

# Algorithmik zur Optimierung in neuronalen Netzwerken

## Gradient Descent und Backpropagation

---

Tim Hilt

19. Mai 2020

Hochschule Esslingen — University of Applied Sciences

- Supervised Learning

- Künstliche Neuronale Netze

  - Künstliches Neuron

  - Architektur eines Neuronalen Netzes

- Training

  - Gradient Descent

  - Backpropagation

- Umsetzung in Python (mit Keras)

# Supervised Learning

---

# Machine Learning Workflow

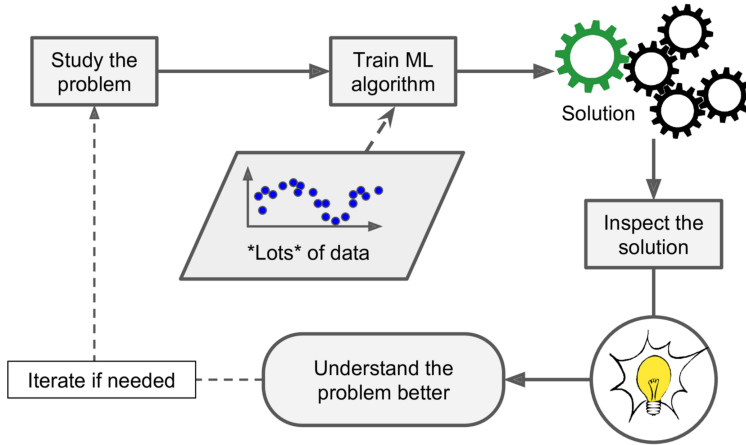


Abbildung 1: Machine Learning Workflow [1]

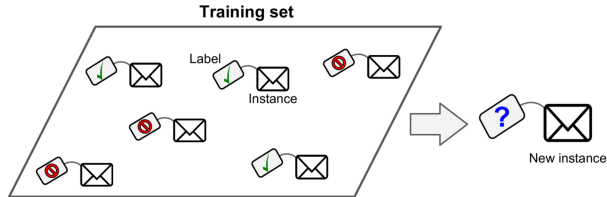


Abbildung 2: Struktur der Daten bei Supervised Learning [1]

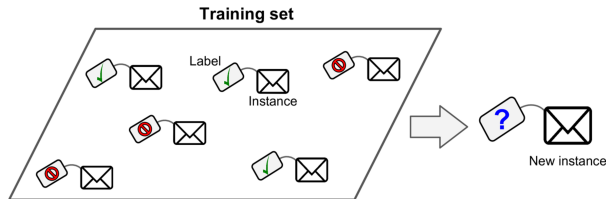
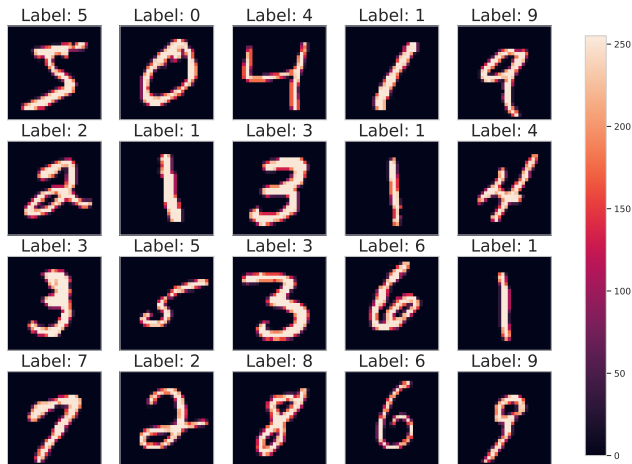


Abbildung 2: Struktur der Daten bei Supervised Learning [1]

## 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:  $28 \times 28$  Pixel
- Abgebildet: Handgeschriebene Ziffern von 0 bis 9
- Quelle: Yann LeCun et al [3]

# Beispiel: Datensatz für Supervised Learning



- Insgesamt 70000 Bilder
- Bildgröße:  $28 \times 28$  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

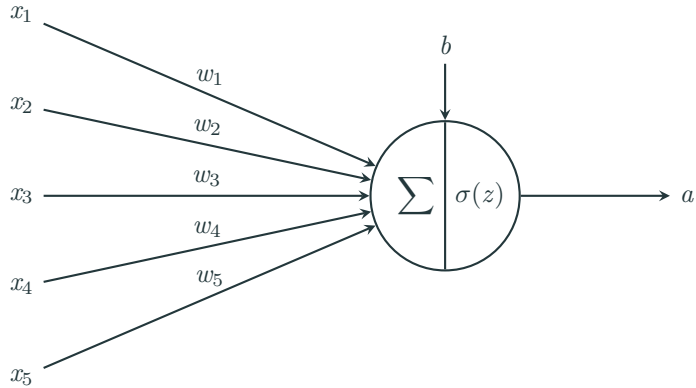
---

# Künstliche Neuronale Netze

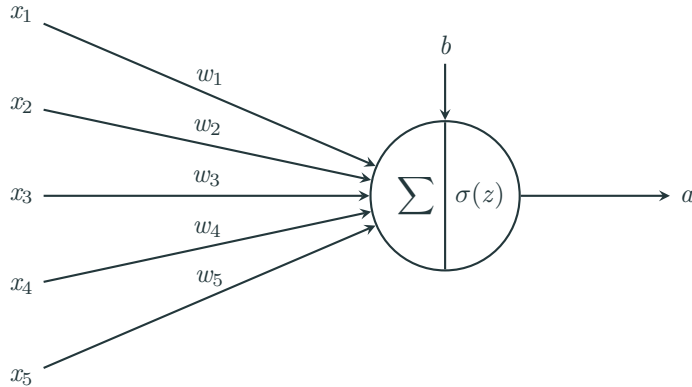
---

## Künstliches Neuron

# Künstliches Neuron



# Künstliches Neuron

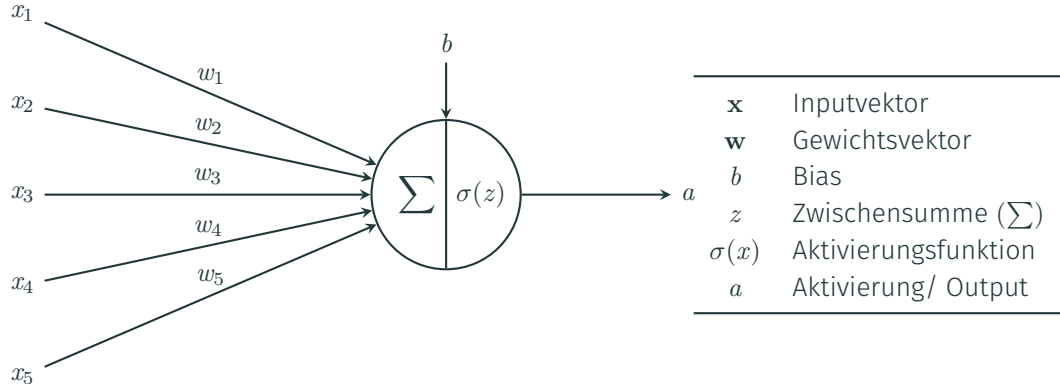


---

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

---

# Künstliches Neuron



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

$\Rightarrow z$  wird für spätere Parameteroptimierung benötigt

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

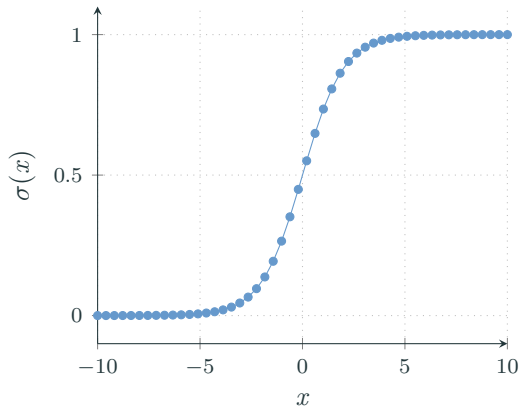
$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

# Aktivierungsfunktion $\sigma(x)$

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

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

Sigmoid-Funktion



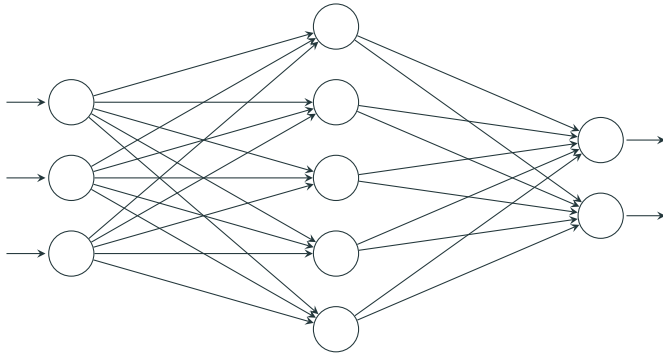
# Künstliche Neuronale Netze

---

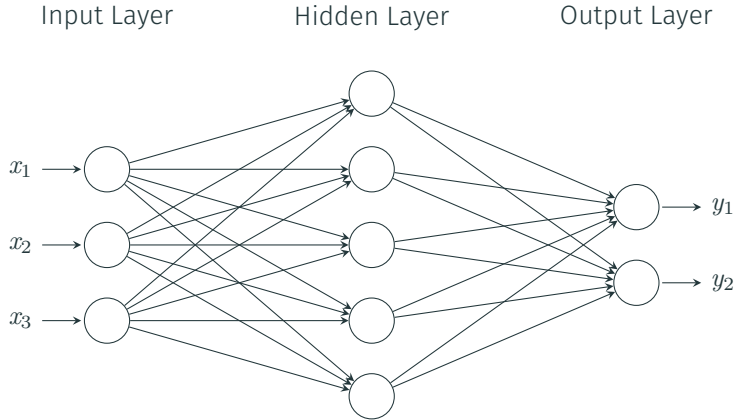
## Architektur eines Neuronalen Netzes



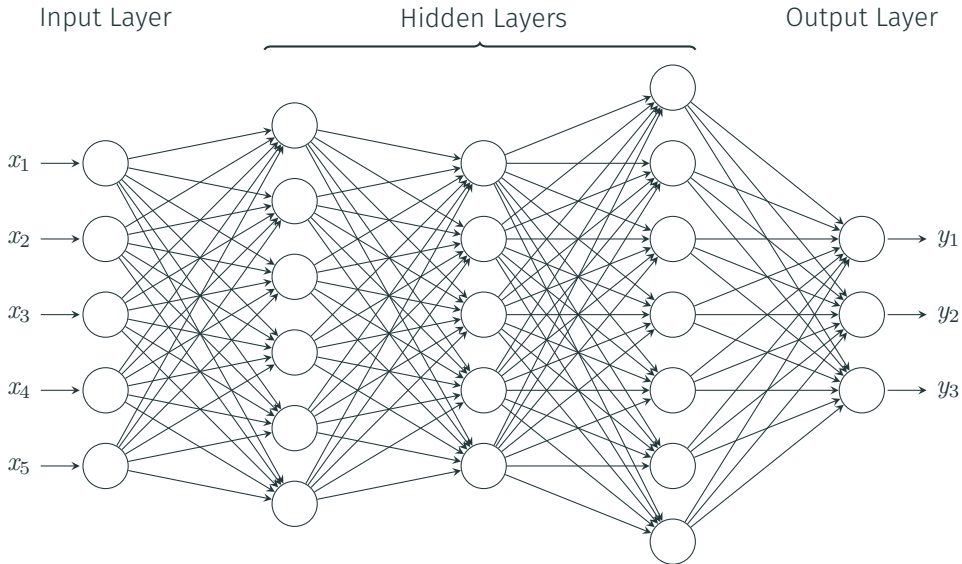
# Architektur eines Neuronalen Netzwerks



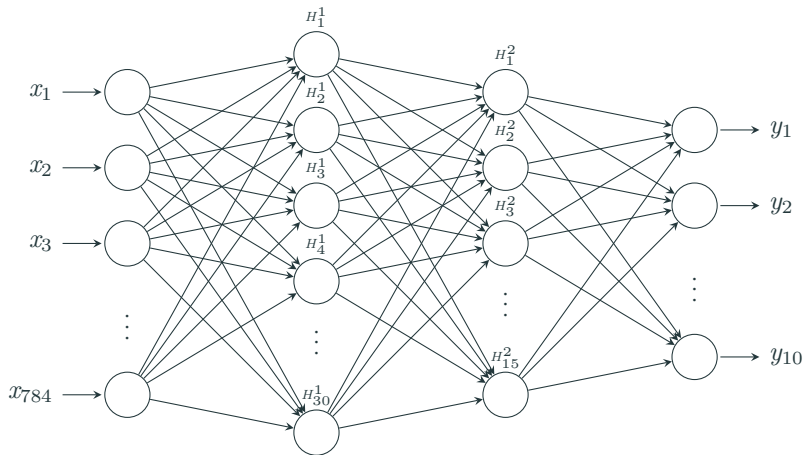
# Architektur eines Neuronalen Netzwerks



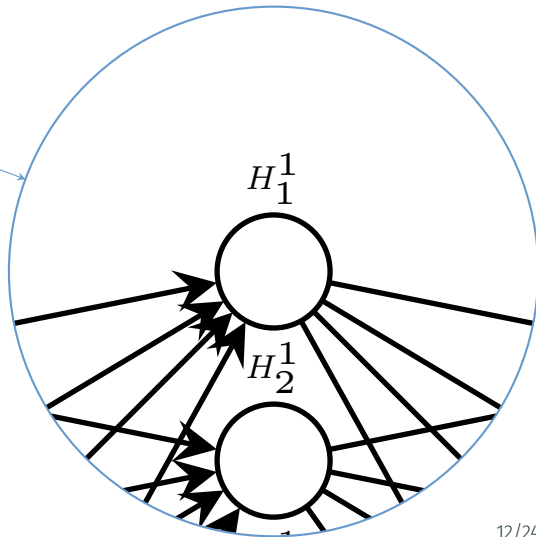
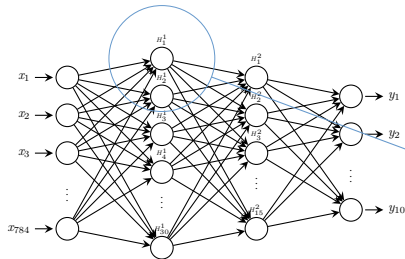
# Deep Neural Network



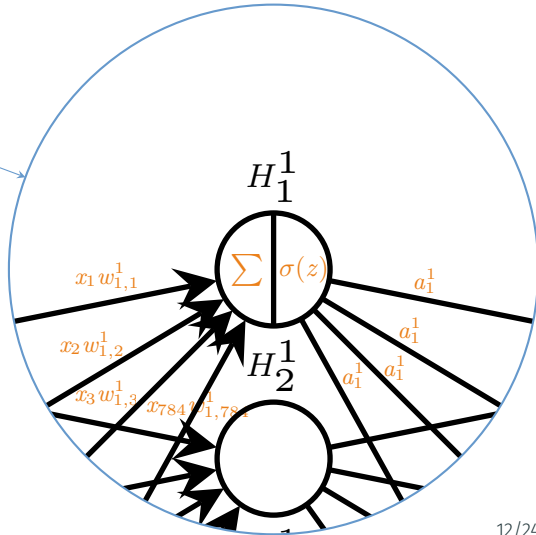
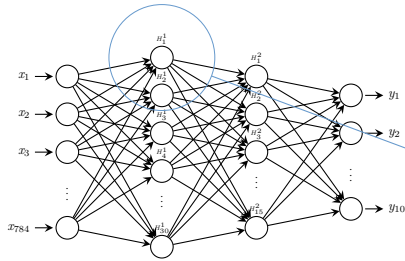
# Target-Architektur zur Klassifikation von MNIST



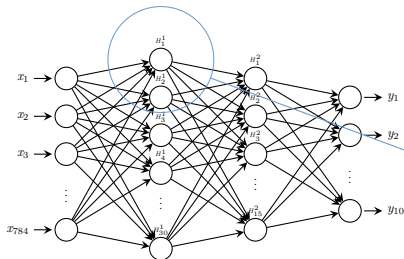
# Vektorisierung der Gewichte $w$ und der Biases $b$



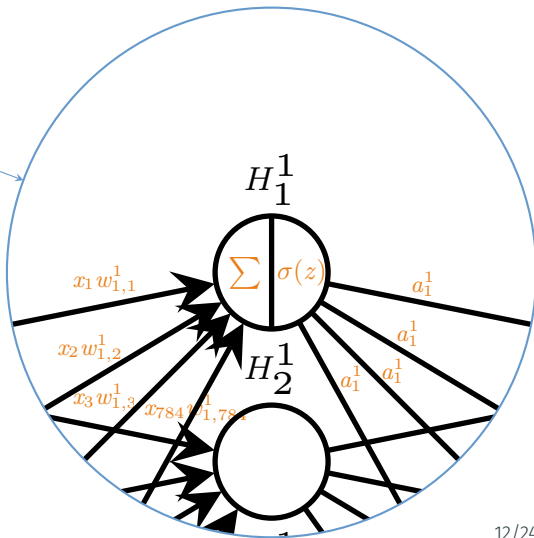
# Vektorisierung der Gewichte $w$ und der Biases $b$



# 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  $\mathbf{W}^{2...4}$
- Biasvektoren  $\mathbf{b}^{2...4}$

$$\mathbf{a}^1 = \mathbf{x}$$

$$\mathbf{a}^2 = \sigma(\mathbf{W}^2 \mathbf{a}^1 + \mathbf{b}^2)$$

$$\mathbf{a}^3 = \sigma(\mathbf{W}^3 \mathbf{a}^2 + \mathbf{b}^3)$$

$$\mathbf{a}^4 = \sigma(\mathbf{W}^4 \mathbf{a}^3 + \mathbf{b}^4) = \hat{\mathbf{y}}$$



# Training

---

- 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  $\eta$

# 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  $\eta$
  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  $\eta$
  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:

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

# Backpropagation — Einleitung

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:

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

- **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

- **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

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



- **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

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

$$g = a + b$$

- **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

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

$$g = a + b$$

$$h = c + d$$

- **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

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

$$g = a + b$$

$$h = c + d$$

$$i = g \cdot h$$

# 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

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

$$g = a + b$$

$$h = c + d$$

$$i = g \cdot h$$

$$f = i^2$$

# Backpropagation

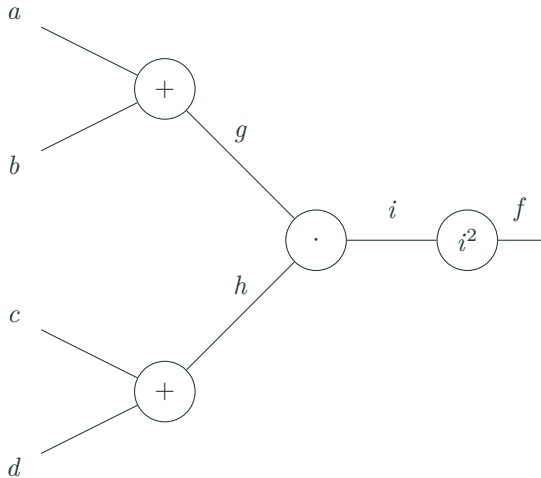
$$f(a, b, c, d) = ((a + b) \cdot (c + d))^2$$

$$g = a + b$$

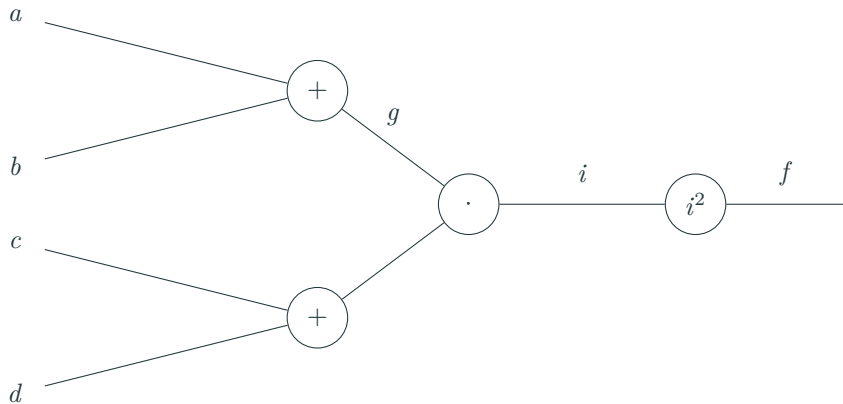
$$h = c + d$$

$$i = g \cdot h$$

$$f = i^2$$

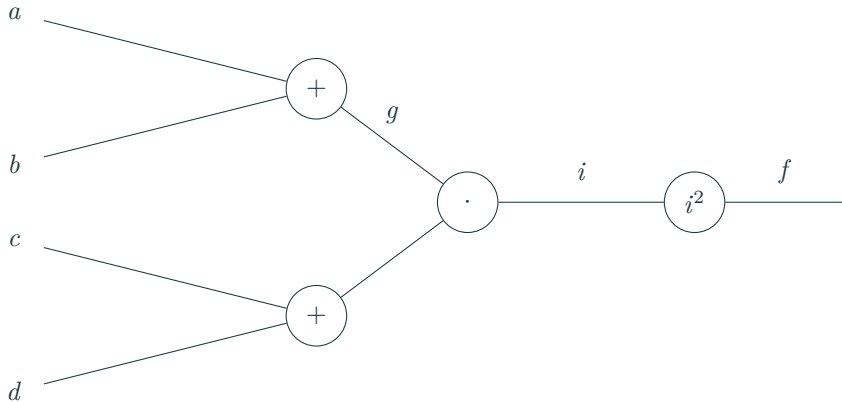


# Backpropagation



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

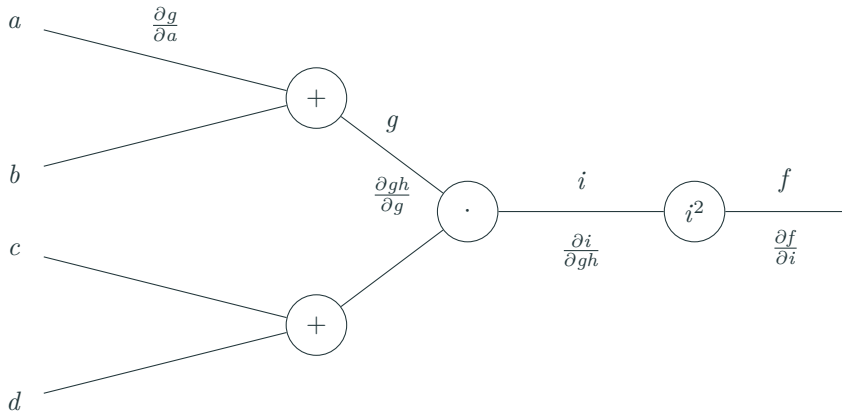
# Backpropagation



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

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

# Backpropagation

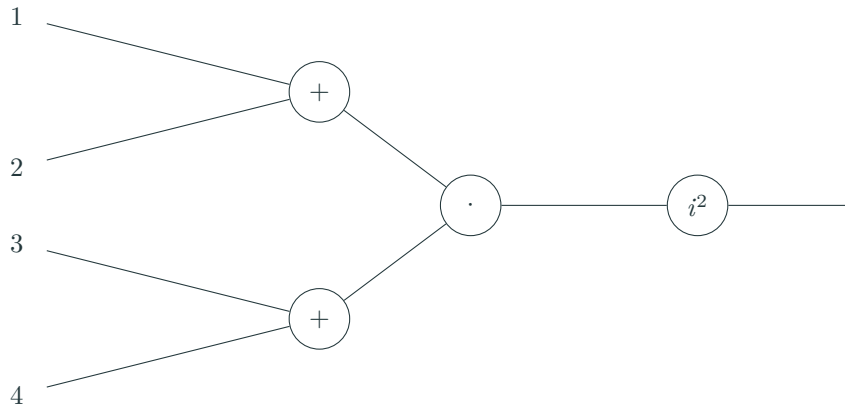


Gesucht:  $\frac{\partial f}{\partial a}$

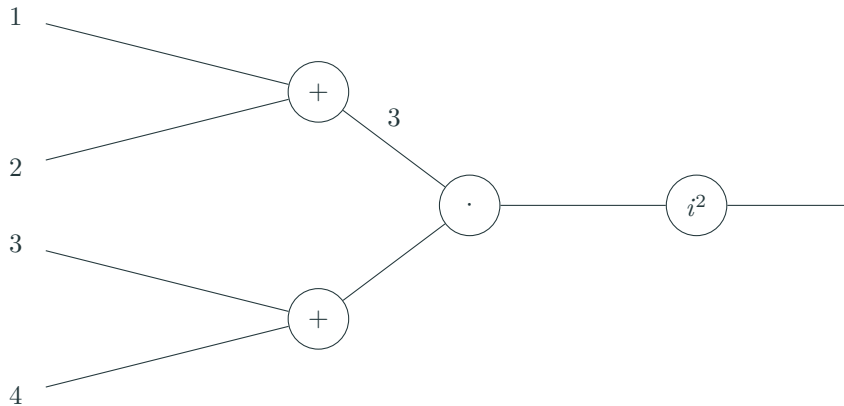
$$\frac{\partial f}{\partial a} = \frac{\partial f}{\partial i} \cdot \frac{\partial i}{\partial gh} \cdot \frac{\partial gh}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial a}$$



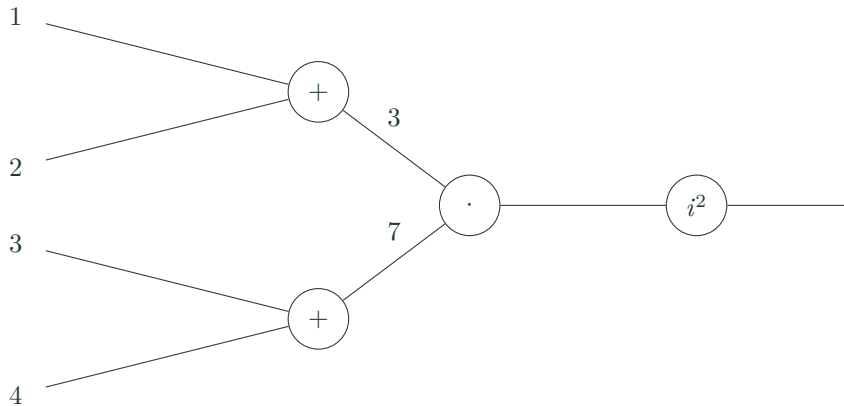
# Beispiel



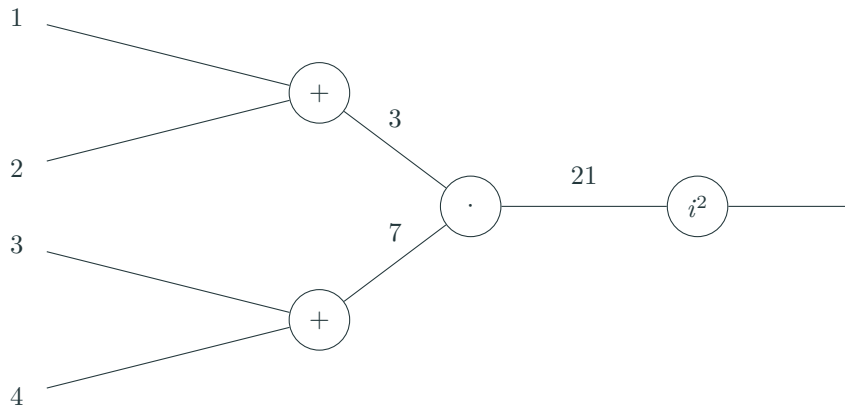
# Beispiel



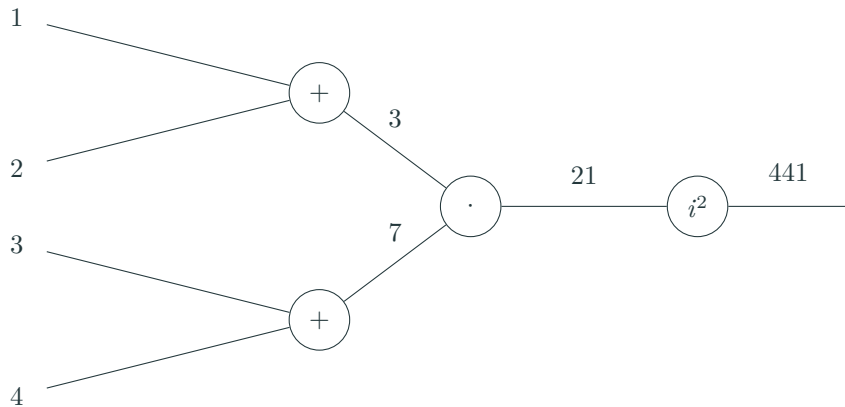
# Beispiel



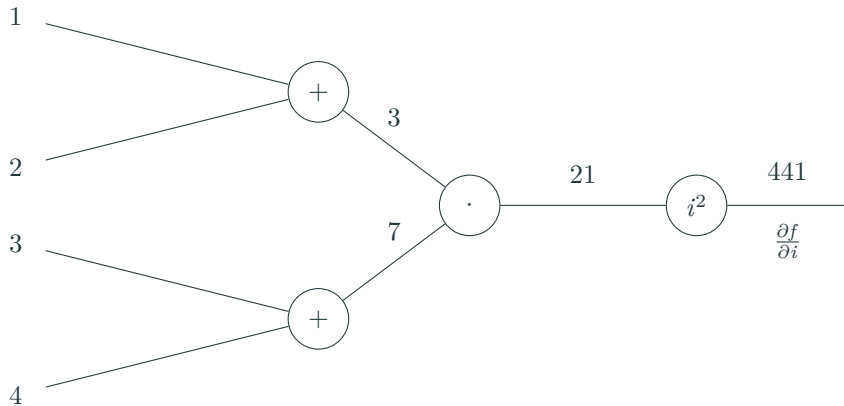
# Beispiel



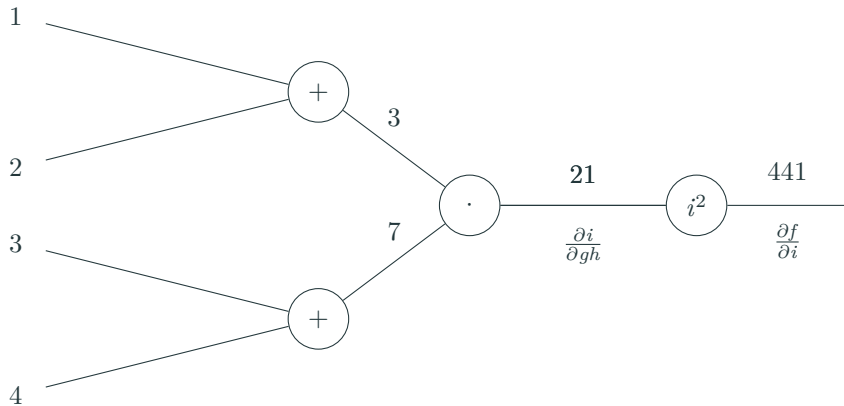
# Beispiel



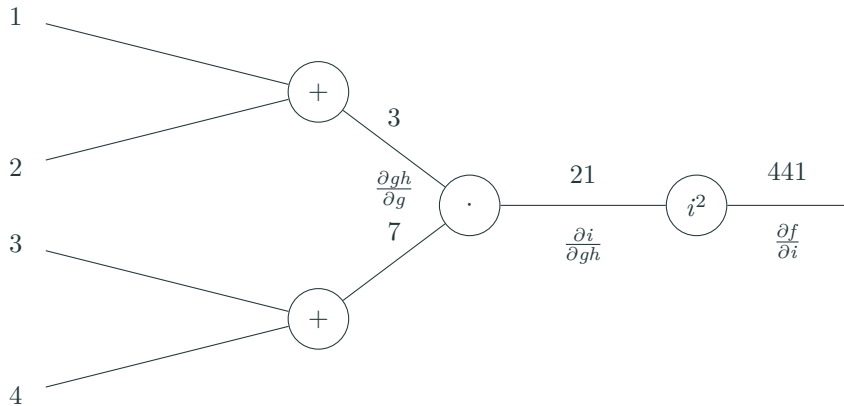
# Beispiel



# Beispiel

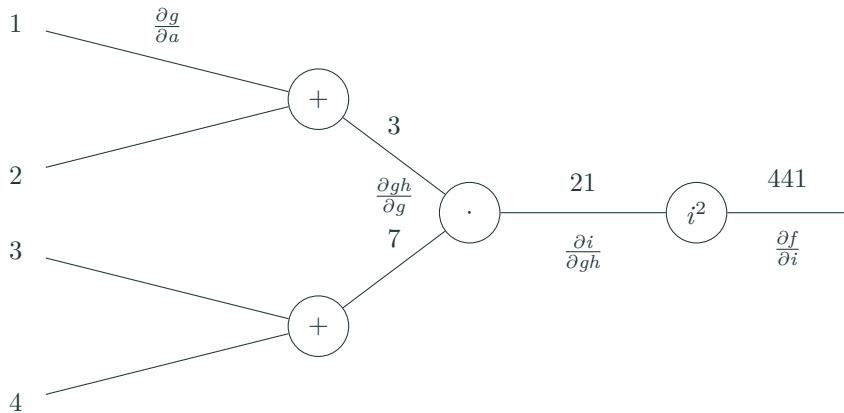


# Beispiel

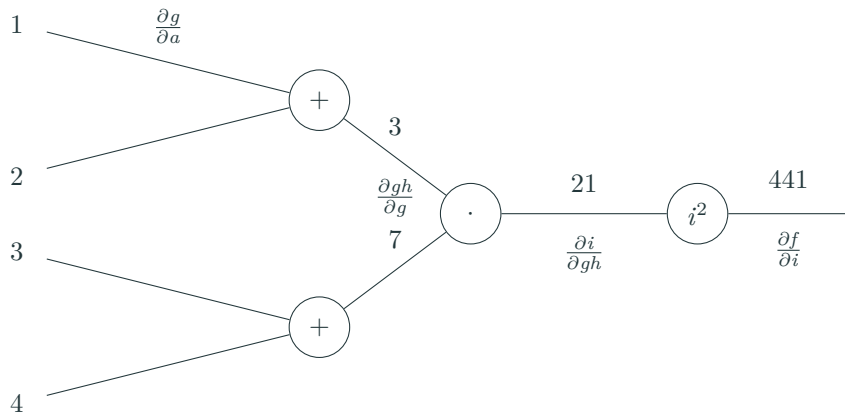




# Beispiel



# Beispiel



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

## Umsetzung in Python (mit Keras)

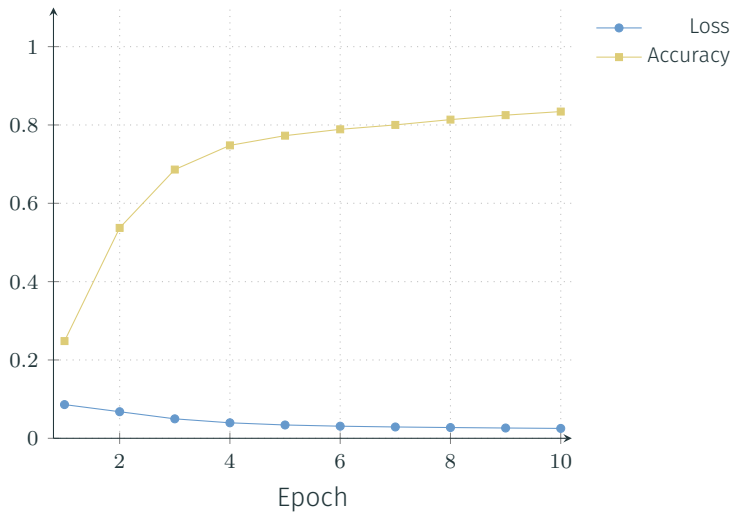
---

```
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))
```

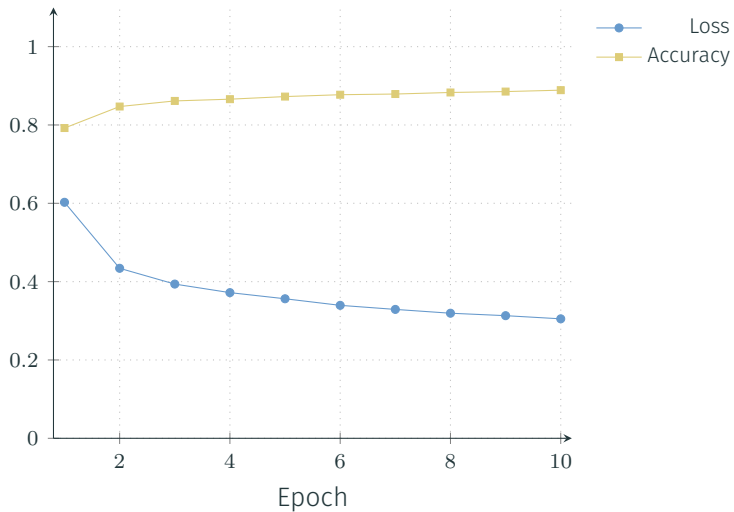
# Verlauf während des Trainings



- 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.