Vorlesung Computational Intelligence:

Teil 3: Künstliche Neuronale Netze

Multi-Layer-Perceptron-Netze (MLP-Netze),
Radial-Basis-Funktions-Netze (RBF-Netze),

Ralf Mikut, Wilfried Jakob, Markus Reischl
Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Automation und angewandte Informatik
E-Mail: ralf.mikut@kit.edu, wilfried.jakob@kit.edu

jeden Donnerstag 14:00-15:30 Uhr, Nusselt-Hörsaal

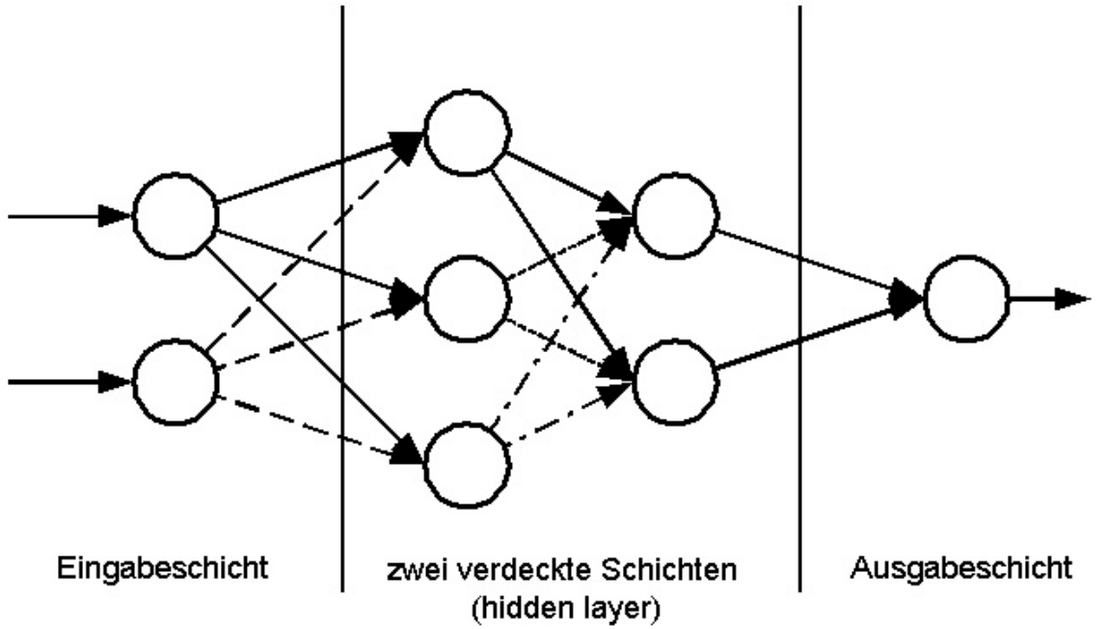
Gliederung

Multi-Layer-Perceptron-Netze (MLP-Netze)

Das MLP-Netz ist dadurch gekennzeichnet, dass

- die Neuronen in mehreren Schichten (Ebenen) angeordnet sind
- Feedforward-Netz
- Bestimmung des Zustands: gewichtete Summe mit Absolutterm
- Aktivierungsfunktion für verdeckte Schicht meist Tansig- oder Sigmoid-Funktion

Veranschaulichung (Beispiel mit V=4 Schichten):



Hierbei handelt es sich um eine Erweiterung des klassischen Perceptrons (besteht nur aus einem einzigen Neuron). Das MLP-Netz ist ein statisches Netz.

Schichten von MLPs (1)

Neuronen der Eingabeschicht (Schicht v = 1):

- verteilen die Eingangswerte auf die Neuronen der ersten verdeckten Schicht
- jedes Neuron hat deshalb nur einen Eingang, dieser Eingang ist auch Eingang des Netzes
- meist lineare Aktivierungsfunktionen

Neuronen der verdeckten Schichten (v = 2...V-1) und der Ausgabeschicht (v=V):

- Eingang eines jeden Neurons ist in der Regel mit allen Neuronen der Vorgängerschicht verbunden
- zusätzlicher Eingang mit Wert Eins (Gewicht w_{i0})
- Zustand z_i des Neurons berechnet sich aus der mit w_{ij} gewichteten Summe der Ausgänge der Neuronen der vorherigen (v-1). Schicht:

$$z_i^{(v)} = w_{i0}^{(v)} + \sum_j w_{ij}^{(v)} y_j^{(v-1)}$$

Schichten von MLPs (2)

- Ausgang des Neurons berechnet sich aus Aktivierungsfunktion für den Zustand z

$$y_i^{(v)} = f_i^{(v)}(z_i^{(v)})$$

- Ausgabeschicht: f meist linear
- Ausgang der Neuronen der Ausgabeschicht = Ausgang des Netzes
  - für Regressionsaufgaben häufig ein Ausgang
  - für Klassifikationsaufgaben meist mehrere Ausgänge (z.B. 3 Klassen o.k., Fehler Typ A, Fehler Typ B) jeweils als ein Neuron kodieren (einfacheres Lernen), Details siehe Vorlesung "Datenanalyse für Ingenieure" im Sommersemester
- Struktur:
  - Anzahl der Schichten V
  - Anzahl der Neuronen in den Schichten
  - Typ der Aktivierungsfunktion
- Parameter:
  - Gewichte der Verbindungen

Einfaches MLP-Beispiel

- 1 Eingang x_1, 1 Ausgang y_1, 1 verdeckte Schicht (V=3)
- lineare Aktivierungsfunktionen f für Eingangs- und Ausgangsneuron
- tansig-Aktivierungsfunktion in verdeckter Schicht
- zusätzliche Schwellwerte in verdeckter Schicht und am Ausgangsneuron

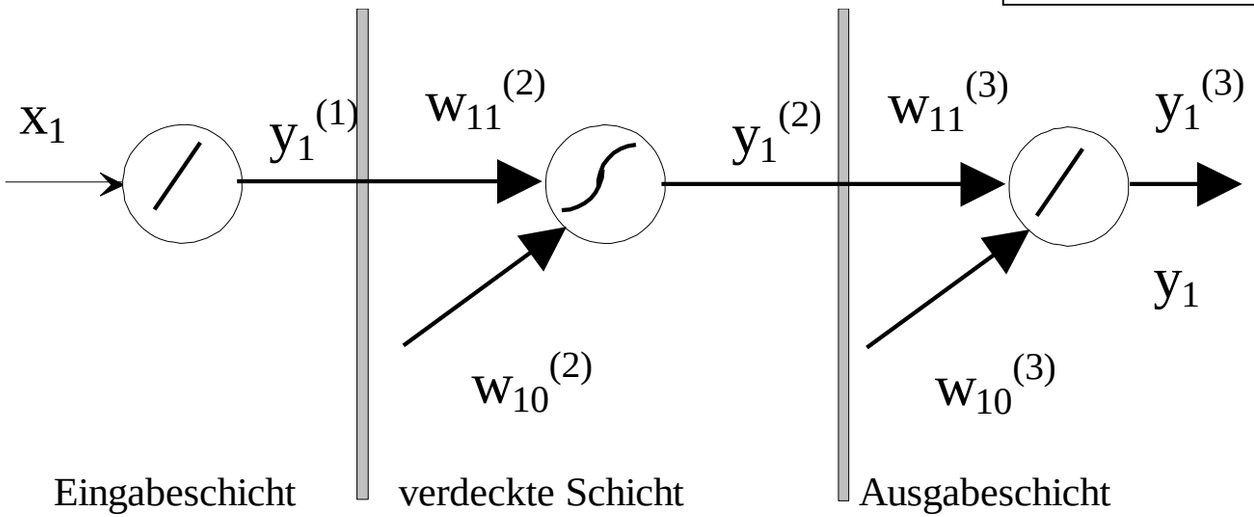
$$y_1^{(1)} = f_1^{(1)}(x_1) = x_1$$

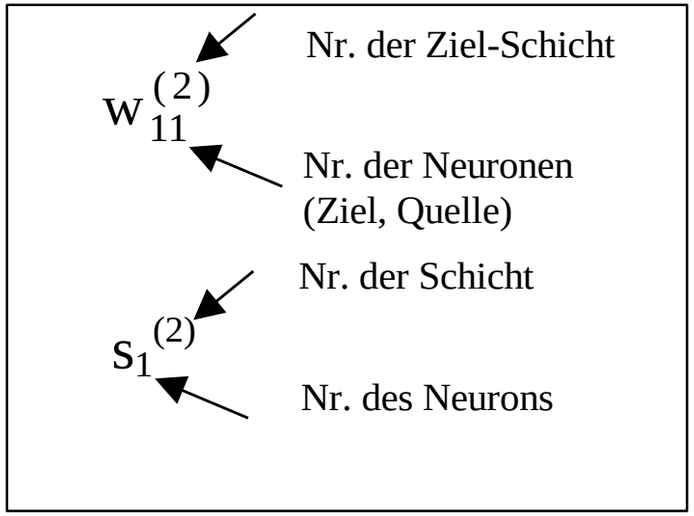
$$y_1^{(2)} = f_1^{(2)}(z_1^{(2)}) = \frac{2}{1+e^{-2(w_{11}^{(2)} y_1^{(1)} + w_{10}^{(2)})}} - 1$$

$$\hat{y}_1 = y_1^{(3)} = f_1^{(3)}(z_1^{(3)})$$

$$= w_{11}^{(3)} y_1^{(2)} + w_{10}^{(3)}$$

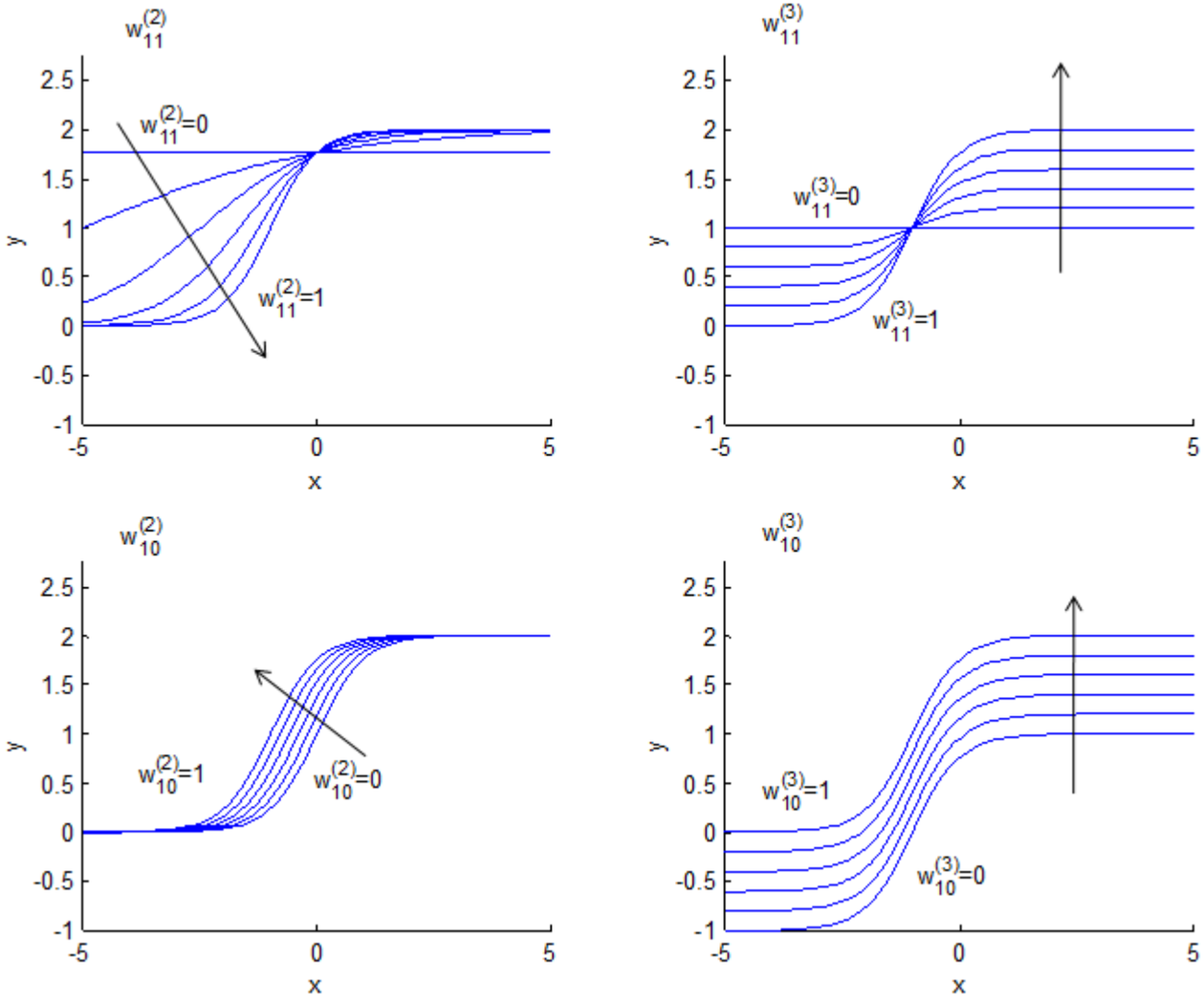
$$= w_{11}^{(3)} \left(\frac{2}{1+e^{-2(w_{11}^{(2)} x_1 + w_{10}^{(2)})}} - 1 \right) + w_{10}^{(3)}$$



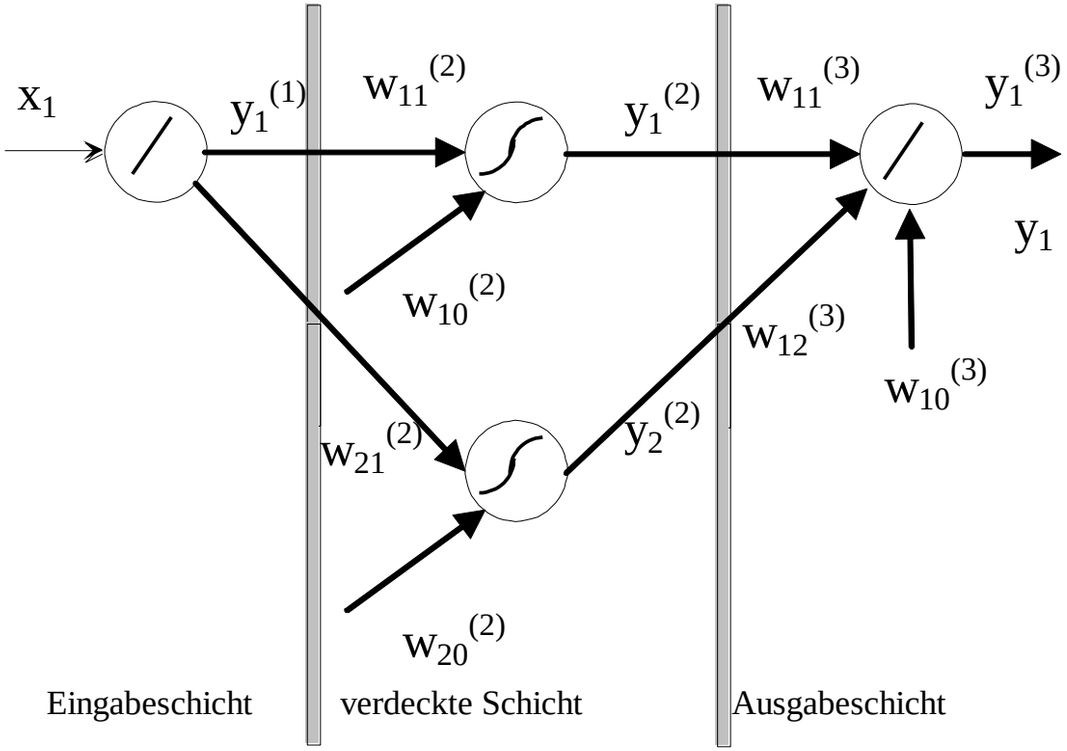


Wirkung der einzelnen Parameter (3 Neuronen)

- $w_{11}^{(2)}$ - Gewicht zwischen Neuron Eingabeschicht und Neuron verdeckte Schicht (oben links)
- $w_{11}^{(3)}$ - Gewicht zwischen Neuron verdeckter Schicht und Neuron Ausgabe-schicht (oben rechts)
- $w_{10}^{(2)}$ - Absolut-Term Neuron verdeckte Schicht (unten links)
- $w_{10}^{(3)}$ - Absolut-Term Neuron Ausgabeschicht (unten rechts)
- Änderung je ein Parameter zwischen 0 und 1, alle anderen Parameter sind 1



Erweiterung um 2. Neuron in verdeckter Schicht



$$y_2^{(2)} = f_2^{(2)}(z_2^{(2)}) = \left(\frac{2}{1+e^{-2(w_{21}^{(2)} y_1^{(1)} + w_{20}^{(2)})}} - 1 \right)$$

$$\hat{y}_1 = y_1^{(3)} = f_1^{(3)}(z_1^{(3)})$$

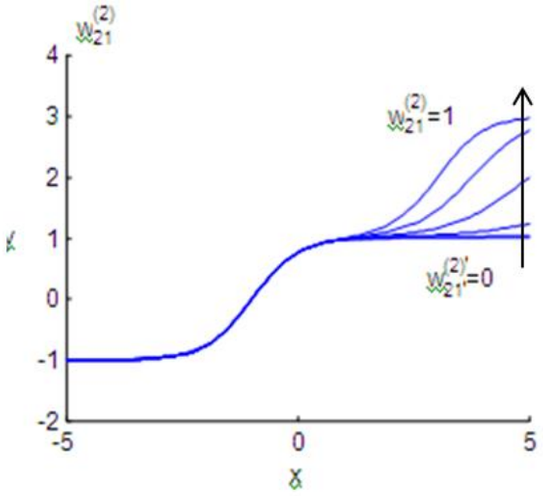
$$= w_{11}^{(3)} y_1^{(2)} + w_{10}^{(3)} + w_{12}^{(3)} y_2^{(2)}$$

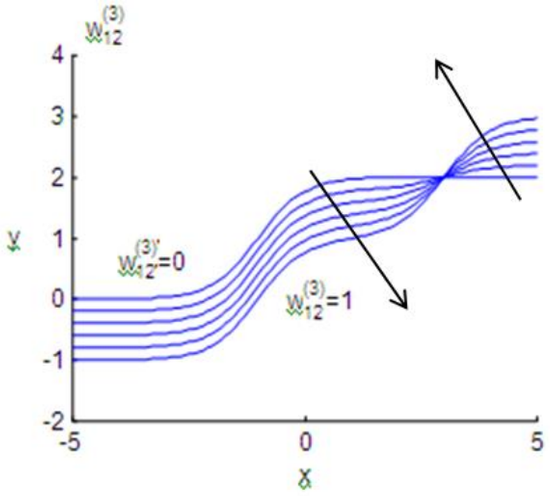
$$= w_{11}^{(3)} \left(\frac{2}{1+e^{-2(w_{11}^{(2)} x_1 + w_{10}^{(2)})}} - 1 \right) + w_{10}^{(3)}$$

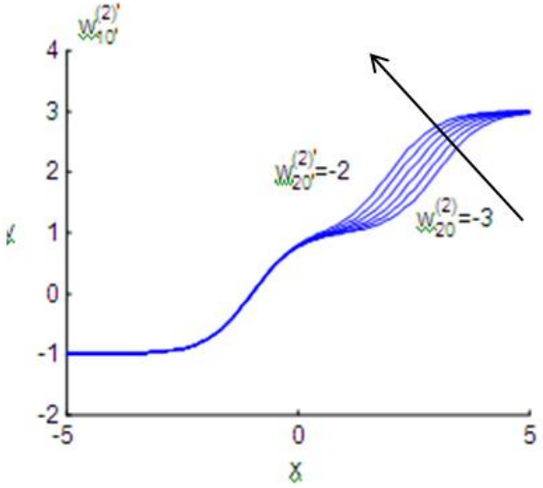
$$+ w_{12}^{(3)} \left(\frac{2}{1+e^{-2(w_{21}^{(2)} x_1 + w_{20}^{(2)})}} - 1 \right)$$

Wirkung der einzelnen Parameter (4 Neuronen)

- $w_{21}^{(2)}$ - Gewicht zwischen Neuron Eingabeschicht und 2. Neuron verdeckte Schicht (oben links)
- $w_{12}^{(3)}$ - Gewicht zwischen 2. Neuron verdeckter Schicht und Neuron Ausgabeschicht (oben rechts)
- $w_{20}^{(2)}$ - Absolut-Term 2. Neuron verdeckte Schicht (unten links)
- Standard:
  $w_{21}^{(2)} = 1$,
  $w_{12}^{(3)} = 1$,
  $w_{20}^{(2)} = -3$,
- Änderung:
  $w_{21}^{(2)} = 0...1$,
  $w_{12}^{(3)} = 0...1$,
  $w_{20}^{(2)} = -2...-3$







Jedes Neuron hat <u>globale</u> Wirkung!!!

Hausaufgabe (5 Neuronen)

Erweitern Sie das Netz um ein 3. Neuron in verdeckter Schicht!

Fragen:

1. Welche Parameter kommen dazu?
2. Welche Terme kommen dazu?
3. Ermöglicht die Erweiterung den Aufbau anderer Funktionen?
4. Unter welchen Voraussetzungen beeinflusst das 3. Neuron den Ausgang nicht?

Bestimmung der Parameter (1)

- Alle Gewichte werden in einen Vektor $\mathbf{w}_{MLP}$ geschrieben
- Gütekriterium: Summe der quadratischen Fehler minimieren (entspricht der Euklidischen Distanz d_{Euk} zwischen Ausgangsgrößen im Lerndatensatz und den Ausgangsgrößen des Netzes, überwachtes Lernen)

$$Q = (d_{Euk}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}))^2 = \sum_{n=1}^{N} (y[n] - \hat{y}[n])^2 = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^T \cdot (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

- Ausgangsgrößen des Netzes hängen in komplizierter Form von den Parametern ab, siehe vorherige Beispiele
- deswegen existiert keine geschlossene Lösung
- rekursives Verfahren:

$$\mathbf{w}_{MLP}[k+1] = \mathbf{w}_{MLP}[k] - \rho[k]\mathbf{W}_{rek}[k] \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{w}_{MLP}}\Big|_{\mathbf{w}_{MLP}[k]}, \rho \in [0,1]$$

- Startlösung meist zufällig
- $\mathbf{W}_{rek}$ ist Wichtungsmatrix, im einfachsten Fall Einheitsmatrix

Bestimmung der Parameter (2)

- Hauptproblem: Berechnung des Gradienten $\frac{\partial Q}{\partial \mathbf{w}_{MLP}}\Big|_{\mathbf{w}_{MLP}[k]}$

- Zwei Lösungswege:
  - kleine Änderungen an w_{ij} durchführen, neues Q und Gradient ausrechnen (numerisch extrem aufwändig, jedes Mal komplette Netzberechnung)
  - Gradient geschlossen berechnen (eleganter!), dazu muss Q nach jedem (!) Gewicht abgeleitet werden
    - Bei vielen Netzen (z.B. MLP) ist Ausnutzung der Feedforward- und Schichtenstruktur möglich
    - Fehler wird rückwärts von Ausgabeschicht ausgehend nach vorn verteilt
    - daher der Name "Backpropagation-Verfahren"

- Auch noch zu klären: Berechnung der Rekursion und der Gradienten
  - separat für jedes Datentupel oder
  - für alle Datentupel (Batch-Verfahren)

Bestimmung der Parameter (3)

Geschlossene Berechnung des Gradienten (MLP, 4 Neuronen, Auszüge):

$$\hat{y} = w_{11}^{(3)} \left(\frac{2}{1+\exp\left(-2\left(w_{11}^{(2)} y_1^{(1)} + w_{10}^{(2)}\right)\right)} - 1 \right) + w_{10}^{(3)}$$

$$+ w_{12}^{(3)} \left(\frac{2}{1+\exp\left(-2\left(w_{21}^{(2)} y_1^{(1)} + w_{20}^{(2)}\right)\right)} - 1 \right)$$

$$Q = \sum_{n=1}^{N} (y[n] - \hat{y}[n])^2$$

$$\frac{\partial Q}{\partial w_{10}^{(3)}} = 2 \sum_{n=1}^{N} (y[n] - \hat{y}[n])$$

$$\frac{\partial Q}{\partial w_{11}^{(3)}} = 2 \sum_{n=1}^{N} (y[n] - \hat{y}[n]) \underbrace{\left(\frac{2}{1+\exp\left(-2\left(w_{11}^{(2)} y_1^{(1)}[n] + w_{10}^{(2)}\right)\right)} - 1 \right)}_{y_1^{(2)}[n]}$$

Bestimmung der Parameter (4)

- Gradient kann für alle Schichten rückwärts und symbolisch berechnet werden
- Formeln in Computerprogrammen hinterlegt
- Zwischenergebnisse müssen abgespeichert werden
- Rolle von $\mathbf{W}_{rek}$ in (ρ[k]: Parameter)

$$\mathbf{w}_{MLP}[k+1] = \mathbf{w}_{MLP}[k] - \rho[k]\mathbf{W}_{rek}[k]\frac{\partial Q}{\partial \mathbf{w}_{MLP}}|_{\mathbf{w}_{MLP}[k]}, \rho \in [0,1]$$

  - Gradientenabstieg (manchmal auch als Backpropagation bezeichnet)
    $\mathbf{W}_{rek}[k] = \mathbf{I}$
  - Levenberg-Marquardt-Verfahren:

    $\mathbf{W}_{rek}[k] = (\hat{\mathbf{H}} + \alpha[k] \cdot \mathbf{I})^{-1}$, $\alpha[k]$ – Wichtungsfaktor

    α = 0: Newton-Verfahren

Hesse-Matrix $\mathbf{H}$: Matrix der partiellen zweiten Ableitungen des Bewertungsmaßes nach den Parametern mit Elementen $H_{ij} = \partial^2 Q/(\partial w_{MLP,i} \cdot \partial w_{MLP,j})$

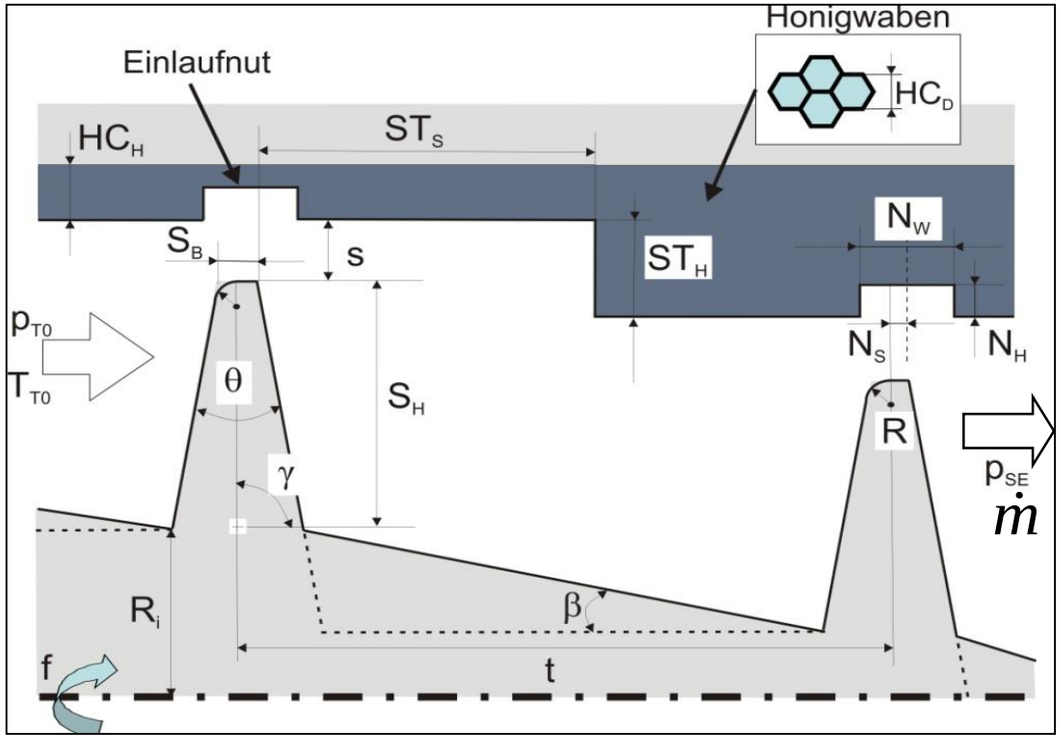
Kommentare

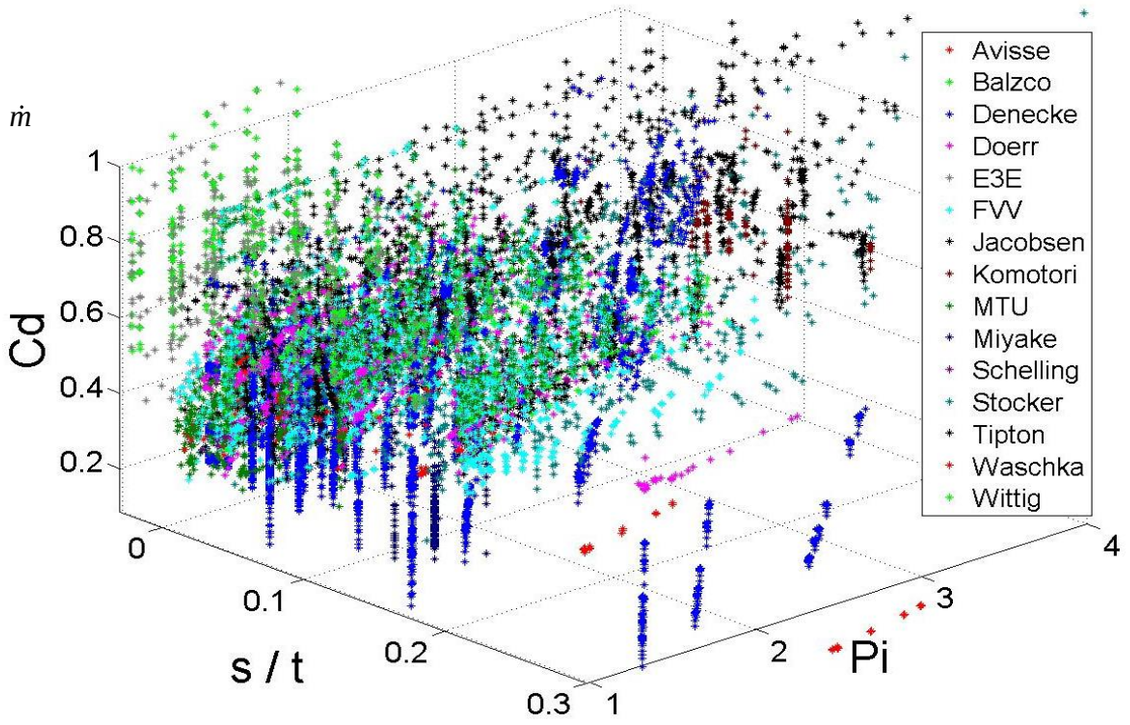
- Verfahren zur Bestimmung der Parameter:
  - garantieren keine optimale Lösung, alle genannten Verfahren können in lokalen Minima der Gütefunktion stagnieren
  - Gradientenabstieg konvergiert oft extrem langsam
  - Levenberg-Marquardt-Verfahren konvergiert viel schneller, erfordert aber die aufwändige Berechnung der Hesse-Matrix (u.U. Laufzeit- oder Speicherprobleme im Computer, insbesondere bei großen Netzen)
  - Backpropagation wird oft auch als Synonym für Gradientenabstieg benutzt
- Struktursuche:
  - oft Heuristiken
  - mit extrem einfachen Netzen beginnen (eine verdeckte Schicht, 2-3 Neuronen) und langsam steigern
  - zu komplizierte Strukturen führen zu Overfitting (siehe Übung)
  - Validierung mit unbekannten Testdaten oder Validierungsverfahren (siehe Vorlesung "Datenanalyse für Ingenieure" im Sommersemester)

Durchblick- und Stufenlabyrinthe [Pychynski09,10]

Karlsruher Institut für Technologie

Datensammlung zum Durchflussverhalten von Durchblick- und Stufenlabyrinthen:





Komplexes System mit 21 Einflussparametern

Datensatz mit 15.297 Datentupeln aus 15 Quellen

[Pychynski09] Pychynski, T.: Anwendung von Data Mining Methoden zur Analyse von Turbomaschinenkomponenten am Beispiel des Durchflussverhaltens von Labyrinthdichtungen. *Karlsruher Institut für Technologie (KIT),* **2009**

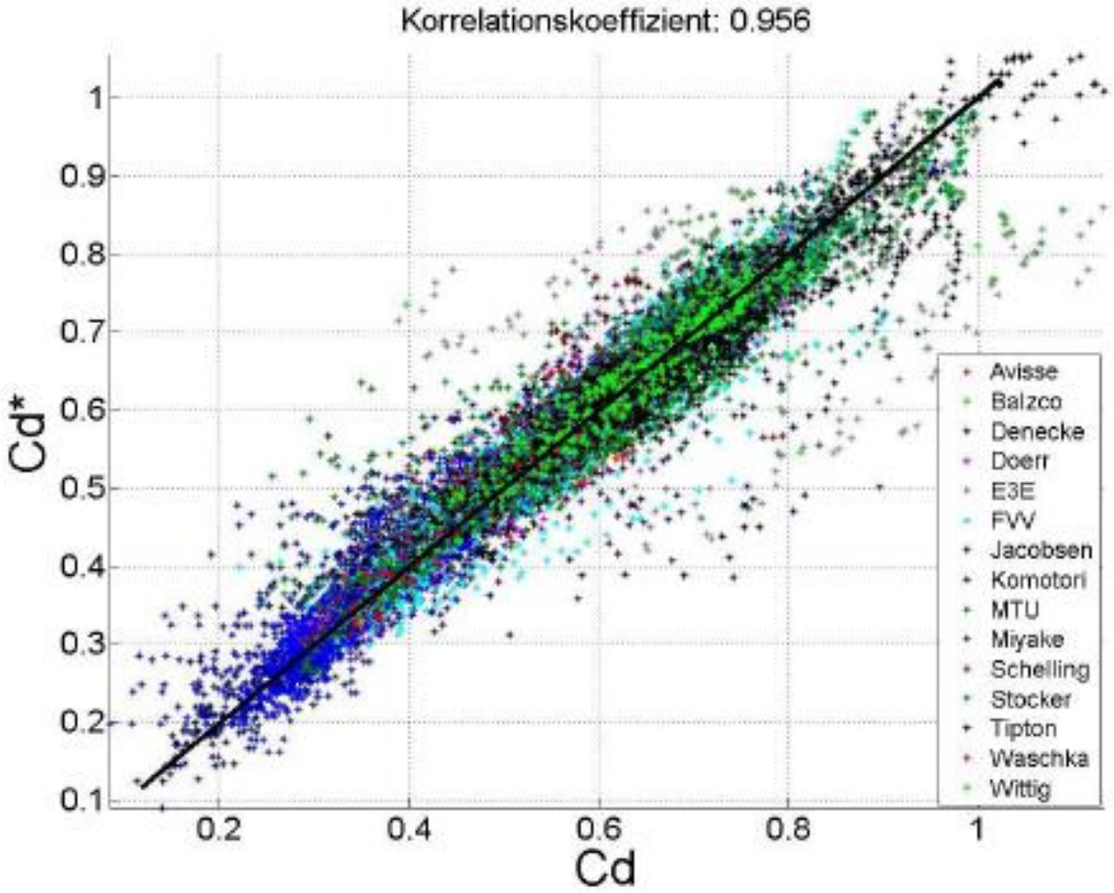
[Pychynski10] Pychynski, T.; Blesinger, G.; Mikut, R.; Dullenkopf, K. & Bauer., H.-J.: Modelling the Labyrinth Seal Discharge Coefficient Using Data Mining Methods. *Proc., ASME TURBO EXPO; Glasgow,* **2010**

Hinweise

- Ein Ausgangsneuron: Durchflussbeiwert C_d (dimensionsloser Leckagestrom)
- Strukturentscheidungen:
  - MLP mit einer verdeckten Schicht, Zahl Neuronen in dieser Schicht schrittweise steigern (1...30)
  - Eingangsgrößen u.U. vorher kombinieren (Verhältnisse wie s/t) und als neue Eingangsgrößen verwenden
  - nicht mit allen 21 Merkmalen als Eingangsgrößen des Netzes arbeiten
  - konsequente Merkmalsauswahl durch Durchprobieren von Netzstrukturen, beginnend mit einem Eingang, gute Ergebnisse ab 4 Merkmalen ("Wrapper-Verfahren", siehe "Datenanalyse für Ingenieure" im Sommersemester)
- Gibt es irgendwelche Fallen?
  Daten z.T. auf Papier, schlechte Datenqualität (Abdeckung Merkmalsraum, nicht gemessene Merkmale)

Lösung [Pychynski09,10]

- Regressionsmodelle mit Polynomen und Künstlichen Neuronalen Netzen (MLP mit 30 Neuronen in der verdeckten Schicht)
- Polynome ab Grad 2 o.k., Neuronale Netze besser
- Bewertung mit Korrelationskoeffizienten zwischen Cd und Schätzung von Cd für jedes Modell, je nach Modell zwischen 0.95 - 0.99
- ACHTUNG! Modellgüte nur in der Nähe von existierenden Datentupeln gut, Probleme in schlecht abgedeckten Bereichen



Gliederung

Radial-Basis-Funktions-Netze (RBF-Netze)

- Idee aus mathematischer Interpolations-/Approximationstheorie
- gegeben:
  - N Datentupel mit
    - bekannten Eingangsgrößen **x**[n], n=1,...,N, **x** ist s-dimensional, und
    - bekannten Ausgangsgrößen y[n], n=1,...,N
  - gesucht: Funktion y = f(**x**), die diese Punkte verbindet
    - Interpolation:
      Funktion läuft GENAU DURCH diese Punkte
    - Approximation/Regression:
      Funktion läuft IN DER NÄHE dieser Punkte weil
      - auf y Störungen liegen (Regression) oder
      - der funktionelle Zusammenhang anders ist (Approximation) oder
      - sowohl Störungen als auch andere funktionelle Zusammenhänge vorliegen (Approgression)
- Eine Lösungstechnik wählt f(.) als Linearkombination von radialsymmetrischen Basisfunktionen

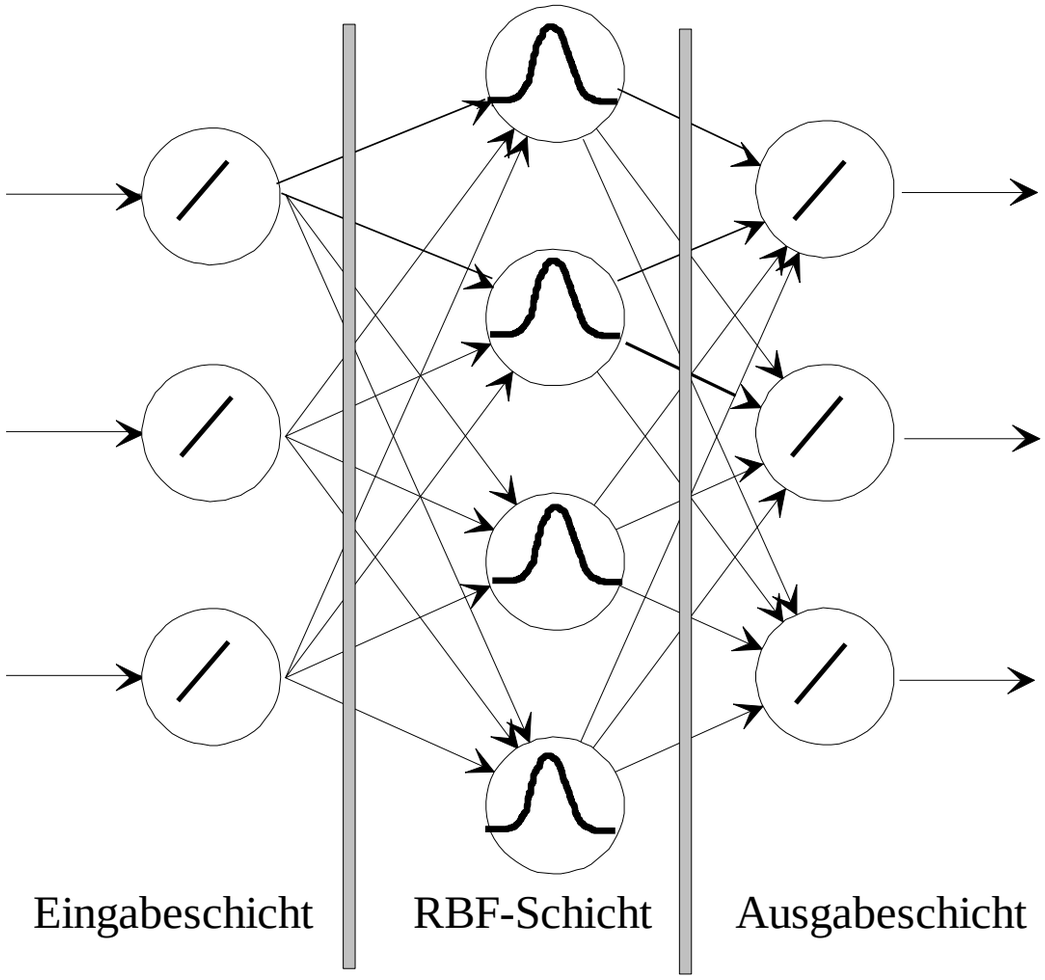
RBF-Netze

Eigenschaften:

- Neuronen in drei Schichten:
  - Eingabeschicht,
  - nur **eine** Schicht mit RBF-Neuronen,
  - Ausgabeschicht
- Verbindungen zwischen den Neuronen vorwärts gerichtet (Feedforward-Netz)
- Funktionen zur Bestimmung des Zustands der RBF-Neuronen sind Gaußfunktionen:

$$z(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{w})^T (\mathbf{x}-\mathbf{w})}$$

$$= e^{-w_0 \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{w})^T (\mathbf{x}-\mathbf{w})}$$



Struktur von RBF-Netzen

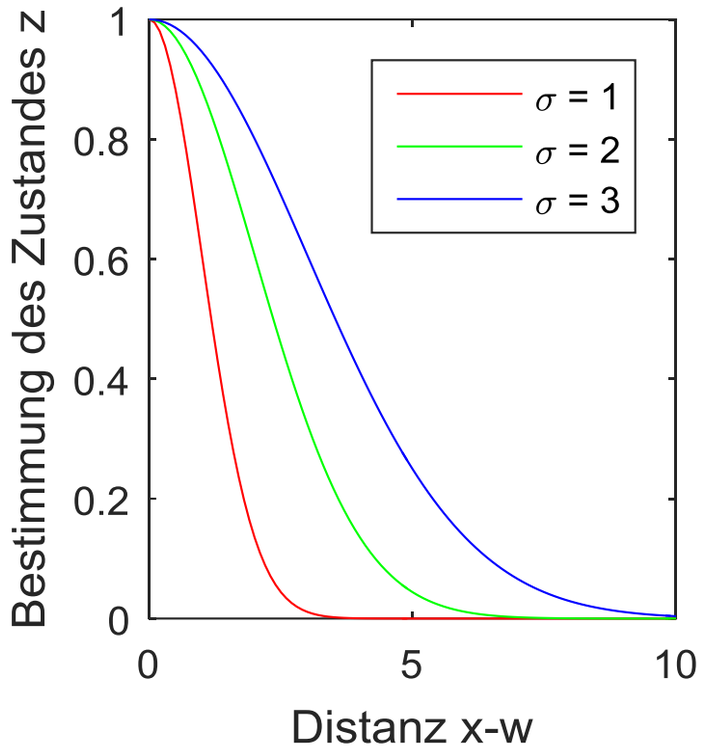
Verdeckte Schicht (RBF-Schicht):

- Parameter w_{ij} kennzeichnen den „Mittelpunkt“ der RB-Funktion (vgl. Mittelwert Normalverteilung)
- Parameter σ (als Teil von w_0) definiert Breite der Funktion (vgl. Streuung der Normalverteilung)
- lineare Aktivierungsfunktion f(z) = z
- für jedes Neuron der RBF-Schicht gilt

$$y_i^{(2)} = e^{-s_i^{(2)}} = \exp\left(-w_{i0}^{(2)} \sum_j (x_j - w_{ij}^{(2)})^2 \right)$$

mit $w_{i0}^{(2)} = \frac{1}{2\sigma^2}$

(σ meist für alle Neuronen gleich, bei Bedarf auch spezifisch für jedes Neuron $\sigma_i^{(2)}$)



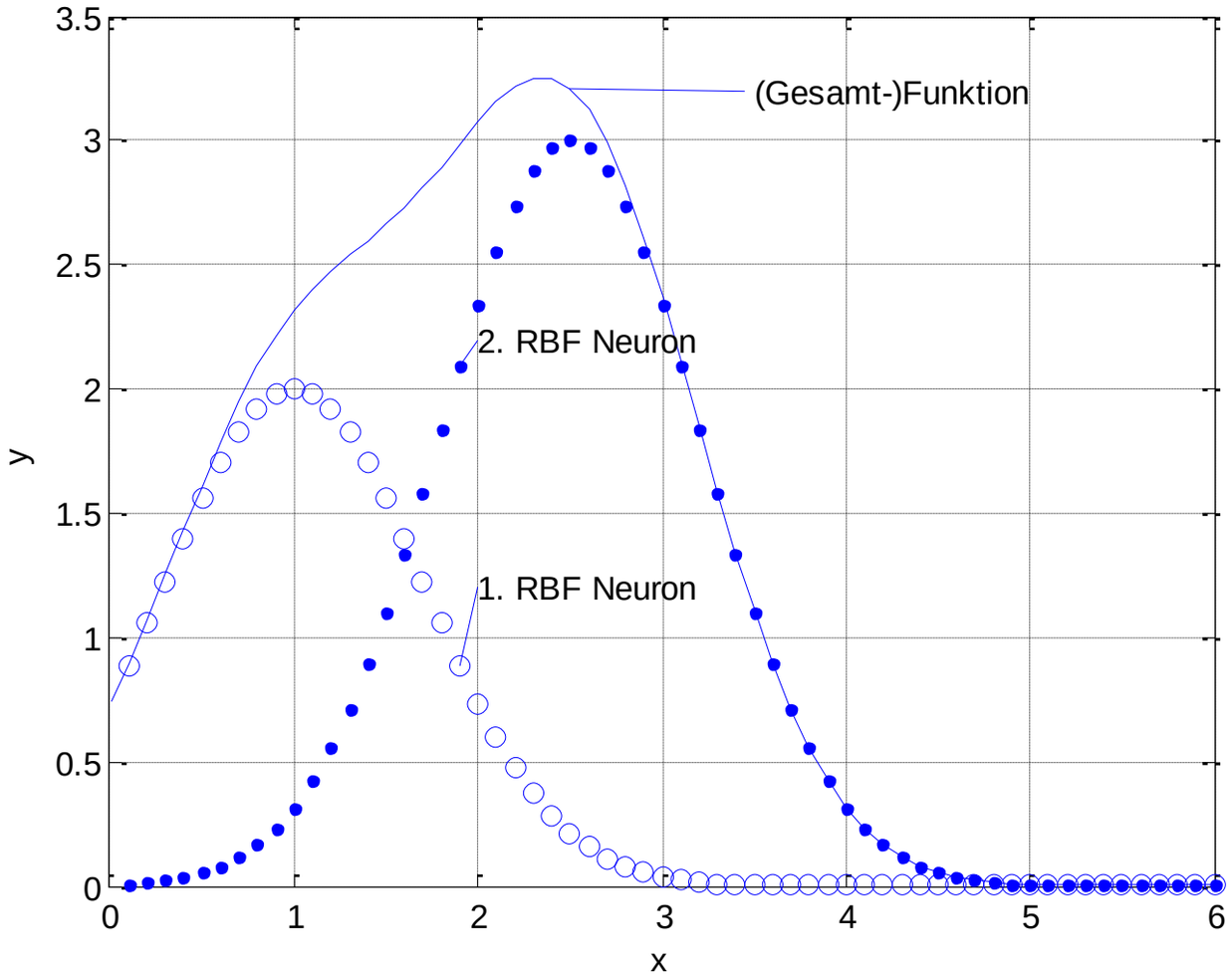
Veranschaulichung Verhalten mit 2 Neuronen

$$y = w_{11}^{(3)} \exp\left(-w_{10}^{(2)}(x - w_{11}^{(2)})^2\right) + w_{12}^{(3)} \exp\left(-w_{20}^{(2)}(x - w_{21}^{(2)})^2\right)$$

Ein Neuron in der Eingabeschicht,
ein Neuron in der Ausgabeschicht

Parameter:

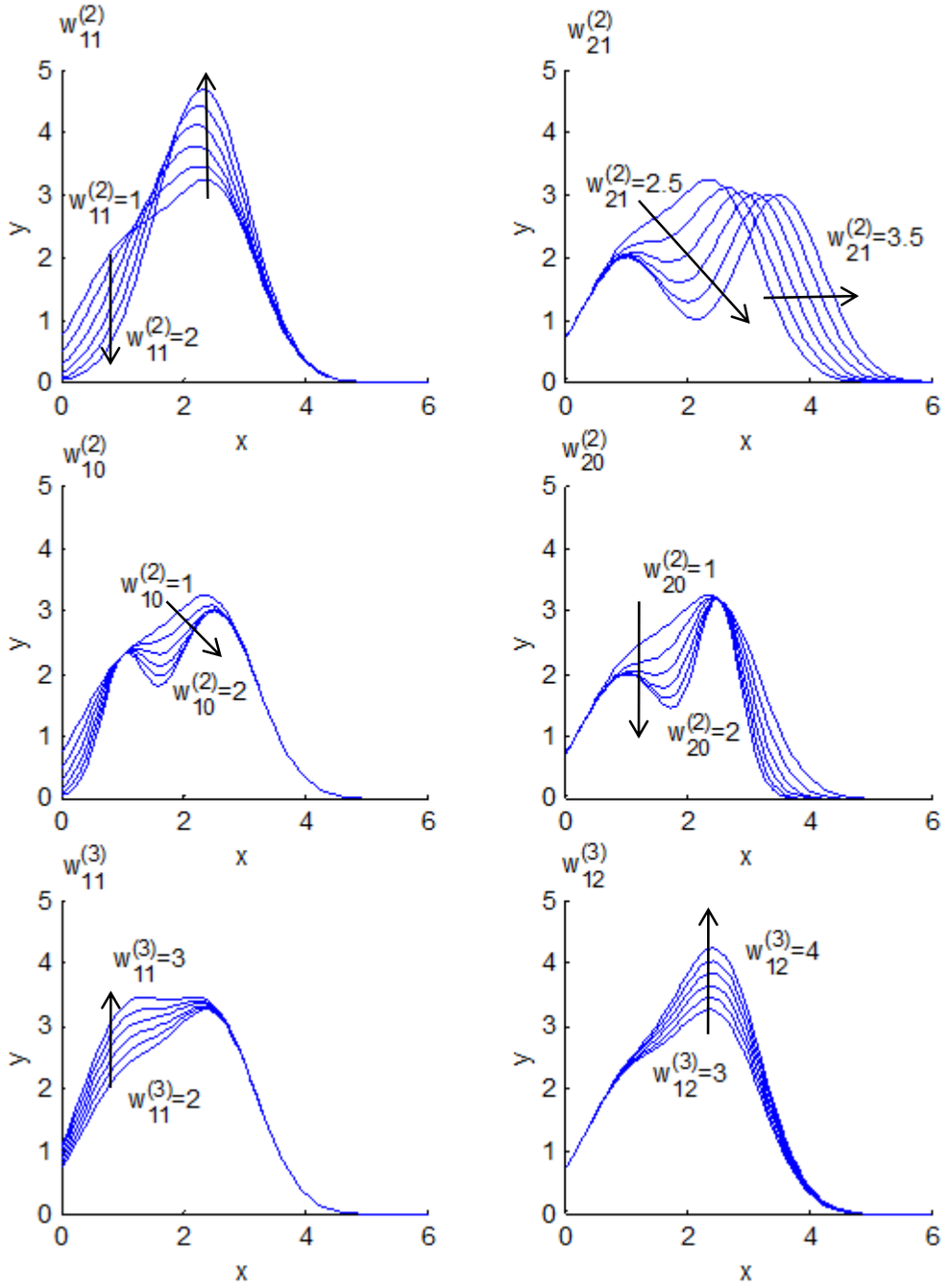
- $w_{11}^{(2)} = 1$
  Veränderung 1..2
- $w_{21}^{(2)} = 2.5$
  Veränderung 2.5..3.5
- $w_{11}^{(3)} = 2$
  Veränderung 2..3
- $w_{12}^{(3)} = 3$
  Veränderung 3..4
- $w_{10}^{(2)} = 1$
  Veränderung 1...2
- $w_{20}^{(2)} = 1$,
  Veränderung 1...2



Wirkung der Parameter

Auswirkung der Veränderungen:

- $w_{11}^{(2)}$ - Gewicht zwischen Neuron Eingabeschicht und 1. RBF-Neuron (oben links)
- $w_{21}^{(2)}$ - Gewicht zwischen Neuron Eingabeschicht und 2. RBF-Neuron (oben rechts)
- $w_{10}^{(2)}$ - Skalierung Einzugsbereich 1.RBF Neuron (mitte links)
- $w_{20}^{(2)}$ - Skalierung Einzugsbereich 2.RBF Neuron (mitte rechts)
- $w_{11}^{(3)}$ - Gewicht zwischen 1. RBF- Neuron und Neuron Ausgabeschicht (unten links)
- $w_{12}^{(3)}$ - Gewicht zwischen 2. RBF-Neuron und Neuron Ausgabeschicht (unten rechts)



Lernen von RBF-Netzen

- Lernen der optimalen Gewichte zum Ausgangsneuron $w_{1j}^{(3)}$
  - mit linearer Aktivierungsfunktion am Ausgangsneuron ergibt sich parameterlineares Schätzproblem
  - kann mit Methode der kleinsten Fehlerquadrate (engl. Least Square) optimal bestimmt werden
- Platzierung der RBF-Neuronen $w_{ij}^{(2)}$
  - nichtlineares Problem
  - mehrere Algorithmen:
    - schrittweise Erhöhung der Anzahl der RBF-Neuronen (z.B. MATLAB-Funktion "newrb.m")
      1. Platzierung eines neuen Neurons am Datentupel mit dem größten Fehler
      2. Lernen der optimalen Gewichte zum Ausgangsneuron für RBF-Netz
      3. Abbruch, wenn Zielgütewerte erreicht, sonst Fortsetzen mit 1.
    - Platzierung auf regelmäßigem Gitter
    - Clusterverfahren (Vorlesung "Datenanalyse für Ingenieure" im Sommersemester)

Kommentare zum Verhalten von RBF-Netzen

Ergebnis:

- Jedes RBF-Neuron der 2. Schicht wird um so stärker angeregt ($f(s) = 0 \ldots 1$), je ähnlicher die Eingangswerte **x** dem jeweiligen Parametervektor **w** sind.
- Verbindungen zwischen RBF-Schicht und Ausgabeschicht wie bei MLP

$\Rightarrow$ Die Verbindung zwischen dem RBF-Neuron, dessen Parametervektor **w** dem Eingangsvektor **x** am nächsten ist, und dem Ausgangsneuron bestimmt maßgeblich den Ausgangswert des Netzes!

$\Rightarrow$ **Jedes Neuron hat nur lokale Wirkung!!!**