TECHNISCHE UNIVERSITÄT DORTMUND

Wintersemester 2007/08

Praktische Optimierung

(Vorlesung)

Prof. Dr. Günter Rudolph

Fakultät für Informatik

Lehrstuhl für Algorithm Engineering

Metamodellierung

Inhalt

- Multilayer-Perceptron (MLP)
- Radiale Basisfunktionsnetze (RBF)
- Kriging

$\left.\begin{array}{l}\text{Multilayer-Perceptron (MLP)}\\ \text{Radiale Basisfunktionsnetze (RBF)}\end{array}\right\}$ Neuronale Netze

Künstliche neuronale Netze

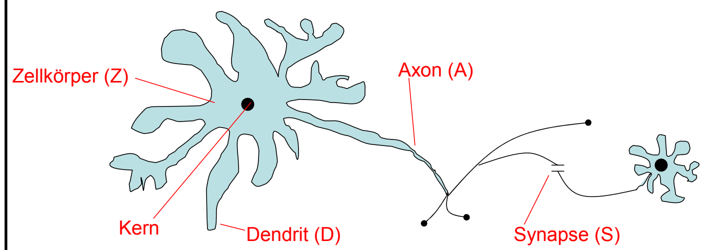
Biologisches Vorbild

- Neuronen
  - Information aufnehmen (D)
  - Information verarbeiten (Z)
  - Information weiterleiten (A / S)

Mensch: 10^{12} Neuronen

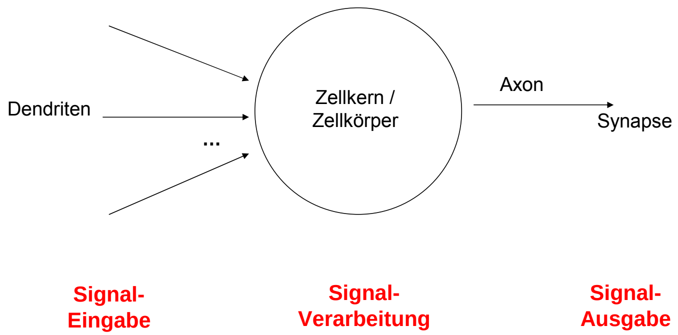
Strom im mV-Bereich

120 m / s



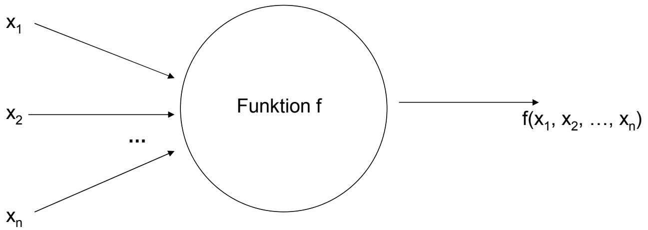
Künstliche neuronale Netze

Abstraktion



Künstliche neuronale Netze

Modell



McCulloch-Pitts-Neuron 1943:

$x_i \in \{ 0, 1 \} =: \mathbb{B}$

$f: \mathbb{B}^n \to \mathbb{B}$

Künstliche neuronale Netze

Perzeptron (Rosenblatt 1958)

→ komplexes Modell → reduziert von Minsky & Papert auf das „Notwendigste"

→ Minsky-Papert-Perzeptron (MPP), 1969

Was leistet <u>ein</u> MPP?

$w_1 x_1 + w_2 x_2 \ge \theta$ J → 1, N → 0

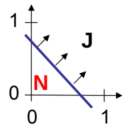
umstellen nach x_2 liefert:

$x_2 \ge \frac{\theta}{w_2} - \frac{w_1}{w_2} x_1$ J → 1, N → 0

Bsp:

$0,9\, x_1 + 0,8\, x_2 \ge 0,6$

$\Leftrightarrow \quad x_2 \ge \frac{3}{4} - \frac{9}{8} x_1$

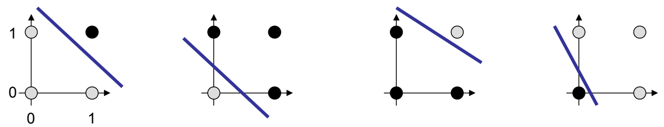


Trenngerade <u>separiert</u> $\mathbb{R}^2$ in 2 Klassen

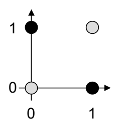
Künstliche neuronale Netze

○ = 0 ● = 1

AND **OR** **NAND** **NOR**



XOR



?

x_1	x_2	xor
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

$\Rightarrow 0 < \theta$

$\Rightarrow w_2 \ge \theta$

$\Rightarrow w_1 \ge \theta$

$\Rightarrow w_1 + w_2 < \theta$

$w_1, w_2 \ge \theta > 0$

$\Rightarrow w_1 + w_2 \ge 2\theta$

Widerspruch!

$w_1 x_1 + w_2 x_2 \ge \theta$

Künstliche neuronale Netze

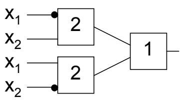
1969: Marvin Minsky / Seymor Papert

- Buch *Perceptrons* → Analyse math. Eigenschaften von Perzeptrons
- Ernüchterndes Ergebnis:
  Triviale Probleme können nicht mit Perzeptrons gelöst werden!
  - XOR-Problem
  - Parity-Problem
  - Connectivity-Problem
- „Folgerung": Alle künstliche Neuronen haben diese Schwäche!
  ⇒ Forschung auf diesem Gebiet ist wissenschaftliche Sackgasse!
- Folge: Forschungsförderung bzgl. KNN praktisch eingestellt (~ 15 Jahre)

Künstliche neuronale Netze

Wege aus der „Sackgasse“:

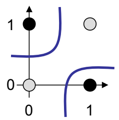
1. <u>Mehrschichtige</u> Perzeptrons:



$\Rightarrow$ realisiert XOR

2. <u>Nichtlineare</u> Trennfunktionen:

XOR $g(x_1, x_2) = 2x_1 + 2x_2 - 4x_1x_2 - 1$ mit $\theta = 0$



$g(0,0) = -1$
$g(0,1) = +1$
$g(1,0) = +1$
$g(1,1) = -1$

Künstliche neuronale Netze

Wie kommt man zu den Gewichten und θ ?

<u>bisher:</u> durch Konstruktion

Bsp: NAND-Gatter

x_1	x_2	NAND	
0	0	1	$\Rightarrow 0 \geq \theta$
0	1	1	$\Rightarrow w_2 \geq \theta$
1	0	1	$\Rightarrow w_1 \geq \theta$
1	1	0	$\Rightarrow w_1 + w_2 < \theta$

erfordert Lösung eines linearen Ungleichungssystems ($\in$ P)

(Bsp: $w_1 = w_2 = -2$, $\theta = -3$)

<u>jetzt:</u> durch „Lernen“ bzw. Trainieren

Künstliche neuronale Netze

Perceptron-Lernen

<u>Annahme:</u> Testbeispiele mit richtigem Ein-/Ausgabeverhalten bekannt

Prinzip:

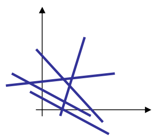
(1) wähle Gewichte irgendwie

(2) lege Testmuster an

(3) falls Perceptronausgabe falsch, dann verändere Gewichte

(4) gehe nach (2) bis richtige Perceptronausgabe für alle Testmuster

grafisch:

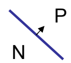


$\rightarrow$ Verschieben und Drehen der Trenngeraden

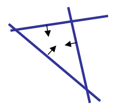
Künstliche neuronale Netze

Was kann man durch zusätzliche Schichten (Layer) erreichen?

- Single-layer perceptron (SLP)
  $\Rightarrow$ Hyperfläche separiert Raum in zwei Teilräume

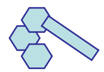


- Two-layer perceptron
  $\Rightarrow$ beliebige konvexe Mengen unterscheidbar



Verknüpfung mit AND in der 2. Schicht

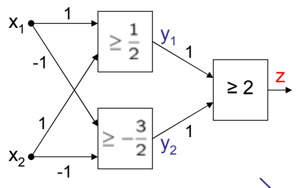
- Three-layer perceptron
  $\Rightarrow$ beliebige Mengen unterscheidbar (abh. von Anzahl der Neuronen),
  weil mehrere konvexe Mengen bis 2. Schicht darstellbar,
  diese können in 3. Schicht kombiniert werden



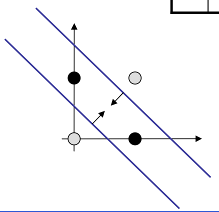
$\Rightarrow$ Mehr als 3 Schichten sind nicht nötig!

Künstliche neuronale Netze

XOR mit 3 Neuronen in 2 Schichten



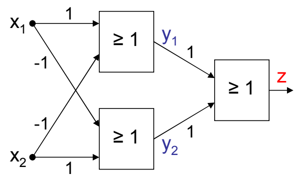
x_1	x_2	y_1	y_2	z
0	0	0	1	0
0	1	1	1	1
1	0	1	1	1
1	1	1	0	0



konvexe Menge

Künstliche neuronale Netze

XOR mit 3 Neuronen in 2 Schichten

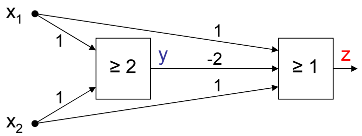


x_1	x_2	y_1	y_2	z
0	0	0	0	0
0	1	0	1	1
1	0	1	0	1
1	1	0	0	0

ohne AND-Verknüpfung in 2. Schicht

Künstliche neuronale Netze

XOR mit 2 Neuronen möglich



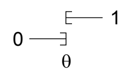
x_1	x_2	y	-2y	x_1-2y+x_2	z
0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	1	1
1	0	0	0	1	1
1	1	1	-2	0	0

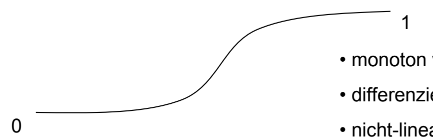
aber: keine Schichtenarchitektur

Künstliche neuronale Netze

Lernalgorithmus für Multi-Layer-Perceptron

vorteilhaft: sigmoide Aktivierungsfunktion (statt Signum-Funktion)





- monoton wachsend
- differenzierbar
- nicht-linear
- Ausgabe $\in$ [0,1] statt $\in$ { 0, 1 }
- Schranke θ in Aktivierungs-funktion integriert

Bsp:

- $a(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ $\quad a'(x) = a(x)(1-a(x))$
- $a(x) = \tanh(x)$ $\quad a'(x) = (1-a^2(x))$

Werte für Ableitungen direkt aus Funktionswerten bestimmbar

Künstliche neuronale Netze

Quantifizierung des Klassifikationsfehlers beim MLP

- Total Sum Squared Error (TSSE)

$$f(w) = \sum_{x \in B} \| \underbrace{g(w;x)}_{\text{Ausgabe des Netzes für Gewichte w und Eingabe x}} - \underbrace{g^*(x)}_{\text{Soll-Ausgabe des Netzes für Eingabe x}} \|^2$$

- Total Mean Squared Error (TMSE)

$$f(w) = \frac{1}{|B| \cdot \ell} \sum_{x \in B} \| g(w;x) - g^*(x) \|^2 = \underbrace{\frac{1}{|B| \cdot \ell}}_{const.} \cdot \text{ TSSE}$$

Anzahl der Beispiele (|B|) Anzahl der Ausgabeneuronen (ℓ)

⇒ führt zur gleichen Lösung wie TSSE

Künstliche neuronale Netze

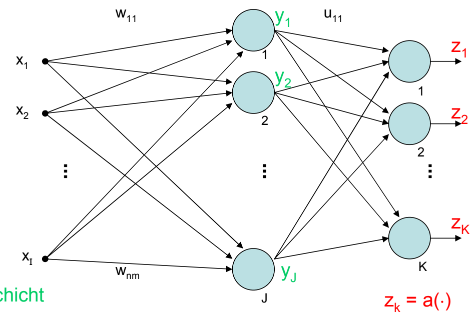
Lernalgorithmus für Multi-Layer-Perceptrons

<u>Gradientenverfahren</u>

$f(w_t, u_t)$ = TSSE

$u_{t+1} = u_t - \gamma \nabla_u f(w_t, u_t)$

$w_{t+1} = w_t - \gamma \nabla_w f(w_t, u_t)$



x_i : Eingabe an Eingabeschicht

y_j : Ausgabe der verdeckten Schicht

z_k: Ausgabe der Ausgabeschicht

$y_j = h(\cdot)$

$z_k = a(\cdot)$

Künstliche neuronale Netze

$$y_j = h\left(\sum_{i=1}^{I} w_{ij} \cdot x_i\right) = h(w_j' x)$$

Ausgabe von Neuron j in der verdeckten Schicht

$$z_k = a\left(\sum_{j=1}^{J} u_{jk} \cdot y_j\right) = a(u_k' y)$$

Ausgabe von Neuron k in der Ausgabeschicht

$$= a\left(\sum_{j=1}^{J} u_{jk} \cdot h\left(\sum_{i=1}^{I} w_{ij} \cdot x_i\right)\right)$$

Fehler bei Eingabe x:

$$f(w,u;x) = \sum_{k=1}^{K} (z_k(x) - z_k^*(x))^2 = \sum_{k=1}^{K} (z_k - z_k^*)^2$$

Netzausgabe Sollausgabe bei Eingabe x

Künstliche neuronale Netze

Fehler bei Eingabe x und Sollausgabe z*:

$$f(w,u;x,z^*) = \sum_{k=1}^{K} \Bigg[\underbrace{a\left(\sum_{j=1}^{J} u_{jk} \cdot \underbrace{h\left(\overbrace{\sum_{i=1}^{I} w_{ij} \cdot x_i}^{w_j' x}\right)}_{y_j}\right)}_{z_k} - z_k^*(x) \Bigg]^2$$

Gesamtfehler für alle Beispiele (x, z*) ∈ B:

$$f(w,u) = \sum_{(x,z^*) \in B} f(w,u;x,z^*) \qquad \text{(TSSE)}$$

Künstliche neuronale Netze

Gradient des Gesamtfehlers:

$$\nabla f(w,u) = \sum_{(x,z^*)\in B} \nabla f(w,u;x,z^*)$$

Vektor der partiellen Ableitungen nach den Gewichten u_{jk} und w_{ij}

also:

$$\frac{\partial f(w,u)}{\partial u_{jk}} = \sum_{(x,z^*)\in B} \frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial u_{jk}}$$

bzw.

$$\frac{\partial f(w,u)}{\partial w_{ij}} = \sum_{(x,z^*)\in B} \frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial w_{ij}}$$

Künstliche neuronale Netze

<u>**Annahme:**</u> $a(x) = \dfrac{1}{1+e^{-x}} \quad \Rightarrow \quad \dfrac{d\,a(x)}{dx} = a'(x) = a(x)\cdot(1-a(x))$

<u>**und:**</u> $h(x) = a(x)$

Kettenregel der Differentialrechnung:

$$[\,p(q(x))\,]' = \underbrace{p'(q(x))}_{\text{äußere Ableitung}} \cdot \underbrace{q'(x)}_{\text{innere Ableitung}}$$

Künstliche neuronale Netze

$$f(w,u;x,z^*) = \sum_{k=1}^{K} [\,a(u_k'y) - z_k^*\,]^2$$

partielle Ableitung nach u_{jk}:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial u_{jk}} &= 2\,[\,a(u_k'y) - z_k^*\,]\cdot a'(u_k'y)\cdot y_j \\
&= 2\,[\,a(u_k'y) - z_k^*\,]\cdot a(u_k'y)\cdot(1-a(u_k'y))\cdot y_j \\
&= \underbrace{2\,[\,z_k - z_k^*\,]\cdot z_k\cdot(1-z_k)}_{\text{„Fehlersignal“ } \delta_k}\cdot y_j
\end{aligned}$$

Künstliche neuronale Netze

partielle Ableitung nach w_{ij}:

$$\frac{\partial f(w,u;x,z^*)}{\partial w_{ij}} = 2\sum_{k=1}^{K}[\,\underbrace{a(u_k'y)}_{z_k} - z_k^*\,]\cdot \underbrace{a'(u_k'y)}_{z_k\,(1-z_k)}\cdot u_{jk}\cdot \underbrace{h'(w_j'x)}_{y_j\,(1-y_j)}\cdot x_i$$

$$= 2\cdot\sum_{k=1}^{K}[\,z_k - z_k^*\,]\cdot z_k\cdot(1-z_k)\cdot u_{jk}\cdot y_j\,(1-y_j)\cdot x_i$$

Faktoren umordnen

$$= \underbrace{x_i\cdot y_j\cdot(1-y_j)\cdot\sum_{k=1}^{K}\underbrace{2\cdot[\,z_k-z_k^*\,]\cdot z_k\cdot(1-z_k)}_{\text{Fehlersignal } \delta_k \text{ aus vorheriger Schicht}}\cdot u_{jk}}_{\text{Fehlersignal } \delta_j \text{ aus „aktueller“ Schicht}}$$

Künstliche neuronale Netze

Verallgemeinerung

Das neuronale Netz habe L Schichten (*layer*) $S_1, S_2, \ldots S_L$.
Seien Neuronen aller Schichten durchnummeriert von 1 bis N.

$j \in S_m \rightarrow$ Neuron j ist in m-ter Schicht

Alle Gewichte w_{ij} sind in Gewichtsmatrix W zusammengefasst.

Sei o_j Ausgabe (*output*) von Neuron j.

Fehlersignal:

$$\delta_j = \begin{cases} o_j \cdot (1 - o_j) \cdot (o_j - z_j^*) & \text{falls } j \in S_L \text{ (Ausgabeneuron)} \\ o_j \cdot (1 - o_j) \cdot \sum\limits_{k \in S_{m+1}} \delta_k \cdot w_{jk} & \text{falls } j \in S_m \text{ und } m < L \end{cases}$$

Korrektur:

$$w_{ij}^{(t+1)} = w_{ij}^{(t)} - \gamma \cdot o_i \cdot \delta_j$$

beim Online-Lernen:
Korrektur nach **jedem** präsentierten Beispiel

Künstliche neuronale Netze

Fehlersignal eines Neurons einer inneren Schicht bestimmt durch

- Fehlersignale aller Neuronen der nachfolgenden Schicht und
- zugehörige Verbindungsgewichte.

$\Downarrow$

- Erst Fehlersignale der Ausgabeneuronen bestimmen,
- daraus Fehlersignale der Neuronen der vorhergehenden Schicht berechnen,
- daraus Fehlersignale der Neuronen der vorhergehenden Schicht berechnen,
- usw. bis zur ersten inneren Schicht.

$\Downarrow$

Fehler wird also von Ausgabeschicht zur ersten inneren Schicht zurückgeleitet.

$\Rightarrow$ **Backpropagation** (of error)

Künstliche neuronale Netze

Satz:

MLPs mit einer verdeckten Schicht sigmoidaler Einheiten sind universelle Approximatoren für stetige Funktionen.

Beweis:

Hornik, K., Stinchcombe, M., and White, H. (1989).
"Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators,"
Neural Networks, 2(5), 359-366.

Folgt im Grunde aus dem Satz von Weierstraß.

Netz explizit hinschreiben und ausmultiplizieren.

Sigmoidale Funktionen durch ihre Reihenentwicklung (Polynome!) ersetzen.

Ausmultiplizieren $\rightarrow$ Polynom als Ersatzzielfunktion