag{2.24}$$

$$z_2^1 = \frac{1}{1 + e^{-net_2^1}} \tag{2.25}$$

$$net_2^2 = z_1^1 \cdot w_4^2 + z_1^2 \cdot w_5^2 - w_3^2 \tag{2.26}$$

$$z_2^2 = \frac{1}{1 + e^{-net_2^2}} \tag{2.27}$$

Der Gradient für die Gewichte setzt sich wie nachfolgend zusammen:

$$\vec{\nabla} = (w_0^1, w_1^1, w_2^1, w_0^2, w_1^2, w_2^2, w_3^1, w_4^1, w_5^1, w_3^2, w_4^2, w_5^2) \tag{2.28}$$

Die Korrektur in einem Schritt kann wiederum über den Vektor der Gewichte $\vec{w}$ erfolgen.

$$\vec{w}_{neu} = \vec{w}_{alt} + \lambda \cdot \vec{\nabla} \tag{2.29}$$

Wie bereits erwähnt wird nur die Komponente w_1^1 aus dem Vektor $\vec{\nabla}$ berücksichtigt. Um diesen herzuleiten, müssen alle Pfade zum Gewicht berücksichtigt werden. In dem Fall gibt es, wie in Abbildung 2.4 entnommen werden kann, deren zwei. Die Funktionskette ist in Gleichung 2.30 ersichtlich. Es werden nur die wirklich relevanten Aufrufe gezeigt.

$$\begin{aligned} P_{err} = &-\frac{1}{2} \cdot (d^1 - z_2^1(net_2^1(w_4^1 \cdot z_1^1(net_1^1(w_1^1 \cdot x_1, w_2^1 \cdot x_2, -w_0^1)), z_1^2 \cdot w_5^1, -w_3^1)))^2 + \\ &-\frac{1}{2} \cdot (d^2 - z_2^2(net_2^2(w_4^2 \cdot z_1^1(net_1^1(w_1^1 \cdot x_1, w_2^1 \cdot x_2, -w_0^1)), z_1^2 \cdot w_5^2, -w_3^2)))^2 \end{aligned} \tag{2.30}$$

Dementsprechend werden die beiden Pfade für die Komponente des Gradienten für w_1^1 berücksichtigt.

$$\begin{aligned} \frac{\delta P_{err}}{\delta w_1^1} = &\frac{\delta P_{err}}{\delta z_2^1(w_1^1)} \cdot \frac{\delta z_2^1(w_1^1)}{\delta net_2^1(w_1^1)} \cdot \frac{\delta net_2^1(w_1^1)}{\delta z_1^1(w_1^1)} \cdot \frac{\delta z_1^1(w_1^1)}{\delta net_1^1(w_1^1)} \cdot \frac{\delta net_1^1(w_1^1)}{\delta w_1^1} + \\ &\frac{\delta P_{err}}{\delta z_2^2(w_1^1)} \cdot \frac{\delta z_2^2(w_1^1)}{\delta net_2^2(w_1^1)} \cdot \frac{\delta net_2^2(w_1^1)}{\delta z_1^1(w_1^1)} \cdot \frac{\delta z_1^1(w_1^1)}{\delta net_1^1(w_1^1)} \cdot \frac{\delta net_1^1(w_1^1)}{\delta w_1^1} \end{aligned} \tag{2.31}$$

Anders ausgedrückt lautet demnach die Komponente:

$$\begin{aligned} w_{1,korr}^1 = &(d^1 - z_2^1) \cdot z_2^1(1 - z_2^1) \cdot w_4^1 \cdot z_1^1(1 - z_1^1) \cdot x_1 + \\ &(d^2 - z_2^2) \cdot z_2^2(1 - z_2^2) \cdot w_4^2 \cdot z_1^1(1 - z_1^1) \cdot x_1 \end{aligned} \tag{2.32}$$

An dieser Stelle sei angemerkt, dass dieses Verfahren durchaus funktioniert, jedoch wachsen die Ableitungsterme exponentiell mit der Anzahl Neuronen in den Layern. Aus diesem Grund ist der Gradientenabstieg so nicht brauchbar in der Praxis. Was jedoch auffällt ist die Tatsache, dass einmal berechnete Ableitungsketten wiederverwendet werden können. Gedanklich kann an dieser Stelle z.B. die Ableitungskette für w_2^1 hinzugezogen werden. Man erkennt relativ schnell, dass viele Berechnung, welche schon für w_1^1 gemacht wurden, wiederauftreten. Auf Grundlage dieser Idee der dynamischen Programmierung wurde der Backpropagation Algorithmus entwickelt.

2.2.2 Lernverfahren mit Backpropagation

Der grosse Vorteil dieses Verfahrens ist die Berechnungszeit, welche im Vergleich zum reinen Gradientenabstieg nur noch linear mit der Anzahl der Gewichte wächst. So werden einmal berechnete Ableitungsketten gespeichert und wiederverwendet. Der Input-Layer wird nicht beachtet, dieser ist für die Berechnung irrelevant. Die verbleibenden Layer (Hidden-, Output-Layer) bilden die zwei zu unterscheidenden Fälle des Algorithmus.

Es folgen einige generelle Bemerkungen zu den Abbildungen 2.5 und 2.6. Der Algorithmus kann anhand eines neuronalen Netzes wie eine Schablone dreier Ebenen verstanden werden, die von rechts nach links über die Layer des Netzwerks geschoben wird. Es gibt eine blau markierte Ebene, diese ist dem aktuellen Berechnungsschritt von einem Vorausgehenden bereits bekannt. Hier muss also nichts gemacht werden, diese Werte kennt man. Die grün markierte Ebene ist diejenige, welche im aktuellen Berechnungsschritt für den Nächsten berechnet und auch gespeichert wird. Die orange markierte Ebene ist die Korrektur der Gewichte im aktuellen Berechnungsschritt für den aktuellen Layer. In den jeweiligen Ebenen gibt es eine relevante Stelle (als roter Pfeil markiert). Für jede Ebene hat diese Stelle eine gewisse Bedeutung. Bei der blauen Ebene markiert sie die Position des Layers, bis zu welcher der Wert bekannt ist. Bei der grünen Ebene markiert sie das Resultat, welches berechnet wird. Bei der orangen Ebene ist nur ein Beispiel für ein Gewicht gegeben. Auch dort wird das Resultat markiert, welches berechnet wird (Ableitung der Fehlerfunktion nach einem spezifischen Gewicht zur Korrektur desselben). Diese Information ist lediglich für den aktuellen Berechnungsschritt und Layer relevant und wird nicht gespeichert (das korrigierte Gewicht natürlich schon). Als Beispiel ist ebenfalls eine Reihe von Neuronen ersichtlich, deren Indizes vollständig ausgeschrieben wurden. Die untere Reihe wiederum befasst sich mit der verallgemeinert gültigen Schreibweise. Gewichte werden anhand der Neuronennummer im Layer wie auch der Nummer des Gewichts innerhalb des Neurons indexiert. Für ein Gewicht 2 im Neuron 3 des Layers r lautet die Schreibweise demnach w^r_{32}.

Beim ersten Fall des Algorithmus handelt es sich um den Output-Layer. Um dies zu veranschaulichen, kann die Abbildung 2.5 betrachtet werden. In der blauen Ebene ist der Fehlerwert P_{err} gegeben. Hierbei stehen die Angaben r für die zu berechnende Schicht, i für die Anzahl der Neuronen der Schicht und j für die Anzahl der Gewichte (Inputs), welche pro Neuron existieren. Weiterhin gibt es die vorherige Schicht p, welche wiederum aus s Neuronen besteht. In diesem Beispiel ist $j = 3$. Die Gewichte erhalten dadurch mit $i = 2$ die folgende Nummerierung: w^r_{11}, w^r_{12}, w^r_{13}, w^r_{21}, w^r_{22}, w^r_{23}. Ebenfalls relevant ist hierbei, dass es sich um ein „fully connected Network“ handelt, also alle jeweiligen Outputs mit allen Neuronen der folgenden Schicht verbunden sind.

Die grün markierte Ebene besteht nun aus der Berechnung des Terms δ^r_i. Dieser Term beschreibt die Ableitungskette $\frac{\delta P_{err}}{\delta net^r_i} = \frac{\delta P_{err}}{\delta z^r_i} \cdot \frac{\delta z^r_i}{\delta net^r_i}$. Man beachte, dass es genau so viele Elemente δ^r_i wie Neuronen in der Schicht r gibt. Im Falle des Perceptrons gibt es z.B. nur ein Element, im Falle eines neuronalen Netzes gibt es im Output-Layer so viele Elemente wie Output-Klassen (Neuronen). Es kann also festgehalten werden, dass gilt:

$$\delta^r_i = (d^r_i - z^r_i) \cdot z^r_i(1 - z^r_i) \cdot \tag{2.33}$$

Auf die orange markierte Ebene (Korrektur der Gewichte) wird nach der Erklärung des zweiten Falles eingegangen.

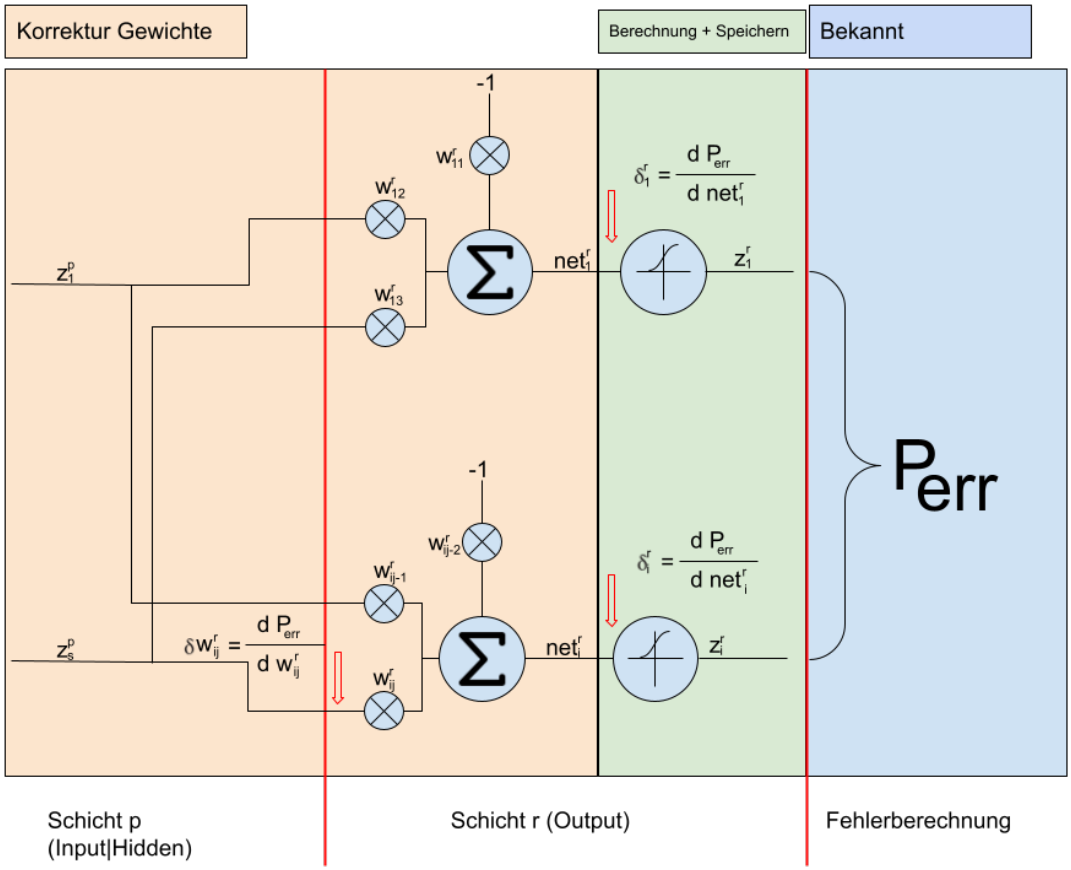


Abbildung 2.5: Backpropagation für Output-Layer

Beim zweiten Fall handelt es sich um einen Hidden-Layer. Dazu kann Abbildung 2.6 hinzugezogen werden. Wie vorhin auch steht hier r für die Schicht, welche berechnet werden soll, i für die Anzahl der Neuronen der Schicht r, j für die Anzahl der Gewichte (Inputs) pro Neuron der Schicht r, k für die vorher berechnete Schicht, l für die Anzahl der Neuronen der Schicht k, m für die Anzahl der Gewichte pro Neuron der Schicht k (bei einem „fully connected Netzwerk“ gilt $m = i + 1$), p für die vorherige Schicht, welche aus s Neuronen besteht. In der blauen Ebene der Abbildung können wiederum die bekannten Werte abgelesen werden. Diese setzen sich aus den bereits vorhin gesehenen Termen[2] δ^k_l zusammen. Es sind die Ableitungen der Fehlerfunktion P_{err} nach net^k_l. Wie bereits erwähnt gibt es so viele Terme, wie Neuronen der Schicht k.

Auch in diesem Fall geht es um die Berechnung des Terms δ^r_i in der grünen Ebene anhand der genannten bekannten Terme. Es müssen wiederum alle Pfade, welche zu dem Neuron

[2]Anzumerken sei hier, dass es sich bei l nur um einen Platzhalter handelt. Die Nummerierung geht von 1 bis l, es existieren also l δ.

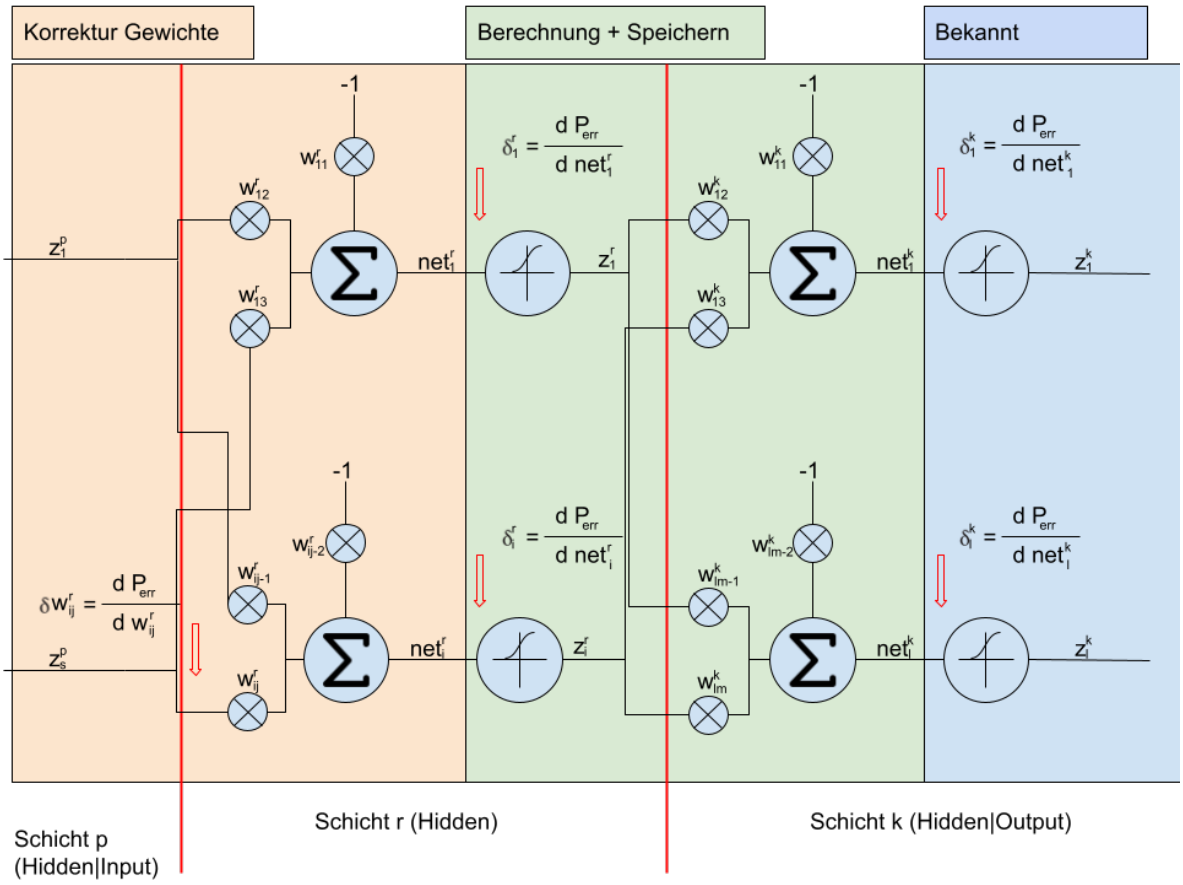


Abbildung 2.6: Backpropagation für Hidden-Layer

führen, betrachtet werden. Der Term δ_i^r setzt sich wie nachfolgend zusammen[3]:

$$\delta_1^k = \frac{\delta P_{err}}{\delta net_1^k} \tag{2.34}$$

$$\delta_l^k = \frac{\delta P_{err}}{\delta net_l^k} \tag{2.35}$$

$$\delta_i^r = \frac{\delta z_i^r}{\delta net_i^r} \cdot \delta_1^k \cdot w_{13}^k + \frac{\delta z_i^r}{\delta net_i^r} \cdot \delta_l^k \cdot w_{lm}^k \tag{2.36}$$

$$\delta_i^r = \frac{\delta z_i^r}{\delta net_i^r} \cdot (\delta_1^k \cdot w_{13}^k + \delta_l^k \cdot w_{lm}^k) \tag{2.37}$$

$$\delta_i^r = \frac{\delta z_i^r}{\delta net_i^r} \cdot \sum_n^l (\delta_n^k \cdot w_{nm}^k) \tag{2.38}$$

$$\delta_i^r = z_i^r (1 - z_i^r) \cdot \sum_n^l (\delta_n^k \cdot w_{nm}^k) \tag{2.39}$$

[3]Aus der Gleichung 2.39 ist ersichtlich, dass es sich bei nm um den letzten Index aus den Neuronen handelt, wobei n von 1 bis l läuft. Dieser Index führt immer über ein Gewicht nm zu z_i^r. m kann hier auch anders gewählt werden, je nachdem, nach welchem net^r abgeleitet werden soll.

Da der Term δ_i^r nun für beide Fälle bekannt ist, können zuletzt die Gewichte in der orangen Ebene korrigiert werden. Man nehme an, dass es bei den Gewichten der Schicht r die Inputs z_s^p der vorherigen Schicht p gibt. In dem Fall lautet die Korrektur für w_{ij}^r:

$$\delta_i^r = \frac{\delta P_{err}}{\delta net_i^r} \tag{2.40}$$

$$w_{ij,neu}^r = w_{ij,alt}^r + \lambda \cdot \delta_i^r \cdot \frac{net_i^r}{\delta w_{ij}^r} \tag{2.41}$$

$$w_{ij,neu}^r = w_{ij,alt}^r + \lambda \cdot \delta_i^r \cdot z_s^p \tag{2.42}$$

Wichtig ist zu erkennen, dass dasjenige z_s^p relevant ist, welches mit dem Gewicht w_{ij}^r multipliziert wird. In Bezug auf die beiden Abbildungen 2.5 und 2.6 kann das Beispiel der orangen Ebene für w_{ij}^r betrachtet werden. In dem Fall ist z_s^p relevant. Im Falle des Gewichts w_{ij-2}^r führt der Weg über -1. Dieser Wert für den Bias könnte ebenso als Input z_0^p der Schicht p angesehen werden. Damit ist 2.42 allgemeingültig.

Zu guter Letzt kann noch der abschliessende Algorithmus 1 angegeben werden unter der Voraussetzung, dass der Biaswert -1 als Input z_0^p gegeben wird.

for *o = last downto 2* **do**
  if *o == last* **then**
    for *t = 1 to i* **do**
      $\delta_t^o = (d_t^o - z_t^o) \cdot z_t^o(1 - z_t^o)$
    end
  end
  else
    for *t = 1 to i* **do**
      $\delta_t^o = z_t^o(1 - z_t^o) \cdot \sum_n^l (\delta_n^{o+1} \cdot w_{nm}^{o+1})$
    end
  end
  for *(t, h) = (1,1) to (i, j)* **do**
    $\delta w_{th}^o = \delta_t^o \cdot z_{h-1}^{o-1}$
    $w_{th,neu}^o = w_{th,alt}^o + \lambda \cdot \delta w_{th}^o$
  end
end

Algorithm 1: Backpropagation Algorithmus

Hierbei gibt o die zu berechnende Schicht an. Diese beginnt am Ende, also beim Output-Layer. Der Input-Layer wird nicht berücksichtigt, weswegen das Verfahren bei der vorletzten Schicht stoppt.

2.2.3 XOR und die Lösung

Um noch ein Beispiel einer nichtlinearen Funktion, welche ein neuronales Netz darstellt, zu nennen, wird das vorherige Beispiel von „XOR“ aus Kapitel 2.1.2 wiederaufgegriffen. Diesmal wird ein neuronales Netz mit zwei Inputs, einem Hidden-Layer mit zwei Neuronen sowie einem Output-Layer mit einem Neuron erstellt (siehe Abbildung 2.7).

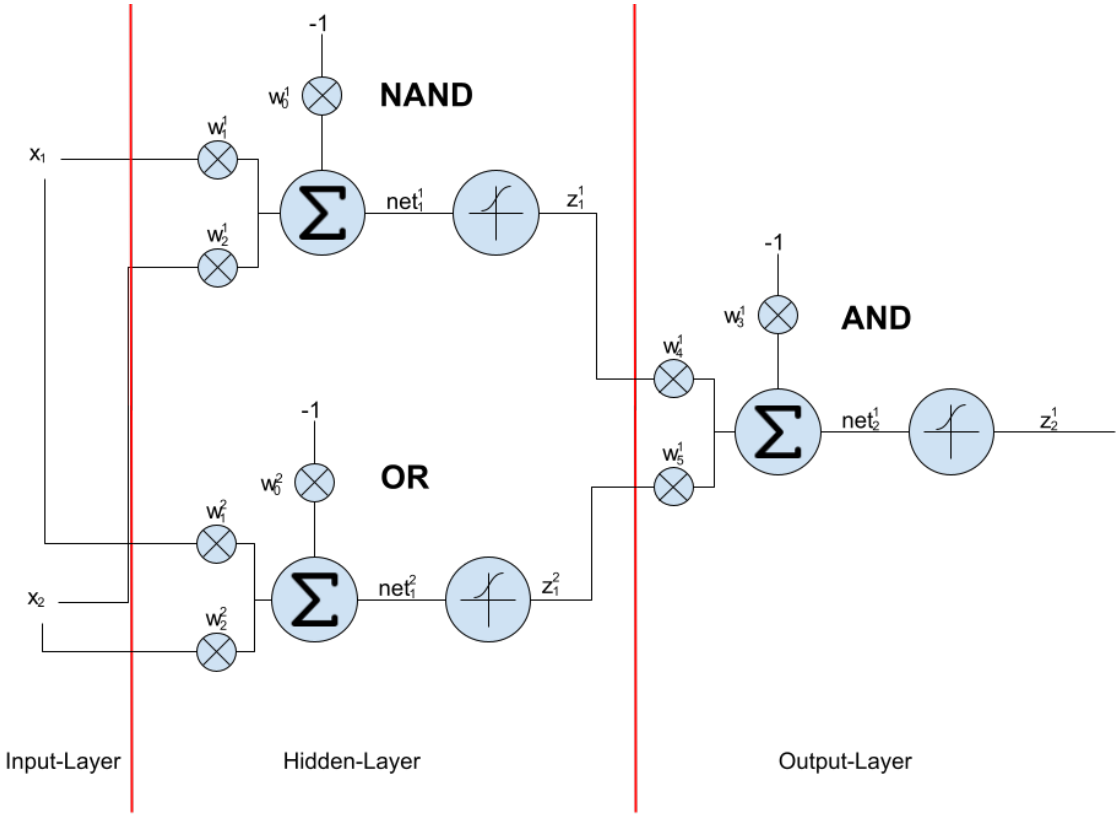


Abbildung 2.7: Ein neuronales Netz für XOR

Hierbei werden die Neuronen der Schichten speziell trainiert. Wie man in der Abbildung 2.8 entnehmen kann, ist „XOR“ die Kombination durch „AND“ von „OR“ und „NAND“. Diese Kombination wird ebenfalls durch das neuronale Netz in Abbildung 2.7 erzielt.

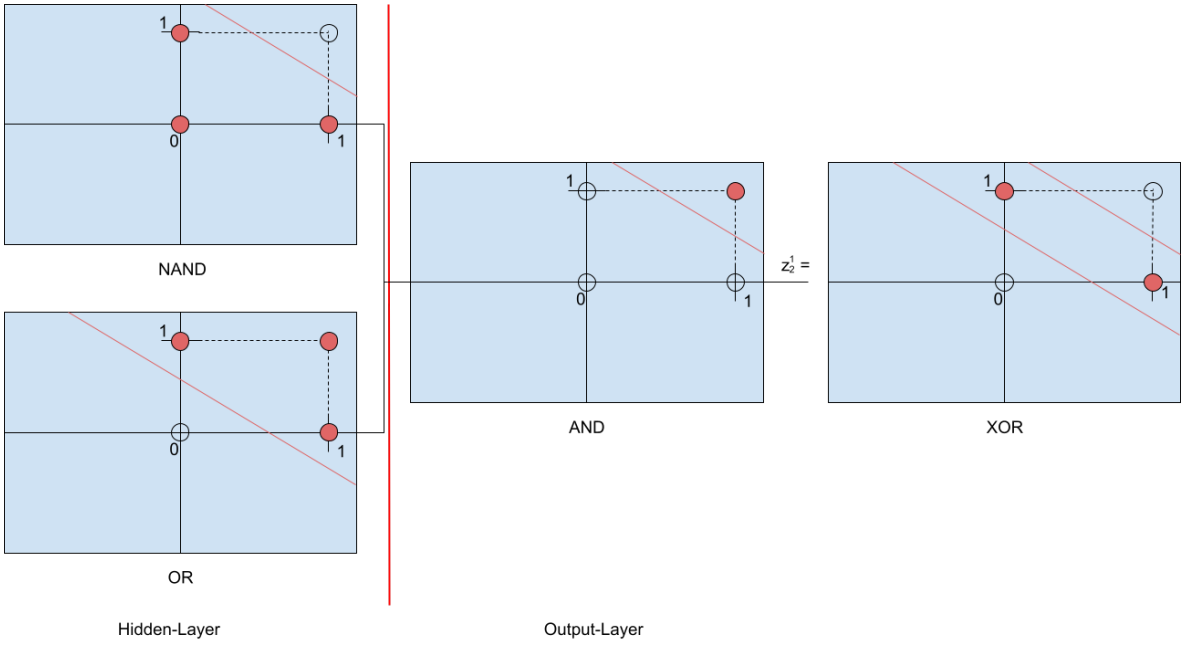


Abbildung 2.8: Die Kombination logischer Operatoren zur Erzielung von XOR

Mathematisch kann man sich ein „XOR“ relativ gut vorstellen und dementsprechend die Architektur des neuronalen Netzes wählen. Bei der Klassifikation in Bilderkennung ist dies jedoch nicht mehr so offensichtlich, weswegen beim Training des Netzes auch sehr viele verschiedene Architekturen (Anzahl Hidden Layer, Anzahl Neuronen, usw.) ausprobiert werden müssen, um eine möglichst gute Annäherung zu finden.

Abbildungsverzeichnis

Glossar

Kapitel 3

Anhang

3.1 Die Ableitung 1. Grades

Die Ableitung 1. Grades beschreibt die Steigung an einem bestimmten Punkt der Funktion. In der Abbildung 3.1 wird eine Funktion $f(x)$ (in grün) gegeben. Die Steigung $f'(x)$ an einem bestimmten Punkt x ist rot markiert. Die Ableitung selbst ist wiederum eine Funktion und kann über diverse Ableitungsregeln aufgrund der gegebenen Funktion selbst gebildet werden.

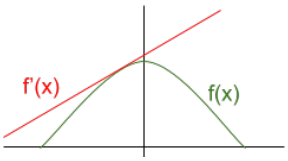


Abbildung 3.1: Steigung an einem bestimmten Punkt der Funktion $f(x)$

Die Ableitungsregeln, welche im Zuge der Erklärung des Lernprozesses eines neuronalen Netzwerks benötigt werden, sind nachfolgend ersichtlich.

Potenzregel $f(x) = x^n \longrightarrow f'(x) = n \cdot x^{n-1}$

Kettenregel $f(x) = u(v(x)) \longrightarrow f'(x) = u'(v(x)) \cdot v'(x)$

Es existieren viele weitere Ableitungsregeln, auf die hier nicht weiter eingegangen wird. Die Schreibweise der Ableitung einer Funktion nach einer Variablen lautet $f'(x) = \frac{\delta f(x)}{\delta x}$.

3.2 Die partielle Ableitung

Ist der Input einer Funktion mehrdimensional, das heisst, die Funktion f ist abhängig von mehreren Variablen, dann kann die Ableitung jeweils lediglich nach einer Variablen gebildet werden. Die übrigen Variablen werden als konstant angesehen. In dem Fall beschreibt die partielle Ableitung die Steigung an einem bestimmten Punkt der abgeleiteten Dimension. Es sei als Beispiel die Funktion $f(x,y) = x^2 + y^2 + 10$ gegeben. Diese wird nun partiell nach x sowie

nach y abgeleitet.

$$f^x(x,y) = 2x \tag{3.1}$$
$$f^y(x,y) = 2y \tag{3.2}$$

Die hierbei angewendete Ableitungsregel ist die Potenzregel, welche bereits im vorangegangenen Kapitel erwähnt wurde.

3.3 Die Sigmoide

Als Aktivierungsfunktion wird die Sigmoidfunktion benutzt. Diese wird heutzutage meist nicht mehr eingesetzt aufgrund des schlechten Lernverhaltens in einigen Bereichen der Funktion. Die erwähnte Eigenschaft wird bei der Betrachtung der Ableitung ersichtlich.

$$sig(t) = \frac{1}{1+e^{-t}} \tag{3.3}$$

Geometrisch lässt sich die Funktion wie in Abbildung 3.2[1] so interpretieren, dass eine gewisse Schwelle existiert, ab der die Funktion den Eingabewert auf 1 abbildet, in dem Jargon der Neuronen also „feuert“. Das Resultat lautet entweder 0 oder 1.

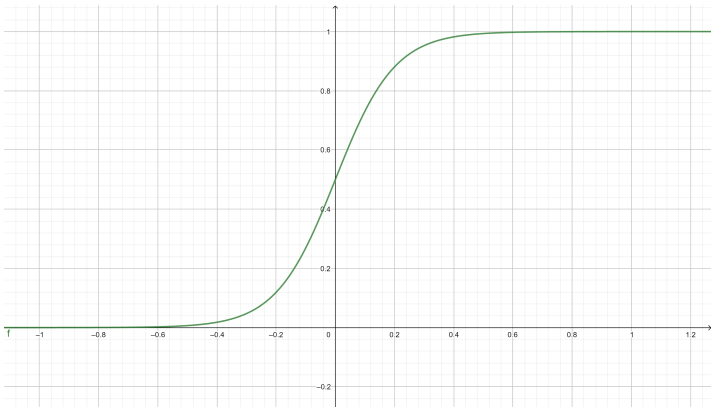


Abbildung 3.2: Die Sigmoid-Funktion

Für die weitere Verwendung ist vor allem die Ableitung der Sigmoide interessant, welche in den nachfolgenden Zeilen behandelt wird. Zuerst wird der Bruch durch eine andere Schreibweise (Exponent -1) dargestellt. Weiterhin lässt sich die Sigmoide als Verkettung von zwei Funktionen f und y schreiben.

$$sig(t) = (1+e^{-t})^{-1} \longrightarrow y(t) = 1+e^{-t}, f(t) = y(t)^{-1} \tag{3.4}$$

[1] Die Sigmoid-Funktion kann über einen Parameter modifiziert werden. Die eigentliche Funktion lautet $sig(t) = \frac{1}{1+e^{-\alpha \cdot t}}$. Für die Abbildungen der Sigmoide wie deren Ableitung wurde ein Parameter $\alpha = 10$ gewählt. Für die Herleitung der Ableitungskette der neuronalen Netze wie auch bei der weiteren Erklärung in diesem Kapitel wird der Wert auf 1 belassen. Für die Abbildung wurde ein höherer Wert gewählt, um den Effekt der Ableitung nahe 0 zu verdeutlichen.

Es handelt sich also um eine äussere und innere Funktion, wobei nun die Ableitungsregel 3.1 angewendet wird. Für die innere Ableitung wird noch die Regel $f(x) = e^x \longrightarrow f'(x) = e^x$ verwendet.

$$\frac{\delta f(t)}{\delta t} = (-1) \cdot (y(t))^{-2} \tag{3.5}$$

$$\frac{\delta y(t)}{\delta t} = (e^{-t}) \cdot (-1) \tag{3.6}$$

Nach der Kettenregel resultiert:

$$\frac{\delta sig(t)}{\delta t} = (-1) \cdot (1 + e^{-t})^{-2} \cdot (e^{-t}) \cdot (-1) \tag{3.7}$$

$$\frac{\delta sig(t)}{\delta t} = \frac{e^{-t}}{(1 + e^{-t})^2} \tag{3.8}$$

Nun wird $\frac{1}{1+e^{-t}}$ ausgeklammert.

$$\frac{\delta sig(t)}{\delta t} = \frac{1}{1 + e^{-t}} \cdot \frac{e^{-t}}{1 + e^{-t}} \tag{3.9}$$

Es wird $\frac{1}{1+e^{-t}}$ dazuaddiert und abgezogen, damit der Faktor umgeformt werden kann.

$$\frac{\delta sig(t)}{\delta t} = \frac{1}{1 + e^{-t}} \cdot \frac{e^{-t} + 1 - 1}{1 + e^{-t}} \tag{3.10}$$

$$\frac{\delta sig(t)}{\delta t} = \frac{1}{1 + e^{-t}} \cdot (\frac{1 + e^{-t}}{1 + e^{-t}} - \frac{1}{1 + e^{-t}}) \tag{3.11}$$

Es resultiert die Ableitung in bekannter Form 3.12

$$\frac{\delta sig(t)}{\delta t} = sig(t) \cdot (1 - sig(t)) \tag{3.12}$$

Auch hier kann eine geometrische Interpretation in Abbildung 3.3 erfolgen. Ersichtlich wird nun, dass die Steigung nur in einem sehr kleinen Intervall stark ungleich 0 ist. Dies bedeutet, dass sich im Falle eines solchen Variablenwerts, wo die Steigung fast 0 ist, kaum eine Korrektur durch den Gradienten[2] durchzuführen ist. Daher werden heutzutage Aktivierungsfunktionen wie die „ReLU“ oder „LeakyReLU“ verwendet, welche dieses Problem beheben.

[2] Siehe Kapitel 3.4

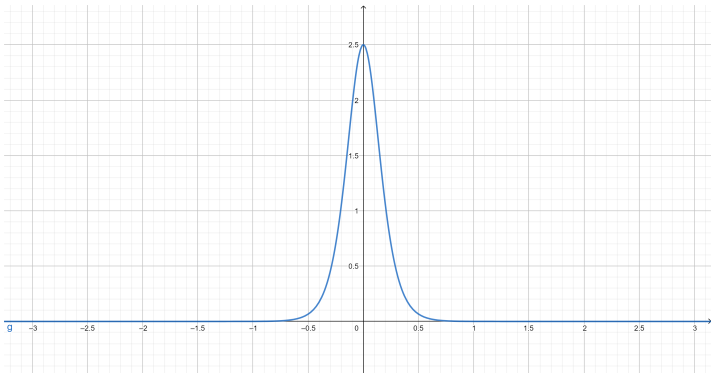


Abbildung 3.3: Die Ableitung der Sigmoid-Funktion

3.4 Der Gradient

Der Gradient beschreibt einen Vektor, welcher in Richtung des steilsten Anstiegs einer Funktion zeigt. Die Komponenten des Gradientenvektors bestehen aus den partiellen Ableitungen der Funktion an der jeweiligen Variablen.

$$\nabla f(x,y) \longrightarrow \left(\frac{\delta f(x,y)}{\delta x} \quad \frac{\delta f(x,y)}{\delta y}\right) \tag{3.13}$$

Geometrisch kann dies an der Position $(x = 1, y = 1)$ für die Funktion $f(x,y) = x^2 + y^2$ wie in Abbildung 3.4 aussehen. Zu beachten sei hier, dass der eigentliche Gradient in der XY-Ebene liegt (blau). Der schwarze Vektor soll lediglich anzeigen, was eine Verschiebung in dieser Richtung bei der Eingabe der Variablen für den Ausgabewert der Funktion bedeutet. Die Länge des Gradienten entspricht der Stärke der Steigung an diesem Punkt.

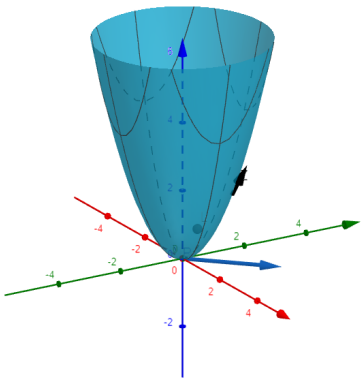


Abbildung 3.4: Gradient an der Position $(1,1)$

3.5 Das Gradientenabstiegsverfahren

Hierbei handelt es sich um ein Optimierungsverfahren, um einen Maximal- oder Minimalwert[3] einer gegebenen Zielfunktion zu finden. Es wird in dem Fall der Gradient, wie in Kapitel 3.4 besprochen, verwendet. Die Idee ist, dass man bei einer Maximierung in kleinen Schritten in Richtung des Gradienten folgt. Als Beispiel wird eine Funktion angegeben, die von zwei Variablen x, y abhängig ist. Beim Wert λ handelt es sich um die Lernrate, welche die Länge der zu gehenden Schritte beeinflusst. Der $\vec{\nabla}$ steht hierbei für den Gradienten.

$$\begin{pmatrix} x_{neu} & y_{neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{alt} & y_{alt} \end{pmatrix} + \lambda \cdot \vec{\nabla} \tag{3.14}$$

Geometrisch kann wiederum die Abbildung 3.4 hinzugezogen werden. Dort würde man in einem ersten Schritt in Richtung des schwarzen Vektors gehen, respektive in Richtung des Blauen, wenn man nur die Variablen beachtet.

[3] Obwohl das Verfahren Gradientenabstieg heisst, kann ebenso ein Gradientenaufstieg durchgeführt werden. Dies ist auch der Ansatz, der in diesem Kapitel erwähnt wird. Beim Gradientenabstieg wird lediglich der Gradientenvektor in die umgekehrte Richtung verfolgt, man sucht also ein Minimum. Die Formel lautet in dem Fall $\vec{w_{neu}} = \vec{w_{alt}} - \lambda \cdot \vec{\nabla}$, wobei der Vektor $\vec{w}$ für die anzupassenden Variablen steht.