Algorithmik zur Optimierung in neuronalen Netzwerken

Gradient Descent und Backpropagation

Tim Hilt

19. Mai 2020

Hochschule Esslingen — University of Applied Sciences

Gliederung

Supervised Learning

Machine Learning Workflow

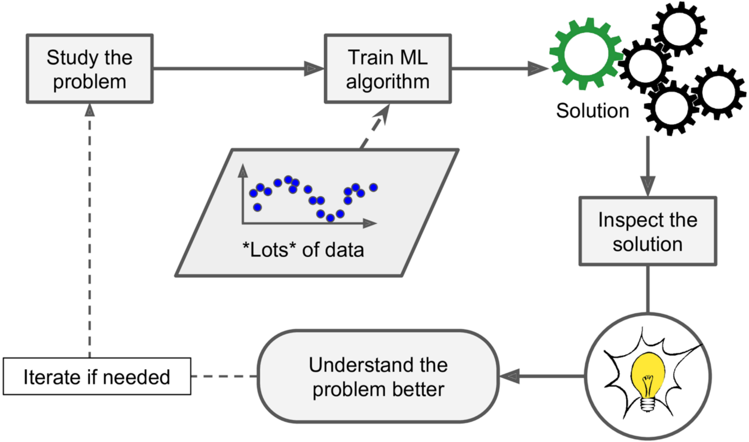


Abbildung 1: Machine Learning Workflow [1]

Supervised Learning

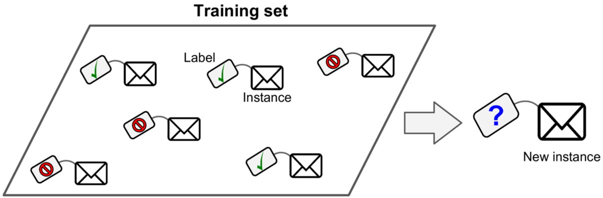


Abbildung 2: Struktur der Daten bei Supervised Learning [1]

Supervised Learning

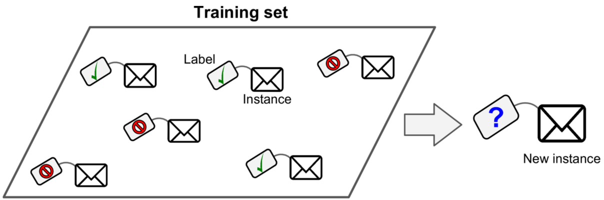
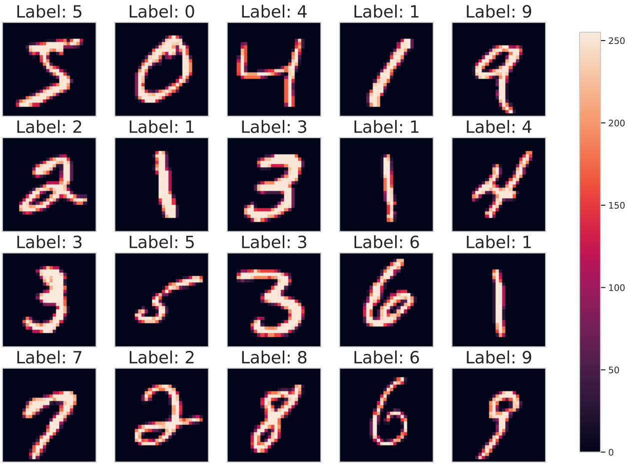


Abbildung 2: Struktur der Daten bei Supervised Learning [1]

Definition Supervised Learning

Bei Supervised Learning ist jeweils ein Datensatz gegeben, der *gelabelte* Beispiele enthält. Dabei wird das i-te Beispiel jeweils mit einem Vektor $\mathbf{x}_i$ und das Label mit y_i benannt. Die Aufgabe des lernenden Algorithmus ist es, aufgrund der Beispielmatrix $\mathbf{X}$ auf die Beispiellabel $\mathbf{y}$ zu schließen. Hierzu wird ein sog. *Modell* trainiert, welches angewendet auf bisher unbekannte Daten $\mathbf{x}_{\text{unbekannt}}$ passende Werte $y_{\text{unbekannt}}$ vorhersagen kann. [2]

Beispiel: Datensatz für Supervised Learning



- Insgesamt 70000 Bilder
- Bildgröße: 28 × 28 Pixel
- Abgebildet: Handgeschriebene Ziffern von 0 bis 9
- Quelle: Yann LeCun et al [3]

Beispiel: Datensatz für Supervised Learning

- Insgesamt 70000 Bilder
- Bildgröße: 28 × 28 Pixel
- Abgebildet: Kleidungsstücke
- Quelle: Zalando Research [4]

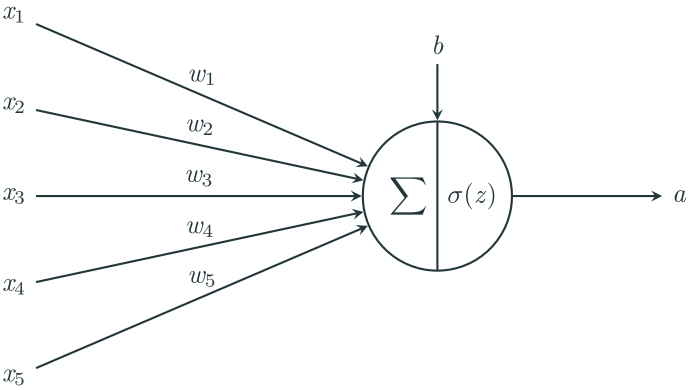
Label	Description
0	T-shirt/top
1	Trouser
2	Pullover
3	Dress
4	Coat
5	Sandal
6	Shirt
7	Sneaker
8	Bag
9	Ankle boot

Künstliche Neuronale Netze

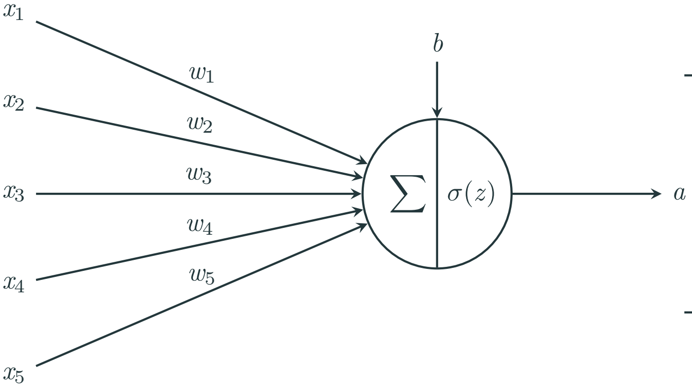
Künstliche Neuronale Netze

Künstliches Neuron

Künstliches Neuron

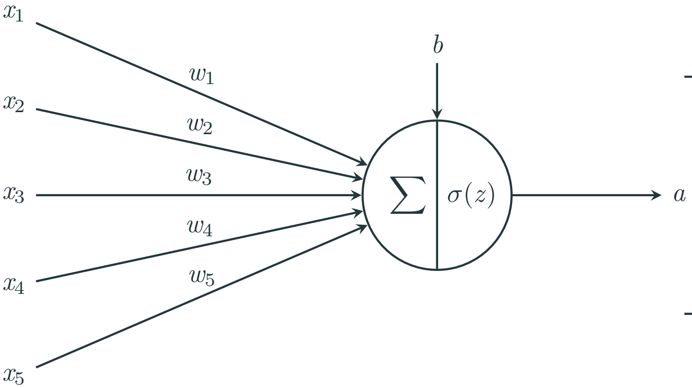


Künstliches Neuron



$\mathbf{x}$	Inputvektor
$\mathbf{w}$	Gewichtsvektor
b	Bias
z	Zwischensumme ($\sum$)
$\sigma(x)$	Aktivierungsfunktion
a	Aktivierung/ Output

Künstliches Neuron



$\mathbf{x}$	Inputvektor
$\mathbf{w}$	Gewichtsvektor
b	Bias
z	Zwischensumme ($\sum$)
$\sigma(x)$	Aktivierungsfunktion
a	Aktivierung/ Output

$$z = \sum_i x_i w_i + b = \mathbf{xw} + b$$

$\Rightarrow$ z wird für spätere Parameteroptimierung benötigt

Aktivierungsfunktion $\sigma(x)$

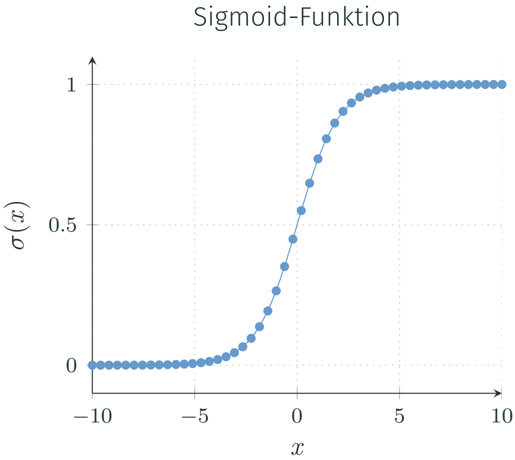
$\Rightarrow$ Es gibt eine Vielzahl verschiedener Aktivierungsfunktionen für unterschiedliche Problemstellungen, für uns soll jedoch lediglich die **Sigmoid-Funktion** relevant sein:

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

Aktivierungsfunktion $\sigma(x)$

$\Rightarrow$ Es gibt eine Vielzahl verschiedener Aktivierungsfunktionen für unterschiedliche Problemstellungen, für uns soll jedoch lediglich die **Sigmoid-Funktion** relevant sein:

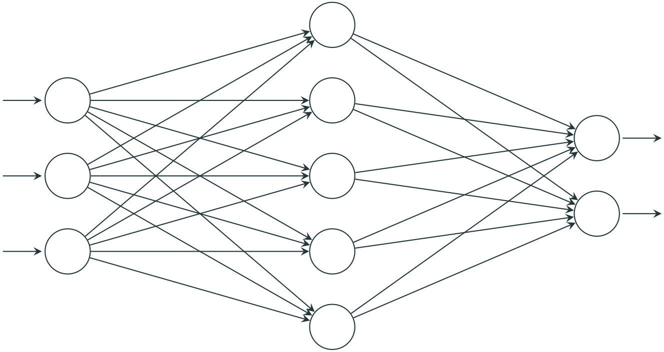
$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$



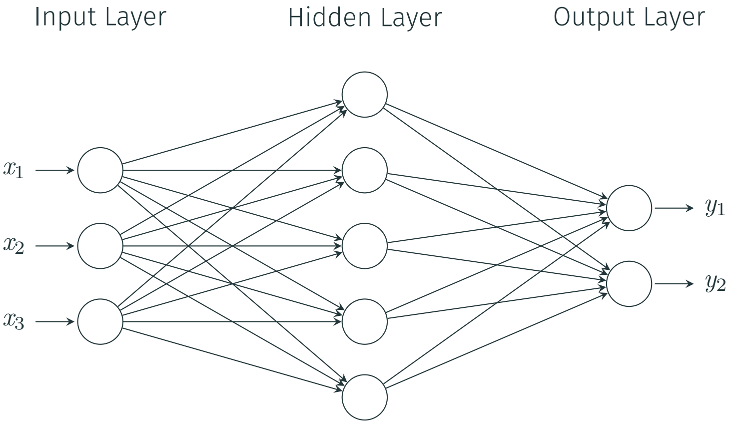
Künstliche Neuronale Netze

Architektur eines Neuronalen Netzes

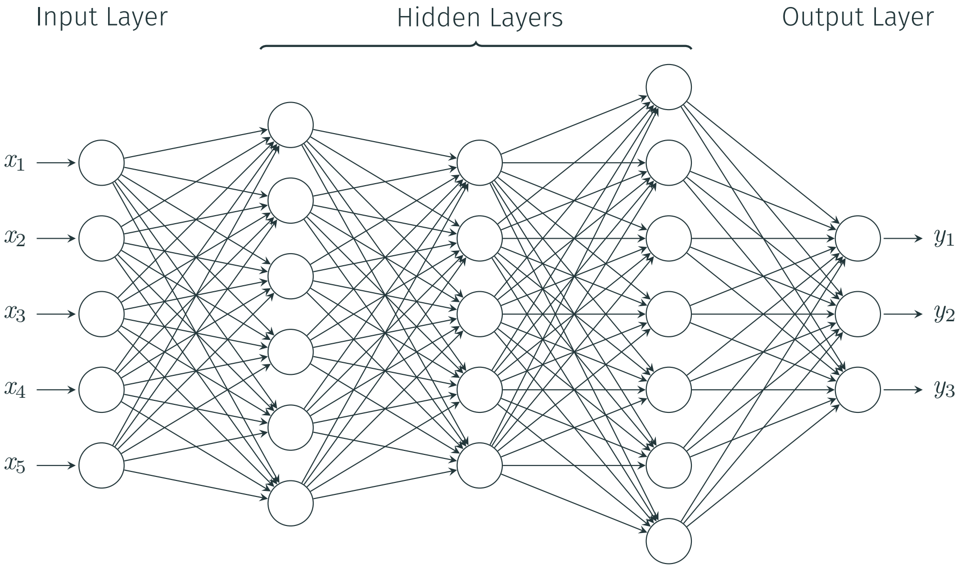
Architektur eines Neuronalen Netzwerks



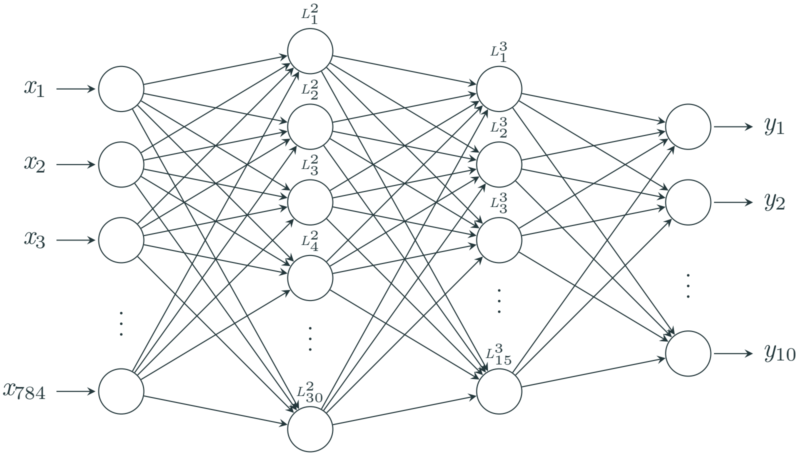
Architektur eines Neuronalen Netzwerks



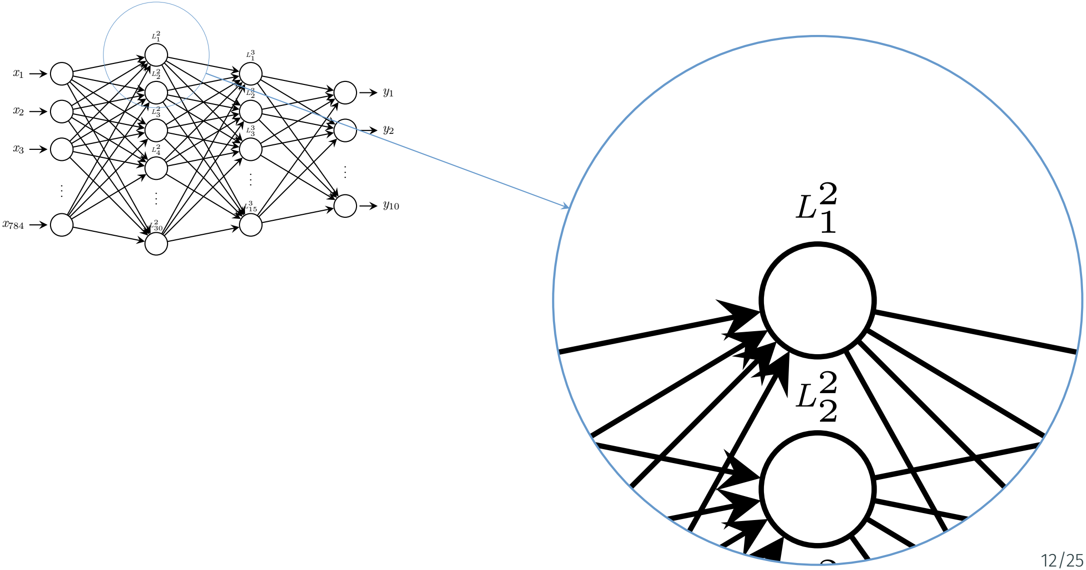
Deep Neural Network



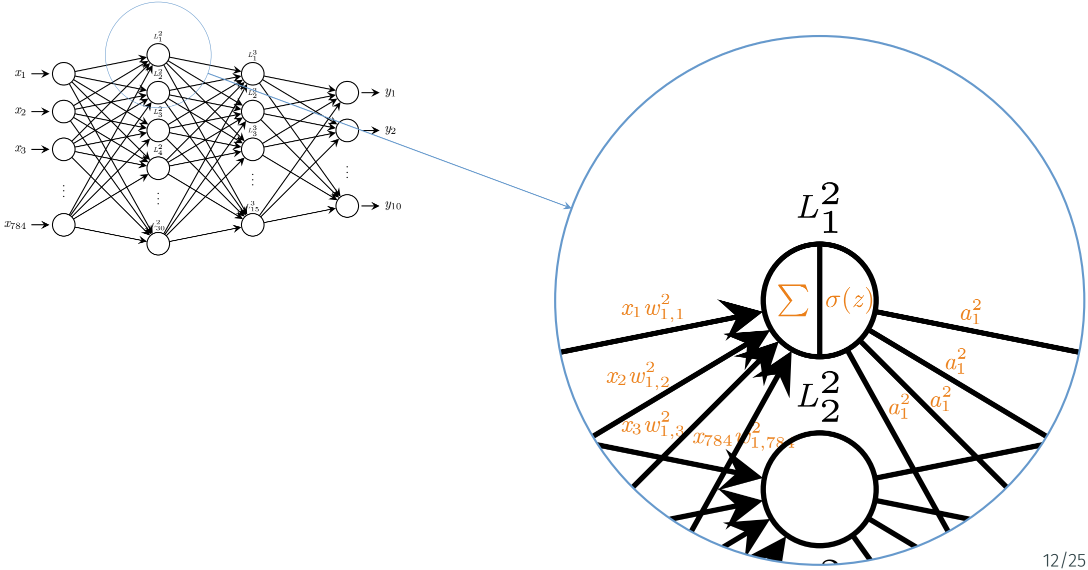
Target-Architektur zur Klassifikation von MNIST



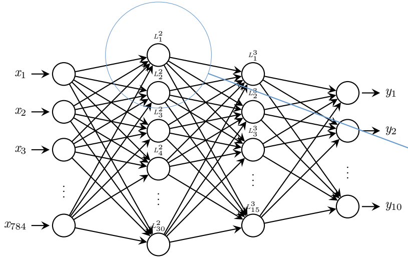
Vektorisierung der Gewichte w und der Biases b

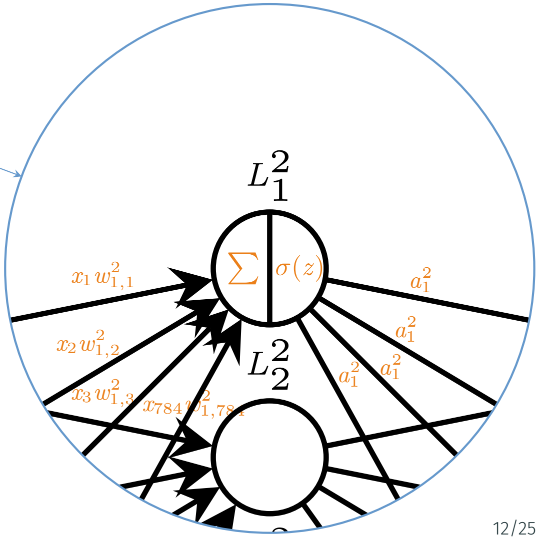


Vektorisierung der Gewichte w und der Biases b



Vektorisierung der Gewichte w und der Biases b





$$\mathbf{W^2} = \begin{bmatrix} w_{1,1}^2 & w_{2,1}^2 & \cdots & w_{30,1}^2 \\ w_{1,2}^2 & w_{2,2}^2 & \cdots & w_{30,2}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1,784}^2 & w_{2,784}^2 & \cdots & w_{30,784}^2 \end{bmatrix} ; \; \mathbf{b^2} = \begin{bmatrix} b_1^2 \\ b_2^2 \\ \vdots \\ b_{30}^2 \end{bmatrix}$$

Output eines neuronalen Netzwerks berechnen

Gegeben:

- Inputvektor $\mathbf{x}$
- Gewichtsmatrizen $\mathbf{W}^{2\ldots4}$
- Biasvektoren $\mathbf{b}^{2\ldots4}$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{a^1} &= \mathbf{x} \\
\mathbf{a^2} &= \sigma(\mathbf{W^2 a^1} + \mathbf{b^2}) \\
\mathbf{a^3} &= \sigma(\mathbf{W^3 a^2} + \mathbf{b^3}) \\
\mathbf{a^4} &= \sigma(\mathbf{W^4 a^3} + \mathbf{b^4}) = \widehat{\mathbf{y}}
\end{aligned}
$$

Training

Loss-Funktion

- Dient zur Berechnung des Fehlers während dem Training
- Trainingsfehler soll minimiert werden
- $\Rightarrow$ wir suchen den Punkt, an dem die Ableitung der Loss-Funktion 0 wird, der Fehler also nicht mehr abnimmt
- Es gibt eine Vielzahl an Loss-Funktionen, wir betrachten hier die „**Mean Squared Error (MSE)**“:

$$C(w,b) = \frac{1}{2m}\sum_{x=1}^{m}(y(x) - \hat{y}(x))^2$$

Loss-Funktion

- Dient zur Berechnung des Fehlers während dem Training
- Trainingsfehler soll minimiert werden
- $\Rightarrow$ wir suchen den Punkt, an dem die Ableitung der Loss-Funktion 0 wird, der Fehler also nicht mehr abnimmt
- Es gibt eine Vielzahl an Loss-Funktionen, wir betrachten hier die „**Mean Squared Error (MSE)**“:

$$C(w, b) = \frac{1}{2m} \sum_{x=1}^{m} (y(x) - \hat{y}(x))^2$$

$C(w, b)$	Cost in Abhängigkeit von w und b
m	Anzahl der Trainingsinstanzen
$y(x)$	Gewünschter Output wenn x Input ist
$\hat{y}(x)$	Tatsächlicher Output des Netzwerkes

Training

Gradient Descent

Gradient Descent

- Methode um die Weights w und Biases b zu optimieren
- Vorgehen:

Gradient Descent

- Methode um die Weights w und Biases b zu optimieren
- Vorgehen:
    1. Finde die Änderungsrate des Fehlers in Abhängigkeit von den Weights und Biases ($\partial C / \partial w ; \partial C / \partial b$)

Gradient Descent

- Methode um die Weights w und Biases b zu optimieren
- Vorgehen:
    1. Finde die Änderungsrate des Fehlers in Abhängigkeit von den Weights und Biases ($\partial C/\partial w; \partial C/\partial b$)
    2. Multipliziere die Änderungsrate mit der Lernrate η

Gradient Descent

- Methode um die Weights w und Biases b zu optimieren
- Vorgehen:
  1. Finde die Änderungsrate des Fehlers in Abhängigkeit von den Weights und Biases ($\partial C/\partial w; \partial C/\partial b$)
  2. Multipliziere die Änderungsrate mit der Lernrate η
  3. Ziehe das Produkt aus Änderungsrate und Lernrate von den aktuellen Parametern ab

Gradient Descent

- Methode um die Weights w und Biases b zu optimieren
- Vorgehen:
    1. Finde die Änderungsrate des Fehlers in Abhängigkeit von den Weights und Biases ($\partial C/\partial w; \partial C/\partial b$)
    2. Multipliziere die Änderungsrate mit der Lernrate η
    3. Ziehe das Produkt aus Änderungsrate und Lernrate von den aktuellen Parametern ab
    4. Aktualisiere die alten Parameter durch das Ergebnis des letzten Schrittes

$$w_{k+1} = w_k - \eta \frac{\partial C}{\partial w_k}$$

$$b_{k+1} = b_k - \eta \frac{\partial C}{\partial b_k}$$

Training

Backpropagation

Problem

Wie finde ich die Änderungsraten $\frac{\partial C}{\partial w}; \frac{\partial C}{\partial b}$, die ich für Gradient Descent benötige?

Problem

Wie finde ich die Änderungsraten $\frac{\partial C}{\partial w}$; $\frac{\partial C}{\partial b}$, die ich für Gradient Descent benötige?

Beispiel:

Gegeben:

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2$$

Gesucht:

$$\frac{\partial f}{\partial a}$$

Beispiel:

Gegeben:

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2$$

Gesucht:

$$\frac{\partial f}{\partial a}$$

Analytische Lösung

Umformung zu Summanden:

$$f = (a + b)^2 \cdot (c + d)^2$$
$$f = (a^2 + 2ab + b^2) \cdot (c + d)^2$$

Ableitung:

$$\frac{\partial f}{\partial a} = (2a + 2b) \cdot (c + d)^2$$

Backpropagation — Idee

- Problem:
  - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
  - Sind schwer zu implementieren
  - Sind ineffizient

Backpropagation — Idee

- **Problem:**
    - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
    - Sind schwer zu implementieren
    - Sind ineffizient
- **Idee:** Divide and conquer; Problem in kleinere, handhabbare Probleme zerlegen [5, 6]

Backpropagation — Idee

- **Problem:**
  - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
  - Sind schwer zu implementieren
  - Sind ineffizient
- **Idee:** Divide and conquer; Problem in kleinere, handhabbare Probleme zerlegen [5, 6]

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2$$

Backpropagation — Idee

- **Problem:**
  - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
  - Sind schwer zu implementieren
  - Sind ineffizient
- **Idee:** Divide and conquer; Problem in kleinere, handhabbare Probleme zerlegen [5, 6]

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2$$
$$g = a + b$$

Backpropagation — Idee

- **Problem:**
  - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
  - Sind schwer zu implementieren
  - Sind ineffizient
- **Idee:** Divide and conquer; Problem in kleinere, handhabbare Probleme zerlegen [5, 6]

$$
\begin{aligned}
f(a, b, c, d) &= ((a + b) \cdot (c + d))^2 \\
g &= a + b \\
h &= c + d
\end{aligned}
$$

Backpropagation — Idee

- **Problem:**
  - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
  - Sind schwer zu implementieren
  - Sind ineffizient
- **Idee:** Divide and conquer; Problem in kleinere, handhabbare Probleme zerlegen [5, 6]

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2$$

$$g = a + b$$

$$h = c + d$$

$$i = g \cdot h$$

Backpropagation — Idee

- **Problem:**
  - Analytische Verfahren kommen bei komplizierten Funktionen an ihre Grenzen
  - Sind schwer zu implementieren
  - Sind ineffizient
- **Idee:** Divide and conquer; Problem in kleinere, handhabbare Probleme zerlegen [5, 6]

$$f(a,b,c,d) = \left((a+b)\cdot(c+d)\right)^2$$

$$g = a + b$$

$$h = c + d$$

$$i = g \cdot h$$

$$f = i^2$$

Backpropagation

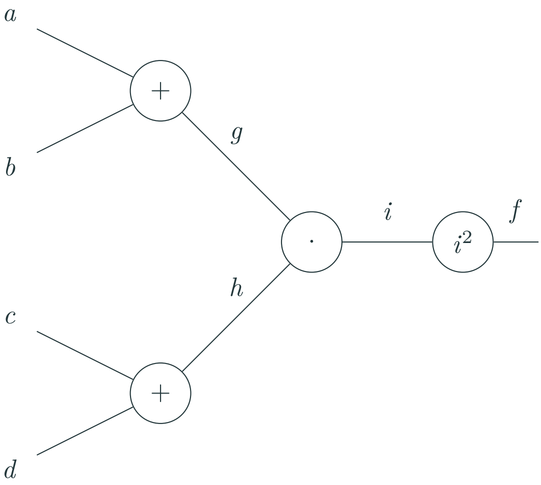
$$f(a,b,c,d) = ((a+b)\cdot(c+d))^2$$

$$g = a + b$$

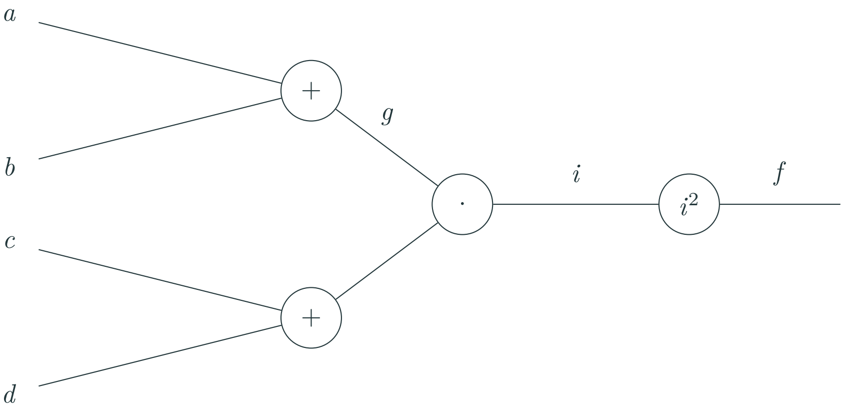
$$h = c + d$$

$$i = g \cdot h$$

$$f = i^2$$

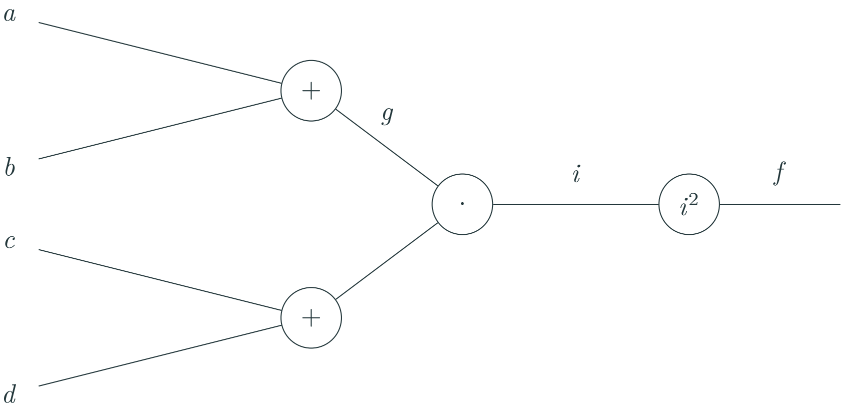


Backpropagation



Gesucht: $\frac{\partial f}{\partial a}$ [6, 7]

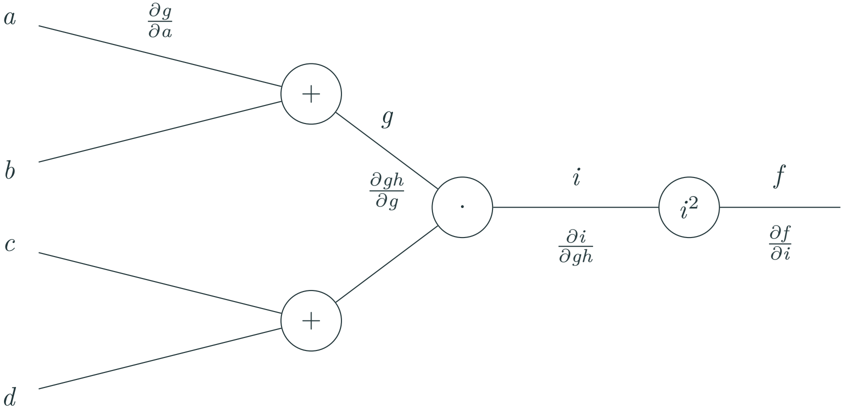
Backpropagation



Gesucht: $\frac{\partial f}{\partial a}$ [6, 7]

$$\frac{\partial f}{\partial a} = \frac{\partial f}{\partial i} \cdot \frac{\partial i}{\partial gh} \cdot \frac{\partial gh}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial a}$$

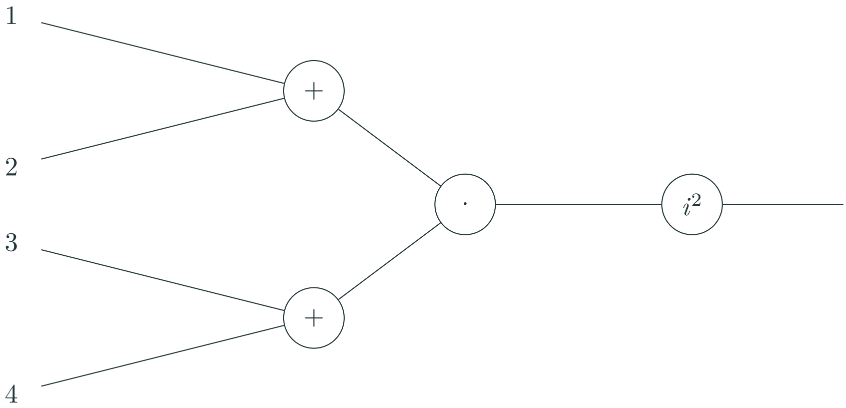
Backpropagation



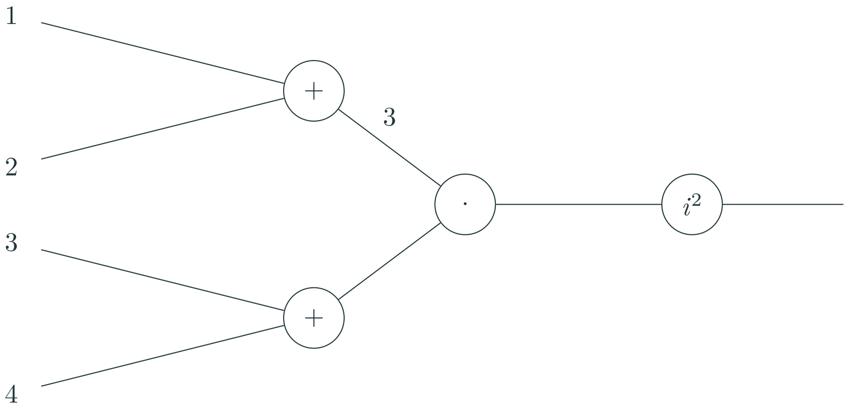
Gesucht: $\frac{\partial f}{\partial a}$ [6, 7]

$$\frac{\partial f}{\partial a} = \frac{\partial f}{\partial i} \cdot \frac{\partial i}{\partial gh} \cdot \frac{\partial gh}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial a}$$

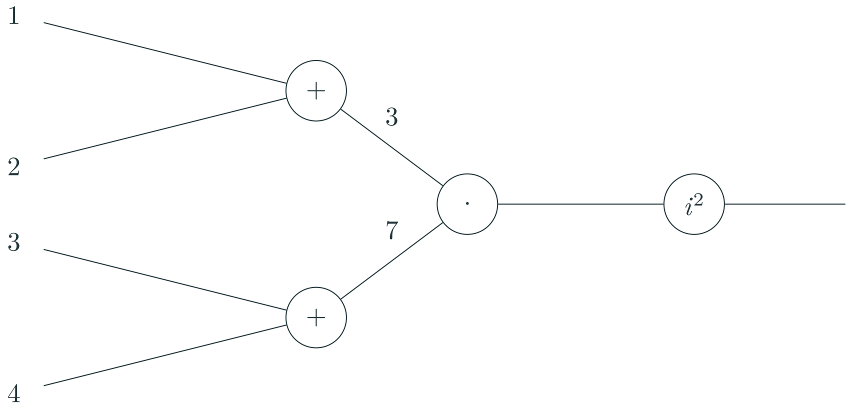
Beispiel



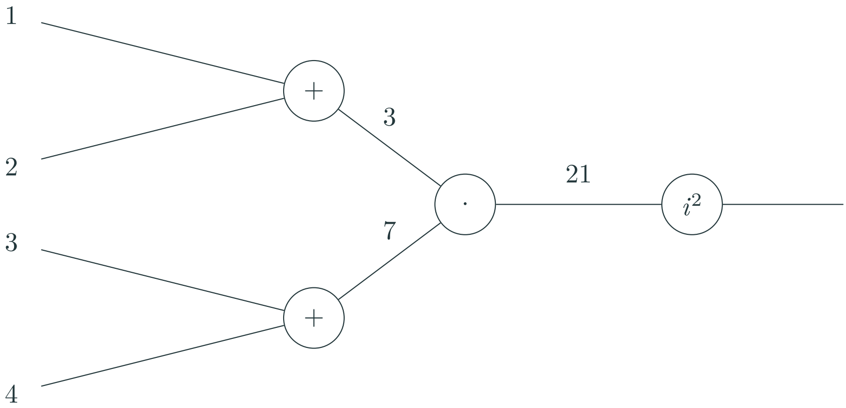
Beispiel



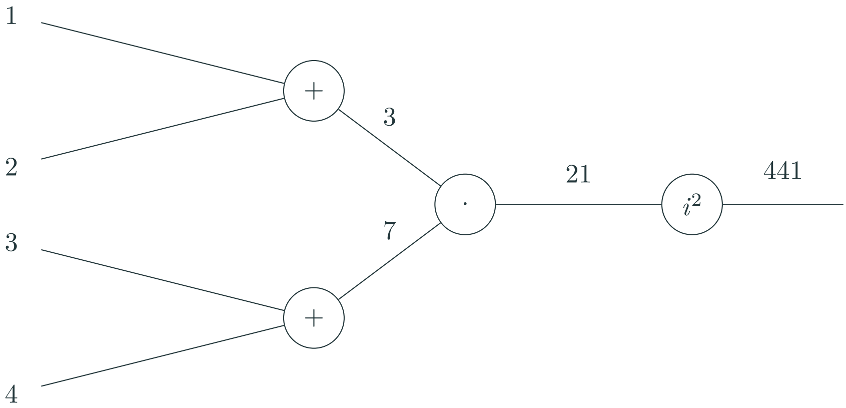
Beispiel



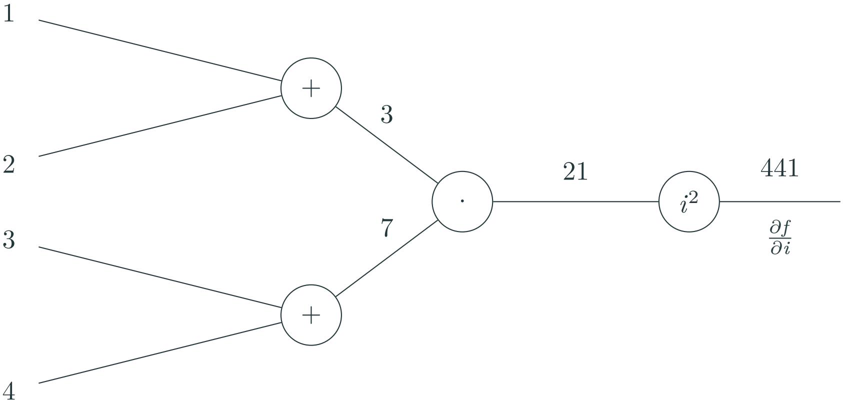
Beispiel



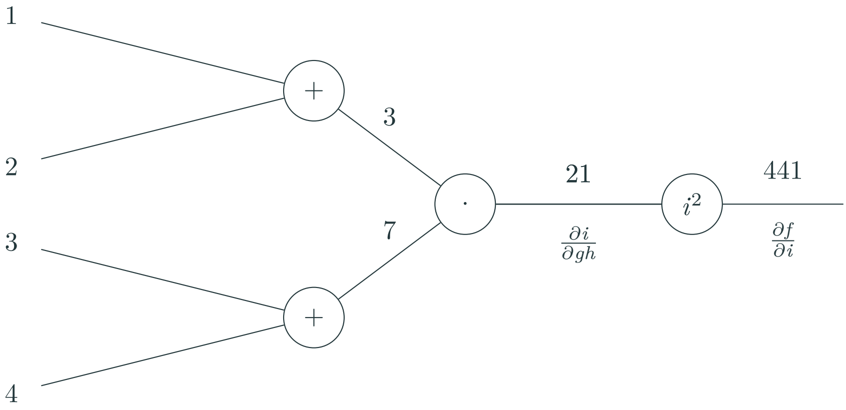
Beispiel



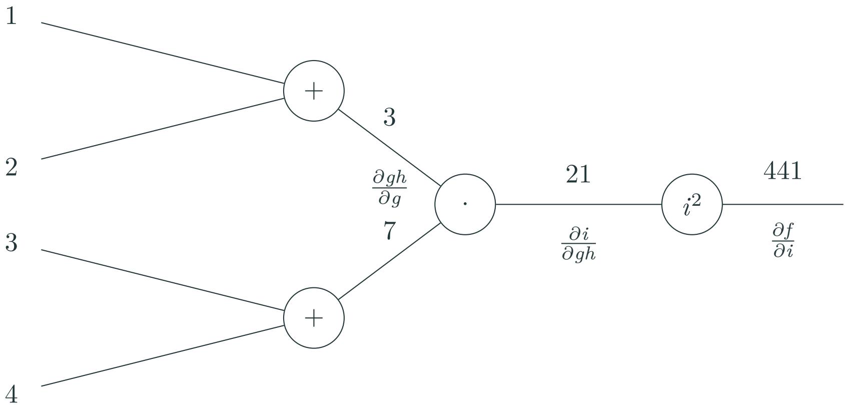
Beispiel



Beispiel

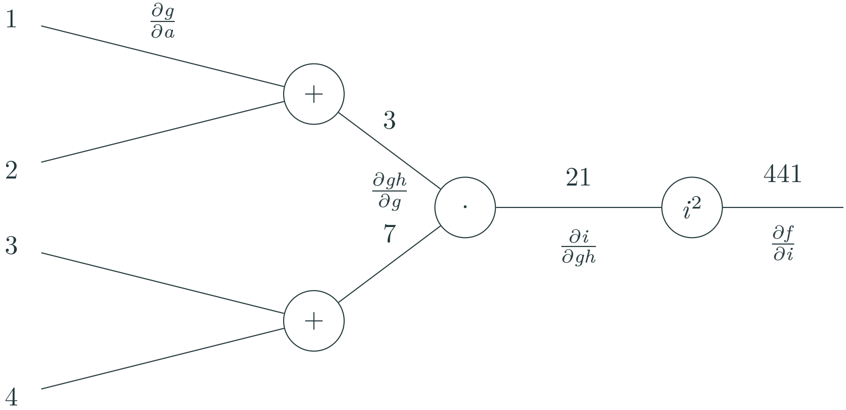

1
2
3
4
+
+
3
7
·
21
$\frac{\partial i}{\partial gh}$
i^2
441
$\frac{\partial f}{\partial i}$

Beispiel



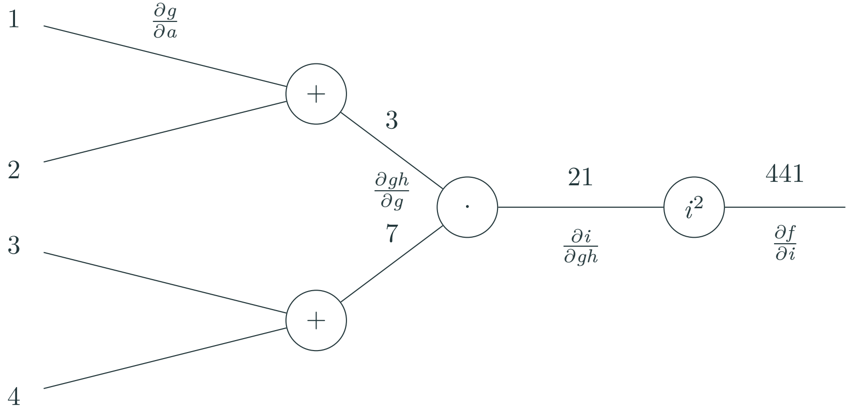
1
2
3
4
+
+
3
7
$\frac{\partial gh}{\partial g}$
$\cdot$
21
$\frac{\partial i}{\partial gh}$
i^2
441
$\frac{\partial f}{\partial i}$

Beispiel



1
$\frac{\partial g}{\partial a}$
2
3
4
+
+
3
$\frac{\partial gh}{\partial g}$
7
$\cdot$
21
$\frac{\partial i}{\partial gh}$
i^2
441
$\frac{\partial f}{\partial i}$

Beispiel



$$\frac{\partial f}{\partial i} = 2 \cdot 21 = 42; \quad \frac{\partial i}{\partial gh} = 1; \quad \frac{\partial gh}{g} = h = 7; \quad \frac{\partial g}{\partial a} = 1 \quad \Rightarrow 7 \cdot 42 = 294$$

Überprüfung mit analytischer Lösung

Gegeben:

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2, \quad a = 1, b = 2, c = 3, d = 4$$

Gesucht:

$$\frac{\partial f}{\partial a}$$

Gefunden:

$$\frac{\partial f}{\partial a} = (2a + 2b) \cdot (c + d)^2$$

Überprüfung mit analytischer Lösung

Gegeben:

$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2, \quad a = 1, b = 2, c = 3, d = 4$$

Gesucht:

$$\frac{\partial f}{\partial a}$$

Gefunden:

$$\frac{\partial f}{\partial a} = (2a + 2b) \cdot (c + d)^2$$

Einsetzen:

$$\frac{\partial f}{\partial a} = (2 \cdot 1 + 2 \cdot 2) \cdot (3 + 4)^2 = 294$$

Umsetzung in Python (mit Keras)

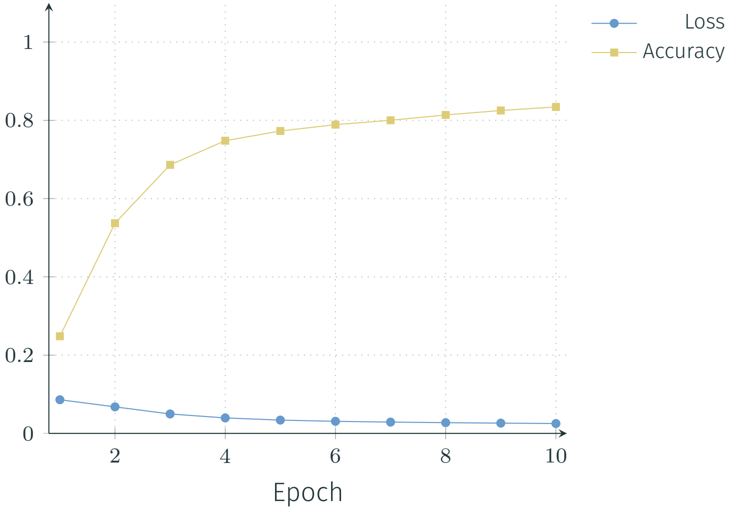
Zuvor beschriebene Architektur

```python
from tensorflow import keras
...
model = keras.models.Sequential([
  keras.layers.Flatten(input_shape=(28, 28)),
  keras.layers.Dense(30, activation='sigmoid'),
  keras.layers.Dense(15, activation='sigmoid'),
  keras.layers.Dense(10, activation='sigmoid'),
])

model.compile(loss='mse',
              optimizer=keras.optimizers.SGD(learning_rate=.8),
              metrics=['accuracy'])

history = model.fit(X_train, y_train_cat, epochs=10,
                    validation_data=(X_valid, y_valid_cat))
```

Verlauf während des Trainings



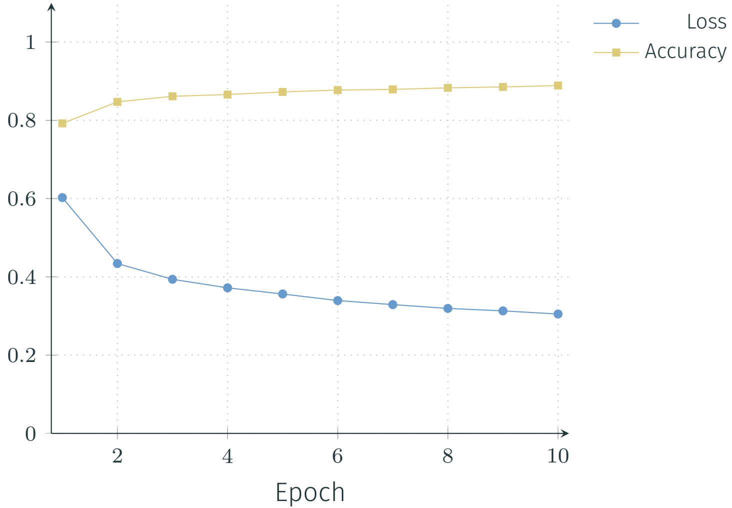
Optimierte Architektur

- Vorteil: Schnellere Konvergenz
- Verwendung von optimierter Cost-, Activation- und Gradient-Descent-Funktion

```
model = keras.models.Sequential([
  keras.layers.Flatten(input_shape=(28, 28)),
  keras.layers.Dense(30, activation='relu'),
  keras.layers.Dense(15, activation='relu'),
  keras.layers.Dense(10, activation='softmax'),
])

model.compile(loss='sparse_categorical_crossentropy',
              optimizer='Adam',
              metrics=['accuracy'])
```

Verlauf während des Trainings



Fragen?

Literaturverzeichnis

GÉRON, Aurélien. *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems*. O'Reilly Media, 2019.

BURKOV, Andriy. *The hundred-page machine learning book*. Andriy Burkov Quebec City, Can., 2019.

LECUN, Yann; BOTTOU, Léon; BENGIO, Yoshua; HAFFNER, Patrick. Gradient-based learning applied to document recognition. *Proceedings of the IEEE*. 1998, Jg. 86, Nr. 11, S. 2278–2324.

XIAO, Han; RASUL, Kashif; VOLLGRAF, Roland. Fashion-mnist: a novel image dataset for benchmarking machine learning algorithms. *arXiv preprint arXiv:1708.07747*. 2017.

RUMELHART, David E; HINTON, Geoffrey E; WILLIAMS, Ronald J. Learning representations by back-propagating errors. *nature*. 1986, Jg. 323, Nr. 6088, S. 533–536.

LI, Fei-Fei. *CS231n: Convolutional Neural Networks for Visual Recognition* [online] [besucht am 2020-05-04]. Abgerufen unter: `https://cs231n.github.io/optimization-2/`.

OLAH, Christopher. *Calculus on computational graphs: Backpropagation* [online] [besucht am 2020-05-26]. Abgerufen unter: `https://colah.github.io/posts/2015-08-Backprop/`.