

Rekurrente Neuronale Netze

Malte Deckers, Marvin Winkens, Tobias Faßbender

Übersicht

- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- Strukturen von RNNs
- Trainieren von RNNs
- LSTMs / GRUs
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Übersicht

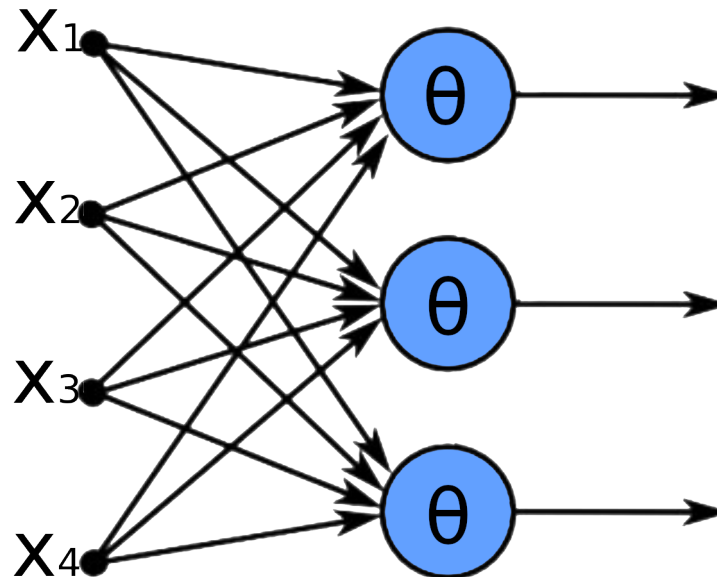
- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- Strukturen von RNNs
- Trainieren von RNNs
- LSTMs / GRUs
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Abgrenzung von Feedforward-Netzen

- Feedforward-Netze:
 - Verschiedene Möglichkeiten Neuronen zu verbinden
 - Vollvermaschte Netze
 - Convolutional Neuronal Networks
 - Gemeinsamkeit: Alle vorwärts gerichtet

Abgrenzung von Feedforward-Netzen

- Feedforward-Netze:
 - Verschiedene Möglichkeiten Neuronen zu verbinden
 - Vollvermaschte Netze
 - Convolutional Neuronal Networks
 - Gemeinsamkeit: Alle vorwärts gerichtet

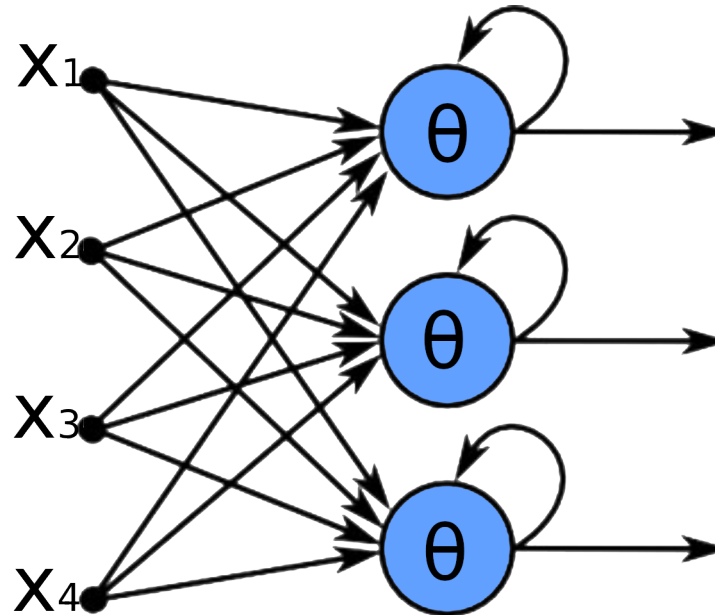


Abgrenzung von Feedforward-Netzen

- Rekurrent Neuronal Networks:
 - Enthalten rückwärts gerichtete Verbindungen
 - Ausgaben der Neuronen werden wieder als Eingaben (meist für die selben Neuronen) verwendet

Abgrenzung von Feedforward-Netzen

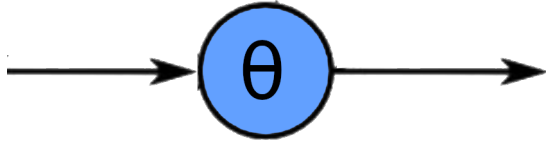
- Rekurrent Neuronal Networks:
 - Enthalten rückwärtsgerichtete Verbindungen
 - Ausgaben der Neuronen werden wieder als Eingaben (meist für die selben Neuronen) verwendet



Wiso rückwärtsgerichtete Verbindungen?

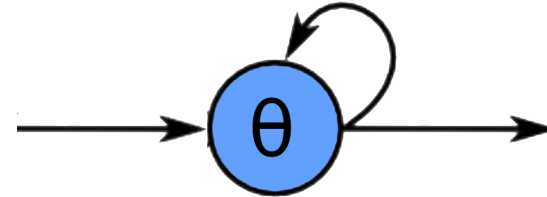
- Bevorzugte Verschaltungsweise neuronaler Netze in Gehirnen (von Menschen und Tieren)
- Erzeugen die Möglichkeit von Gedächtniswerten
 - Verarbeiten von Informationen durch verwenden vorher bekannter Informationen
 - Neue Informationen werden nicht von Grund auf neu interpretiert
 - Ermöglichen Verarbeitung von Zeitreihen, ...

Was können RNNs?



Feedforward Netze:

- Wiedererkennen von bekannten Strukturen (z.B. in Bildern)
- Verarbeiten Eingaben vorgegebener Länge (z.B. MNIST: 28x28 Pixel)
- Bewerten und Interpretieren gegebene Informationen



Rückgekoppelte Netze:

- Analyse und Vorhersage von Zeitreihen (z.B. in Aktienkursen)
- Verarbeiten Eingaben Variabler Länge (nützlich z.B. in Sprachverarbeitung, automatische Übersetzung)
- Sagen eine wahrscheinliche Zukunft vorher

Verwendungszwecke von RNNs

- Verarbeitung von Zeitreihen
 - Bewerten von Aktienkursen
 - Analyse von Audiodateien
- Sprachverarbeitung
 - Verarbeiten von Sprache (z.B. Google Assistant, Alexa, Siri, ...)
 - Automatische Übersetzung (z.B. Google Übersetzer)
 - Meinungsanalysen (z.B. Interpretieren von Filmbewertungen o.ä.)
- „Kreative“ Künstliche Intelligenz

Übersicht

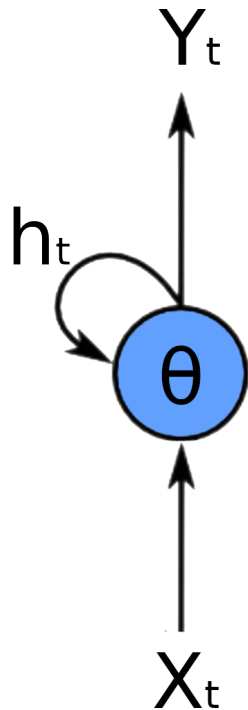
- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- Strukturen von RNNs
- Trainieren von RNNs
- LSTMs / GRUs
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Rekurrente Neuronen

- Nicht nur vorwärts gerichtete Verbindungen
- Enthalten Schleifen

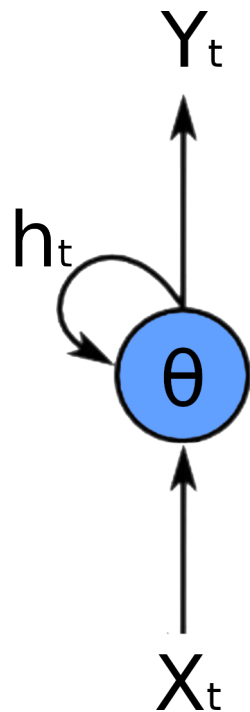
Rekurrente Neuronen

- Nicht nur vorwärts gerichtete Verbindungen
- Enthalten Schleifen



Rekurrente Neuronen

- Nicht nur vorwärts gerichtete Verbindungen
- Enthalten Schleifen



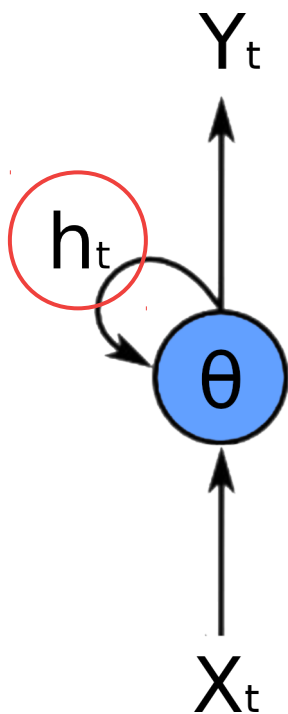
Berechnung:

$$y_t = \theta(x_t^T \cdot w_x + y_{t-1} \cdot w_y + b)$$

- y_t : Ausgabe zum Zeitpunkt t
- x_t : Eingabe zum Zeitpunkt t
- w_x : Gewichtsvektor der aktuellen Eingabe
- w_y : Gewichtsvektor der letzten Ausgabe
- b : Bias Term

Rekurrente Neuronen

- Nicht nur vorwärts gerichtete Verbindungen
- Enthalten Schleifen



Berechnung:

$$y_t = \theta(x_t^T \cdot w_x + y_{t-1} \cdot w_y + b)$$

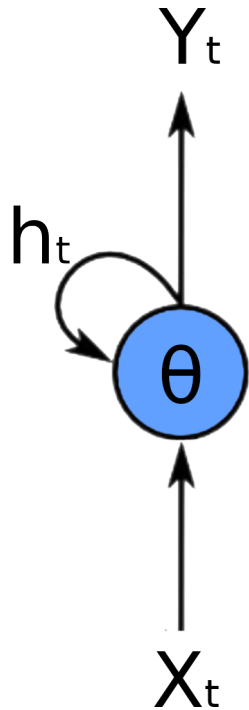
- y_t : Ausgabe zum Zeitpunkt t
- x_t : Eingabe zum Zeitpunkt t
- w_x : Gewichtsvektor der aktuellen Eingabe
- w_y : Gewichtsvektor der letzten Ausgabe
- b : Bias Term
- h_t : Zustand der Zelle zum Zeitpunkt t
 $h_t = f(h_{t-1}, x_t)$ ($h_t = y_{t-1}$ gilt allgemein **nicht**)

Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen

Alternative Darstellungsform des Netzes:

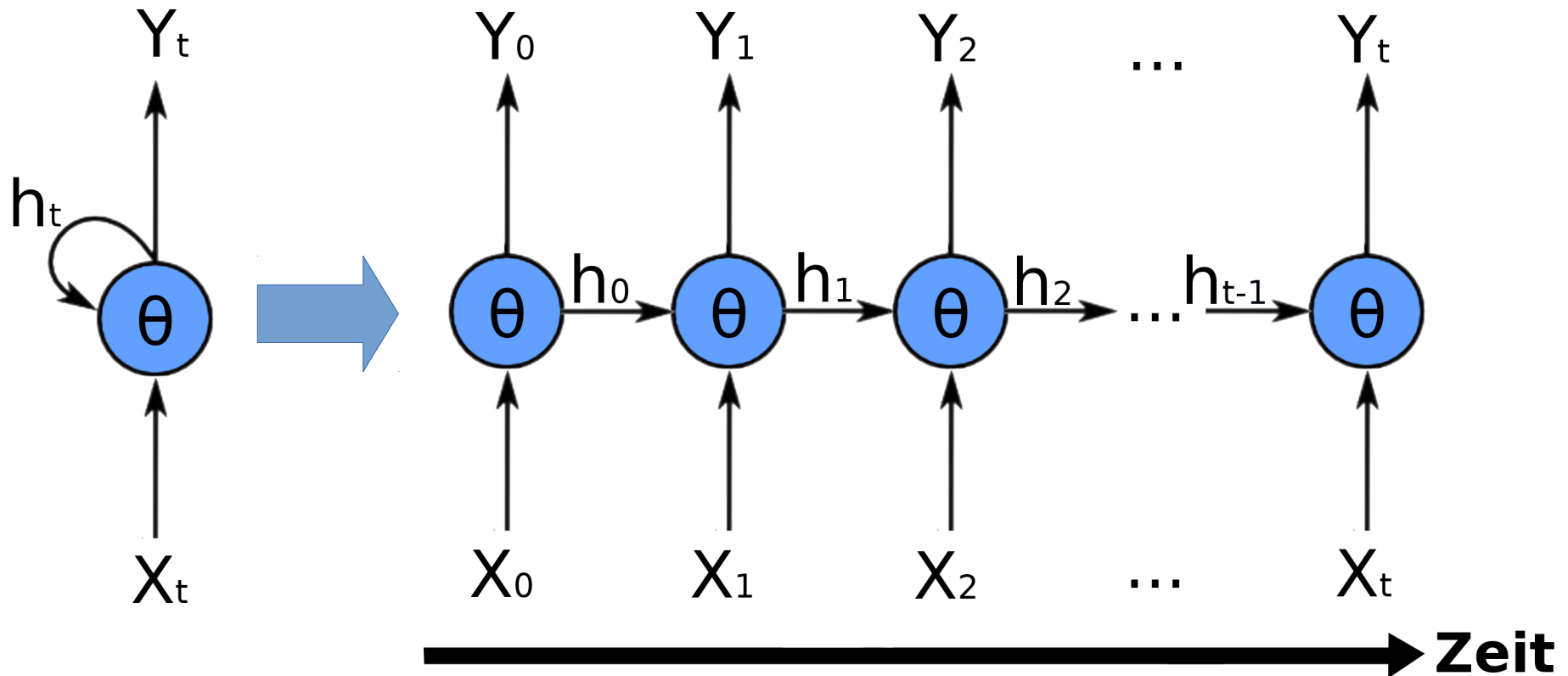
Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen

Alternative Darstellungsform des Netzes:



Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen

Alternative Darstellungsform des Netzes:

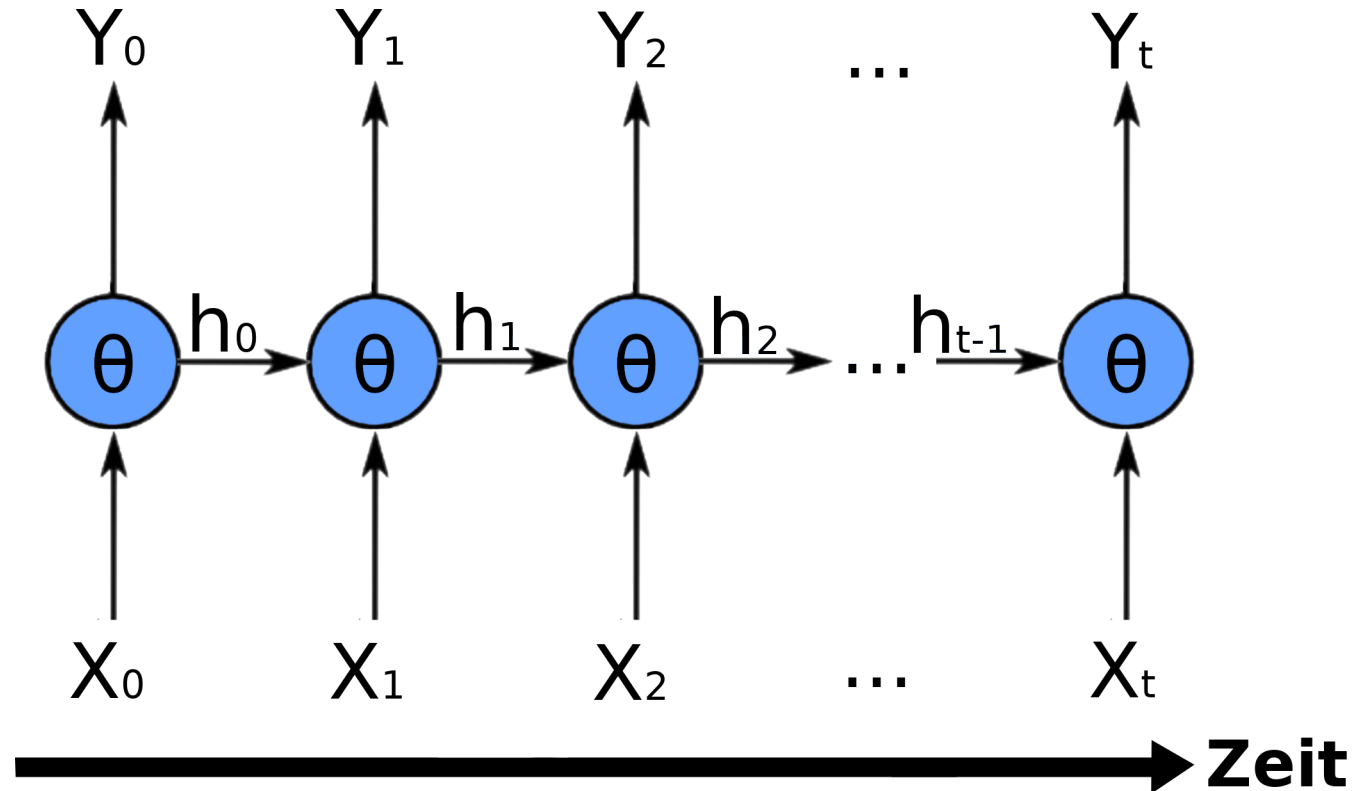


Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen

Alternative Darstellungsform des Netzes:

Ein **einzelnes Neuron** und die **zeit-/iterations-abhängigen Werte** (X , Y und h) werden auf einer Zeitachse dargestellt

Wichtig für das **Trainieren des Netzes**



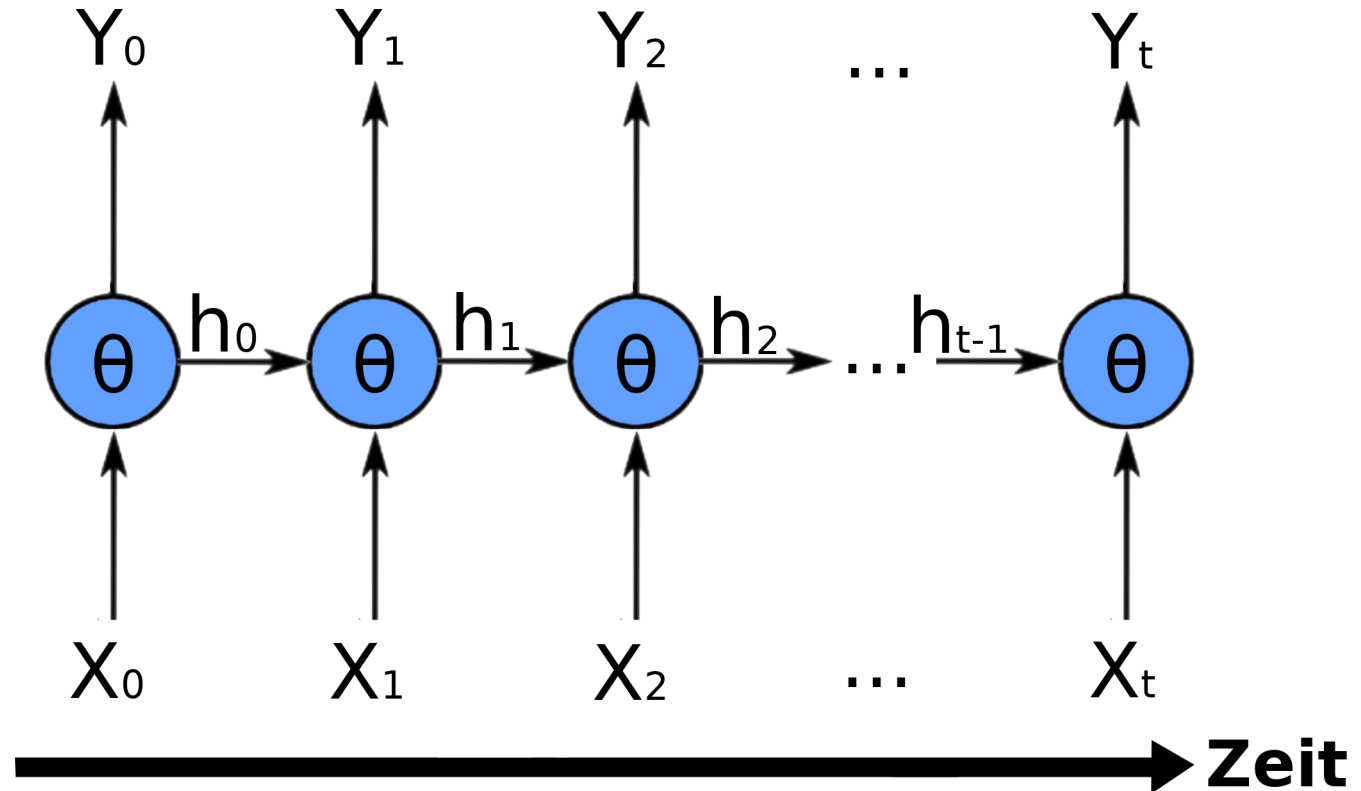
Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen

Alternative Darstellungsform des Netzes:

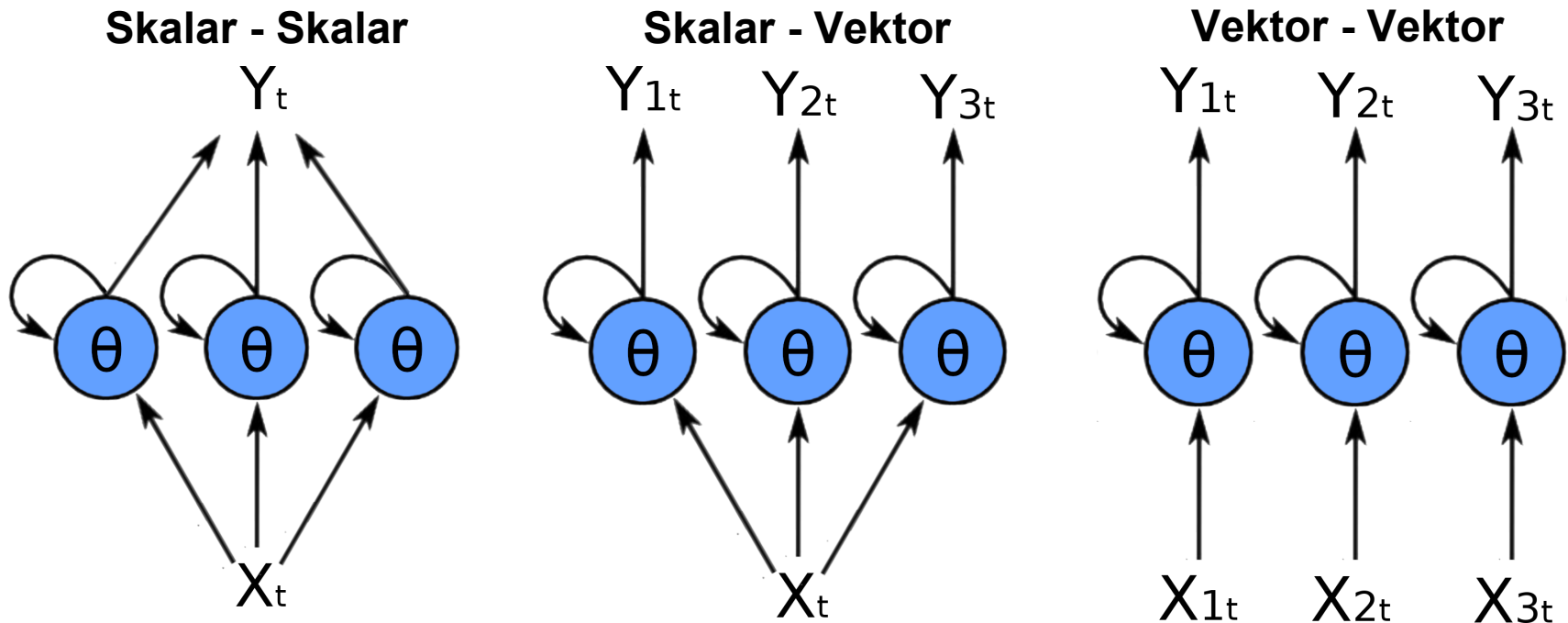
Ein **einzelnes Neuron** und die **zeit-/iterations-abhängigen Werte** (X , Y und h) werden auf einer Zeitachse dargestellt

Wichtig für das **Trainieren des Netzes**

Ein- und Ausgaben können dabei Skalare oder Vektoren sein



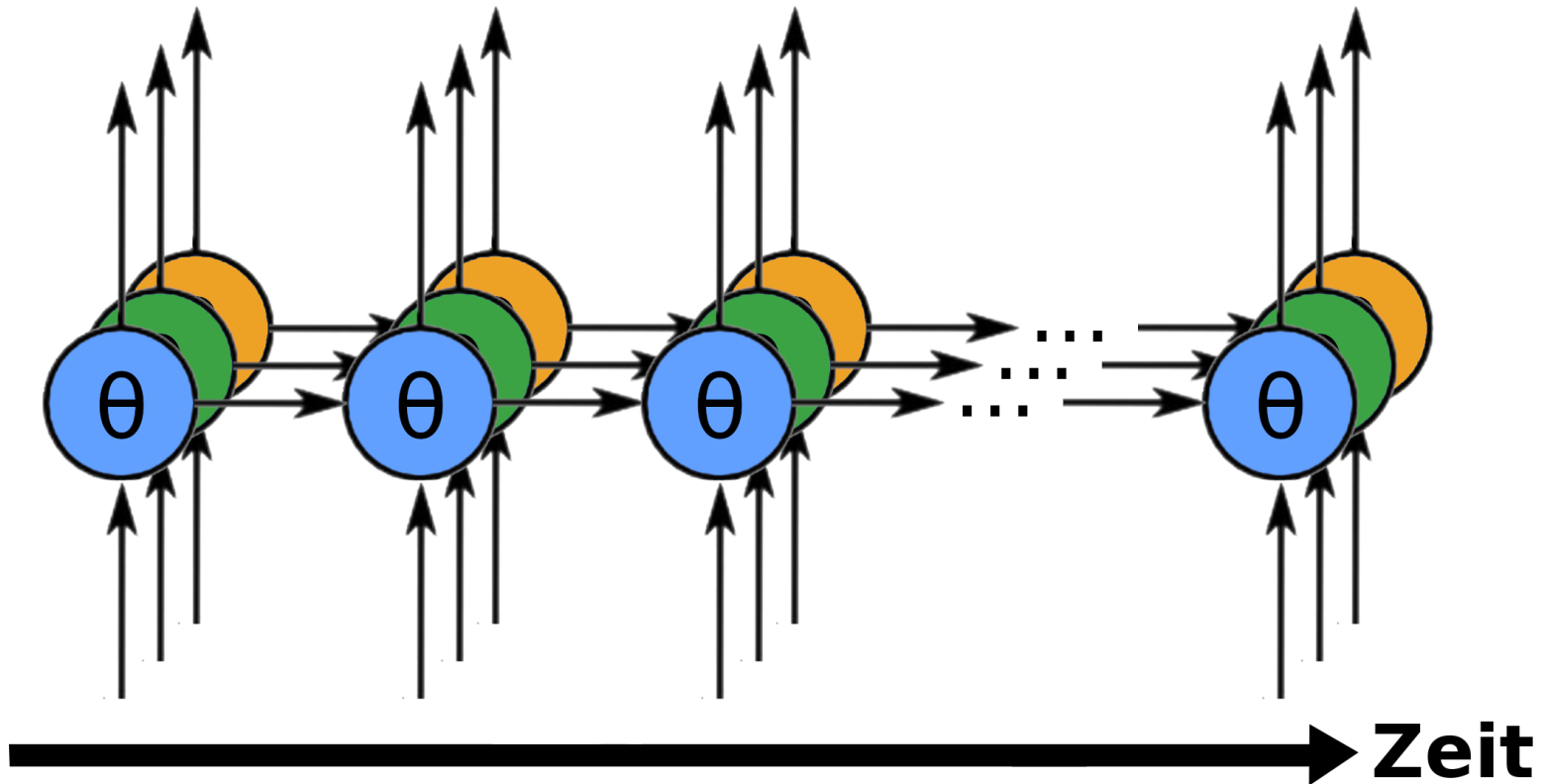
Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen



Ein- und
Ausgaben
können dabei
Skalare oder
Vektoren sein

Das Netz entlang der Zeitachse aufrollen

Aufgerollte Netze mit mehreren (parallelen) rekurrenten Neuronen können als 2-Dimensionales Gitter dargestellt werden

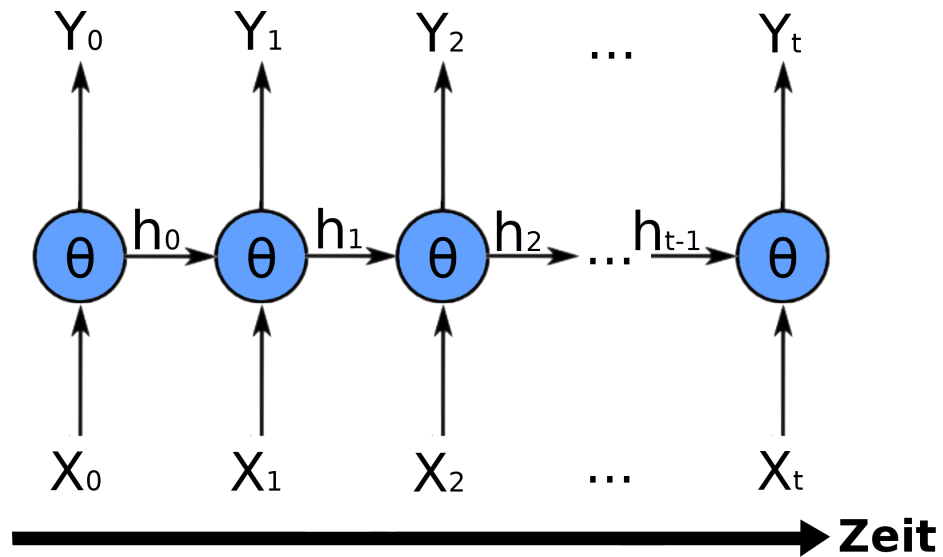


Gedächtnis der Neuronen

Ausgabe eines Neurons zur Zeit t:

$$Y_t = f(X_t, h_{t-1})$$

$$h_t = g(X_t, h_{t-1})$$



Gedächtnis der Neuronen

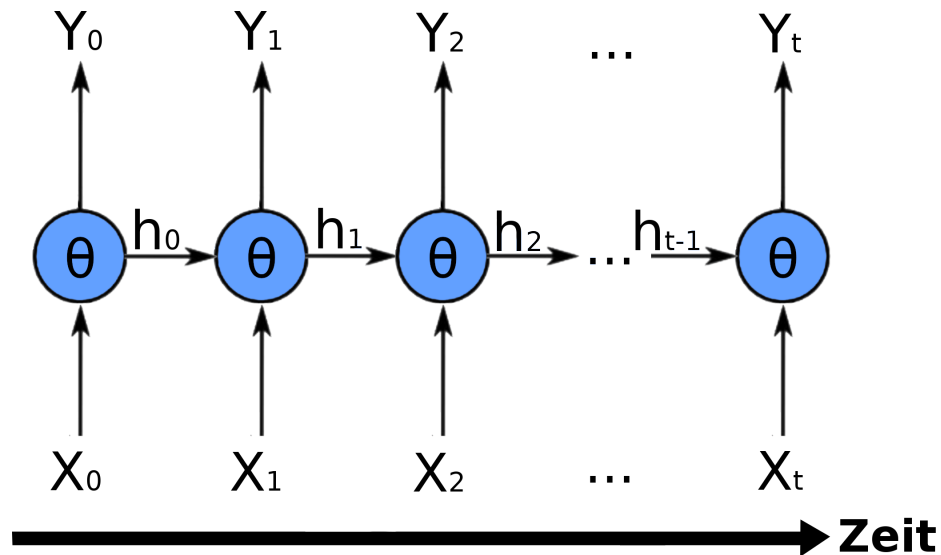
Ausgabe eines Neurons zur Zeit t:

$$Y_t = f(X_t, h_{t-1})$$

$$h_t = g(X_t, h_{t-1})$$

Rekursionsgleichung:

$$Y_t = f(X_t, g(X_{t-1}, g(X_{t-2}, \dots)))$$



Gedächtnis der Neuronen

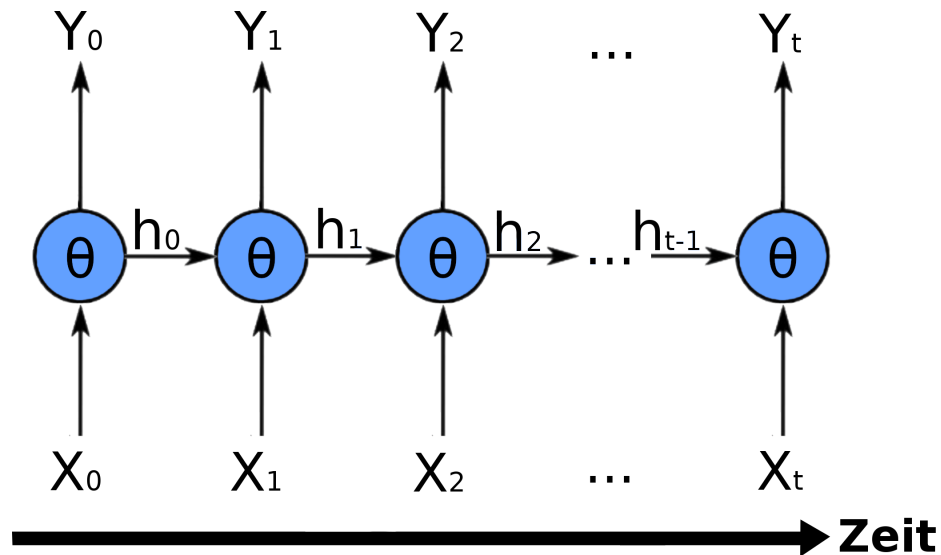
Ausgabe eines Neurons zur Zeit t:

$$Y_t = f(X_t, h_{t-1})$$

$$h_t = g(X_t, h_{t-1})$$

Rekursionsgleichung:

$$Y_t = f(X_t, g(X_{t-1}, g(X_{t-2}, \dots)))$$



=> Die Ausgabe eines Neurons ist eine Funktion in Abhängigkeit **aller bisherigen Eingaben** des Neurons

=> Das Neuron hat eine Art **Gedächtnis**

Übersicht

- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- **Strukturen von RNNs**
- Trainieren von RNNs
- LSTMs / GRUs
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Ein- und Ausgabesequenzen

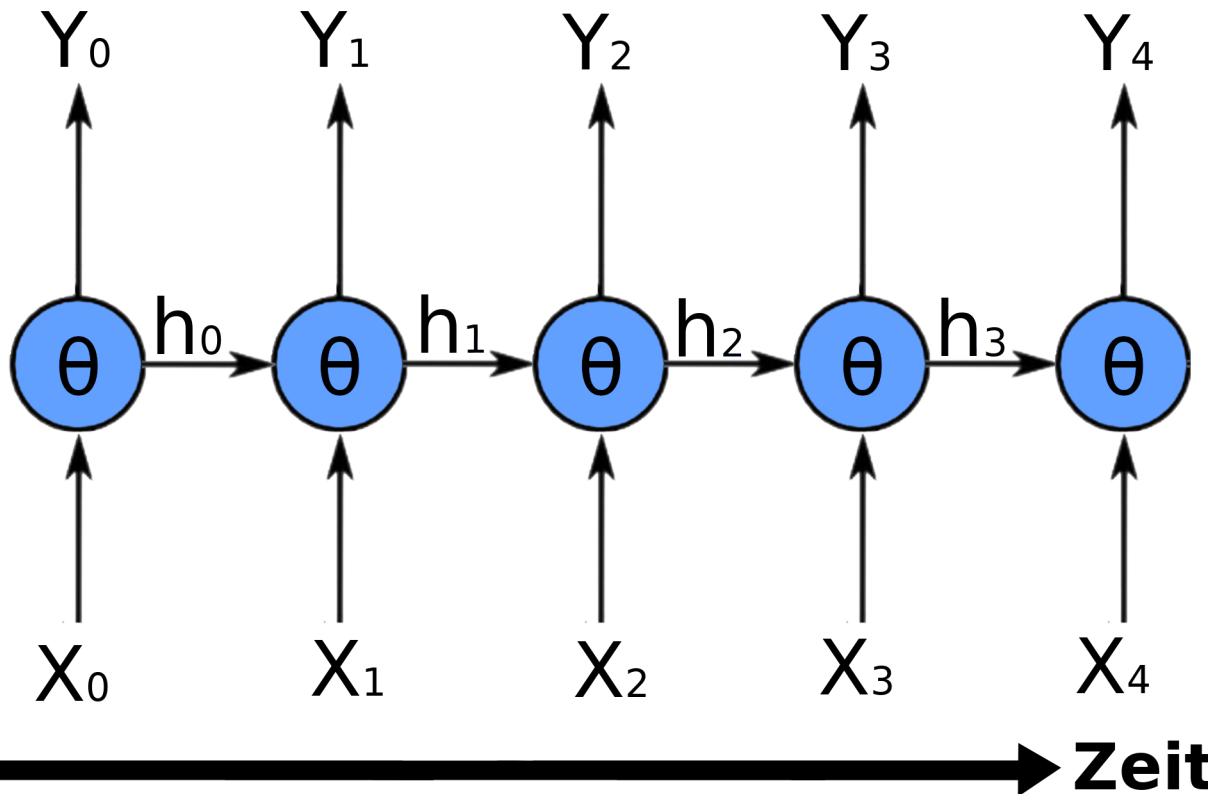
- Feedforward-Netze verarbeiten nur Eingaben vorgegebener Länge
- Rekurrente Neuronale Netze haben keine Vorgegebenen Längen (weder in der Eingabe, noch in der Ausgabe)

=> RNNs können für verschiedene Zwecke verwendet werden, bei denen sie verschiedene Längen von Ein- und Ausgaben erhalten / generieren

=> Sequenz zu Sequenz, Sequenz zu Vektor, Vektor zu Sequenz, verzögerte Sequenz zu Sequenz

Ein- und Ausgabesequenzen

Sequenz zu Sequenz

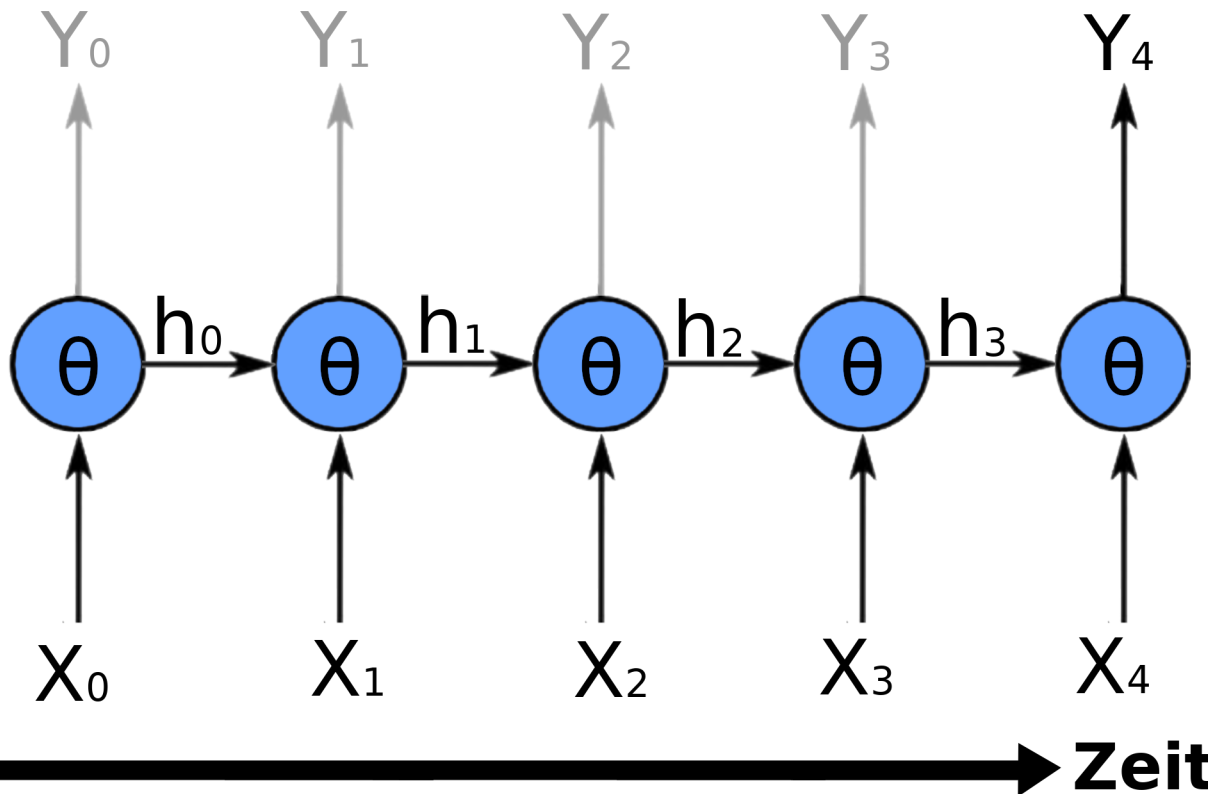


Verwendungsbeispiel:

Vorhersage von
Zeitreihen (wie z.B.
Aktienkursen)

Ein- und Ausgabesequenzen

Sequenz zu Vektor

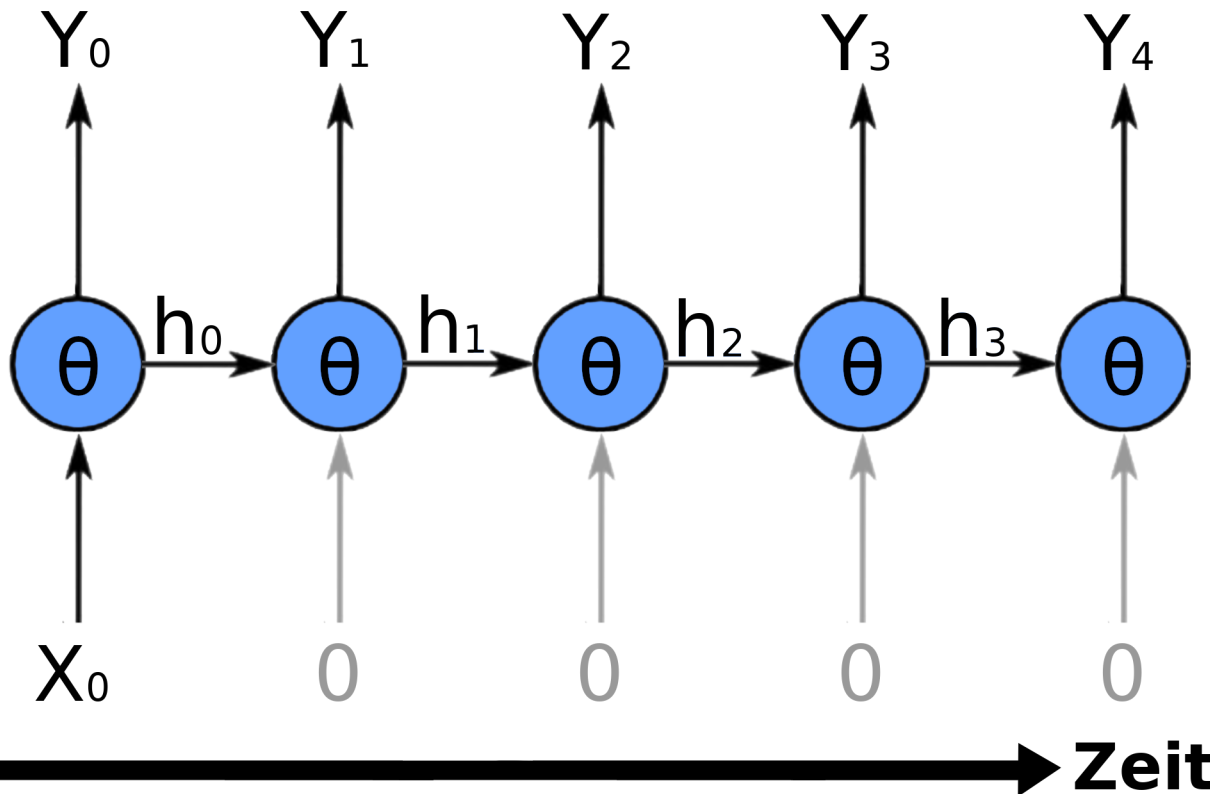


Verwendungsbeispiel:

Analyse von Texten
(z.B. Filmbewertungen:
Eingabe ist der Text der
Filmbewertung)

Ein- und Ausgabesequenzen

Vektor zu Sequenz



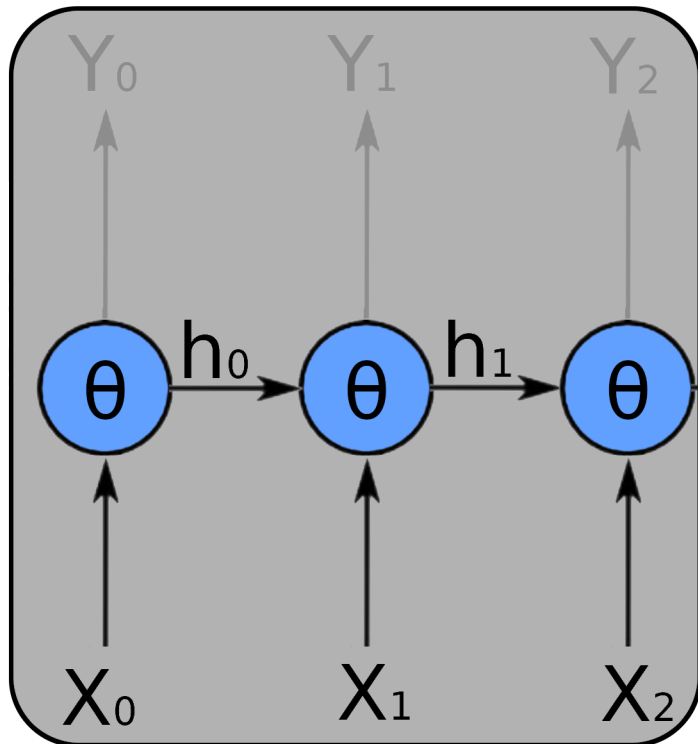
Verwendungsbeispiel:

Bildbeschreibung
(Eingabe ist ein Bild,
Ausgabe ist die
Beschreibung des Bilds)

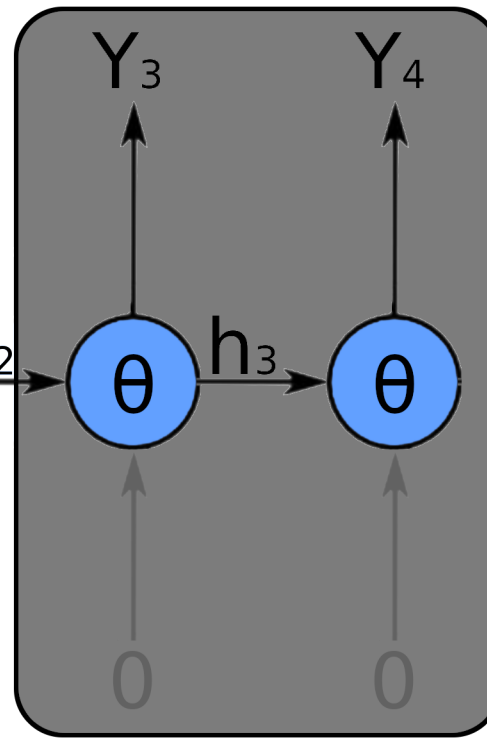
Ein- und Ausgabesequenzen

Encoder - Decoder

Encoder



Decoder

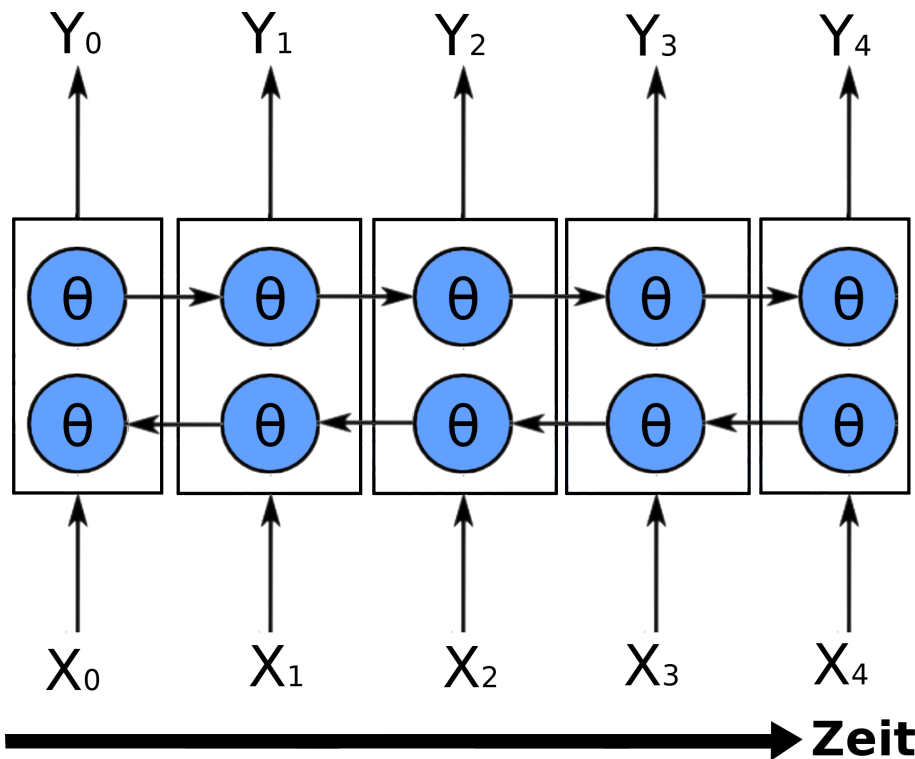
 h_2 h_3 **Zeit**

Verwendungsbeispiel:

Automatische
Übersetzung von Text
(die Eingabelänge muss
nicht gleich der
Ausgabelänge sein)

Bidirektionale RNNs

- Informationen aus Vergangenheit und Zukunft
- Jeweils ein Hidden-Layer für Vorwärts- und Rückwärtsrichtung



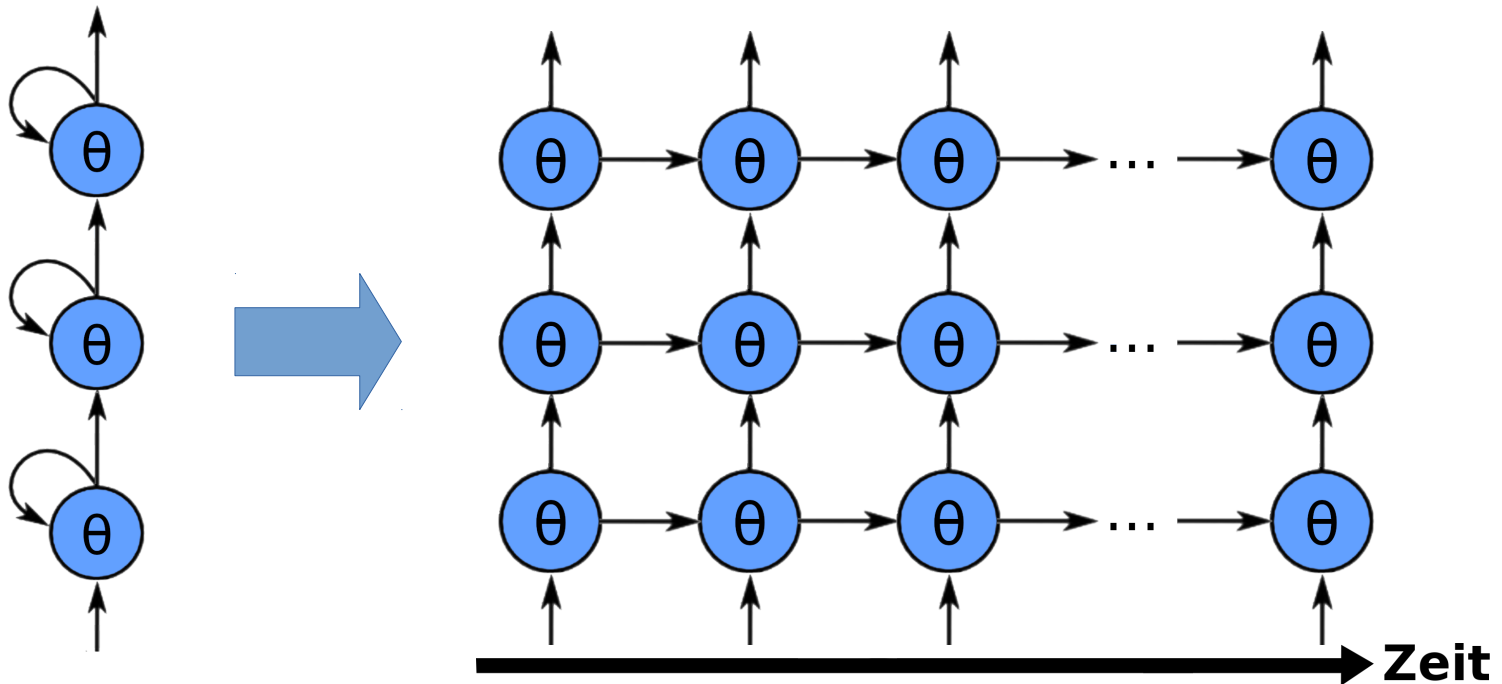
- Nützlich wenn bereits alle Informationen bekannt sind
- Erhöht den Anteil von Input-Informationen im Netz

Verwendungsbeispiel:

Erkennen von handschriebenen Ziffern (MNIST), da alle Daten bekannt sind und verwendet werden können

Deep RNNs

- RNNs lassen sich auch mit mehreren Hidden-Recurrent-Layern bilden
- Meistens werden dafür (vergleichsweise) wenige Hidden-Layers verwendet (2-4 Layer)



Übersicht

- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- Strukturen von RNNs
- **Trainieren von RNNs**
- LSTMs / GRUs
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Training von RNNs

RNNs werden mit Backpropagation Through Time (BPTT) trainiert.

Die gleichen Parameter werden über die Zeit beibehalten (Parameter Sharing)

Es folgen:

- Grundlagen BPTT
- Unterschiede zur traditionellen BP
- Vanishing Gradient Problem
- Dropout

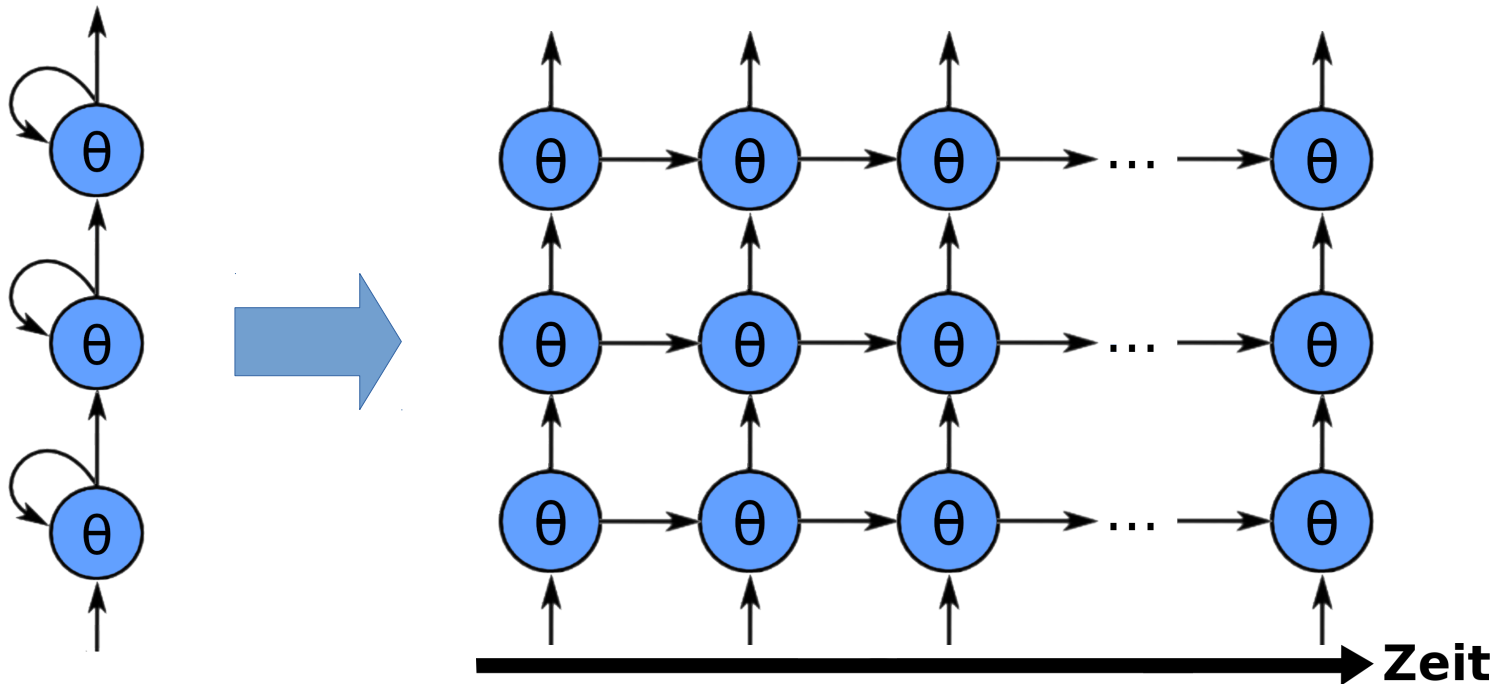
Grundlagen BP

Zur Erinnerung:

- Gradienten Berechnungen für Parameter U , V , W
- Stochastic Gradient Descent

BPTT

- Beginnt damit, das Netz aufzufalten
- Gewichte Rekursiv über zeitliche Layer berechnen
- Gleicher Algorithmus, wie bei Feedforward NNs



BPTT

- standard RNNs sind hard zu trainieren
- Sequenz kann sehr lang sein
- Back-propagation durch viele Layer
- Oft wird der BP-Algorithmus abgekürzt
- Truncated Backpropagation Through Time

BPTT

- standard RNNs sind hard zu trainieren
- Sequenz kann sehr lang sein
- Back-propagation durch viele Layer
- Oft wird der BP-Algorithmus abgekürzt
- Truncated Backpropagation Through Time

Fragen:

1.) Welchen Vorteil hat ein Abkürzen der Backpropagation?

Truncated BPTT - TBPTT

- Anstelle Berechnen aller vorherigen Gewichte
 - Nur letzten K Gewichte
 - Aufrollen nur K mal
 - Weniger Kosten
 - Wirkt gegen Vanishing Gradients für kleines K

Fragen:

- 1.) Wie wählt man K?
- 2.) Wann macht man das Gewichtsupdate beim Betrachten einer Sequenz?

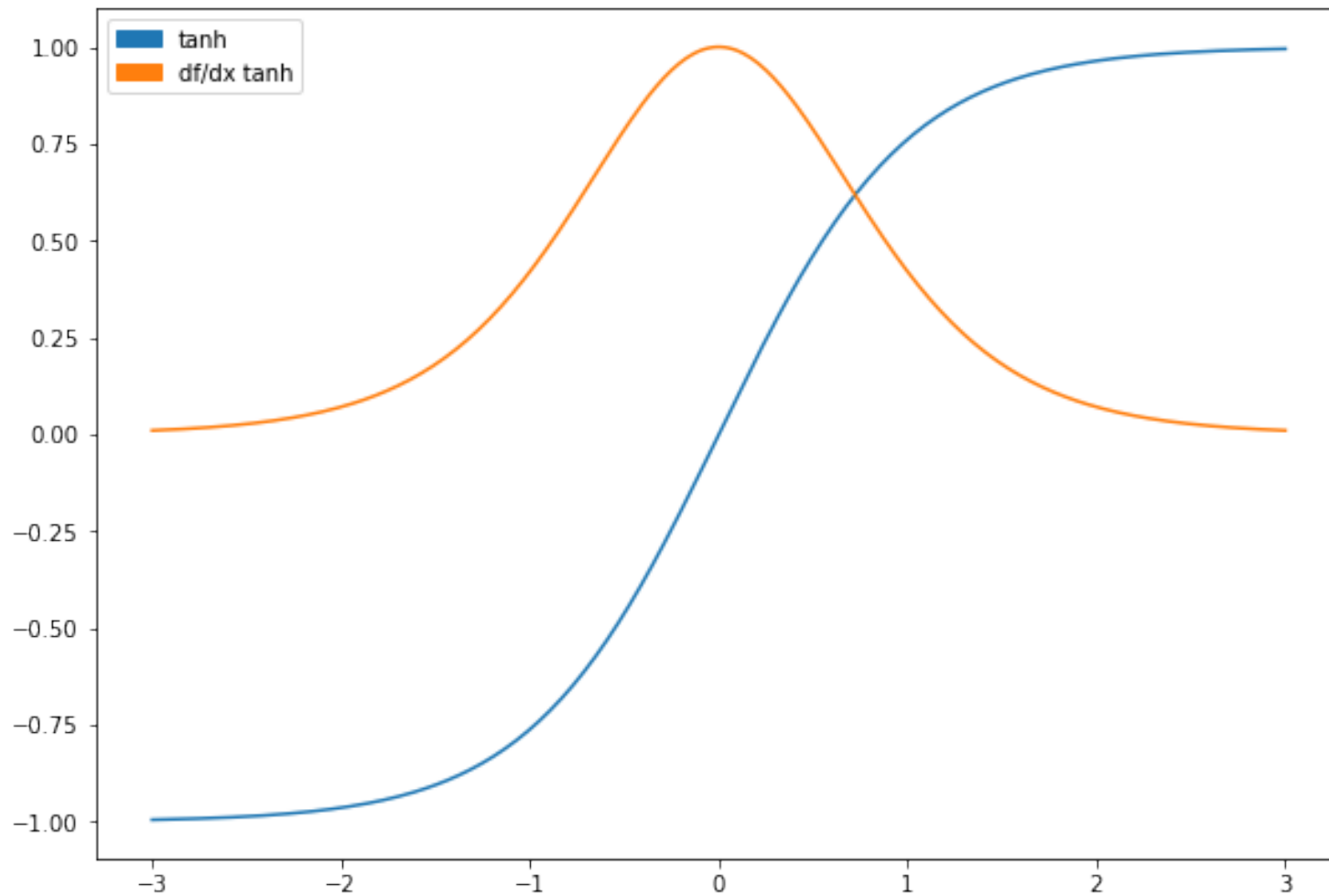
TBPTT

- **TBPTT(n, n)**
 - Klassisch: Update am Ende der Sequenz über alle Zeitschritte
- **TBPTT($1, n$)**
 - Nach einem Sequenzschritt Update über alle Zeitschritte
- **TBPTT($k1, 1$)**
 - Nach $k1$ Sequenzschritten Update für einen Zeitschritt
- **TBPTT($k1, k2$)** $k1 < k2 < n$
 - Viele Updates pro Sequenz
→ Beschleunigte Lernrate
- **TBPTT($k1, k2$)** $k1=k2=h$
 - Gebräuchlich: TF und Keras implementierung

Vanishing Gradient Problem

- Kettenregel geht über Zeit
- $\frac{df}{dx}$ tanh (oder sigmoid)-Funktion geht gegen 0 an beiden Enden
- Kleine Werte werden multipliziert
 - Gradient geht gegen 0
 - Lernen über längere Zeit nicht möglich
 - Vergleichbar mit unglaublich tiefen Netzen

BPTT



Lösung Vanishing Gradient Problem

- Initialisierung von W reduziert Effekt
- Regularisierung
 - Dropout
 - Layer-Normalization
 - Etc.
- ReLU anstelle von tanh oder sigmoid
- LSTMs oder GRUs

Exploding Gradient Problem

Gradient steigt exponentiell

→ „explodiert“

Lösungen

→ Clipping:

- Gradientenlänge wird verkürzt bzw. „geclippt“ (Norm based clipping)
- Größte Teilkomponente wird „geclippt“ (Value based clipping)

→ Andere Regularisierer

- Dropout
- Layer-Normalization

RNN Dropout

Mehrere Arten von Dropout in RNNs

- Input Dropout
- Recurrent Dropout
- weitere (Variational, Fraternal, Curriculum, etc.)

RNN Dropout

Mehrere Arten von Dropout in RNNs

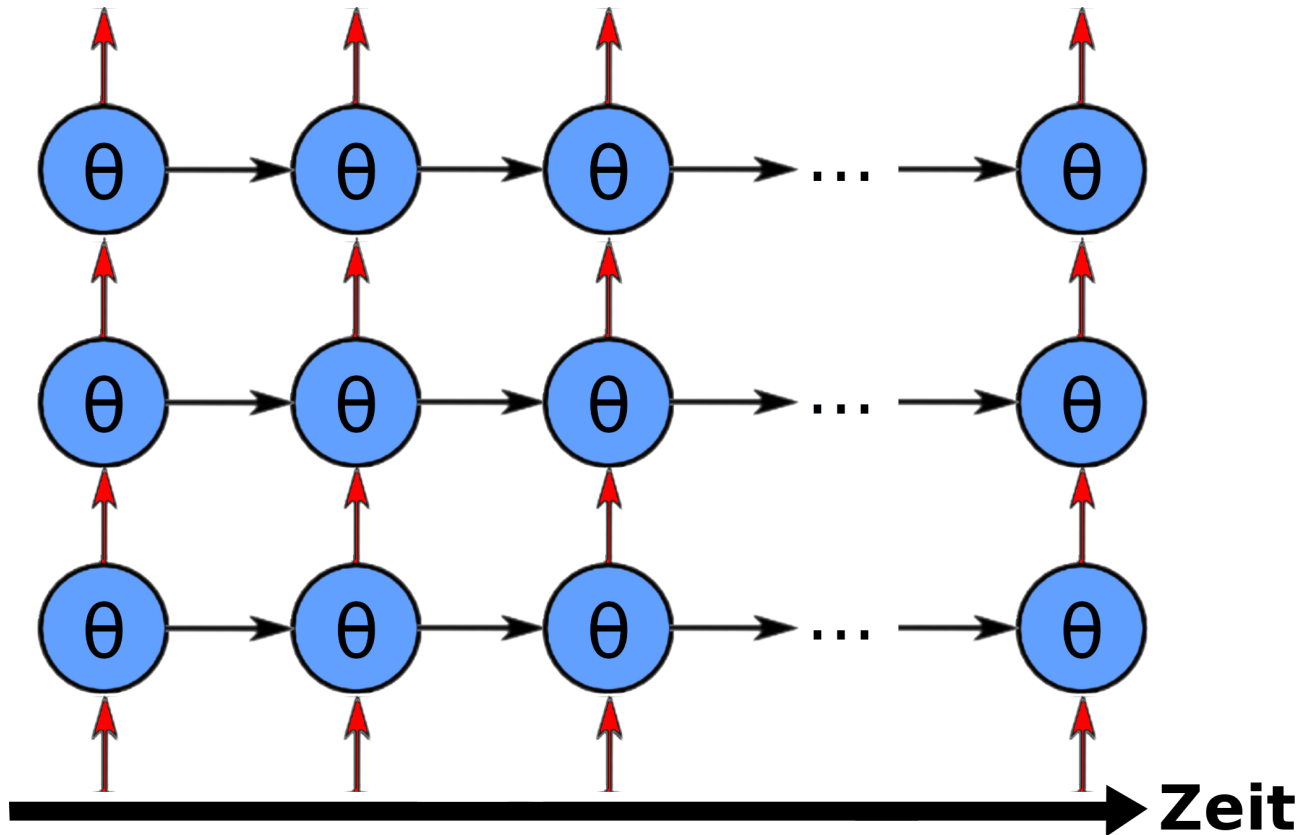
- Input Dropout
- Recurrent Dropout
- weitere (Variational, Fraternal, Curriculum, etc.)

Fragen:

- 1.) Warum mehrere Arten?
- 2.) Wie könnten diese funktionieren?

„normaler“ Dropout in RNNs

Die Roten Pfeile markieren die betroffenen Verbindungen



Input Dropout

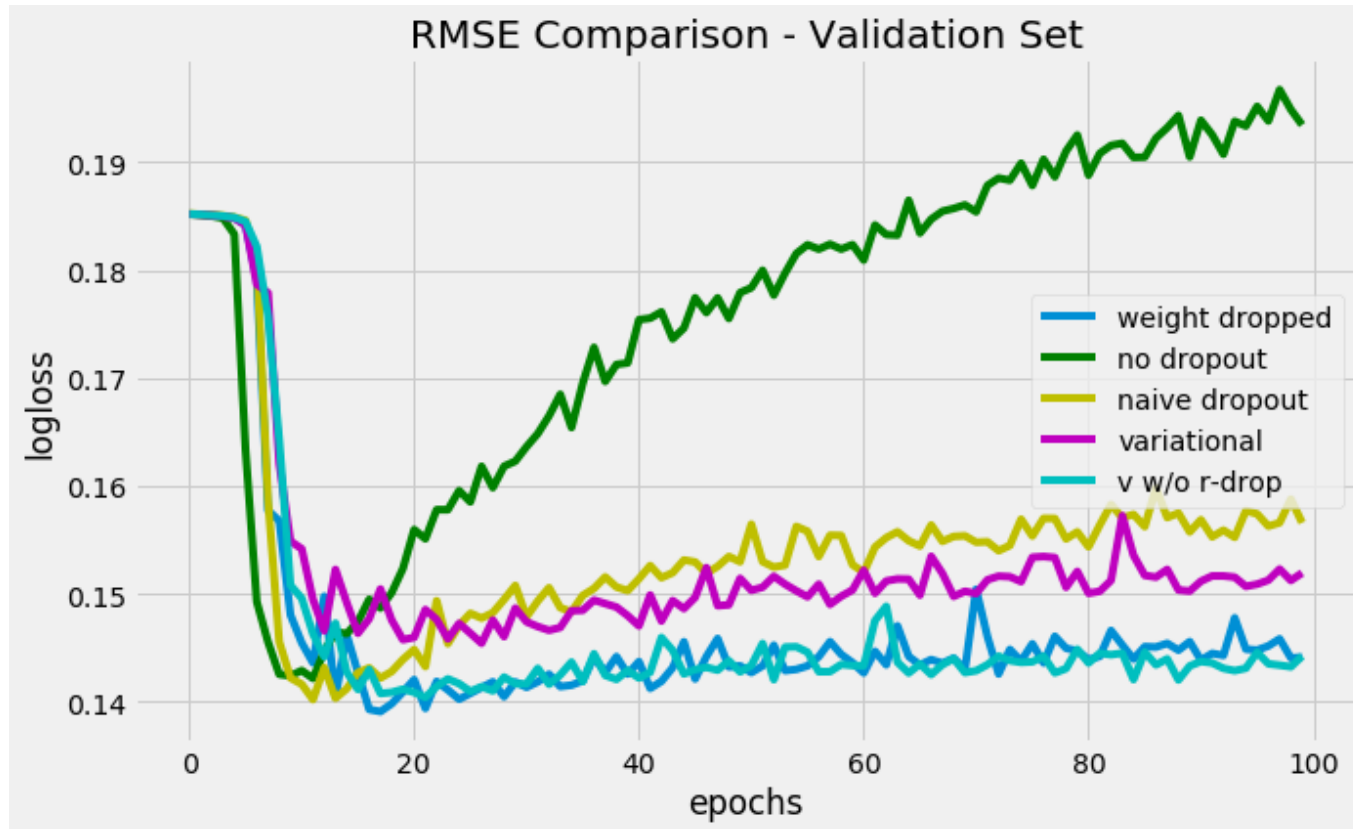
- Daten an einer RNN-Input-Node werden ausgeschlossen
 - Kein Gewichtsupdate für ausgeschlossene Nodes
- Entspricht „normalen“ Dropout

Recurrent Dropout

- Dropout am „Gedächtnis-Speicher“ von RNN Nodes
- Nur für LSTMs:
 - Dropout für Subnetzwerk
 - Nur Update des „Gedächtnis-Speichers“ auf den Input der zeitlich nächsten Node betroffen

Dropout Loss Beispiel

Beispiel mit Pytorch auf Cornell Film Review Dataset



Von <https://towardsdatascience.com/learning-note-dropout-in-recurrent-networks-part-3-1b161d030cd4>

Batch Normalization

Klassisch:

$$\hat{x}_i = \frac{x_i - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \epsilon}}, \quad \mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \quad \sigma^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu)^2$$

- Unklar wie man Batch-Normalization für RNNs einsetzt
 - Man benötigt sehr große mini-Batches um Statistiken genau vorherzusagen
- Layer Normalization

Layer Normalization

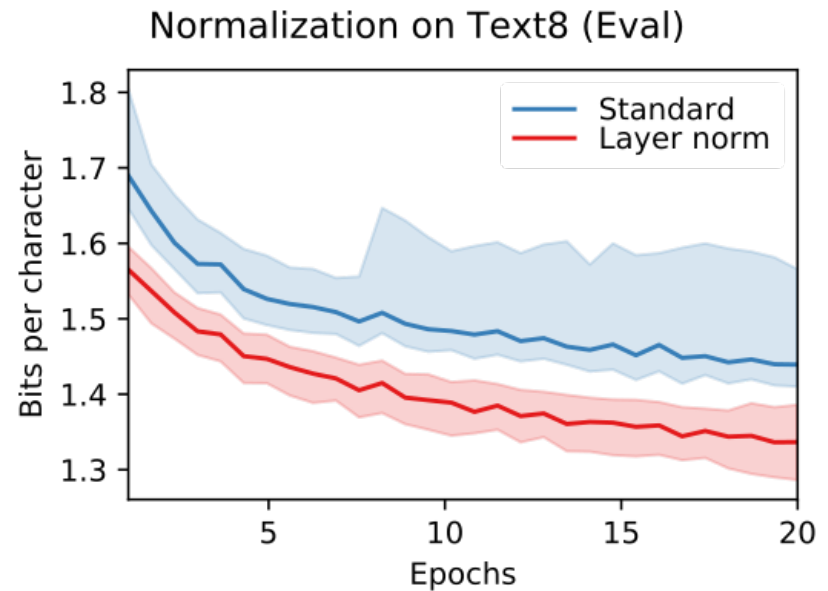
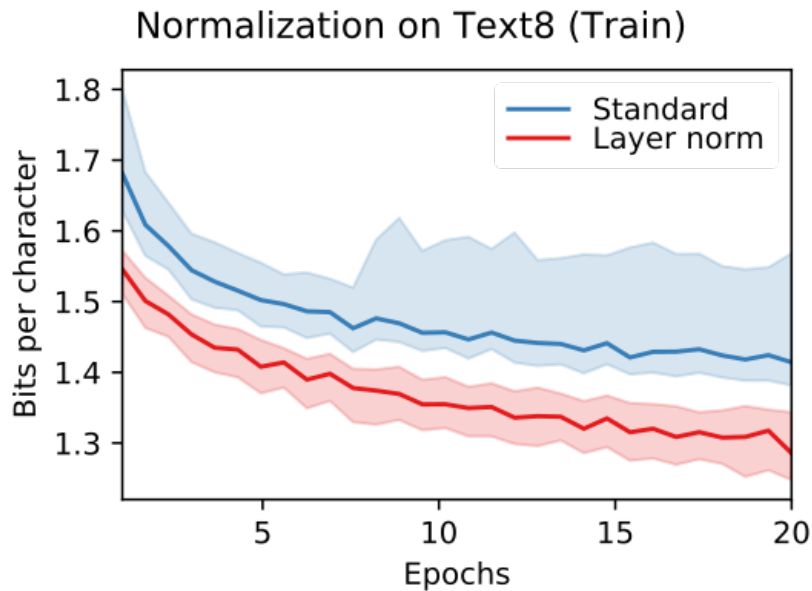
- Features werden normalisiert

$$\mu = \frac{1}{D} \sum_{d=1}^D x_i^d$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{D} \sum_{d=1}^D (x_i^d - \mu)^2$$

$$\hat{x}_i^d = \frac{x_i^d - \mu}{\sqrt{\sigma^2 + \epsilon}}$$

Layer Normalization



Von <https://danijar.com/language-modeling-with-layer-norm-and-gru/>

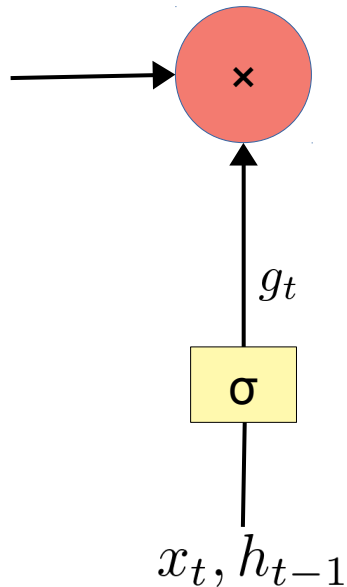
Übersicht

- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- Strukturen von RNNs
- Trainieren von RNNs
- **LSTMs / GRUs**
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Long Short Term Memory

- Probleme von Vanilla-RNNs:
 - Abhängigkeiten und Informationen gehen über lange Sequenzen hinweg verloren
 - *Vanishing Gradient*
- Einführung eines Zellzustandes / Kontext C_t
 - „Langzeitgedächtnis“
 - zusätzlich zum *hidden state* h_t

Long Short Term Memory Gates



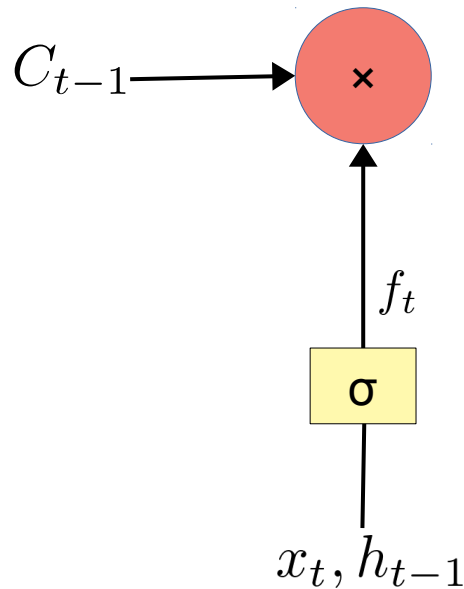
- Gates bestimmen welche Informationen „durchgelassen“ werden
- Bestehen aus Sigmoid-Schicht und einer elementweisen Multiplikation \odot oder \times
- Eingabe: Netzeingabe und *hidden state*
- Sigmoid-Layer erzeugt Werte zwischen 0 und 1
 - 1 bedeutet Information wird durchgelassen
 - 0 bedeutet Information wird nicht durchgelassen

$$g_t = \sigma(W_x x_t + b_x + W_h h_{t-1} + b_h)$$

Kürzere Notation: $g_t = \sigma(W_g [h_{t-1}, x_t] + b_g)$

Long Short Term Memory

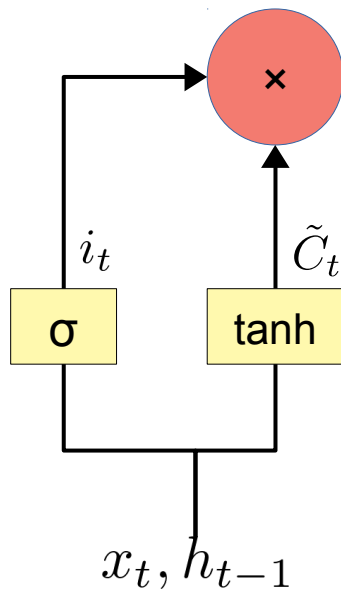
Forget Gate



Bestimmt welche Informationen aus dem Kontext „vergessen“ werden

$$f_t = \sigma (W_f [h_{t-1}, x_t] + b_f)$$

Long Short Term Memory Input Gate

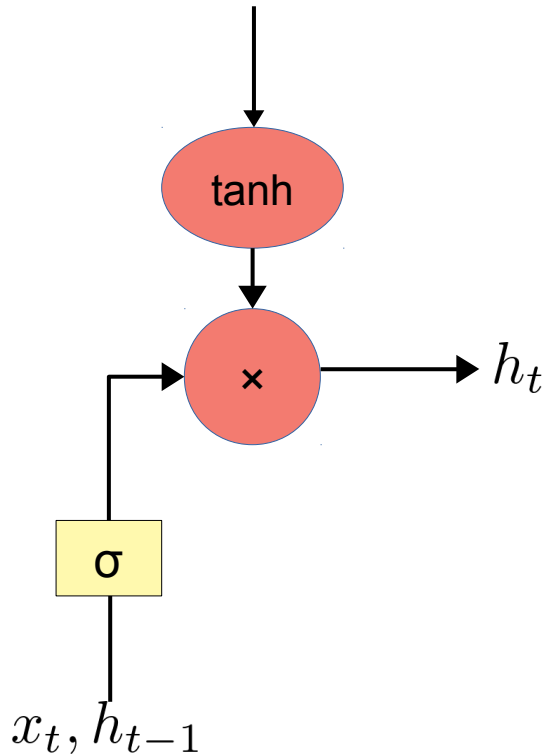


Bestimmt welche Informationen aus dem alten Kontext und dem aus der Eingabe ermittelten Kandidaten \tilde{C}_t in den neuen Zustand übernommen werden

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c)$$

$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i)$$

Long Short Term Memory Output Gate

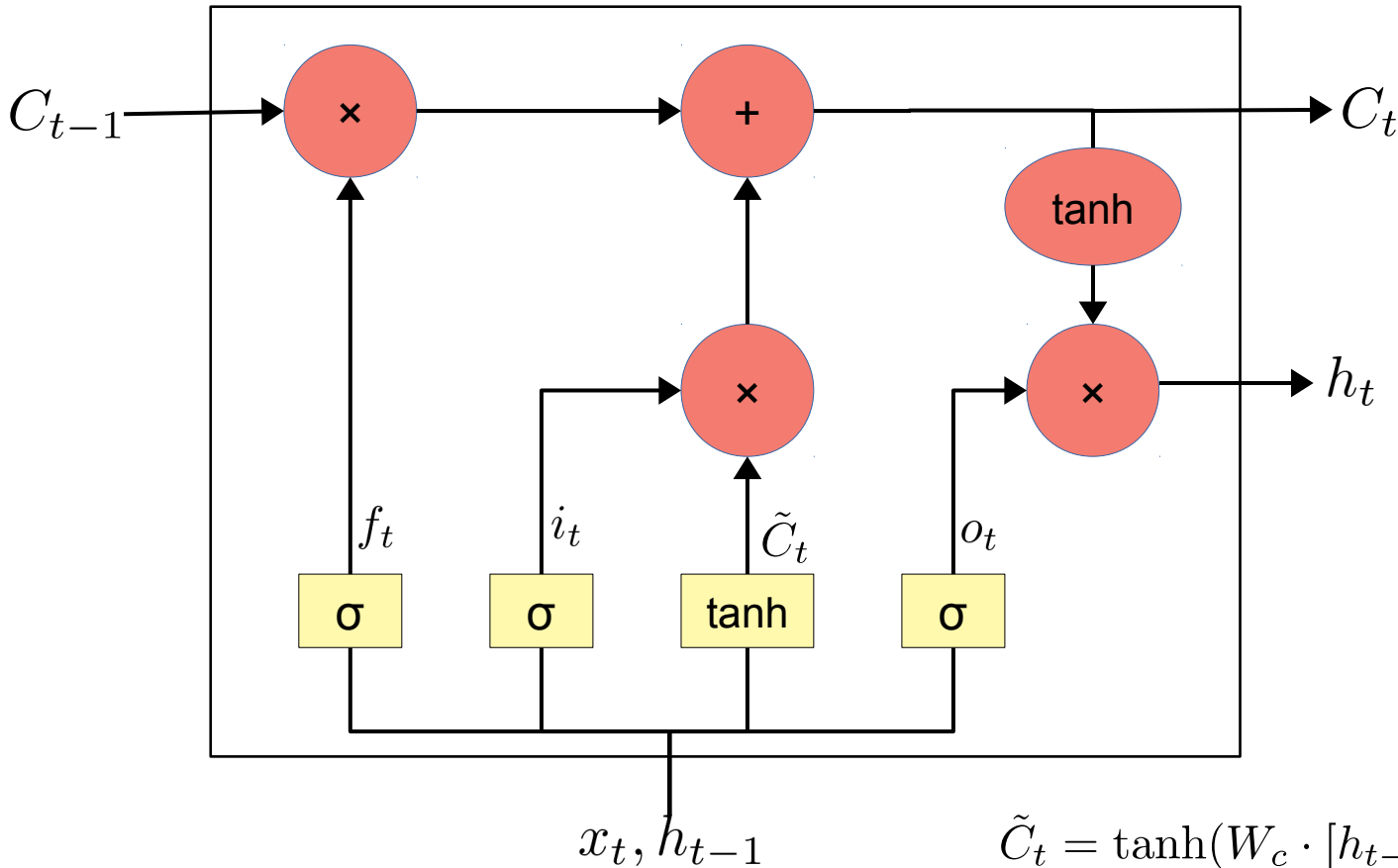


Bestimmt welche
Informationen aus dem
Zellzustand in die Ausgabe
übernommen werden

$$o_t = \sigma(W_o \cdot [x_t, h_{t-1}] + b_o)$$

$$h_t = o_t \circ \tanh(C_t)$$

Long Short Term Memory

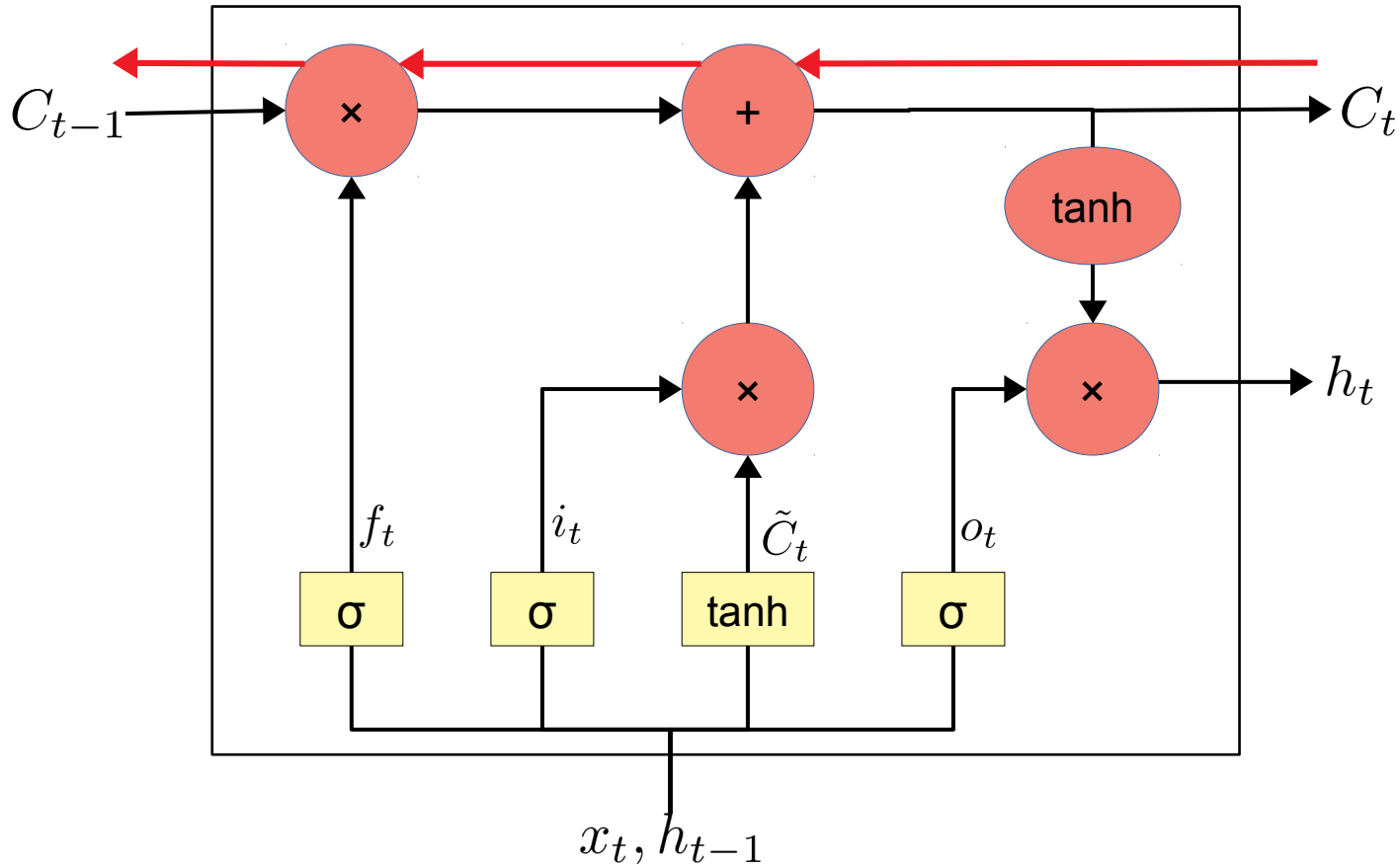


$$\tilde{C}_t = \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c)$$

$$C_t = f_t \circ C_{t-1} + i_t \circ \tilde{C}_t$$

$$h_t = o_t \circ \tanh(C_t)$$

Long Short Time Memory Gradientenfluss



Long Short Time Memory Gradientenfluss

- LSTMs schwächen das Problem verschwindender Gradienten ab
- Problem im Vanilla-RNN: häufige Multiplikation mit der selben Gewichtsmatrix
 - Verstärkung verschwindender / explodierender Gradienten
- Vorteil LSTM: „Ungehinderter“ Gradientenfluss für den Zellzustand
 - Lediglich elementweise Operationen, keine Matrixmultiplikation
 - *Forget gate* kann über die Schritte hinweg unterschiedlich aussehen, es handelt sich nicht immer um die selbe Matrix

LSTM Varianten

- Peephole Connections: Gates „schauen“ auf den Zellenkontext

$$f_t = \sigma(W_f[C_{t-1}, h_{t-1}, x_t])$$

$$o_t = \sigma(W_o[C_{t-1}, h_{t-1}, x_t])$$

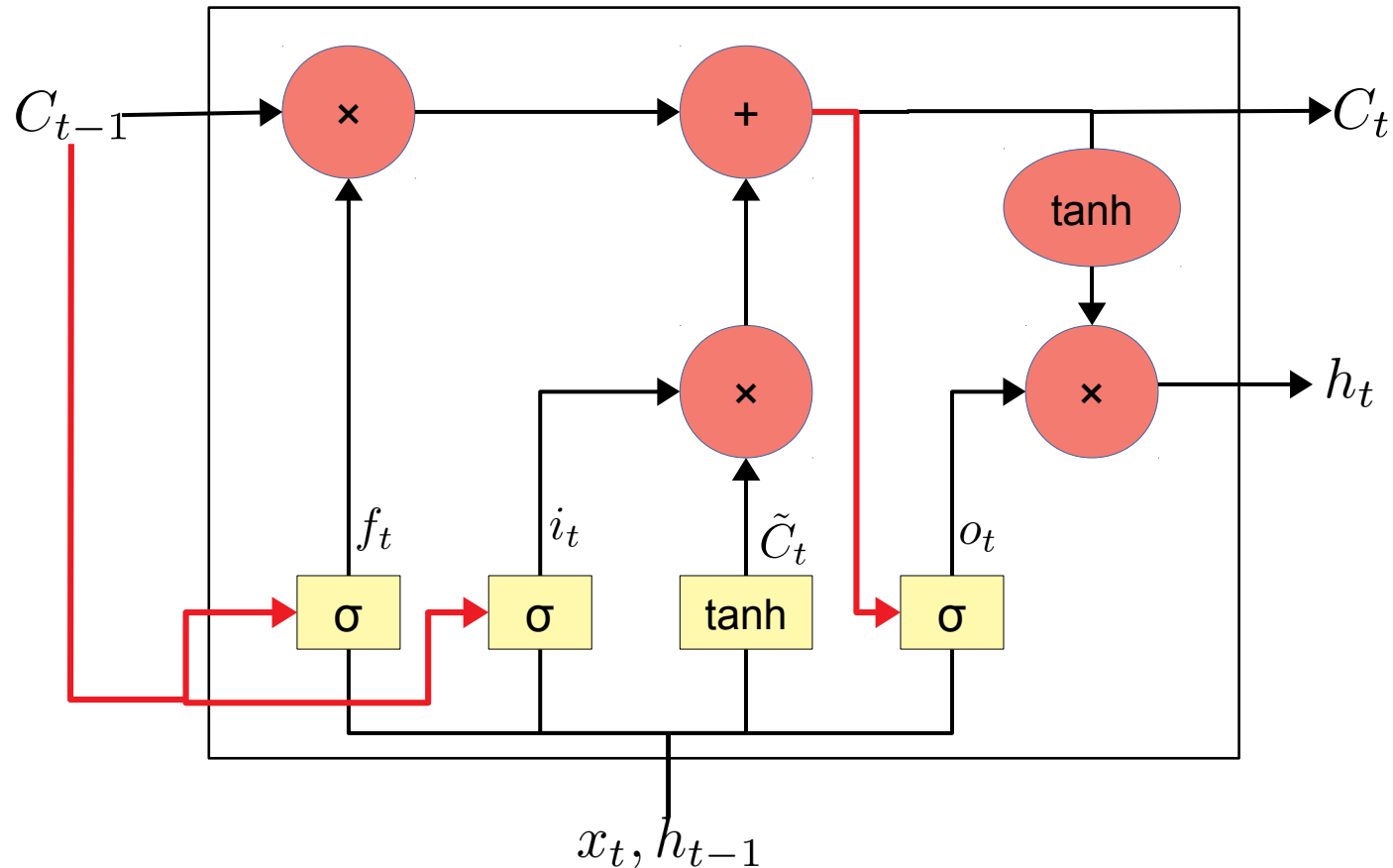
$$i_t = \sigma(W_i[C_t, h_{t-1}, x_t])$$

- Gekoppeltes *forget* und *input* gate

$$C_t = f_t \circ C_{t-1} + (1 - f_t) \circ \tilde{C}_t$$

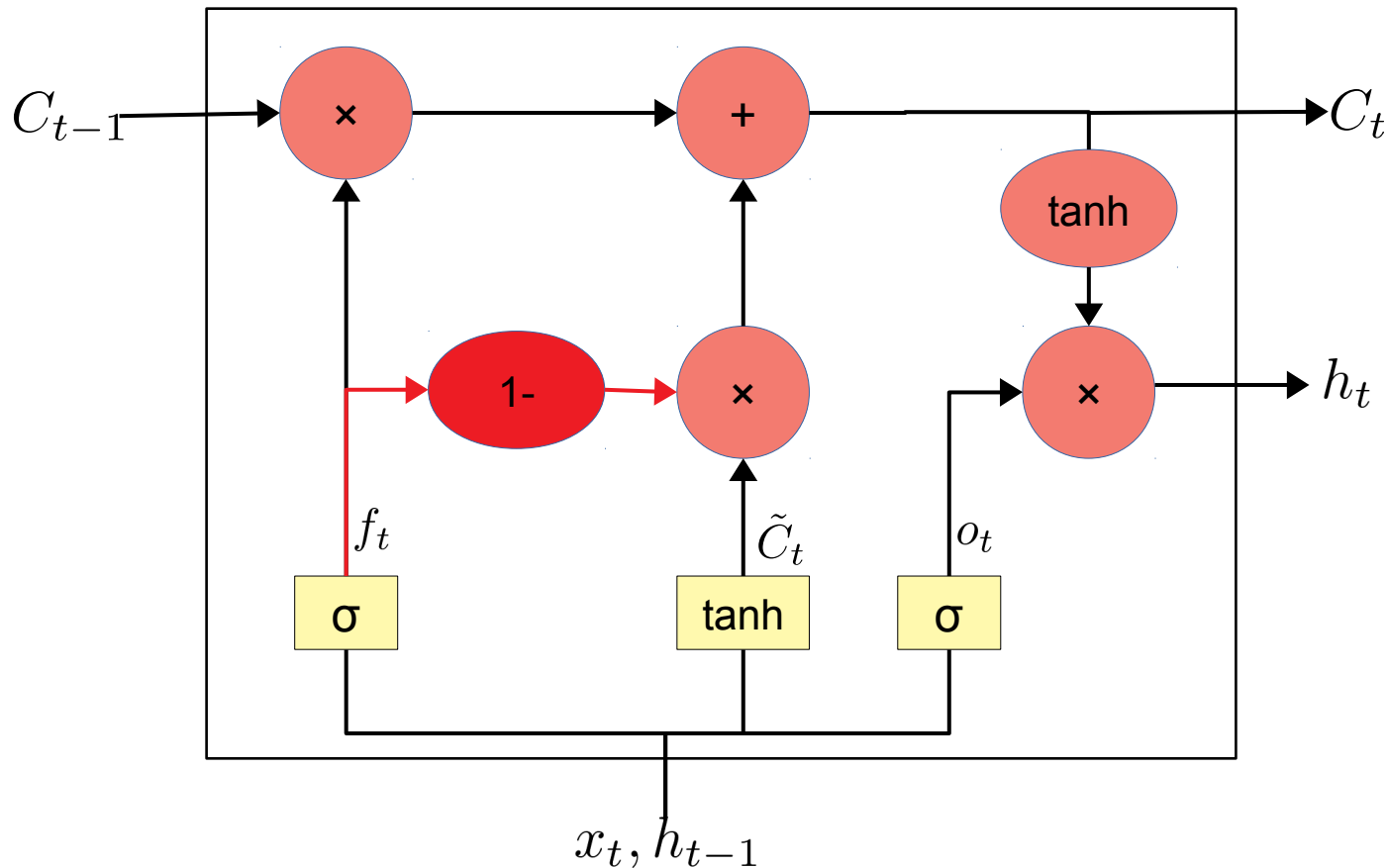
LSTM Varianten

Peephole Connections



LSTM Varianten

Gekoppeltes *forget* und *input gate*



Gated Recurrent Units

- Vereinfachtes LSTM, verwendet keinen Zellzustand C_t
- GRU nutzt ein *reset gate* an Stelle von *forget* und *output gate*, so wie ein *update gate*

Reset Gate:

Bestimmt wie viel aus dem vorherigen *hidden state* in den Neuen eingeht

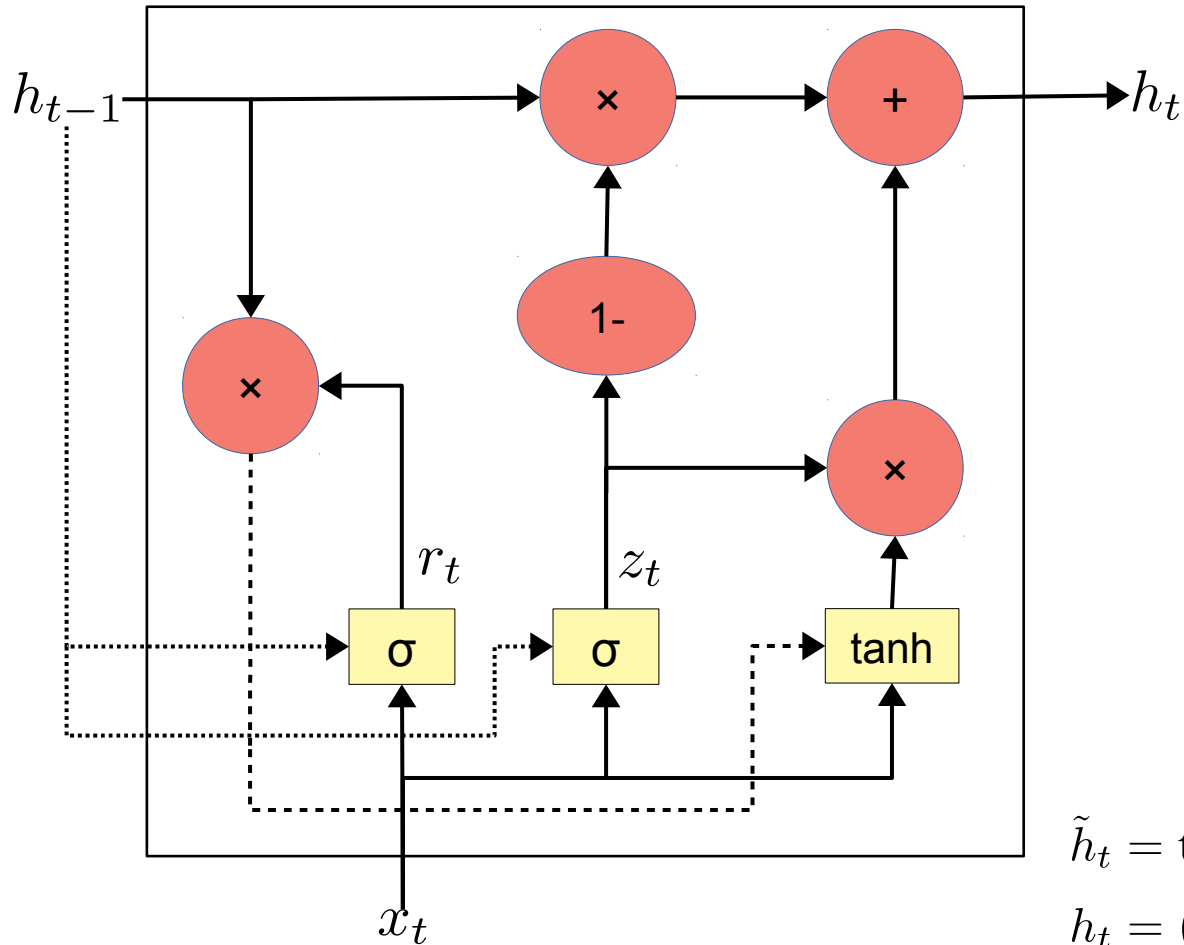
$$r_t = \sigma(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_r)$$

Update Gate:

Bestimmt zu welchen Anteilen neuer Input und alter *hidden state* in den neuen *hidden state* eingehen

$$z_t = \sigma(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_z)$$

Gated Recurrent Unit



$$\tilde{h}_t = \tanh(W \cdot [r_t \circ h_{t-1}, x_t])$$

$$h_t = (1 - z_t) \circ h_{t-1} + z_t \circ \tilde{h}_t$$

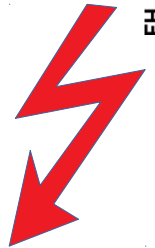
LSTM und GRU

- LSTM und GRU können auch mehrschichtig verwendet werden
 - Eingabe ist hier der *hidden state* der vorhergehenden Schicht
- Welche LSTM-Alternative sich am besten eignet ist abhängig von der Problemstellung
- Einträge des Zellkontexts C_t können Sachverhalte direkt abbilden und Speichern
 - Bsp.: Vorzeichenwechsel eines Eintrags an öffnendem Anführungszeichen, Wechsel zurück erst am Ende der wörtlichen Rede

One-Hot-Kodierung

- Kategorien, Wörter und Zeichen müssen zur Eingabe in NN numerisch kodiert werden
- „Durchnummerierung“ ist oft nicht geeignet: Wörter erhalten so eine Ordnung bzw. Gewichtung
- Erzeugung eines Vektors, welcher 1 an der Stelle ist, die das Wort / Kategorie beschreibt, 0 sonst
- Erfordert begrenztes, bekanntes Alphabet oder Wörterbuch

Rot	Grün	Blau
1	2	3

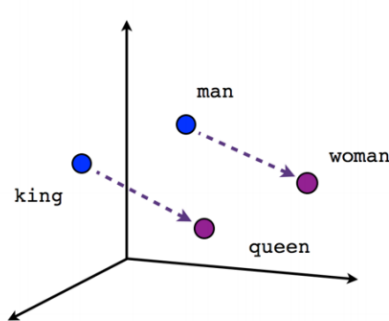


$\Rightarrow Rot < Grün < Blau?$

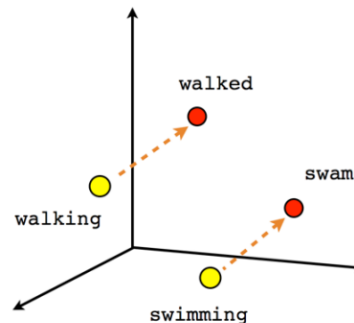
Rot	Grün	Blau
1	0	0
0	1	0
0	0	1

Word2Vec

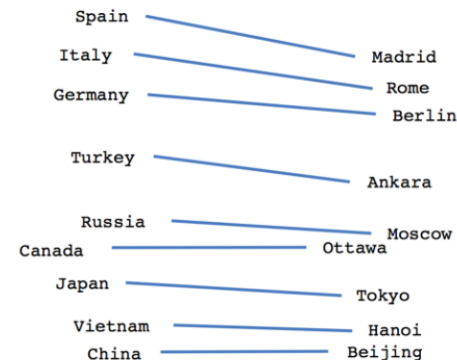
- One-Hot-Kodierung ist ineffizient auf großem Wörterbuch (großer, dünnbesetzter Vektor)
- Alternative: Einbettungen wie *Word2Vec*
 - Einbettung wird erlernt, Vektor beschreibt Position im Raum
 - Beschreibt semantische Bedeutung: Distanzen und Position der Wörter beschreiben Beziehungen und semantische Bedeutungen



Male-Female



Verb tense



Country-Capital

Bildquelle: <https://www.tensorflow.org/images/linear-relationships.png>, CC BY 4

Tensorflow Tutorial „Vector Representations of Words“: <https://www.tensorflow.org/tutorials/representation/word2vec>

Übersicht

- Grundlagen
- Rekurrente Neuronen
- Strukturen von RNNs
- Trainieren von RNNs
- LSTMs / GRUs
- Beispiele für die Verwendung von RNNs

Beispiele für die Verwendung von RNNs

- MNIST Classifier mit (verschiedenen) RNNs
- Zeitreihenvorhersage mit RNNs
- Erstellen „kreativer“ Zeitreihen mit RNNs

Die Beispiele zeigen wir auf dem Jupyter Hub
(Ihr findet sie auch im Ilias)

**Vielen Dank für die
Aufmerksamkeit!**

Fragen?