Allgemeine (Künstliche) Neuronale Netze

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.

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

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

die **Vorgänger** des Knotens u
und die Knoten der Menge

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

die **Nachfolger** des Knotens u genannt.

Allgemeine Neuronale Netze

Allgemeine Definition eines neuronalen Netzes 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 U_{in} der **Eingabeneuronen**,
- die Menge U_{out} der **Ausgabeneuronen**, und
- die Menge U_{hidden} der **versteckten Neuronen**.

Es gilt:

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

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

Allgemeine Neuronale Netze

Jede Verbindung $(v, u) \in C$ besitzt ein **Gewicht** w_{uv} und
jedes Neuron $u \in U$ besitzt drei (reellwertige) Zustandsvariablen:

- die **Netzwerkeingabe** net_u,
- die **Aktivierung** act_u, und
- die **Ausgabe** out_u.

Jedes Eingabeneuron $u \in U_{\mathrm{in}}$ besitzt weiterhin eine vierte reellwertige Zustandsvariable,

- die **externe Eingabe** ex_u.

Weiterhin besitzt jedes Neuron $u \in U$ drei Funktionen:

- die **Netzwerkeingabefunktion** $f_{\mathrm{net}}^{(u)} : \mathbb{R}^{2|\,\mathrm{pred}(u)|+\kappa_1(u)} \to \mathbb{R}$,
- die **Aktivierungsfunktion** $f_{\mathrm{act}}^{(u)} : \mathbb{R}^{\kappa_2(u)} \to \mathbb{R}$, und
- die **Ausgabefunktion** $f_{\mathrm{out}}^{(u)} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$,

die benutzt werden, um die Werte der Zustandsvariablen zu berechnen.

Typen (künstlicher) neuronaler Netze

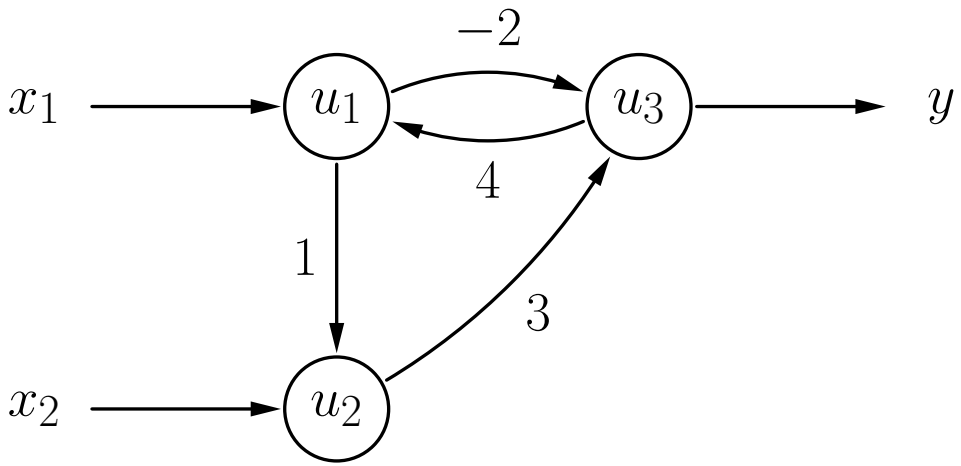
- Falls der Graph eines neuronalen Netzes **azyklisch** ist, wird das Netz **Feed-Forward-Netzwerk** genannt.
- Falls der Graph eines neuronalen Netzes **Zyklen** enthält, (rückwärtige Verbindungen), wird es **rekurrentes Netzwerk** genannt.

Darstellung der Verbindungsgewichte als Matrix

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} u_1 & u_2 & \dots & u_r \end{array} \\ \begin{pmatrix} w_{u_1u_1} & w_{u_1u_2} & \dots & w_{u_1u_r} \\ w_{u_2u_1} & w_{u_2u_2} & & w_{u_2u_r} \\ \vdots & & & \vdots \\ w_{u_ru_1} & w_{u_ru_2} & \dots & w_{u_ru_r} \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_r \end{array}$$

Allgemeine Neuronale Netze: Beispiel

Ein einfaches rekurrentes neuronales Netz:

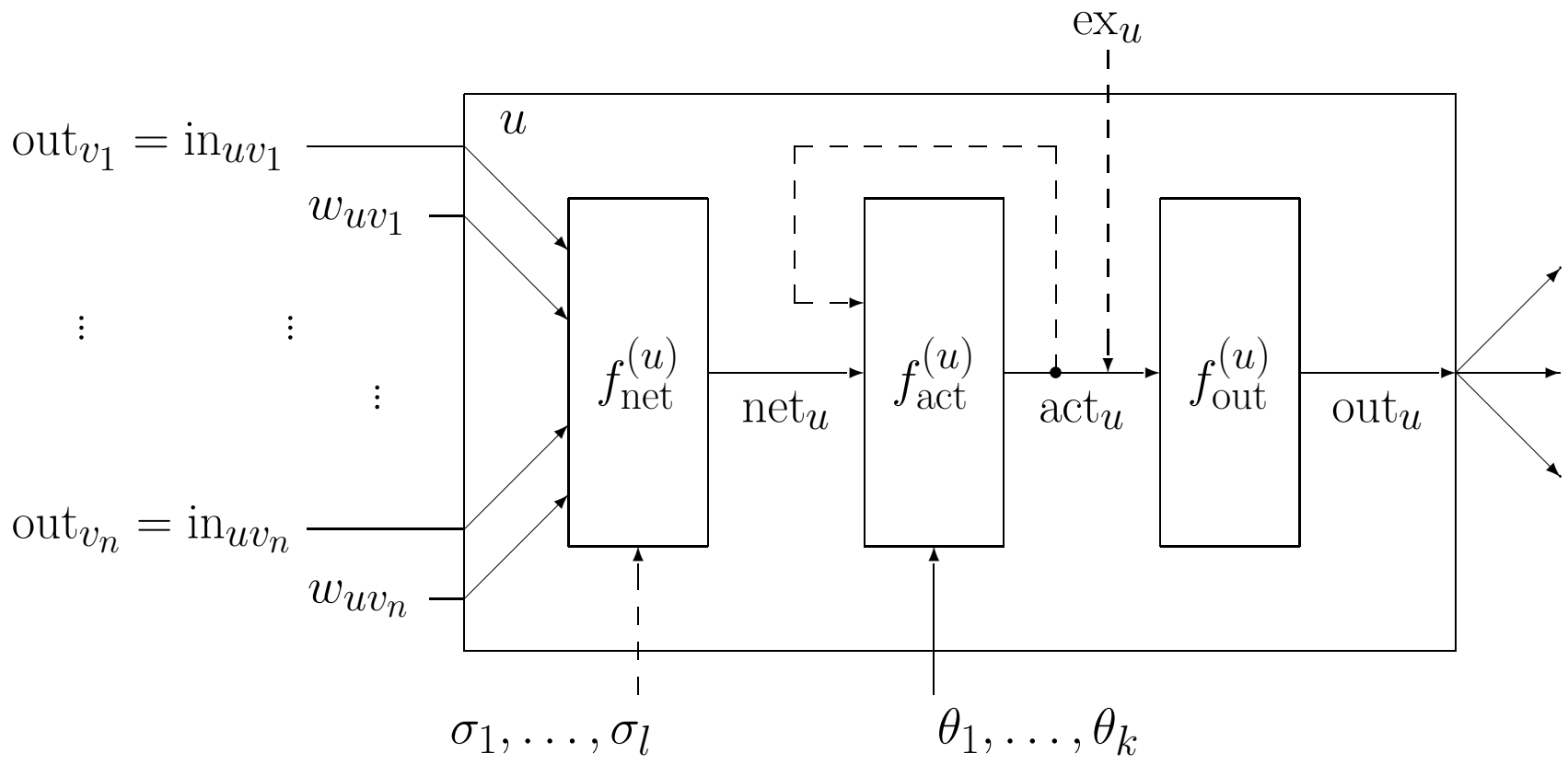


Gewichtsmatrix dieses Netzes:

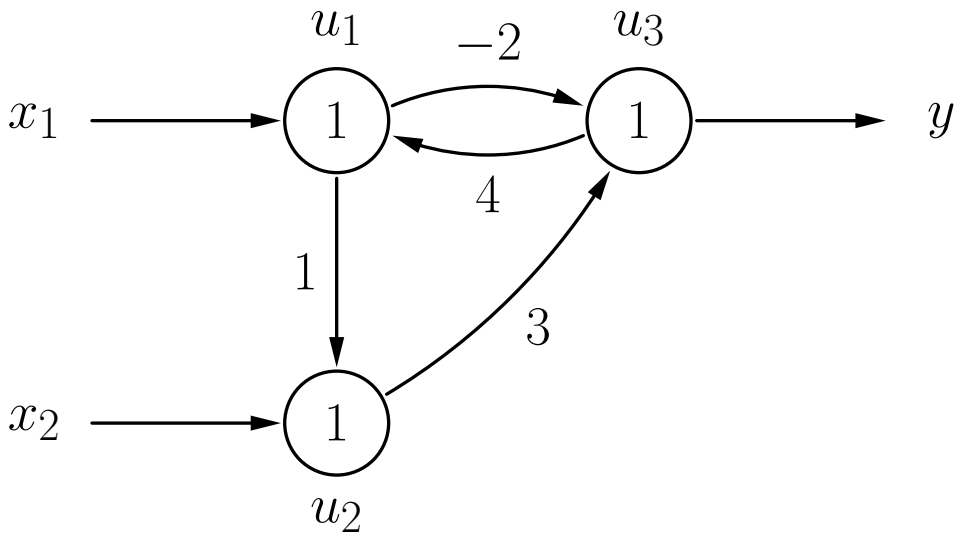
$$\begin{array}{c} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 4 \\ 1 & 0 & 0 \\ -2 & 3 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \begin{matrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{matrix} \end{array}$$

Structure of a Generalized Neuron

Ein verallgemeinertes Neuron verarbeitet numerische Werte



Allgemeine Neuronale Netze: Beispiel



$$f_{\text{net}}^{(u)}(\boldsymbol{w}_u, \mathbf{in}_u) = \Sigma_{v \in \text{pred}(u)} w_{uv} \text{in}_{uv} = \Sigma_{v \in \text{pred}(u)} w_{uv} \, \text{out}_v$$

$$f_{\text{act}}^{(u)}(\text{net}_u, \theta) = \begin{cases} 1, & \text{falls} \quad \text{net}_u \geq \theta, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$f_{\text{out}}^{(u)}(\text{act}_u) = \text{act}_u$$

Aktualisierung der Neuronenaktivierungen

	u_1	u_2	u_3	
Eingabephase	**1**	**0**	**0**	
Arbeitsphase	1	0	**0**	$\text{net}_{u_3} = -2$
	0	0	0	$\text{net}_{u_1} = 0$
	0	**0**	0	$\text{net}_{u_2} = 0$
	0	0	**0**	$\text{net}_{u_3} = 0$
	0	0	0	$\text{net}_{u_1} = 0$

- Aktualisierungsreihenfolge:
  $u_3, u_1, u_2, u_3, u_1, u_2, u_3, \ldots$
- Eingabephase: Aktivierungen/Ausgaben im Startzustand (erste Zeile)
- Die Aktivierung des gerade zu aktualisierenden Neurons (fettgedruckt) wird mit Hilfe der Ausgaben der anderen Neuronen und der Gewichte neu berechnet.
- Ein stabiler Zustand mit eindeutiger Ausgabe wird erreicht.

Aktualisierung der Neuronenaktivierungen

	u_1	u_2	u_3	
Eingabephase	**1**	**0**	**0**	
Arbeitsphase	1	0	**0**	$\text{net}_{u_3} = -2$
	1	**1**	0	$\text{net}_{u_2} = 1$
	0	1	0	$\text{net}_{u_1} = 0$
	0	1	**1**	$\text{net}_{u_3} = 3$
	0	**0**	1	$\text{net}_{u_2} = 0$
	1	0	1	$\text{net}_{u_1} = 4$
	1	0	**0**	$\text{net}_{u_3} = -2$

- Aktualisierungsreihenfolge:
  $u_3, u_2, u_1, u_3, u_2, u_1, u_3, \ldots$
- Es wird kein stabiler Zustand erreicht (Oszillation der Ausgabe).

Definition von Lernaufgaben für ein neuronales Netz

Eine **feste Lernaufgabe** L_{fixed} für ein neuronales Netz mit

- n Eingabeneuronen, d.h. $U_{\text{in}} = \{u_1, \ldots, u_n\}$, and
- m Ausgabeneuronen, d.h. $U_{\text{out}} = \{v_1, \ldots, v_m\}$,

ist eine Menge von **Trainingsbeispielen** $l = (\boldsymbol{\imath}^{(l)}, \boldsymbol{o}^{(l)})$, bestehend aus

- einem **Eingabevektor** $\boldsymbol{\imath}^{(l)} = (\text{ex}_{u_1}^{(l)}, \ldots, \text{ex}_{u_n}^{(l)})$ and
- einem **Ausgabevektor** $\boldsymbol{o}^{(l)} = (o_{v_1}^{(l)}, \ldots, o_{v_m}^{(l)})$.

Eine feste Lernaufgabe gilt als gelöst, wenn das NN für alle Trainingsbeispiele $l \in L_{\text{fixed}}$ aus den externen Eingaben im Eingabevektor $\boldsymbol{\imath}^{(l)}$ eines Trainingsmusters l die Ausgaben berechnet, die im entsprechenden Ausgabevektor $\boldsymbol{o}^{(l)}$ enthalten sind.

Lösen einer festen Lernaufgabe: Fehlerbestimmung

- Bestimme, wie gut ein neuronales Netz eine feste Lernaufgabe löst.
- Berechne Differenzen zwischen gewünschten und berechneten Ausgaben.
- Summiere Differenzen nicht einfach, da sich die Fehler gegenseitig aufheben könnten.
- Quadrieren liefert passende Eigenschaften, um die Anpassungsregeln abzuleiten.

$$e = \sum_{l \in L_{\text{fixed}}} e^{(l)} = \sum_{v \in U_{\text{out}}} e_v = \sum_{l \in L_{\text{fixed}}} \sum_{v \in U_{\text{out}}} e_v^{(l)},$$

$$\text{wobei} \qquad e_v^{(l)} = \left(o_v^{(l)} - \text{out}_v^{(l)}\right)^2$$

Definition von Lernaufgaben für ein neuronales Netz

Eine **freie Lernaufgabe** L_{free} für ein neuronales Netz mit

- n Eingabeneuronen, d.h. $U_{\text{in}} = \{u_1, \ldots, u_n\}$,

ist eine Menge von **Trainingsbeispielen** $l = \left(\boldsymbol{\imath}^{(l)}\right)$, wobei jedes aus

- einem **Eingabevektor** $\boldsymbol{\imath}^{(l)} = \left(\text{ex}_{u_1}^{(l)}, \ldots, \text{ex}_{u_n}^{(l)}\right)$ besteht.

Eigenschaften:

- Es gibt keine gewünschte Ausgabe für die Trainingsbeispiele.
- Ausgaben können von der Trainingsmethode frei gewählt werden.
- Lösungsidee: **Ähnliche Eingaben sollten zu ähnlichen Ausgaben führen.** (Clustering der Eingabevektoren)

Normalisierung der Eingabevektoren

- Berechne Erwartungswert und Standardabweichung jeder Eingabe:

$$\mu_k = \frac{1}{|L|} \sum_{l \in L} \mathrm{ex}_{u_k}^{(l)} \qquad \text{and} \qquad \sigma_k = \sqrt{\frac{1}{|L|} \sum_{l \in L} \left(\mathrm{ex}_{u_k}^{(l)} - \mu_k\right)^2},$$

- Normalisiere die Eingabevektoren auf Erwartungswert 0 und Standardabweichung 1:

$$\mathrm{ex}_{u_k}^{(l)(\mathrm{neu})} = \frac{\mathrm{ex}_{u_k}^{(l)(\mathrm{alt})} - \mu_k}{\sigma_k}$$

- Vermeidet Skalierungsprobleme.