



Vorlesung

Statistische Methoden der Datenanalyse

Prof. Dr. Dr. Wolfgang Rhode

Neuronale Netze

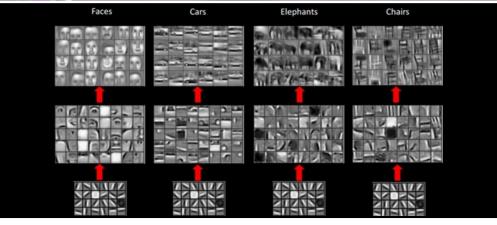


Experimentelle Physik Vb Astroteilchenphysik











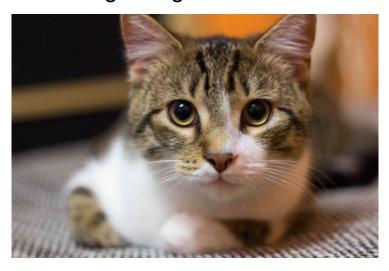
Experimentelle Physik Vb Astroteilchenphysik





Neuronale Netze – Klassifizierung von Bildern

- Jedes Bild stellt f
 ür den Computer ein großes 2-dimensionales Array an Zahlen dar (3 RGB-Werte pro Pixel)
- Ziel: Reduktion des Arrays zu einem geschätzten Label aus einer festen Menge möglicher Label



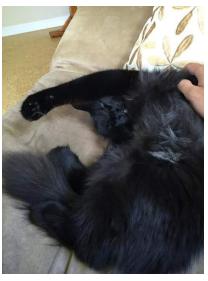




Herausforderungen bei der Klassifizierung von Bildern

- Verschiedene Ansichten
- Beleuchtungsbedingungen
- Unterschiedliche Größen
- Deformation
- Sehr ähnlicher Hintergrund
- Hohe Variation innerhalb einer Klasse





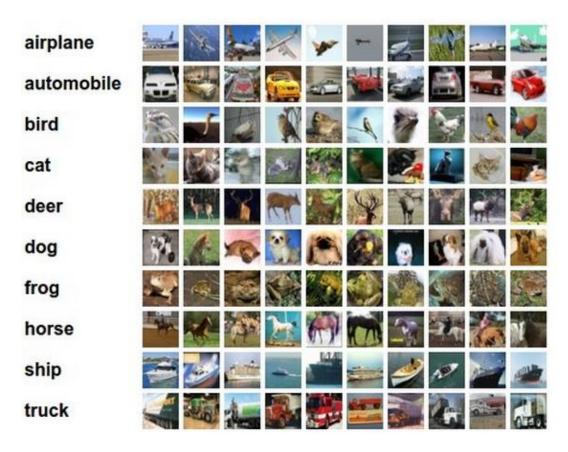
Data-Mining – Teil 2

Statistische Methoden der Datenanalyse





CIFAR-10 als Benchmark Datensatz



Einfachster Ansatz – Nearest Neighbor Classifier

- Vergleiche Testbild mit übrigen Trainingsbildern
- Berechne die 1-Norm über alle Pixel: $d_1(I_1,I_2)=\sum_p |I_1^p-I_2^p|$
- Als Gütekriterium wird oft die Accuracy verwendet (Anteil richtiger Schätzungen)
- Der NN-Classifier liefert auf dem CIFAR-10 Datensatz eine Accuracy von knapp 40%
- Nachteile: Gesamter Trainingsdatensatz muss gespeichert werden, das Testen eines Bildes ist sehr aufwändig

Besser: Lineare Klassifikation

- Sehr einfache Auswertungs-Funktion: $f(x_i, W, b) = W x_i + b$
- x_i : Spaltenvektor, der für jeden RGB-Pixel einen Wert enthält
- $f(x_i, W, b)$ berechnet für jedes Bild x_i eine Score für jede Zielklasse k = 1, ..., K
- f ist eine vektorwertige Funktion mit K Elementen
- Die Einträge der Matrix W werden häufig als Gewichte bezeichnet
- b heißt Bias Vektor
- W und b sind dann durch die Klassifikation zu bestimmen
- Klassifikation: $y_{\text{pred}} = \operatorname{argmax}_j(f_j)$



Lineare Klassifikation

- Jede Zeile der Matrix W ist dann ein Klassifikator für eine der Klassen
- Interpretation der linearen Klassifikation als Template Matching



- Jede Zeile legt ein Prototyp Bild der jeweiligen Klasse fest
- Der Klassifikator findet dann den am besten passenden Prototypen für das jeweilige Testbild über das Skalarprodukt

Lineare Klassifikation - Kostenfunktion

- Das Ergebnis der linearen Klassifikation kann in die Form einer Wahrscheinlichkeitsdichte gebracht werden
- Gebräuchlichster Weg: Softmax Funktion

$$q_i(k) = \frac{\exp(f_{k,i})}{\sum_j \exp(f_{j,i})}$$

- Erzeugt für jede Klasse eine Wahrscheinlichkeit zwischen 0 und 1, sodass gilt: $\sum_{k}q_{i}(k)=1$

Lineare Klassifikation - Kostenfunktion

- Wie können wir die Parameter anpassen?
- Die Kostenfunktion beschreibt ein Maß dafür, wie glücklich wir mit dem Resultat der Klassifikation sind.
- Schlechte Klassifikation → Hohe Kosten
- Gute Klassifikation → Niedrige Kosten
- Gebräuchlichste Kostenfunktion zur Klassifikation: Kreuzentropie

$$H(p,q) = -\sum_{k} p(k) \log q(k)$$

- Liefert kleinere Werte je ähnlicher die wahre Wahrscheinlichkeitsdichte p(x) zu der geschätzten Wahrscheinlichkeitsdichte q(x) ist
- Problem: Wie kann diese Kostenfunktion nun optimiert werden?

Lineare Klassifikation – Optimierung der Kostenfunktion

- Die Kostenfunktion l\u00e4sst uns die Qualit\u00e4t von einer speziellen Menge an Gewichten W quantifizieren
- Fragestellung: Welches W minimiert die Kostenfunktion?
- Ansatz: Dem Gradienten der Kostenfunktion folgen
- Gradient: Vektor der partiellen Ableitungen für alle Dimensionen

$$\frac{\partial f(t_i)}{\partial t_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(t_i + h) - f(t_i)}{h}$$





Lineare Klassifikation – Bestimmung des Gradienten

- Analytische Berechnung:
 - Schnell
 - Exakt
- Numerische Berechnung:
 - Berechnung für jede Dimension mit einer festen Schrittweite h
 - Langsam
 - gilt nur näherungsweise
 - kann zur Überprüfung des analytischen Gradienten verwendet werden

Lineare Klassifikation – Analytische Gradientenberechnung

- Rekursive Verwendung der Kettenregel (backpropagation)
- Beispiel für einen Datenpunkt (x,y):
 - Netzwerk gegeben durch: $\hat{y} = f(x,a,b) = a \cdot x + b$
 - Quadratischer Abstand als Kostenfunktion: $L = (y \hat{y})^2 = \left[y f(x, a, b)\right]^2$

$$\frac{\partial L}{\partial a} = \frac{\partial L}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial a} = 2 \cdot [y - f(x, a, b)] \cdot \frac{\partial f}{\partial a} = 2 \cdot [y - f(x, a, b)] \cdot x$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \frac{\partial L}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial b} = 2 \cdot [y - f(x, a, b)] \cdot \frac{\partial f}{\partial b} = 2 \cdot [y - f(x, a, b)]$$



Lineare Klassifikation – Analytische Gradientenberechnung

- Rekursive Verwendung der Kettenregel (backpropagation)
- Kostenfunktion: $H(p,q) = -\sum_k p(k) \log q(k)$
- Wahre Klassenverteilung p(k): $\mathbb{1}(y=k) \rightarrow 1$ für Klasse k, sonst 0
- Geschätzte Klassenverteilung q(k): Softmax-Funktion

$$q_i(k) = \frac{\exp(f_{k,i})}{\sum_{j} \exp(f_{j,i})}$$

Mittlere Kostenfunktion für mehrere Trainings-Beispiele

$$C(f) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[-\sum_{k=1}^{K} \mathbb{1}(y_i = k) \log q_i(k) \right]$$

m: Anzahl Bilder

i: Bildnummer

K: Anzahl Klassen

k: Klassennummer





Lineare Klassifikation – Analytische Gradientenberechnung

 $\hat{C}(f_i)$ zeilenweise ableiten nach $f_{a,i}$ (Score für die Klasse a zum Bild i)

$$\nabla_{f_{a,i}} \hat{C}(f_i) = -\sum_{k=1}^{K} \mathbb{1}(y_i = k) \nabla_{f_{a,i}} \log \frac{\exp(f_{k,i})}{\sum_{j} \exp(f_{j,i})}$$

$$\Rightarrow \nabla_{f_{a,i}} \hat{C}(f_i) = \frac{\exp(f_{a,i})}{\sum_{j} \exp(f_{j,i})} - \mathbb{1}(y_i = a)$$

→ Verwendung der Kettenregel um den Gradienten der anzupassenden Parameter zu bestimmen

m: Anzahl Bilder

k: Klassennummer

Lineare Klassifikation - Analytische Gradientenberechnung

• Kettenregel:
$$\nabla_W \hat{C} = \sum_{k=1}^K rac{\partial \hat{C}}{\partial f_{k,i}} \cdot rac{\partial f_{k,i}}{\partial W}$$

Bestimmung der inneren Ableitung (nach der a-ten Zeile):

$$\nabla_{W_a} f_{k,i}(W,b) = \nabla_{W_a} (W_k x_i + b_k) = \delta_{ak} x_i^T$$

- Gradient für die b_k kann dann analog berechnet werden
- In der Praxis: Die Gradienten sind in ML-Bibliotheken implementiert (bspw. Tensorflow, Theano etc.)

Lineare Klassifikation – Parameteranpassung

 Anpassung der Parameter entlang der Richtung des Gradienten mit der Schrittweite h

$$W^{(i+1)} = W^{(i)} - h \cdot \operatorname{grad}(W^{(i)})$$
$$b^{(i+1)} = b^{(i)} - h \cdot \operatorname{grad}(b^{(i)})$$

- Die Schrittweite wird oft als learning rate bezeichnet
- Dieser Prozess der wiederholten Parameteranpassung heißt gradient descent → iterativer Prozess



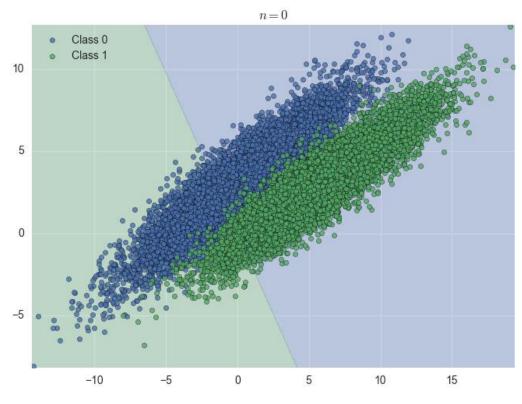


Lineare Klassifikation – Batch Learning

- Sind sehr viele Trainings-Daten vorhanden ist es nicht sinnvoll alle Trainings-Beispiele für jede Parameteranpassung zu verwenden
 dauert zu lange
- Ansatz: Bestimmung des Gradienten über batches der Trainings-Daten
- Dann wird der Gradient nur auf einer kleinen Untermenge bestimmt, wodurch die Parameter deutlich öfter angepasst werden können



Lineare Klassifikation – Beispiel

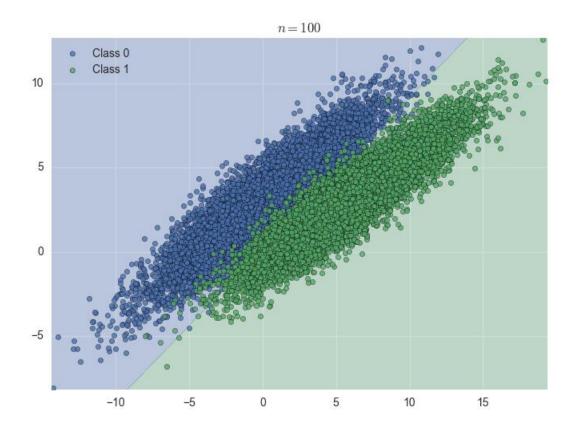


- Klassifikation nach 0 Iterationen
- Zufällige Initialisierung der Gewichte





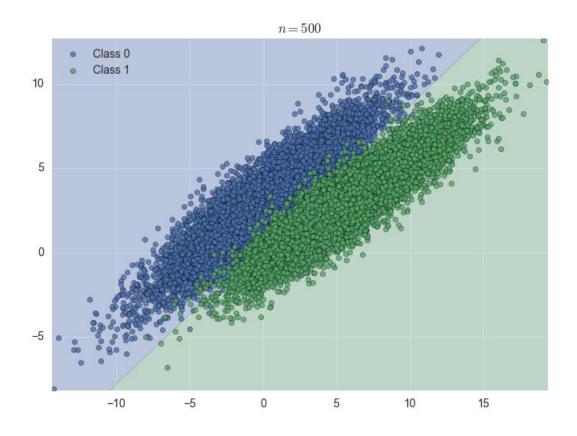
Lineare Klassifikation – Beispiel







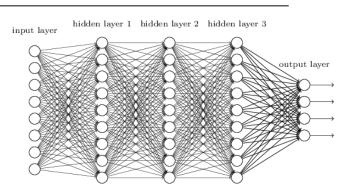
Lineare Klassifikation – Beispiel



Lineare Klassifikation – Zusammenfassung

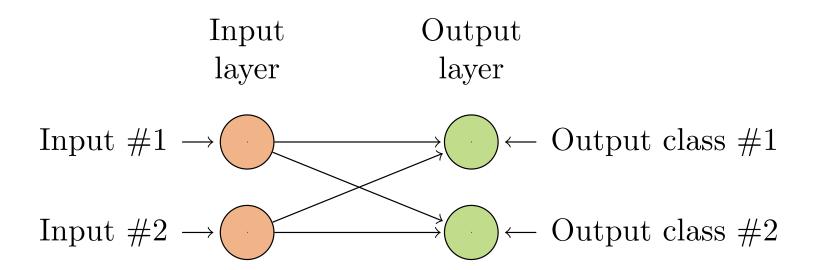
- Verwendung der Funktion $f(x_i, W, b) = Wx_i + b$ um Trainings-Beispielen gegebenen Klassen zuzuordnen
- Evaluierung der Klassifikation über eine Kostenfunktion (Kreuzentropie nach der Anwendung von Softmax)
- Anpassung der Parameter W und b zur Minimierung der Kostenfunktion mittels *gradient descent*

• Vorher: Lineare Klassifikation: f = Wx



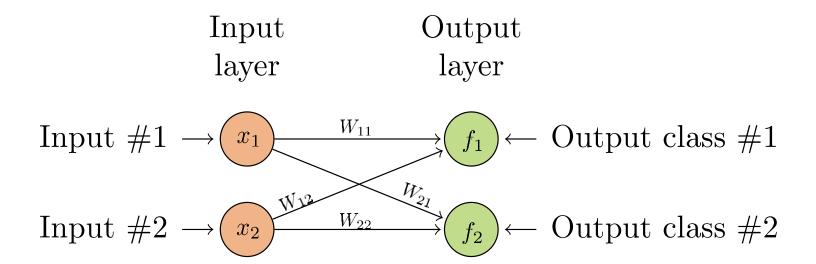
- Jetzt: Neuronales Netz mit 2 Layern: $f = W_2 g(W_1 x)$
- Neuronales Netz mit 3 Layern: $f = W_3 g(W_2 g(W_1 x))$
- Neuronale Netze setzen sich einfach aus einer beliebigen Anzahl an linearen Transformationen (Layern) mit einer nicht-linearen Aktivierungsfunktion g(x) dazwischen zusammen



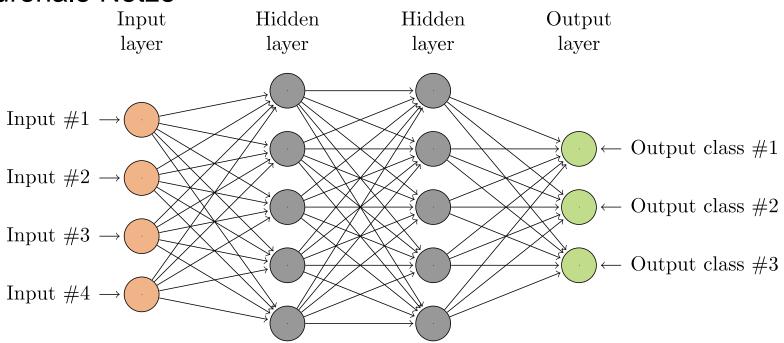




$$f(x) = Wx = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$







Zahl der freien Parameter: 5 + 5 + 3 = 13 (Neuronen)

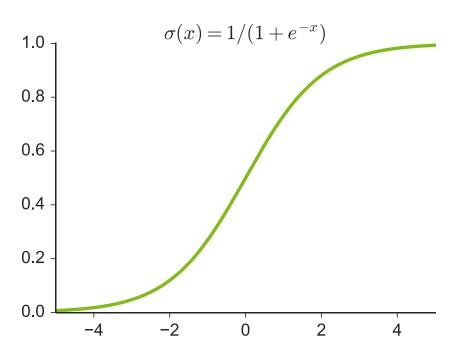
$$[4 * 5] + [5 * 5] + [5 * 3] = 70$$
 (Gewichte)

$$5 + 5 + 3 = 13$$
 (Bias Werte)

→ 83 freie Parameter



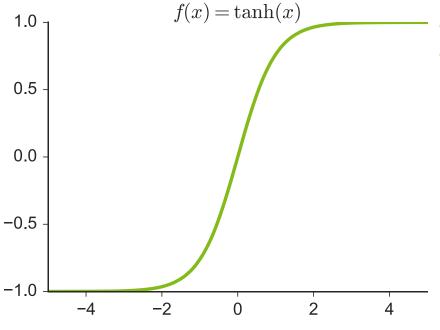
Aktivierungsfunktionen – Sigmoid



- ✓ Funktionswerte im Intervall [0, 1]
- ✓ Hat einen historischen Wert, Funktion lässt sich als saturiertes Schwellenpotential einer Nervenzelle interpretieren
- In saturierten Neuronen verschwindet der Gradient
- × Werte sind nicht um Null zentriert
- × Die Funktionsauswertung ist teuer



Aktivierungsfunktion – Tangens Hyperbolicus

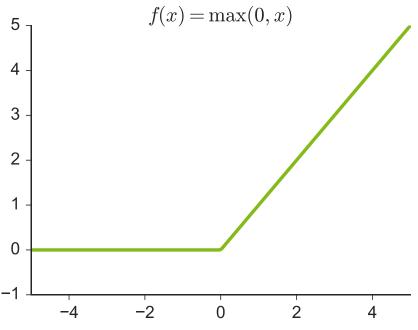


- Funktionswerte im Intervall [-1, 1]
- ✓ Lässt sich aus der Sigmoid-Funktion herleiten
- In saturierten Neuronen verschwindet der Gradient
- ★ Die Funktionsauswertung ist teuer





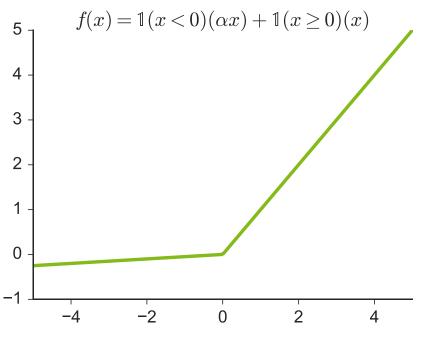
Aktivierungsfunktion – Rectified Linear Unit (ReLU)



- Saturiert nicht (für positive Werte)
- ✓ Sehr effizient zu berechnen
- ✓ Neuronale Netze mit ReLU-Aktivierungsfunktionen konvergieren schneller als mit Sigmoid- oder tanh-Funktionen
- × Werte nicht um Null zentriert
- X Bei negativen Werten verschwindet der Gradient
 → es können keine Parameteranpassungen mehr stattfinden



Aktivierungsfunktion – Leaky ReLU



- Saturiert nicht (für positive Werte)
- ✓ Effizient zu berechnen
- ✓ Neuronale Netze mit ReLU-Aktivierungsfunktionen konvergieren schneller als mit Sigmoid- oder tanh-Funktionen
- × Werte nicht um Null zentriert





Aktivierungsfunktion – TL;DR

- In der Praxis:
 - ✓ ReLU ist fast immer eine gute Wahl
 - ✓ Leaky ReLU und tanh kann in gewissen Situationen gut funktionieren
 - × Sigmoid nur in seltenen Fällen nützlich
 - Wahl der Aktivierungsfunktion hängt von der Problemstellung ab
 - Aktivierungsfunktion der letzten Layer muss zum gewünschten Output passen!
- Was ist der Effekt der Nichtlinearitäten / Aktivierungsfunktionen?





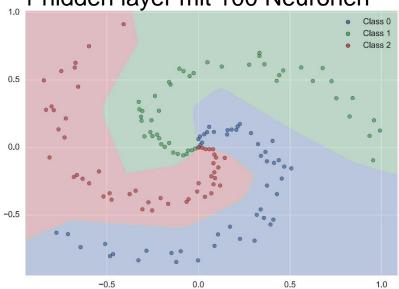
Neuronales Netz – Beispiel

Lineare Klassifikation

0.0 Class 1 Class 2 Cl

Neuronales Netz:





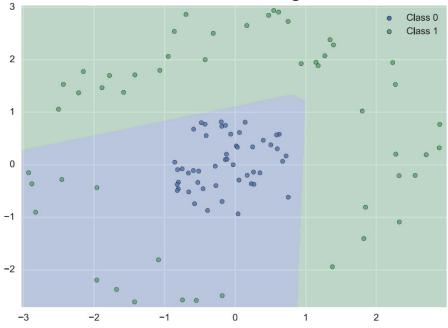
 Der Raum wird durch die Transformation und die Aktivierungsfunktion so verzerrt, dass die Spiralen durch einen gerade Schnitt im verzerrten Raum getrennt werden können





Veranschaulichung mit Kreisring-Daten

- Daten: Zwei Klassen, jeweils gleichverteilt auf einem Kreisring
- Mit zwei Neuronen im hidden layer wird eine Schneise oder ein Keil gefittet, je nach Startwerten und Verteilung der Punkte

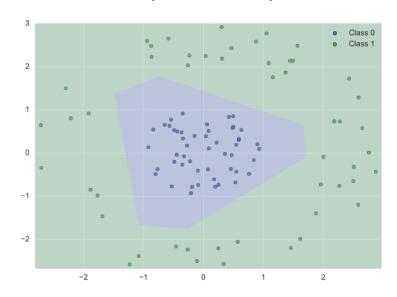


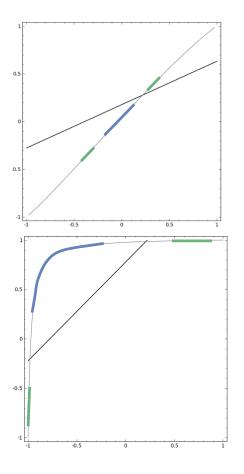




Veranschaulichung mit Kreisring-Daten

- Durch ein drittes Neuron im hidden layer wird das Problem trivial
- Durch eine Verzerrung in der dritten Dimension lassen sich die Populationen perfekt trennen



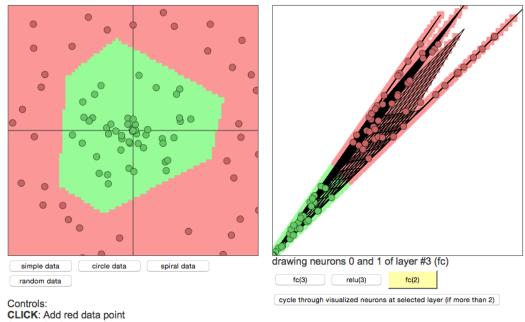






ConvnetJS demo

http://cs.stanford.edu/people/karpathy/convnetjs/demo/classify2d.html

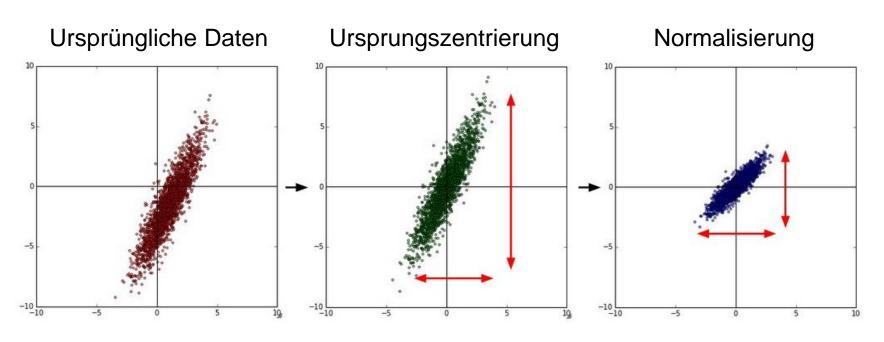


CLICK: Add red data point SHIFT+CLICK: Add green data point CTRL+CLICK: Remove closest data point





Neuronale Netze – Datenvorverarbeitung bei Bildern



Subtraktion des Mittelwerts jedes Features

Division durch die Standardabweichung jedes Features

Neuronale Netze – Initialisierung

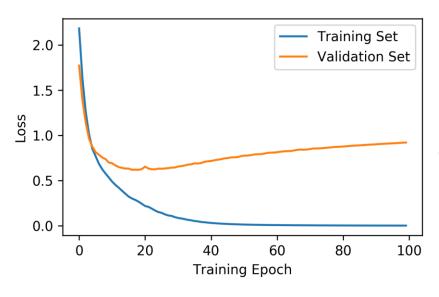
- Bevor der Lerner trainiert werden kann, müssen zunächst die Parameter initialisiert werden
- Initialisierung der Gewichte:
 - Erster Ansatz: Alle Gewichte mit Nullen initialisieren
 - → Wenn jedes Neuron den gleichen Output berechnet, liefern alle Gradienten den gleichen Wert und der erste Schritt ist auf eine feste Richtung begrenzt
 - Besser: Initialisierung mit kleinen um Null zentrierten Zufallszahlen
 - → Varianz der Gewichte hängt noch von der Anzahl der Eingangsparameter ab
- In der Praxis: Kalibration der Varianz über die Zahl der Eingangsparameter Für ReLU: $\mathcal{N}(0,1)\cdot\sqrt{2/n_{\mathrm{in}}}$, sonst: $\mathcal{N}(0,1)/\sqrt{n_{\mathrm{in}}}$
- Die Bias-Vektoren werden in der Regel mit Nullen initialisiert

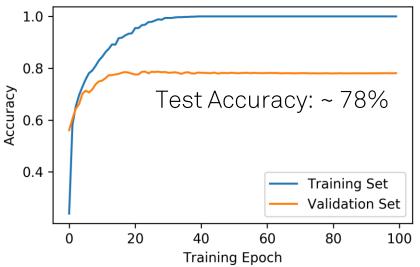




- Wie macht sich Overfitting erkennbar?
- Lösungsansätze:

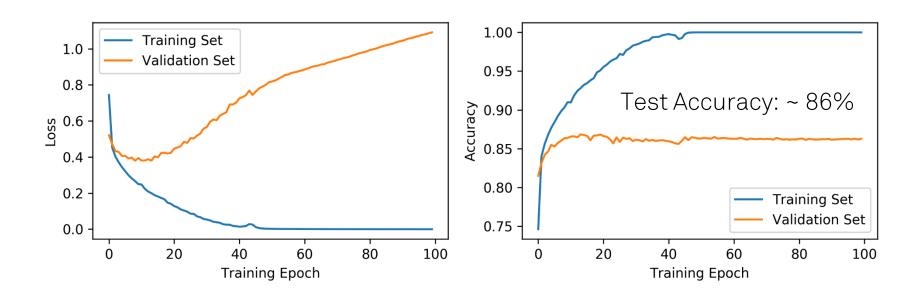
Trainingsdatensatz vergrößern, Model verkleinern, Regularisierung







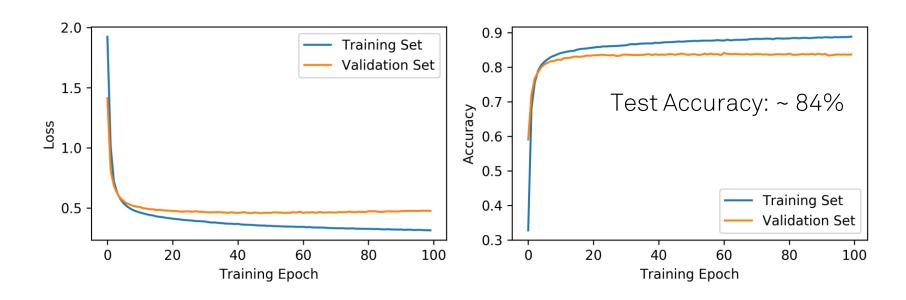
Vergrößere Trainingsdatensatz:







Verringere Modelgröße:





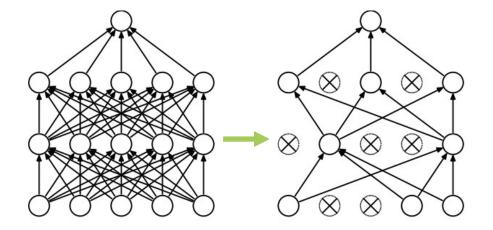


- Regularisierung kann verwendet werden um Overfitting zu verhindern
- L2 Regularisierung:
 - Meist genutzte Form der Regularisierung
 - Einführung des Strafterms $\frac{1}{2}\lambda w^2$ in die Kostenfunktion für jedes Gewicht w→ Modifikation des Gradienten mit dem Term λw
 - Interpretation: Die Kostenfunktion bevorzugt diffuse Gewichtsmatrizen
- L1 Regularisierung:
 - Der Strafterm nimmt hier die Form $\lambda \, |w|\,$ an
 - Sorgt ebenso im Allgemeinen für kleinere Gewichte
 - Bevorzugt große Gewichte an wichtigen Verbindungen im Netz und lässt die restlichen Gewichte gegen Null gehen → Ignoriert Rauschen in den Daten



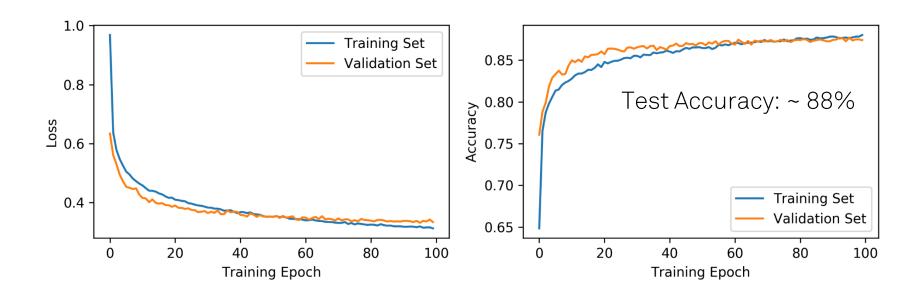


- Dropout Regularisierung
- Neuronen werden nur mit einer Wahrscheinlichkeit p während des Trainings aktiviert
- Die Wahrscheinlichkeit p ist dabei ähnlich zur Regularisierungsstärke λ





Dropout Regularisierung:







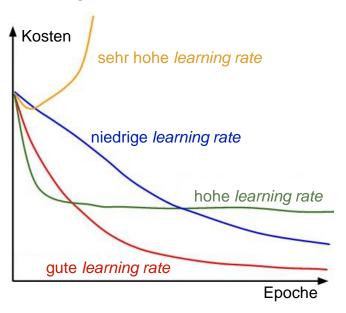
Neuronale Netze – Training

Trainings-Checkliste:

- Überprüfung des Gradienten mit dem numerischen Gradienten
- Liefert die Kostenfunktion nach der Initialisierung den Wert, der erwartet wird, wenn das Netz rät
- Erhöhung der Regularisierungsstärke λ sollte die anfänglichen Kosten erhöhen
- Ein kleines Subset der Daten sollte perfekt klassifizierbar sein

Neuronale Netze – Training

Wichtig: Kontrolle der Kostenfunktion während des Trainings



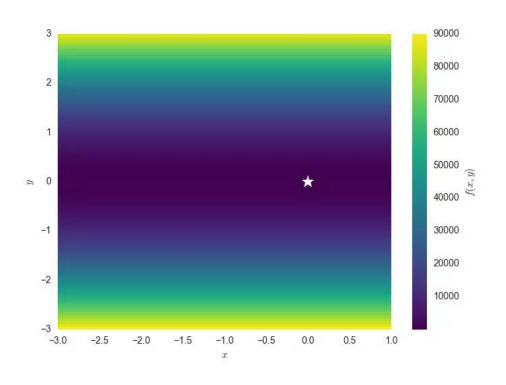
- Niedrige learning rate:
 langsamer, aber stetiger Fortschritt
- Hohe learning rate:
 Kosten nehmen sehr schnell ab,
 können um das wahre Minimum oszillieren
- → Lösung: Variation der learning rate mit der Zeit (learning rate decay)
- Kosten verändern sich gar nicht → learning rate ist zu niedrig
- Kosten werden NaN → learning rate ist oft zu hoch

 Anpassung der Parameter entlang der Richtung des Gradienten mit der learning rate h

$$W^{(i+1)} = W^{(i)} - h \cdot \operatorname{grad}(W^{(i)})$$
$$b^{(i+1)} = b^{(i)} - h \cdot \operatorname{grad}(b^{(i)})$$

Gleiche Parameteranpassung wie bei der linearen Klassifikation

• Gradientenabsteig in $f(x,y) = a_1 x^2 + a_2 y^2$ mit $a_1 = 0.5, a_2 = 100$



→ Das Minimum zu finden dauert sehr lange

Momentum Update:

- Physikalische Herangehensweise an das Optimierungsproblem
- Interpretation der Kosten als H\u00f6he in einem Terrain
- Das Optimierungsproblem wird dann äquivalent zur Simulation eines Teilchens, das sich durch die Kosten-Landschaft bewegt

$$E_{\text{pot}} = mgh$$
$$F = -\nabla E_{\text{pot}}$$

Der Gradient ist proportional zur Beschleunigung des Teilchens

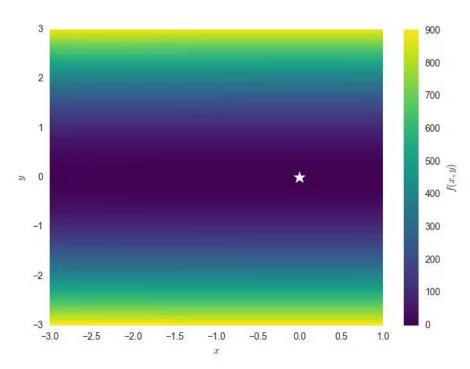
$$v^{(i+1)} = v^{(i)} \cdot \mu - h \cdot \operatorname{grad}(W^{(i)})$$

Dabei ist μ der Reibungskoeffizient (muss beim Training optimiert werden)

$$W^{(i+1)} = W^{(i)} + v^{(i+1)}$$



Momentum Update mit μ = 0,8



In Richtungen mit einem über einige Schritte konsistenten Gradienten baut sich eine Geschwindigkeit auf.



Neuronale Netze – Optimierung von Hyperparametern

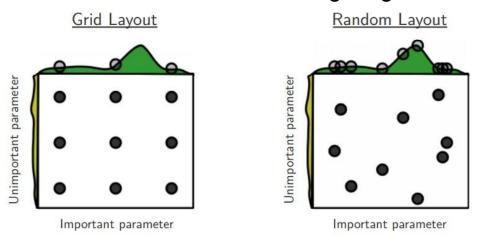
- Hyperparameter sind alle freien Parameter, die nicht vom Modell angepasst werden
 - Anfängliche learning rate h
 - Änderung der learning rate mit der Zeit
 - Regularisierungsstärke λ bzw. die Dropout-Wahrscheinlichkeit p
- Wichtig: Validierung
 - Lange Trainingslaufzeit bei großen neuronalen Netzen
 - → Kreuzvalidierung oft nicht praktikabel
 - Aufteilen der Daten in Trainingsset, Testset und Validierungsset
 - → Optimierung der Hyperparameter auf dem Validierungsset
 - → Final: Bestimmung der Accuracy auf dem Testset





Neuronale Netze – Optimierung von Hyperparametern

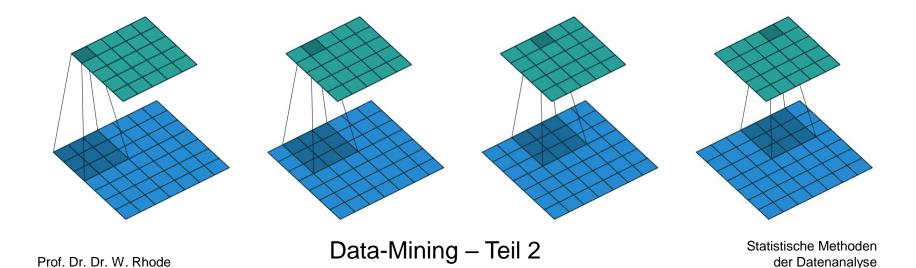
- Hyperparameter Scans sollten zunächst grob auf logarithmischen Skalen durchgeführt werden
- Die besten Hyperparameter-Werte liegen am Rand → Bereich erweitern
- In der richtigen Größenordnung kann dann noch eine feinere Suche stattfinden
- Random Search sollte einer Grid Search vorgezogen werden





Neuronale Netze – Convolutional Neural Networks (CNNs)

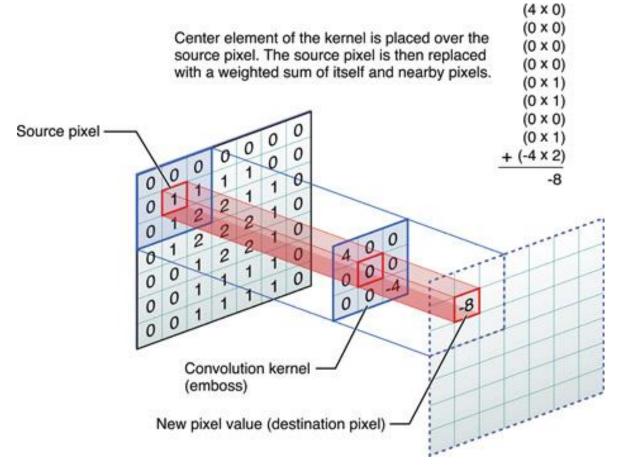
- Fully-connected / dense layer in der Bilderkennung: jeder Pixel ist mit jedem Pixel aus der vorhergehenden Ebene verbunden
 - Führt zur Explosion der Anzahl freier Parameter!
- Lösung: Nutze Translationsinvarianz (es ist egal, wo die Katze im Bild ist) und verbinde Pixel nur mit Pixel in der lokalen Umgebung







Neuronale Netze – Convolutional Neural Networks (CNNs)





Neuronale Netze – Convolutional Neural Networks (CNNs)

0	0	0
0	1	0
0	0	0



-1	-1	-1
-1	8	-1
-1	-1	-1



1/9	1/9	1/9
1/9	1/9	1/9
1/9	1/9	1/9



0	-1	0
-1	4	-1
0	-1	0

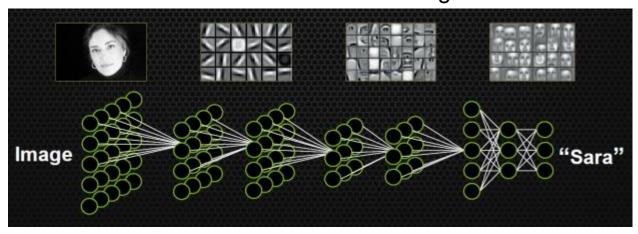


Data-Mining – Teil 2



Neuronale Netze – State of the Art

Convolutional Neural Nets zur Bildklassifizierung



- ~97% Accuracy auf dem CIFAR-10 Datensatz
- ~75% Accuracy auf dem CIFAR-100 Datensatz
- $\mathcal{O}(10^8)$ freie Parameter
- Werden auch viel im Bereich Reinforcement Learning genutzt





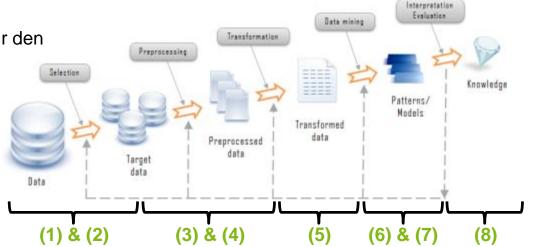
Neuronale Netze – Zusammenfassung

- Verkettung von linearen Transformationen mit Nichtlinearitäten
 Lineare Klassifikation der Benräsentation nach letztem Hidden Lex
 - → Lineare Klassifikation der Repräsentation nach letztem Hidden Layer
- Minimierung einer Kostenfunktion mittels Gradientenabstieg
 - Klassifikation: Kreuzentropie
 - Regression: χ^2
- Initialisierung und geeignete Wahl der Architektur/Hyperparameter wichtig
- Kann auf sehr rohe Daten angewandt werden
 (Repräsentation durch trennstarke Attribute nicht zwingend notwendig)
- Hohe Dimensionalität → schwer zu interpretieren



Data Mining Prozesse

- 🕜 (1) Definition der Ziele der Wissensfindung
- (2) Bereitstellung von Hintergrundwissen für den jeweiligen Fachbereich
- (3) Datenauswahl
- 🅜 (4) Datenbereinigung
- (5) Datenreduktion und -transformation
- 🅜 (6) Auswahl eines Modells
- 🏈 (7) Data-Mining
 - (8) Interpretation

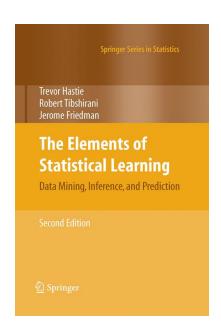


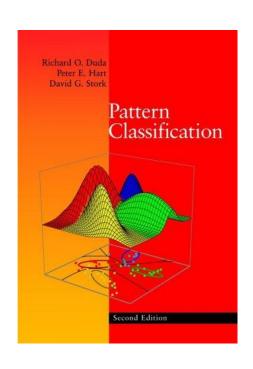
- Bei der Auswahl eines Modells und dem anschließenden Schritt des "Data-Minings" werden eine Vielzahl von Algorithmen angewendet und optimiert, um den stärksten Algorithmus für das gestellte Problem zu finden
- Unabdingbar ist alle Algorithmen auf ihre Stabilität zu untersuchen und die gewonnenen Qualitätsparameter und Ergebnisse zu validieren

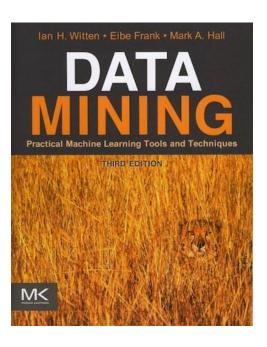




Literatur







Online unter:

http://statweb.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/





Werkzeugkästen







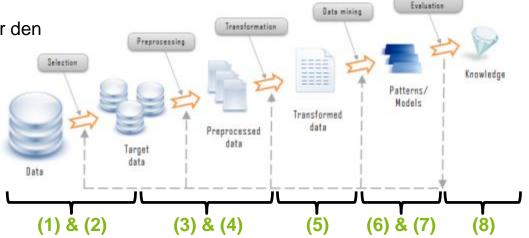






Interpretation der Ergebnisse des KDD/Data-Mining-Prozesses

- 🏈 (1) Definition der Ziele der Wissensfindung
- (2) Bereitstellung von Hintergrundwissen für den jeweiligen Fachbereich
- (3) Datenauswahl
- 🏈 (4) Datenbereinigung
- (5) Datenreduktion und -transformation
- (6) Auswahl eines Modells
- (7) Data-Mining
- 🚺 (8) Interpretation



- Typische Techniken für die Interpretation der gewonnen Ergebnisse sind:
 - Schätzen von Größen und ihrer Konfidenzbereiche
 - Fitten von Funktionen
 - Testen von Hypothesen
 - Entfalten der Daten

Interpretation