Prof. Dr. Matthias O. Franz

Übung 1: Backpropagation für Mehrschichtperzeptronen

Praktikum Deep Learning

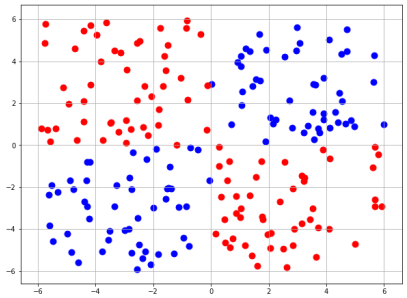
Ziel dieser Übung ist die Implementierung des Experiments aus Vorlesung 1, Folien 29 – 31 in Numpy.

1. Spielzeugdatensatz

Laden Sie sich das Jupyter-Notebook "Training eines MLPs auf MNIST" von der Vorlesungsseite auf Moodle herunter, das den Numpy-Code für den Backpropagation-Algorithmus für MLPs enthält. Statt auf MNIST werden wir zunächst ein einfacheres Perzeptron auf den Spielzeugdaten aus der Vorlesung trainieren.

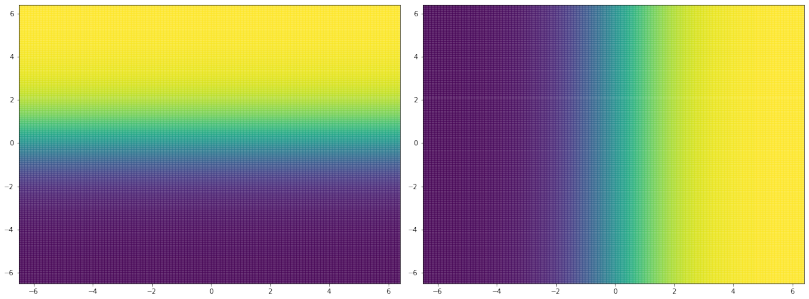
Vorgehensweise:

1. Erzeugen Sie 200 zweidimensionale Trainingsdatenpunkte mithilfe einer Gleichverteilung über dem Gebiet $[-6, 6] \times [-6, 6]$. Speichern Sie diese in einer 200×2 Designmatrix.
2. Die Klassenlabels 0 und 1 werden so vergeben, dass alle Datenpunkte im 1. und 3. Quadranten das Label 1 und im 2. und 4. Quadranten das Label 0 erhalten. Speichern Sie die Labels in einem Array.
3. Erzeugen Sie einen gleich großen Testdatensatz nach demselben Prinzip. Stellen Sie beide Datensätze zur Überprüfung als Scatterplot dar.



4. Das in der Vorlesung dargestellte Experiment operiert nicht direkt auf den Inputdaten, sondern auf 2 Merkmalen, die mithilfe zweier Neuronen mit fixem Gewichtsvektor berechnet werden: ein Neuron teilt die Inputebene waagrecht entlang der x-Achse, das andere senkrecht entlang der y-Achse. Wie muss der Gewichtsvektor für das jeweilige Neuron aussehen?

5. Berechnen Sie die Entscheidungsfunktion beider Neuron mit der im Beispielcode angegebenen sigmoiden Aktivierungsfunktion auf einem 100×100-Gitter innerhalb des Gebietes $[-6, 6] \times [-6, 6]$ und stellen Sie diese zur Überprüfung als Farbbild dar.



6. Da die Eingangsneuronen nicht mittrainiert werden, können wir deren Output schon im Vorfeld berechnen. Erzeugen Sie dazu neue Designmatritzen für den Trainings- und Testdatensatz, so dass die erste Spalte den Output des ersten Neurons und die zweite Spalte den Output des zweiten Neurons enthält. Erzeugen Sie auch eine entsprechende Designmatrix für Ihr 100×100-Gitter, das wir später zu Darstellungszwecken brauchen werden. Wichtig: arbeiten Sie im Folgenden nur mit diesen transformierten Designmatritzen, um korrekte Ergebnisse zu erhalten!

2. Training eines MLPs auf den Spielzeugdaten

Der Code aus dem Beispielnotebook muss zunächst an das Szenario aus der Vorlesung angepasst werden: ein deutlich kleineres Netzwerk mit eindimensionalem statt zehndimensionalem Output.

Vorgehensweise:

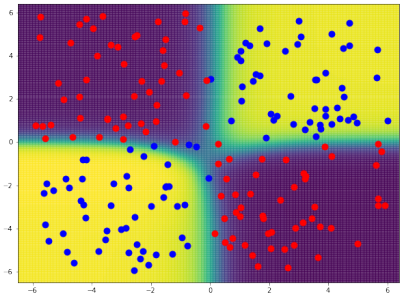
1. Setzen Sie im Code die Größe der Minibatches auf 10, die Anzahl der Epochen auf 150 und die Lernrate auf 0.03. Ändern Sie die Netzarchitektur so ab, dass sie 2 Eingangsneuronen, 2 verdeckte Schichten mit jeweils 2 Neuronen und 1 Ausgangsneuron haben. Überprüfen Sie die Größen der sich daraus ergebenden Gewichtsmatritzen auf Korrektheit.

2. Der Beispielcode verwendet One-Hot-Coding für die Labels, in unserem Beispiel sind die Klassenzugehörigkeiten aber durch die Klassenindizes 0 und 1 codiert. Wir müssen daher die Funktion `evaluate()` im Code so abändern, dass ein Beispiel als korrekt klassifiziert gilt, wenn bei Klasse 0 der MLP-Output kleiner als 0.5 ist und bei Klasse 1

größer als 0.5. Berechnen Sie zusätzlich den MSE in dieser Funktion bei jedem Aufruf uns speichern Sie diesen in einem zusätzlichen Array ab.

3. Trainieren Sie Ihr Netz mit den Trainingsdaten als Validierungsdaten und testen Sie es auf Ihren Testdaten. Stellen Sie die Lernkurven für Genauigkeit und MSE als Plots dar. Beachten Sie hierbei, dass unser Lernproblem nicht konvex ist, so dass die Optimierung zuweilen in lokalen Minima hängenbleiben kann. Wiederholen Sie Ihren Versuch daher mehrere Male und vergeleichen Sie die Ergebnisse.

4. Berechnen Sie die Entscheidungsfunktion Ihres MLPs für Ihr 100×100-Gitter und stellen Sie diese gemeinsam mit dem Scatterplot Ihrer Trainingsdaten dar.



3. Nachvollziehen der Beispiele aus der Vorlesung

Das Netz aus der Vorlesung verwendet als Aktivierungsfunktion den *Tangens hyperbolicus* (`np.tanh()`). Passen Sie die Funktionen `sigmoid()` und `sigmoid_prime()` entsprechend an. Achtung: kommentieren Sie den bisherigen Code für die Sigmoidfunktion nur aus, wir werden ihn in der nächsten Aufgabe nochmals benötigen. Da die Ausgangswerte von *tanh* im Intervall $[-1, 1]$ statt $[0, 1]$ liegen, müssen wir hierfür nochmals die Funktion `evaluate()` entsprechend anpassen. Vollziehen Sie die 3 Beispiele aus der Vorlesung nach.

4. Logistische Regression

Eine alternative, besser an das Klassifikationsszenario angepasste Kostenfunktion statt des MSE ist die Kostenfunktion für die **logistische Regression**:

$$C = -y \log(a^L) - (1 - y) \log(1 - a^L).$$

Damit Sie diese in Ihrem Beispiel anwenden können, müssen Sie die Ableitung $\nabla_{a^L} C$ berechnen und die Funktion `cost_derivative()` entsprechend abändern. Da die logistische Regression davon ausgeht, dass der Output des Netzes eine Wahrscheinlichkeit zwischen 0 und 1 ist, können wir hierfür nicht den *tanh()* als Aktivierungsfunktion verwenden. Machen Sie daher Ihre Änderungen aus Aufgabe 3 rückgängig, so dass Sie wieder eine sigmoide Aktivierungsfunktion haben. In der Funktion `evaluate()` sollte natürlich statt des MSE

die Kostenfunktion der logistischen Regression ausgegeben werden, um zu überprüfen, ob tatsächlich ein Gradientenabstieg stattfindet. Weiterhin ist es nützlich, sowohl auf C wie auf $\nabla_{a^L} C$ die Funktion `np.nan_to_num()` anzuwenden, da hier zuweilen numerische Probleme auftreten können. Auch die Lernrate muss angepasst werden: $\eta = 1.0$ funktioniert hier deutlich besser.