### Neuronale Netze Zusammenfassung

Prof. Dr.-Ing. Sebastian Stober

Artificial Intelligence Lab Institut für Intelligente Kooperierende Systeme Fakultät für Informatik <u>stober@ovgu.de</u>



FACULTY OF COMPUTER SCIENCE



# Künstliche Intelligenz & Maschinelles Lernen

### **Maschinelles Lernen**

Maschinelles Lernen (ML) "durch Erfahrung eine Aufgabe besser machen" [1] Daten

#### Künstliche Intelligenz (KI)

*"die Fähigkeit eines Agenten, Ziele in einer großen Breite von Umgebungen zu erreichen"* [2]

### **Optimierung!**

[1] T. Mitchell (1997). "Machine Learning", McGraw Hill.

[2] S. Legg; M. Hutter (2007). "Universal Intelligence: A Definition of Machine Intelligence". Minds & Machines. 17 (4): 391–444.

# **ML Problemklassen**



### Überwachtes Lernen (supervised learning)



### Unüberwachtes Lernen (unsupervised learning)



# Bestärkendes Lernen

(reinforcement learning)

# Überwachtes Lernen

(feste Lernaufgabe)

- annotierte Trainingsdaten (Beispielein- und Ausgaben)
- Ierne Vorhersagemodell



# **Unüberwachtes Lernen**

(freie Lernaufgabe)

- Trainingdaten ohne Annotationen
- Lerne Struktur der Daten



- a) eigenständiges Ziel (Muster entdecken)
- b) Zwischenschritt der Datenverarbeitung

### Bestärkendes Lernen

- Trainingdaten durch Interaktion mit Umgebung
- Lerne Verhalten, welches die kumulative (verzögerte!) Belohnung über die Zeit maximiert



### **Modell-Kapazität**



Capacity

Bewertung & Selektierung von Modellen nur auf der Basis bisher ungesehener Daten!

### **Bias-Variance Trade-Off**



### **Regularization Techniques**

- parameter norm (L1/L2)
- early stopping
- dropout
- more data / data augmentation
- adding noise / denoising
- semi-supervised learning
- multi-task learning
- parameter tying & sharing
- sparse representations
- bagging / ensembles
- DropConnect = randomly set weights to zero
- (layer-wise) unsupervised pretraining
- adversarial training
- •

. . .

### **Error Factors**



https://kevinzakka.github.io/2016/09/26/applying-deep-learning/



### **Thematische Einordnung**







(nicht vollständig!)

- unterschiedliche Neuronentypen
- unterschiedliche Architekturen
- Gemeinsamkeiten?



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

### **Graphentheoretische Grundlagen**

#### Graphentheoretische Grundlagen

Ein (gerichteter) **Graph** ist ein Tupel G = (V, E), bestehend aus einer (endlichen) Menge V von **Knoten** oder **Ecken** und einer (endlichen) Menge  $E \subseteq V \times V$  von **Kanten**.

Wir nennen eine Kante  $e = (u, v) \in E$  gerichtet von Knoten u zu Knoten v.

 $u \xrightarrow{e} v$ 

Sei G=(V,E) ein (gerichteter) Graph und  $u\in V$  ein Knoten. Dann werden die Knoten der Menge

$$\operatorname{pred}(u) = \{ v \in V \mid (v, u) \in E \}$$

die **Vorgänger** des Knotens uund die Knoten der Menge

$$\operatorname{succ}(u) = \{ v \in V \mid (u,v) \in E \}$$

die Nachfolger des Knotens u genannt.

### **Allgemeine Netwerk-Definition**

Ein (künstliches) neuronales Netz ist ein (gerichteter) Graph G = (U, C), dessen Knoten  $u \in U$  Neuronen oder Einheiten und dessen Kanten  $c \in C$  Verbindungen genannt werden.

Die Menge U der Knoten wird partitioniert in

- die Menge Uin der Eingabeneuronen,
- die Menge Uout der **Ausgabeneuronen**, und
- die Menge U<sub>hidden</sub> der versteckten Neuronen.



Es gilt

$$U = U_{\rm in} \cup U_{\rm out} \cup U_{\rm hidden},$$

$$U_{\text{in}} \neq \emptyset, \qquad U_{\text{out}} \neq \emptyset, \qquad U_{\text{hidden}} \cap (U_{\text{in}} \cup U_{\text{out}}) = \emptyset.$$

### **Allgemeines Neuron**

#### Ein verallgemeinertes Neuron verarbeitet numerische Werte



### Gradientenabstieg

Allgemeinerer Ansatz: Gradientenabstieg.

Notwendige Bedingung: differenzierbare Aktivierungs- und Ausgabefunktionen.



Illustration des Gradienten einer reellwertigen Funktion z = f(x, y) am Punkt  $(x_0, y_0)$ . Dabei ist $\vec{\nabla} z|_{(x_0, y_0)} = \left(\frac{\partial z}{\partial x}|_{x_0}, \frac{\partial z}{\partial y}|_{y_0}\right)$ .

### **Error Backpropagation**

Aktivierungsfunktion: logistisch Ausgabefunktion: Identität impliziter Biaswert

20



# Algorithmus-Skizze (online)

**gegeben:** MLP mit G = (U, C), Lernrate  $\eta$ , Trainingsbeispiele  $L_{\text{fixed}}$ Initialisierung aller Gewichte (Zufallswerte)

#### wiederhole:

für jedes Trainingsbeispiel  $l = (\vec{\imath}^{(l)}, \vec{o}^{(l)}) \in L_{\text{fixed}}$ 

Eingabe, Vorwärtsberechnung der Aktivierungen und Ausgabe:

$$\forall u \in U_{\text{in}} : \qquad \forall u \in U_{\text{hidden}} \cup U_{\text{out}} : \\ \operatorname{out}_{u}^{(l)} = i_{u}^{(l)} \qquad \operatorname{out}_{u}^{(l)} = \left(1 + \exp\left(-\sum_{p \in \operatorname{pred}(u)} w_{up} \operatorname{out}_{p}^{(l)}\right)\right)^{-1}$$

Fehlerberechnung und Rückübertragung (Backpropagation):

 $\begin{array}{l} \forall u \in U_{\text{out}}:\\ \delta_{u}^{(l)} = \left(o_{u}^{(l)} - \operatorname{out}_{u}^{(l)}\right)\lambda_{u}^{(l)} \end{array} \begin{array}{l} \forall u \in U_{\text{hidden}}:\\ \delta_{u}^{(l)} = \left(\sum_{s \in \operatorname{succ}(u)} \delta_{s}^{(l)} w_{su}\right)\lambda_{u}^{(l)} \end{array} \\ \text{mit Ableitung der Aktivierungsfunktion} \quad \left[\lambda_{u}^{(l)} = \operatorname{out}_{u}^{(l)}\left(1 - \operatorname{out}_{u}^{(l)}\right)\right] \\ \text{Berechnung der Gewichtsänderung} \quad \left[\Delta w_{up}^{(l)} = \eta \ \delta_{u}^{(l)} \operatorname{out}_{p}^{(l)}\right] \text{ und Update} \\ \text{bis Stopkriterium erreicht} \end{array} \right]$ 

(nicht vollständig!)

Schwellenwertelem.
 (Perceptron)



### **Schwellenwertelement**



Schwellenwertelement für  $x_1 \wedge x_2$ .





### **Delta-Regel**

**Formale Trainingsregel:** Sei  $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)$  ein Eingabevektor eines Schwellenwertelements, o die gewünschte Ausgabe für diesen Eingabevektor, und y die momentane Ausgabe des Schwellenwertelements. Wenn  $y \neq o$ , dann werden Schwellenwert  $\theta$ und Gewichtsvektor  $\vec{w} = (w_1, \ldots, w_n)$  wie folgt angepasst, um den Fehler zu reduzieren:

$$\begin{split} \theta^{(\text{neu})} &= \theta^{(\text{alt})} + \Delta \theta \quad \text{wobei} \quad \Delta \theta = -\eta (o - y), \\ \forall i \in \{1, \dots, n\} : \quad w_i^{(\text{neu})} = w_i^{(\text{alt})} + \Delta w_i \quad \text{wobei} \quad \Delta w_i = -\eta (o - y) x_i, \end{split}$$

wobei  $\eta$  ein Parameter ist, der **Lernrate** genannt wird. Er bestimmt die Größenordnung der Gewichtsänderungen. Diese Vorgehensweise nennt sich **Delta-Regel** oder **Widrow–Hoff–Procedure** [Widrow and Hoff 1960].

**Online-Training:** Passe Parameter nach jedem Trainingsmuster an.

**Batch-Training:** Passe Parameter am Ende jeder **Epoche** an, d.h. nach dem Durchlaufen aller Trainingsbeispiele.

### **Trainieren von Schwellenwertelementen**

Beispieltrainingsprozedur: Online- und Batch-Training.







(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs



# Mehrschichtige Perzeptren (MLPs)

Allgemeine Struktur eines mehrschichtigen Perzeptrons



## Sigmoide Aktivierungsfunktionen

#### Stufenfunktion:

$$f_{\text{act}}(\text{net}, \theta) = \begin{cases} 1, \text{ falls net} \ge \theta, \\ 0, \text{ sonst.} \end{cases}$$

Sinus bis Sättigung:  $f_{act}(net, \theta) = \begin{cases} 1, & \text{falls } net > \theta + \frac{\pi}{2}, \\ 0, & \text{falls } net < \theta - \frac{\pi}{2}, \\ \frac{\sin(net - \theta) + 1}{2}, & \text{sonst.} \end{cases}$   $1 \xrightarrow{1}{\frac{1}{2}} \xrightarrow{1}{\frac{1}{\frac{1}{2}}} \xrightarrow{\theta} & \theta + \frac{\pi}{2} \end{cases}$ 

#### Semilineare Funktion:





(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs



# **Convolutional Neural Nets (CNNs)**



example from MNIST dataset <a href="http://yann.lecun.com/exdb/mnist/">http://yann.lecun.com/exdb/mnist/</a>

#### 2D input

[1] http://deeplearning.net/software/theano/tutorial/

specialized group of neurons in visual cortex limited & overlapping receptive fields with same filter





2D output (feature map)

# **Convolutional Layers**



convolution

# **Convolutional Neural Nets (CNNs)**





- local connectivity
- parameter sharing
- translation equivariance
- involves non-linear transform (activation function) after conv.
- pool size controls amount of invariance to input translations
- stride (step size) controls non-linear sub-sampling

### Introspection

#### feature visualization (optimize input)













#### relevance / saliency analysis (for given input)







Neuron layer [x,y,z]

Channel layer\_[:,:,z] Layer/DeepDream layer\_[:,:,:]<sup>2</sup>

**Class Logits** pre\_softmax[k] **Class Probability** softmax[k]

#### (a) Original Image

(b) Guided Backprop 'Cat'

(c) Grad-CAM 'Cat'

AH AE AA OW AO AW

#### => sanity checks!



#### feature topography (improve interpretability)



neuron activation profiles

(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

### **Recurrent Neural Nets**



LeCun, Bengio & Hinton. "Deep Learning." nature 521.7553 (2015)

#### recursive networks



y

L

x

y

encoder





The repeating module in an LSTM contains four interacting layers.





Copy

https://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs/

### RNNs

- work well for sequential data
  - time series (with low sampling rate)
  - texts (translation, discourse, sentiment, ...)

support variable-length input

 including long-term dependencies

are hard to parallelize

### **Beispiel: CNN+RNN**

#### **Describes without errors**



A person riding a motorcycle on a dirt road.



Describes with minor errors

Two dogs play in the grass.





A skateboarder does a trick on a ramp.

A little girl in a pink hat is blowing bubbles.

Unrelated to the image



A dog is jumping to catch a frisbee.



A refrigerator filled with lots of food and drinks.



A yellow school bus parked in a parking lot.



A group of young people playing a game of frisbee.

A herd of elephants walking

across a dry grass field.



Two hockey players are fighting over the puck.



A close up of a cat laying on a couch.



A red motorcycle parked on the side of the road.



## **Beispiel: CNN+RNN**



https://avisingh599.github.io/deeplearning/visual-qa/

#### structure: encoder + decoder

- arbitrarily complex
- often symmetrical

**objective:** reconstruct inputs

- often under constraints (capacity, sparsity etc.)



regularization (e.g. sparsity)

**Autoencoders** 

#### **Convolutional Autoencoder**



#### Stacked (Denoising) Autoencoder



#### **Recurrent Autoencoder**





# Abstandsbasierte Netze

(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze





(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze
- LVQ



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

## LVQ

- wie RBF-Netz ohne Ausgabeschicht
- Winner-Takes-All Ausgabefunktion

Voronoi-Diagramm => Quantisierung





(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze
- LVQ & SOMs



### SOMs

Ausgabeneuronen mit Nachbarschaften



Eingabeneuronen

#### Finde topologieerhaltende Abbildung durch Beachtung der Nachbarschaft

Anpassungsregel für Referenzvektor:

$$\vec{r_u}^{(\text{new})} = \vec{r_u}^{(\text{old})} + \eta(t) \cdot f_{\text{nb}}(d_{\text{neurons}}(u, u_*), \varrho(t)) \cdot (\vec{x} - \vec{r_u}^{(\text{old})}),$$

 $u_*$  ist das Gewinnerneuron (Referenzvektor am nächsten zum Datenpunkt). Die Funktion  $f_{\rm nb}$  ist eine radiale Funktion.

Zeitabhängige Lernrate

 $\eta(t) = \eta_0 \alpha_\eta^t, \quad 0 < \alpha_\eta < 1, \qquad \text{oder} \qquad \eta(t) = \eta_0 t^{\kappa_\eta}, \quad \kappa_\eta > 0.$ 

Zeitabhängiger Nachbarschaftsradius

 $\varrho(t) = \varrho_0 \alpha_\varrho^t, \quad 0 < \alpha_\varrho < 1, \qquad \text{oder} \qquad \varrho(t) = \varrho_0 t^{\kappa_\varrho}, \quad \kappa_\varrho > 0.$ 

#### Visualisierung (2D-Eingaberaum) Referenzvektoren => "Entfaltung"



Visualisierung (2D-Ausgaberaum) Aktivierung für eine Beispieleingabe









# **Energiebasierte Netze**

(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze
- LVQ & SOMs
- Hopfield-Netze



50

## **Hopfield-Netze**

Zustandsgraph



- Konvergenz bei asynchroner Verarbeitung (in fester Reihenfolge)
- Endzustand (lokales) Energieminimum
- Verwendung als assoziativer Speicher oder zur Optimierung

# **Generative Models**



# **Generative Training**

• Given training data, generate new samples from same distribution!





training data ~  $p_{data}(x)$ 

generated samples ~  $p_{model}(x)$ 

### => train $p_{model}(x)$ to approximate $p_{data}(x)$

here: capture dependencies between pixels

images from Denton et al. 2015

#### undirected model



#### Restricted Boltzmann Machine (RBM) R



hidden variables (conditionally independent given visible variables)

visible variables (conditionally independent given hidden variables)

$$E(\boldsymbol{v},\boldsymbol{h}) = -\boldsymbol{b}^{\top}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{c}^{\top}\boldsymbol{h} - \boldsymbol{v}^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{h}$$

$$P(\mathbf{v} = \boldsymbol{v}, \mathbf{h} = \boldsymbol{h}) = \frac{1}{Z} \exp\left(-E(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{h})\right)$$

"partition function" – for probability normalization not tractable (sum over **many** values)

#### **RBM Training**



make samples from training

data more likely

make samples from model less likely

negative phase

 $p_{\text{model}}(x)$ 

•  $p_{\text{data}}(x)$ 

#### Variational Autoencoder (VAE)



adapted from F. Chollet (2017) "Deep Learning with Python", Manning

#### **Generative Adversarial Net (GAN)**

generator net (like VAE decoder):

try to fool the discriminator by generating real-looking data

#### discriminator net:

try to distinguish between real and fake data



#### directed model



(causal structure)

#### **Directed Graphical Model**



hidden factors (latent variables)

data (observable variables)

Use DNNs to parameterize and represent conditional distributions!

(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze
- LVQ & SOMs
- Hopfield-Netze
- BMs, RBMs & DBNs



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

### **Boltzmann-Maschinen** (1985)



Keine Neuronen sondern Zufallsvariablen, die sich gegenseitig beeinflussen!



Geoffrey Hinton (Univ. of Toronto / Google)

### **Restricted Boltzmann Machine** (RBM)



#### hidden variables

(conditionally independent given visible variables)

#### visible variables

(conditionally independent given hidden variables)

$$E(\boldsymbol{v},\boldsymbol{h}) = -\boldsymbol{b}^{\top}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{c}^{\top}\boldsymbol{h} - \boldsymbol{v}^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{h}$$

$$P(\mathbf{v} = \mathbf{v}, \mathbf{h} = \mathbf{h}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\mathbf{v}, \mathbf{h}))$$

"partition function" – for probability normalization not tractable (sum over **many** values)

# **RBM Training**



make samples from training data more likely

make samples from model less likely

(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze
- LVQ & SOMs
- Hopfield-Netze
- BMs, RBMs & DBNs
- VAEs



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

# Variational Autoencoder (VAE)



adapted from F. Chollet (2017) "Deep Learning with Python", Manning

## **VAE Introspection**

#### Latent Space Visualization (for MNIST dataset)



(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs
- RBF Netze
- LVQ & SOMs
- Hopfield-Netze
- BMs, RBMs & DBNs
- VAEs
- GANs



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

# **Generative Adversarial Net (GAN)**

generator net (like VAE decoder):

try to fool the discriminator by generating real-looking data

### discriminator net:

try to distinguish between real and fake data



images from Denton et al. 2015

(nicht vollständig!)

- Schwellenwertelem.
   (Perceptron)
- MLPs
- CNNs
- RNNs

Abstand

generativ

- RBF Netze
- LVQ & SOMs
- B Hopfield-Netze
- 🖁 BMs, RBMs & DBNs
- VAEs
- GANs



http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/

### Ausblick

- Responsible Data Science (Projekt)
  - 16. Juli (Workshop)
  - 22. November (öffentliche Präsentation)
- Introduction to Deep Learning (jedes WiSe)
   Vorlesung (flipped) + Übung + Tutorium
- Learning Generative Models (jedes SoSe)
   Vorlesung (flipped) + Übung
- Music Information Retrieval (jedes WiSe)
   Vorlesung + Übung