

Numerik des Maschinellen Lernens

Jan Heiland

TU Ilmenau – Sommersemester 2024

Contents

Vorwort	5
1 Einführung	7
1.1 Was ist ein Algorithmus	7
1.2 Konsistenz, Stabilität, Genauigkeit	9
1.3 Rechenkomplexität	9
1.4 Literatur	11
1.5 Übungen	11
2 Fehler und Konditionierung	13
2.1 Fehler	13
2.2 Kondition	14
2.3 Kondition der Grundrechenarten	15
2.4 Übungen	16
3 Nachklapp	17
Referenzen	19

Vorwort

Das ist ein Aufschrieb der parallel zur Vorlesung erweitert wird.

Korrekturen und Wünsche immer gerne als *issues* oder *pull requests* ans [github-repo](#).

Chapter 1

Einführung

Was sind *Numerische Methoden für Maschinelles Lernen* (ML)?

Kurz gesagt, beim Training eines ML-Modells durchläuft ein Computer Millionen von Anweisungen, die in Form mathematischer Ausdrücke formuliert sind. Gleiches gilt für die Bewertung eines solchen Modells. Dann stellen sich Fragen wie *wird es einen Punkt geben, an dem das Training endet?* und *wird das Modell genau sein?*.

Um zu beschreiben, was passiert, und für die spätere Analyse führen wir die allgemeinen Konzepte von

- Algorithmus
- Konsistenz/Genauigkeit
- Stabilität
- Rechenaufwand

ein, von denen einige klassische *numerische Analysis* sind.

1.1 Was ist ein Algorithmus

Interessanterweise ist der Begriff *Algorithmus* zugleich intuitiv und abstrakt. Es bedurfte großer Anstrengungen, um eine allgemeine und wohlgestellte Definition zu finden, die den Anforderungen und Einschränkungen aller Bereiche gerecht wird (von *Kochrezepten* bis zur Analyse von *formalen Sprachen*).

Definition 1.1 (Algorithmus). Ein Problemlösungsverfahren wird als *Algorithmus* bezeichnet, genau dann wenn es eine *Turing-Maschine* gibt, die dem Verfahren entspricht und die, für jede Eingabe, für die eine Lösung existiert, *anhalten* wird.

Diese Definition ist in ihrer Allgemeinheit nicht allzu hilfreich - wir haben noch nicht einmal definiert, was eine Turing-Maschine ist.

Eine *Turing-Maschine* kann als eine Maschine beschrieben werden, die ein Band von Anweisungen liest und auf dieses Band schreiben kann. Abhängig davon, was sie liest, kann sie vorwärts bewegen, rückwärts bewegen oder anhalten (wenn das Band einen vordefinierten Zustand erreicht hat). Das Schöne daran ist, dass dieses Setup in einen vollständig mathematischen Rahmen gestellt werden kann.

Hilfreicher und gebräuchlicher ist es, die Implikationen dieser Definition zu betrachten, um zu überprüfen, ob ein Verfahren zumindest die notwendigen Bedingungen für einen Algorithmus erfüllt

- Der Algorithmus wird durch endlich viele Anweisungen beschrieben (Endlichkeit).
- Jeder Schritt ist *durchführbar*.
- Der Algorithmus erfordert eine endliche Menge an Speicher.
- Er wird nach endlich vielen Schritten beendet.
- In jedem Schritt ist der nächste Schritt eindeutig definiert (*Determiniertheit*).
- Für denselben Anfangszustand wird er im selben Endzustand anhalten (*Bestimmtheit*).

Somit könnte eine informelle, gute Praxisdefinition eines Algorithmus sein

Definition 1.2 (Algorithmus – informell). Ein Verfahren aus endlich vielen Anweisungen wird als *Algorithmus* bezeichnet, wenn es eine bestimmte Lösung – falls sie existiert – zu einem Problem in endlich vielen Schritten berechnet.

Beachten Sie, wie einige Eigenschaften (wie endlich viele Anweisungen) a priori angenommen werden.

Als informellere Verweise auf Algorithmen werden wir die Begriffe (*numerische*) *Methode* oder *Schema* verwenden, um ein Verfahren durch Auflistung seiner zugrundeliegenden Ideen und Unterprozeduren anzusprechen, wobei *Algorithmus* sich auf eine spezifische Realisierung einer *Methode* bezieht.

Weiterhin unterscheiden wir

- *direkte* Methoden – die die Lösung exakt berechnen (wie die Lösung eines linearen Systems durch *Gauß-Elimination*) und
- *iterative* Methoden – die iterativ eine Folge von Annäherungen an die Lösung berechnen (wie die Berechnung von Wurzeln mit einem *Newton-Schema*).

1.2 Konsistenz, Stabilität, Genauigkeit

Für die Analyse numerischer Methoden werden allgemein die folgenden Begriffe verwendet:

Definition 1.3 (Konsistenz). Wenn ein Algorithmus in exakter Arithmetik die Lösung des Problems mit einer gegebenen Genauigkeit berechnet, wird er als *konsistent* bezeichnet.

Definition 1.4 (Stabilität (informell)). Wenn die Ausgabe eines Algorithmus kontinuierlich von Unterschieden in der Eingabe und kontinuierlich von Unterschieden in den Anweisungen abhängt, dann wird der Algorithmus als *stabil* bezeichnet.

Die *Unterschiede in den Anweisungen* sind typischerweise auf Rundungsfehler zurückzuführen, wie sie in *ungenauer Arithmetik* (oft auch als *Gleitkommaarithmetik* bezeichnet) auftreten.

Man könnte sagen, dass ein Algorithmus konsistent ist, wenn *er das Richtige tut* und dass er stabil ist, *wenn er trotz beliebiger kleiner Ungenauigkeiten funktioniert*. Wenn ein Algorithmus konsistent und stabil ist, wird er oft als *konvergent* bezeichnet, um auszudrücken, dass er schließlich die Lösung auch in ungenauer Arithmetik berechnen wird.

Beachten Sie, dass Begriffe wie

- *Genauigkeit* – wie nahe die berechnete Ausgabe der tatsächlichen Lösung kommt oder
- *Konvergenz* – wie schnell (typischerweise in Bezug auf den Rechenaufwand) der Algorithmus sich der tatsächlichen Lösung nähert

keine intrinsischen Eigenschaften eines Algorithmus sind, da sie von dem zu lösenden Problem abhängen. Man kann jedoch von *Konsistenzordnung* eines Algorithmus sprechen, um die erwartete Genauigkeit für eine Klasse von Problemen zu spezifizieren, und einen Algorithmus als konvergent einer bestimmten Ordnung bezeichnen, wenn er zusätzlich stabil ist.

1.3 Rechenkomplexität

Die *Rechenkomplexität* eines Algorithmus ist sowohl theoretisch (um abzuschätzen, wie der Aufwand mit beispielsweise der Größe des Problems skaliert) als auch praktisch (um zu sagen, wie lange das Verfahren dauern wird und welche Kosten in Bezug auf CPU-Zeit oder Speichernutzung es generieren wird) wichtig.

Typischerweise wird die Komplexität durch Zählen der elementaren Operationen gemessen – wir werden stets die Ausführung einer Grundrechenart als eine

Operation zählen.

Die Definition einer *elementaren Operation* auf einem Computer ist nicht universal, da viele Faktoren hier reinspielen. Gerne werden *FLOP*s angeführt, was für *floating point operations* steht. Allerdings ist es wiederum sehr verschieden auf verschiedenen Prozessoren wieviele FLOPs für eine Multiplikation oder Addition gebraucht werden.

Um die Algorithmen in Bezug auf Komplexität versus Problemgröße zu klassifizieren, sind die folgenden Funktionsklassen hilfreich

Definition 1.5 (Landau-Symbole oder große O-Notation). Sei $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $a \in \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$. Dann sagen wir für eine Funktion $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, dass $f \in O(g)$, wenn

$$\limsup_{x \rightarrow a} \frac{|f(x)|}{|g(x)|} < \infty$$

und dass $f \in o(g)$, wenn

$$\limsup_{x \rightarrow a} \frac{|f(x)|}{|g(x)|} = 0.$$

Der Sinn und die Funktionalität dieser Konzepte wird vielleicht deutlich, wenn man sich die typischen Anwendungen ansieht:

- Wenn $h > 0$ ein Diskretisierungsparameter ist und, sagen wir, $e(h)$ der Diskretisierungsfehler ist, dann könnten wir sagen, dass $e(h) = O(h^2)$, wenn *asymptotisch*, d.h. für immer kleinere h , der Fehler mindestens so schnell wie h^2 gegen 0 geht.
- Wenn $C(n)$ die Komplexität eines Algorithmus für eine Problemgröße n ist, dann könnten wir sagen, dass $C(n) = O(n)$, um auszudrücken, dass die Komplexität *asymptotisch*, d.h. für immer größere n , mit derselben Geschwindigkeit wie die Problemgröße wächst.

Leider ist die übliche Verwendung der Landau-Symbole etwas unpräzise.

1. Das oft verwendete “=”-Zeichen ist informell und keineswegs eine Gleichheit.
2. Was der Grenzwert a ist, wird selten explizit erwähnt, aber glücklicherweise ist es in der Regel aus dem Kontext klar.

Als Beispiel betrachten wir zwei verschiedene Wege, ein Polynom p vom Grad n an der Abszisse x auszuwerten, basierend auf den zwei äquivalenten Darstellungen

$$\begin{aligned} p(x) &= a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \\ &= a_0 + x(a_1 + x(a_2 + \cdots + x(a_{n-1} + a_nx) \cdots)) \end{aligned}$$

Für eine direkte Implementierung der ersten Darstellung erhalten wir die Algorithmen

```
'''Berechnung von p(x) in Standarddarstellung
'''
n = 10                                # Beispielwert für n
ais = [(-1)**k*1/k for k in range(1, n+2)] # Liste der Beispielskoeffizienten
x = 5                                  # Ein Beispielwert für x
cpx = ais[0]                           # der Fall k=0
for k in range(n):
    cpx = cpx + ais[k+1] * x**(k+1)      # der Beitrag des k-ten Schritts
print(f'x={x}: p(x)={cpx:.4f}')
```

Im k -ten Schritt benötigt der Algorithmus eine Addition (wenn wir auch die Initialisierung als Addition zählen) und k Multiplikationen. Das ergibt eine Gesamtkomplexität von

$$C(n) = \sum_{k=0}^n (1+k) = n+1 + \frac{n(n-1)}{2} = 1 + \frac{n}{2} + \frac{n^2}{2} = O(n^2)$$

Für die zweite Darstellung können wir das sogenannte *Horner-Schema* implementieren, das lauten würde

```
'''Berechnung von p(x) mit dem Horner-Schema
'''
n = 10                                # Beispielwert für n
ais = [(-1)**k*1/k for k in range(1, n+2)] # Liste der Beispielskoeffizienten
x = 5                                  # Ein Beispielwert für x
cpx = ais[n]                           # der Fall k=n
for k in reversed(range(n)):
    cpx = ais[k] + x*cpx                # der Beitrag des k-ten Schritts
print(f'x={x}: p(x)={cpx:.4f}')
```

Insgesamt benötigt dieses Schema $n+1$ Additionen und n Multiplikationen, d.h. $2n+1$ FLOPs, so dass wir sagen können, dass *dieser Algorithmus* $O(n)$ ist.

1.4 Literatur

- (Nocedal and Wright 2006): Ein gut lesbares Buch zur Optimierung.

1.5 Übungen

1. Vergleichen Sie die beiden Implementierungen zur Auswertung eines Polynoms, indem Sie die Komplexität als Funktion von n darstellen und die benötigte CPU-Zeit für eine Beispielauswertung im Vergleich zu n messen und darstellen.

2. Zeigen Sie, dass es für $f \in O(g)$ mit $f \geq 0$ und $g > 0$ eine Konstante C gibt, sodass $f(n) = h(n) + Cg(n)$ mit $h \in o(g)$. *Bemerkung: diese Relation ist die Rechtfertigung für die eigentlich inkorrekte Schreibweise $f = O(g)$.*
3. Ermitteln Sie experimentell die *Ordnung* (d.h. den Exponent x in $O(n^x)$) und die *Konstante C* (s.o.) für die Laufzeit $t(n)$ der in `scipy.linalg.cholesky` implementierten Cholesky Zerlegung der Bandmatrix `A_n` aus dem folgenden Code Beispiel

```
import numpy as np
from scipy.linalg import cholesky
from time import time
n = 10                                # example problem size
A_n = -1*np.diag(np.ones(n-1), -1) + \ # a tridiagonal band matrix
      2*np.diag(np.ones(n), 0) + \
      -1*np.diag(np.ones(n-1), 1)
tic = time()                          # start the timer
_ = cholesky(A_n)                     # perform the computation
toc = time()                          # stop the timer
print(f'n: {n} -- t_n: {toc-tic:.4e}')
```

Hinweis: Hier geht es um die Methodik und um eine sinnvolle Interpretation der Ergebnisse. Es kann gut sein, dass die Ergebnisse auf verschiedenen Rechnern verschieden ausfallen. Außerdem können für große n (wenn der Exponent und die Konstante am besten sichtbar sind) auf einmal bspw. ein zu voller Arbeitsspeicher die Berechnung negativ beeinflussen.

4. Diskutieren Sie, wie Laufzeitmessungen (bspw. zur Komplexitätsanalyse eines Verfahrens) aufgesetzt werden sollten, um reproduzierbare Ergebnisse zu erhalten. Was sollte dokumentiert werden, damit dritte Personen die Ergebnisse einordnen und ggf. reproduzieren können.

Weiterführende Literatur:

- [wikipedia:Algorithmus](https://de.wikipedia.org/wiki/Algorithmus)

Chapter 2

Fehler und Konditionierung

Berechnungen auf einem Computer verursachen unvermeidlich Fehler, und die Effizienz oder Leistung von Algorithmen ist immer das Verhältnis von Kosten zu Genauigkeit.

Zum Beispiel:

- Allein aus der Betrachtung von Rundungsfehlern kann die Genauigkeit einfach und signifikant verbessert werden, indem auf *Langzahlarithmetik* zurückgegriffen wird, was jedoch höhere Speichieranforderungen und eine höhere Rechenlast mit sich bringt.
- In iterativen Verfahren können Speicher und Rechenaufwand leicht eingespart werden, indem die Iteration in einem frühen Stadium gestoppt wird - natürlich auf Kosten einer weniger genauen Lösungsapproximation.

Beide, irgendwie trivialen Beobachtungen sind grundlegende Bestandteile des Trainings neuronaler Netzwerke. Erstens wurde beobachtet, dass Zahldarstellungen mit *einfacher Genauigkeit* (im Vergleich zum gängigen *double precision*) Rechenkosten sparen kann, mit nur geringen Auswirkungen auf die Genauigkeit. Zweitens ist das Training ein iterativer Prozess mit oft langsamer Konvergenz, sodass der richtige Zeitpunkt für einen vorzeitigen Abbruch des Trainings entscheidend ist.

2.1 Fehler

Definition 2.1 (Absolute und relative Fehler). Sei $x \in \mathbb{R}$ die interessierende Größe und $\tilde{x} \in \mathbb{R}$ eine Annäherung daran. Dann wird der *absolute Fehler*

definiert als

$$|\delta x| := |\tilde{x} - x|$$

und der *relative Fehler* als

$$\frac{|\delta x|}{|x|} = \frac{|\tilde{x} - x|}{|x|}.$$

Generell wird der relative Fehler bevorzugt, da er den gemessenen Fehler in den richtigen Bezug setzt. Zum Beispiel kann ein absoluter Fehler von 10 km/h je nach Kontext groß oder klein sein.

2.2 Kondition

Als Nächstes definieren wir die *Kondition* eines Problems A und analog eines Algorithmus (der das Problem löst). Dafür lassen wir x einen Parameter/Eingabe des Problems sein und $y = A(x)$ die entsprechende Lösung/Ausgabe. Die Kondition ist ein Maß dafür, inwieweit eine Änderung $x + \delta x$ in der Eingabe die resultierende relative Änderung in der Ausgabe beeinflusst. Dafür betrachten wir

$$\delta y = \tilde{y} - y = A(\tilde{x}) - A(x) = A(x + \delta x) - A(x)$$

welches nach Division durch $y = A(x)$ und Erweiterung durch $x \delta x$ wird zu

$$\frac{\delta y}{y} = \frac{A(x + \delta x) - A(x)}{\delta x} \frac{x}{A(x)} \frac{\delta x}{x}.$$

Für infinitesimal kleine δx wird der Differenzenquotient $\frac{A(x + \delta x) - A(x)}{\delta x}$ zur Ableitung $\frac{\partial A}{\partial x}(x)$, so dass wir die Kondition des Problems/Algorithmus bei x abschätzen können durch

$$\frac{|\delta y|}{|y|} \approx \left| \frac{\partial A}{\partial x}(x) \right| \frac{|x|}{|A(x)|} \frac{|\delta x|}{|x|} =: \kappa_{A,x} \frac{|\delta x|}{|x|}. \quad (2.1)$$

Wir nennen $\kappa_{A,x}$ die Konditionszahl.

Für vektorwertige Probleme/Algorithmen können wir die Konditionszahl darüber definieren, wie eine Differenz in der j -ten Eingabekomponente x_j die i -te Komponente $y_i = A_i(x)$ der Ausgabe beeinflusst.

Definition 2.2 (Konditionszahl). Für ein Problem/Algorithmus $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ nennen wir

$$(\kappa_{A,x})_{ij} := \frac{\partial A_i}{\partial x_j}(x) \frac{x_j}{A_i(x)}$$

die partielle *Konditionszahl* des Problems. Ein Problem wird als *gut konditioniert* bezeichnet, wenn $|(\kappa_{A,x})_{ij}| \approx 1$ und als *schlecht konditioniert*, wenn $|(\kappa_{A,x})_{ij}| \gg 1$, für alle $i = 1, \dots, m$ und $j = 1, \dots, n$.

Anstatt die skalaren Komponentenfunktionen von $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ zu verwenden, kann man die Berechnungen, die zu (2.1) geführt haben, mit vektorwertigen Größen in den entsprechenden Normen wiederholen.

2.3 Kondition der Grundrechenarten

Da einfach jede Operation von Zahlen auf dem Computer auf die Grundrechenarten zurückgeht, ist es wichtig sich zu vergegenwärtigen wie sich diese Basisoperationen in Bezug auf kleine Fehler verhalten.

2.3.1 Addition

```
def A(x, y):
    return x+y

x, tx, y = 1.02, 1.021, -1.00
z = A(x, y)
tz = A(tx, y)
relerrx = (tx - x)/x          # here: 0.00098039
relerrz = (tz - z)/z          # here: 0.04999999
kondAx = relerrz/relerrx      # here: 50.9999999
```

In diesem Code Beispiel liegt der relative Fehler in x bei etwa 0.01% und im Ausgang z bei etwa 5%, was einer etwa 50-fachen Verstärkung entspricht. Für die Konditionszahl der Addition $A_y: x \rightarrow y + x$ gilt:

$$\kappa_{A_y;x} = \frac{|x|}{|x+y|} = \frac{1}{|1 + \frac{y}{x}|}.$$

Diese Konditionszahl kann offenbar beliebig groß werden, wenn x nah an $-y$ liegt. Jan spricht von Auslöschung und tatsächlich lässt sich nachvollziehen, dass in diesem Fall die vorderen (korrekten) Stellen einer Zahl von einander abgezogen werden und die hinteren (möglicherweise inkorrekten) Stellen übrig bleiben.

Praktisch gesagt: Hantiert Jan mit Addition großer Zahlen um ein kleines Ergebnis erzielen ist das numerisch sehr ungünstig.

2.3.2 Multiplikation

```
def M(x, y):
    return x*y

x, tx, y = 1.02, 1.021, -1.00
z = M(x, y)
tz = M(tx, y)
relerrx = (tx - x)/x      # here: 0.00098039
relerrz = (tz - z)/z      # here: 0.00098039
kondMx = relerrz/relerrx  # here: 1.0
```

Das Ergebnis 1.0 für die empirisch ermittelte Konditionszahl war kein Zufall. Es gilt im Allgemeinen für $M_y: x \rightarrow yx$ dass

$$\kappa_{M_y;x} = |y| \frac{|x|}{|xy|} = 1.$$

Die Multiplikation ist also generell gut konditioniert.

2.3.3 Wurzelziehen

Das Berechnen der Quadratwurzel $W: x \rightarrow \sqrt{x}$ hat die Konditionszahl $\frac{1}{2}$. Bei Konditionszahlen kleiner als 1 verringert sich der relative Fehler, Jan spricht von *Fehlerdämpfung*.

2.4 Übungen

1. Leiten Sie die *Konditionszahl* wie in (2.1) für eine vektorwertige Funktion $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ her. Wo spielt eine Matrixnorm eine Rolle?
2. Leiten Sie mit dem selben Verfahren die Konditionszahl einer invertierbaren Matrix M her, d.h. die Kondition des Problems $x \rightarrow y = M^{-1}x$. Wo spielt die Matrixnorm eine Rolle?
3. Leiten Sie die Konditionszahlen für die Operationen *Division* und *Quadratwurzelziehen* her.
4. Veranschaulichen Sie an der Darstellung des Vektors $P = [1, 1]$ in der Standardbasis $\{[1, 0], [0, 1]\}$ und in der Basis $\{[1, 0], [1, 0.1]\}$ unter Verweis auf die Kondition der Addition, warum *orthogonale Basen* als *gut konditioniert* gelten.

Chapter 3

Nachklapp

Ein paar lose Beispiele wo Numerik und maschinelles Lernen sich treffen.

- Iterative Methoden
 - Konvergenz/Konvergenzraten
 - stochastische Konvergenz
 - lokale Extrema
 - randomisierte Methoden
- Optimierung/Ausgleichsrechnung
- Approximationstheorie
 - Universal Approximation Theorem
- Stabilität und Fehleranalyse
 - mixed precision Arithmetik
- Numerische lineare Algebra
 - PCA
 - Support Vector Machines
 - Empfehlungssysteme
- Automatisches Differenzieren
 - *backward propagation* zur Gradientenberechnung

Referenzen

Nocedal, J., Wright, S.J.: Numerical optimization. Springer (2006)