Neuronale Netze

Prof. Dr. Rudolf Kruse

Computational Intelligence
Institut für Intelligente Kooperierende Systeme
Fakultät für Informatik
rudolf.kruse@ovgu.de

Mehrschichtige Perzeptren

Multilayer Perceptrons (MLPs)

Mehrschichtige Perzeptren

Ein **r-schichtiges Perzeptron** ist ein neuronales Netz mit einem Graph $G = (U, C)$ das die folgenden Bedingungen erfüllt:

(i) $U_{\text{in}} \cap U_{\text{out}} = \emptyset$,

(ii) $U_{\text{hidden}} = U_{\text{hidden}}^{(1)} \cup \cdots \cup U_{\text{hidden}}^{(r-2)}$,

$\forall 1 \leq i < j \leq r-2: \quad U_{\text{hidden}}^{(i)} \cap U_{\text{hidden}}^{(j)} = \emptyset$,

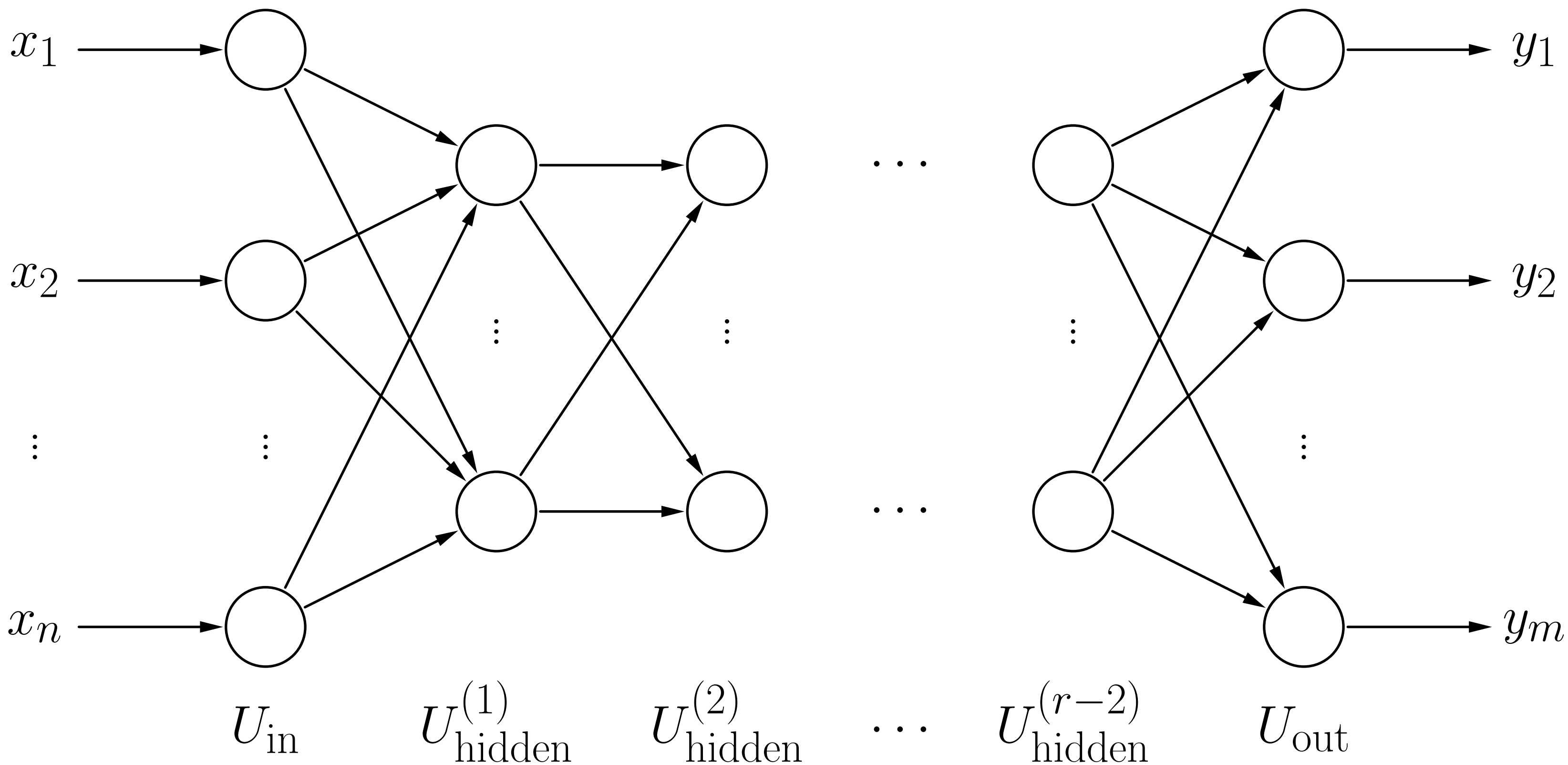
(iii) $C \subseteq \left(U_{\text{in}} \times U_{\text{hidden}}^{(1)}\right) \cup \left(\bigcup_{i=1}^{r-3} U_{\text{hidden}}^{(i)} \times U_{\text{hidden}}^{(i+1)}\right) \cup \left(U_{\text{hidden}}^{(r-2)} \times U_{\text{out}}\right)$

oder, falls keine versteckten Neuronen vorhanden ($r = 2, U_{\text{hidden}} = \emptyset$),

$C \subseteq U_{\text{in}} \times U_{\text{out}}$.

Vorwärtsgerichtetes Netz mit streng geschichteter Struktur.

Allgemeine Struktur eines mehrschichtigen Perzeptrons



Mehrschichtige Perzeptren

Die Netzwerkeingabe jedes versteckten Neurons und jedes Ausgabeneurons ist die **gewichtete Summe** seiner Eingaben, d.h.

$$\forall u \in U_{\text{hidden}} \cup U_{\text{out}} : \qquad f_{\text{net}}^{(u)}(\vec{w}_u, \vec{\text{in}}_u) = \vec{w}_u \vec{\text{in}}_u = \sum_{v \in \text{pred}\,(u)} w_{uv}\, \text{out}_v\,.$$

Die Aktivierungsfunktion jedes versteckten Neurons ist eine sogenannte **Sigmoide**, d.h. eine monoton steigende Funktion

$$f : \mathbb{R} \to [0,1] \quad \text{with} \quad \lim_{x \to -\infty} f(x) = 0 \quad \text{and} \quad \lim_{x \to \infty} f(x) = 1.$$

Die Aktivierungsfunktion jedes Ausgabeneurons ist ebenfalls entweder eine Sigmoide oder eine **lineare Funktion**, d.h.

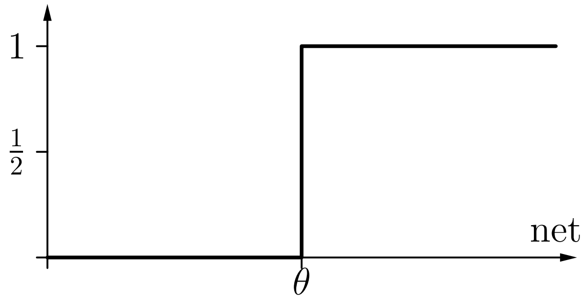
$$f_{\text{act}}(\text{net}, \theta) = \alpha\, \text{net} - \theta.$$

Nur die Stufenfunktion ist eine neurobiologisch plausible Aktivierungsfunktion.

Sigmoide als Aktivierungsfunktionen

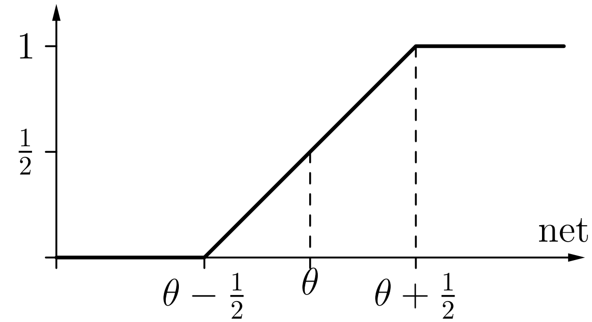
Stufenfunktion:

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



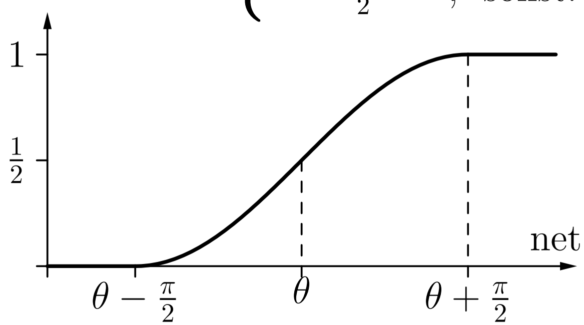
Semilineare Funktion:

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



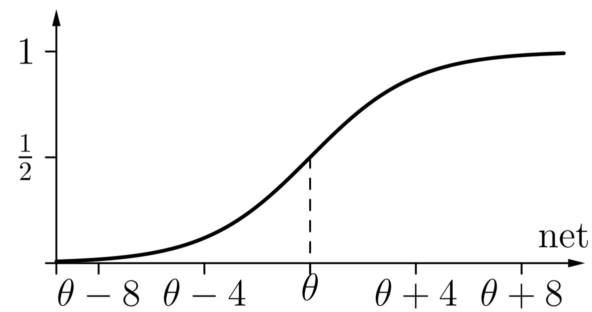
Sinus bis Sättigung:

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



Logistische Funktion:

$$f_{\text{act}}(\text{net}, \theta) = \frac{1}{1 + e^{-(\text{net} - \theta)}}$$



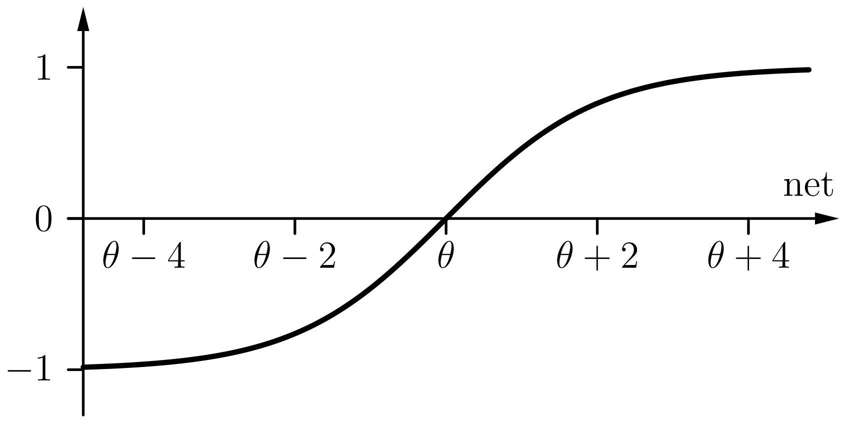
Sigmoide als Aktivierungsfunktionen

Alle Sigmoiden auf der vorherigen Folie sind **unipolar**,
d.h. sie reichen von 0 bis 1.

Manchmal werden **bipolare** sigmoidale Funktionen verwendet,
wie beispielsweise der *tangens hyperbolicus*.

tangens hyperbolicus:

$$f_{\text{act}}(\text{net}, \theta) = \tanh(\text{net} - \theta) = \frac{2}{1 + e^{-2(\text{net} - \theta)}} - 1$$



Mehrschichtige Perzeptren: Gewichtsmatrizen

Seien $U_1 = \{v_1, \ldots, v_m\}$ and $U_2 = \{u_1, \ldots, u_n\}$ die Neuronen zwei aufeinanderfolgender Schichten eines MLP.

Ihre Verbindungsgewichte werden dargestellt als eine $n \times m$-Matrix

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} w_{u_1 v_1} & w_{u_1 v_2} & \ldots & w_{u_1 v_m} \\ w_{u_2 v_1} & w_{u_2 v_2} & \ldots & w_{u_2 v_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ w_{u_n v_1} & w_{u_n v_2} & \ldots & w_{u_n v_m} \end{pmatrix},$$

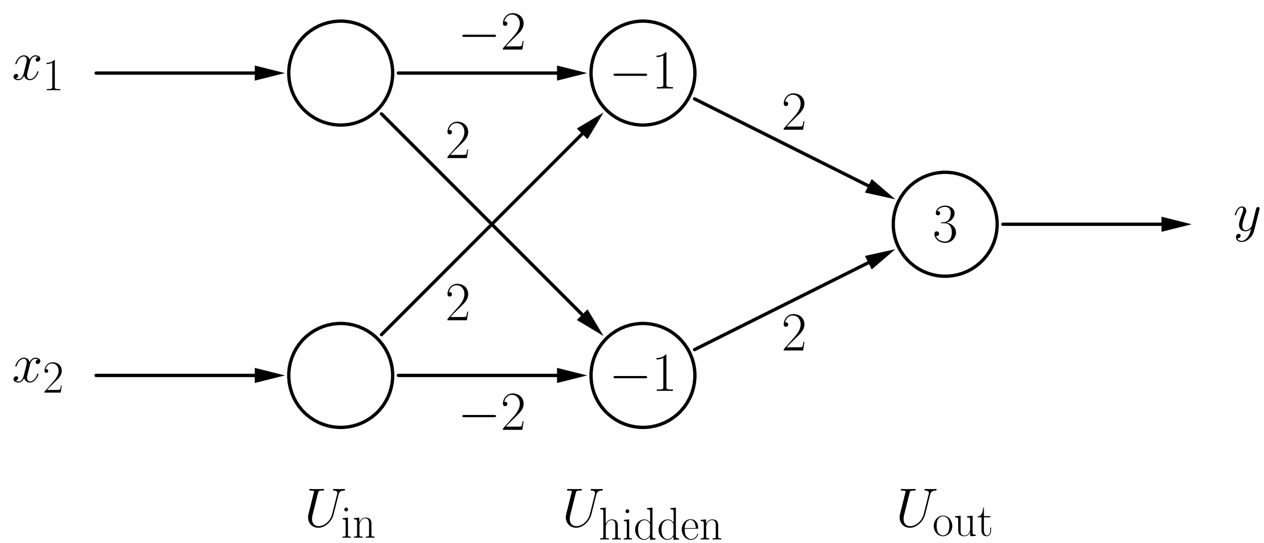
wobei $w_{u_i v_j} = 0$, falls es keine Verbindung von Neuron v_j zu Neuron u_i gibt.

Vorteil: Die Berechnung der Netzwerkeingabe kann geschrieben werden als

$$\vec{\mathrm{net}}_{U_2} = \mathbf{W} \cdot \vec{\mathrm{in}}_{U_2} = \mathbf{W} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_1}$$

wobei $\vec{\mathrm{net}}_{U_2} = (\mathrm{net}_{u_1}, \ldots, \mathrm{net}_{u_n})^\top$ und $\vec{\mathrm{in}}_{U_2} = \vec{\mathrm{out}}_{U_1} = (\mathrm{out}_{v_1}, \ldots, \mathrm{out}_{v_m})^\top$.

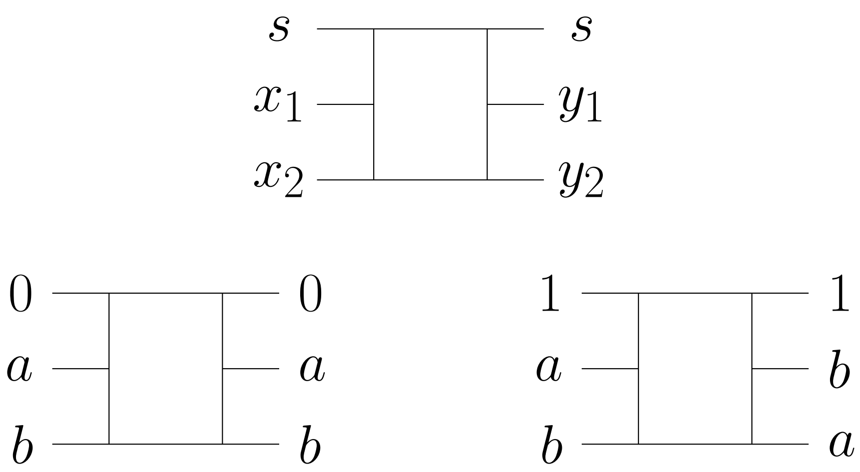
Lösen des Biimplikationsproblems mit einem MLP.



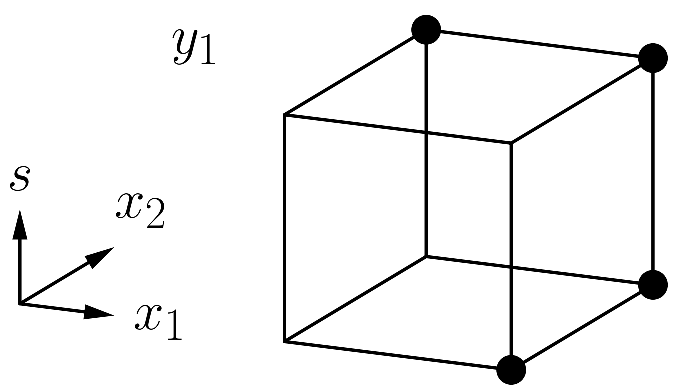
Man beachte die zusätzlichen Eingabeneuronen im Vergleich zur Lösung mit Schwellenwertelementen.

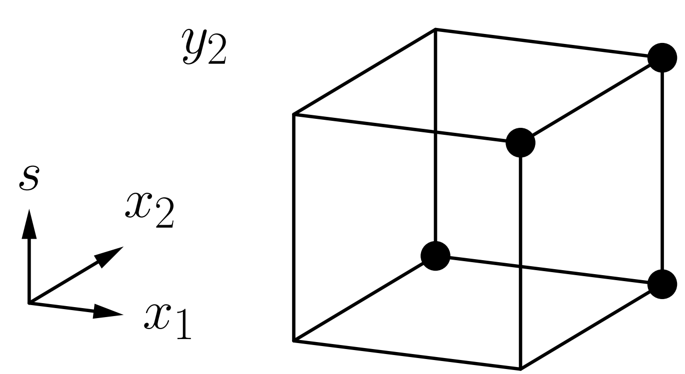
$$\mathbf{W}_1 = \begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{W}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 2 \end{pmatrix}$$

Mehrschichtige Perzeptren: Fredkin-Gatter

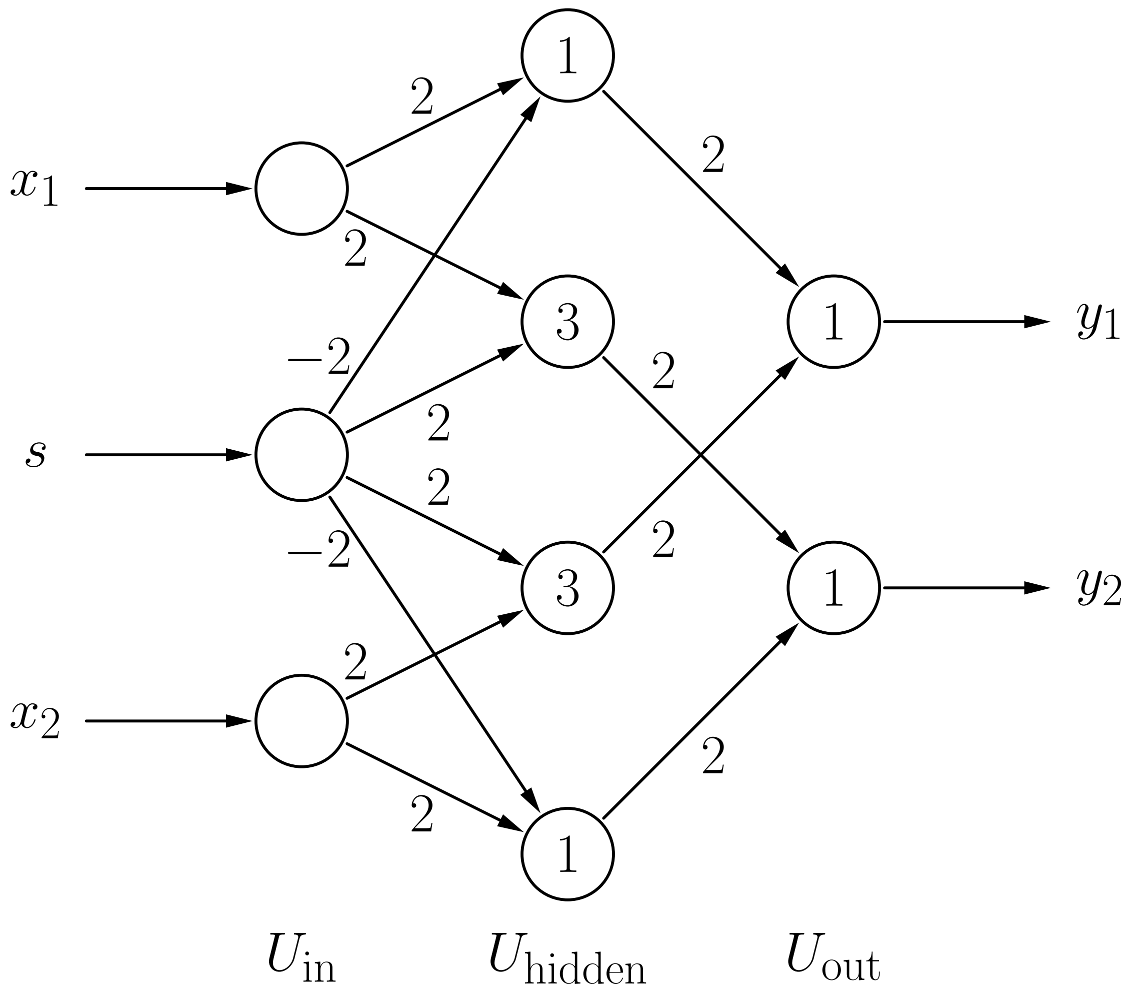


s	0	0	0	0	1	1	1	1
x_1	0	0	1	1	0	0	1	1
x_2	0	1	0	1	0	1	0	1
y_1	0	0	1	1	0	1	0	1
y_2	0	1	0	1	0	0	1	1





Mehrschichtige Perzeptren: Fredkin-Gatter



$$\mathbf{W}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{W}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Warum nicht-lineare Aktivierungsfunktionen?

In Matrixschreibweise ergibt sich für zwei aufeinanderfolgende Schichten U_1 und U_2

$$\vec{\mathrm{net}}_{U_2} = \mathbf{W} \cdot \vec{\mathrm{in}}_{U_2} = \mathbf{W} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_1}.$$

Wenn die Aktivierungsfunktionen linear sind, d.h.

$$f_{\mathrm{act}}(\mathrm{net}, \theta) = \alpha\, \mathrm{net} - \theta.$$

können die Aktivierungen der Neuronen in der Schicht U_2 wie folgt berechnet werden:

$$\vec{\mathrm{act}}_{U_2} = \mathbf{D}_{\mathrm{act}} \cdot \vec{\mathrm{net}}_{U_2} - \vec{\theta},$$

wobei

$\vec{\mathrm{act}}_{U_2} = (\mathrm{act}_{u_1}, \ldots, \mathrm{act}_{u_n})^\top$ der Aktivierungsvektor ist,

$\mathbf{D}_{\mathrm{act}}$ eine $n \times n$ Diagonalmatrix aus den Faktorenα_{u_i}, $i = 1, \ldots, n$, ist und

$\vec{\theta} = (\theta_{u_1}, \ldots, \theta_{u_n})^\top$ der Bias-Vektor ist.

Warum nicht-lineare Aktivierungsfunktionen?

Falls die Ausgabefunktion auch linear ist, gilt analog

$$\vec{\mathrm{out}}_{U_2} = \mathbf{D}_{\mathrm{out}} \cdot \vec{\mathrm{act}}_{U_2} - \vec{\xi},$$

wobei

$\vec{\mathrm{out}}_{U_2} = (\mathrm{out}_{u_1}, \ldots, \mathrm{out}_{u_n})^\top$ der Ausgabevektor ist,

$\mathbf{D}_{\mathrm{out}}$ wiederum eine $n \times n$ Diagonalmatrix aus Faktoren ist und

$\vec{\xi} = (\xi_{u_1}, \ldots, \xi_{u_n})^\top$ ein Biasvektor ist.

In Kombination ergibt sich

$$\vec{\mathrm{out}}_{U_2} = \mathbf{D}_{\mathrm{out}} \cdot \left(\mathbf{D}_{\mathrm{act}} \cdot \left(\mathbf{W} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_1}\right) - \vec{\theta}\right) - \vec{\xi}$$

und daher

$$\vec{\mathrm{out}}_{U_2} = \mathbf{A}_{12} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_1} + \vec{b}_{12}$$

mit einer $n \times m$-Matrix $\mathbf{A}_{12}$ und einem n-dimensionalen Vektor $\vec{b}_{12}$.

Warum nicht-lineare Aktivierungsfunktionen?

Daher ergibt sich

$$\vec{\mathrm{out}}_{U_2} = \mathbf{A}_{12} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_1} + \vec{b}_{12}$$

und

$$\vec{\mathrm{out}}_{U_3} = \mathbf{A}_{23} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_2} + \vec{b}_{23}$$

für die Berechnungen zwei aufeinanderfolgender Schichten U_2 und U_3.

Diese beiden Berechnungen können kombiniert werden zu

$$\vec{\mathrm{out}}_{U_3} = \mathbf{A}_{13} \cdot \vec{\mathrm{out}}_{U_1} + \vec{b}_{13},$$

wobei $\mathbf{A}_{13} = \mathbf{A}_{23} \cdot \mathbf{A}_{12}$ und $\vec{b}_{13} = \mathbf{A}_{23} \cdot \vec{b}_{12} + \vec{b}_{23}$.

Ergebnis: Mit linearen Aktivierungs- und Ausgabefunktionen können beliebige mehrschichtige Perzeptren auf zweischichtige Perzeptren reduziert werden.

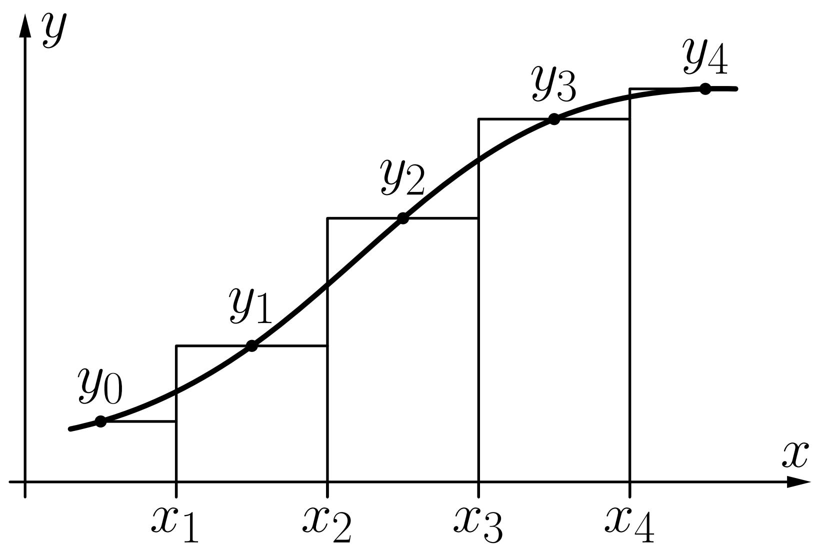
bisher: Erlernen von Boole'schen Funktionen $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$

nun: Erlernen von reellwertigen Funktionen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

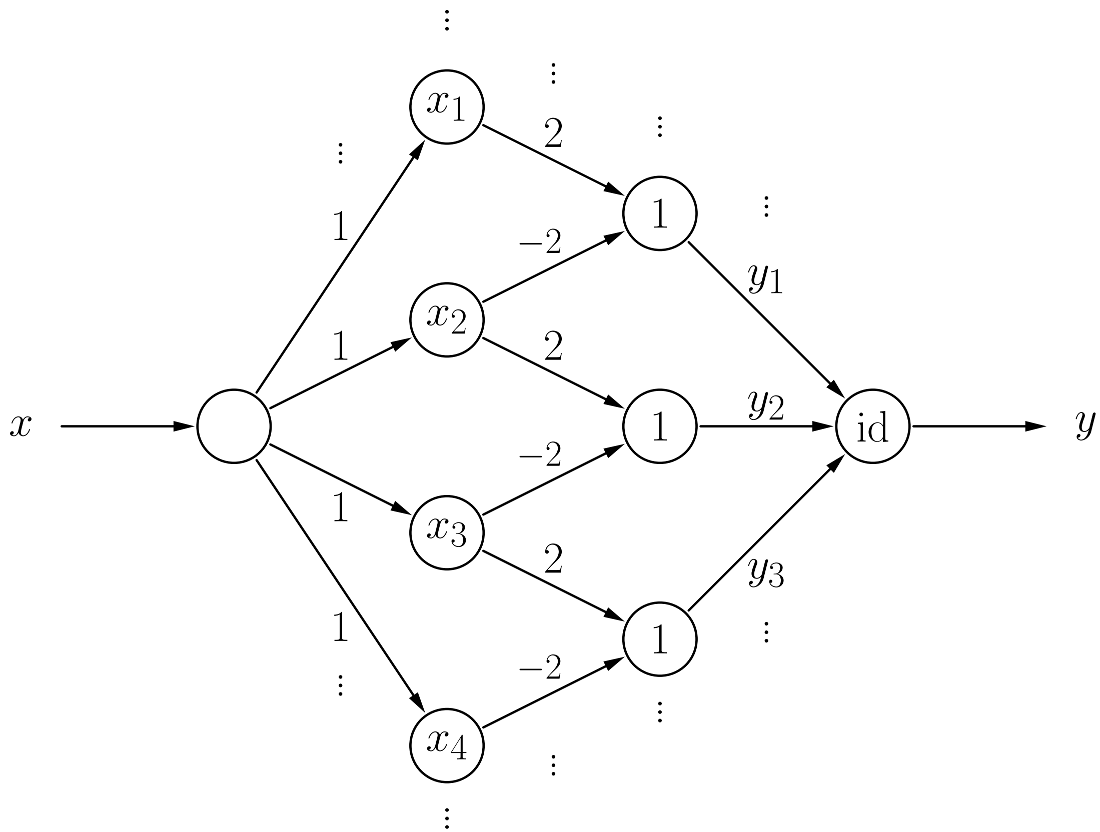
Idee der Funktionsapproximation

Nähere eine gegebene Funktion durch eine Stufenfunktion an.

Konstruiere ein neuronales Netz, das die Stufenfunktion berechnet.



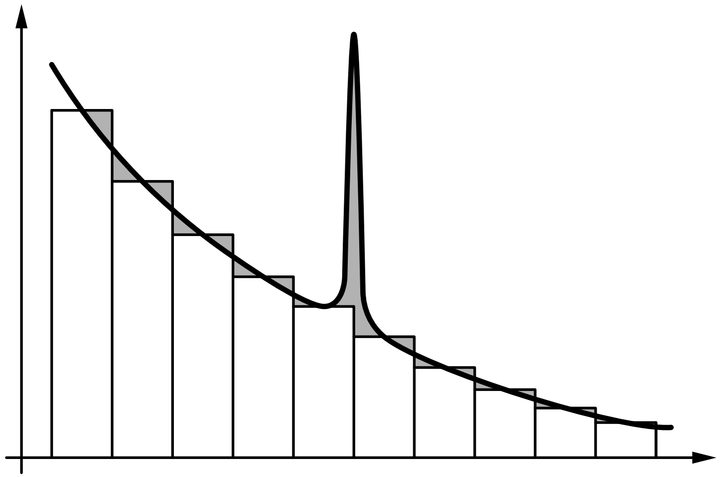
Mehrschichtige Perzeptren: Funktionsapproximation



Ein neuronales Netz, das die Treppenfunktion von der vorherigen Folie berechnet. Es ist immer nur eine Stufe passend zum Eingabewert aktiv und die Stufenhöhe wird ausgegeben. Das Ausgabeneuron ist kein Schwellenwertelement: Seine Ausgabe ist die Identität der Neuroneingaben.

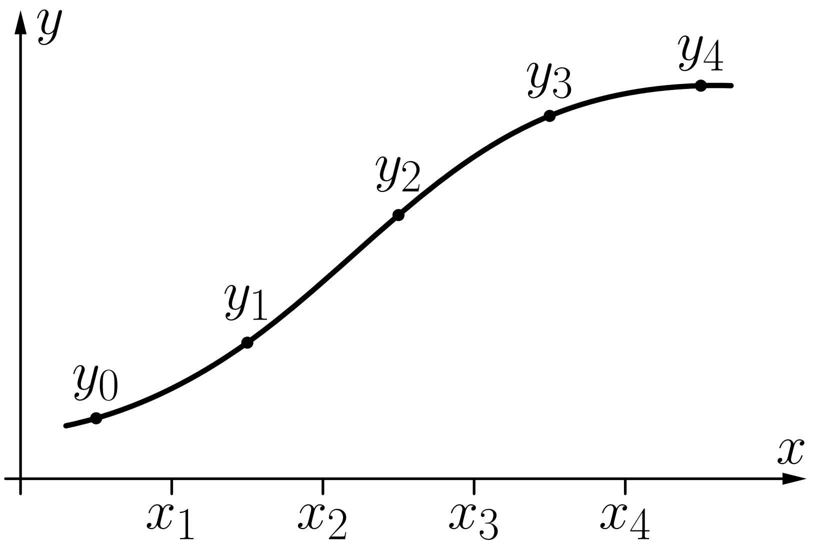
Theorem: Jede Riemann-integrierbare Funktion kann mit beliebiger Genauigkeit durch ein vierschichtes MLP berechnet werden.

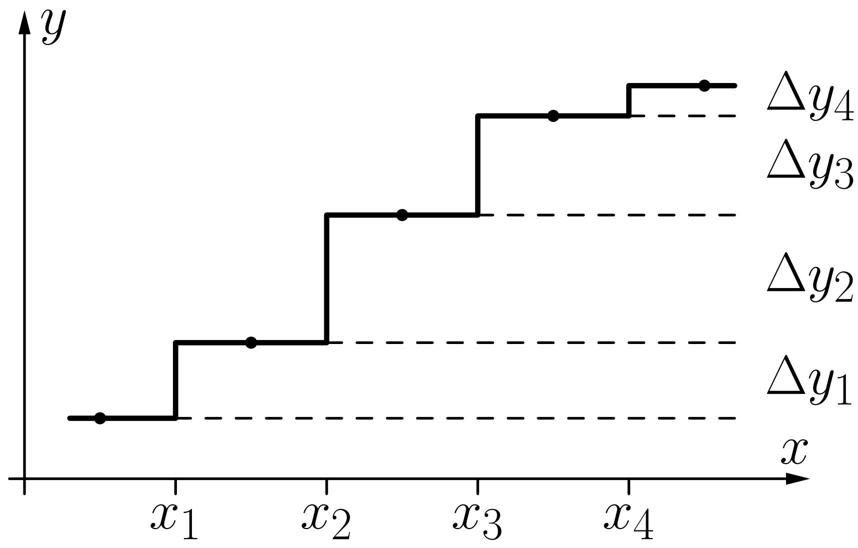
Aber: Fehler wird bestimmt als die **Fläche** zwischen Funktionen.

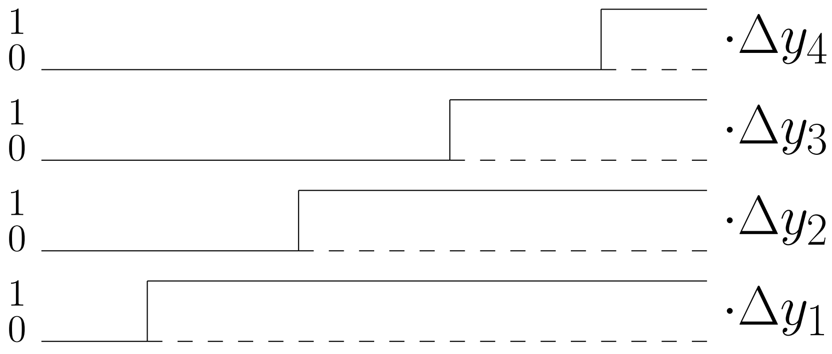


Weitere mathematische Untersuchungen zeigen, dass sogar gilt: Mit einem dreischichtigen Perzeptron kann jede stetige Funktion mit beliebiger Genauigkeit angenähert werden (Fehlerbestimmung: maximale Differenz der Funktionswerte).

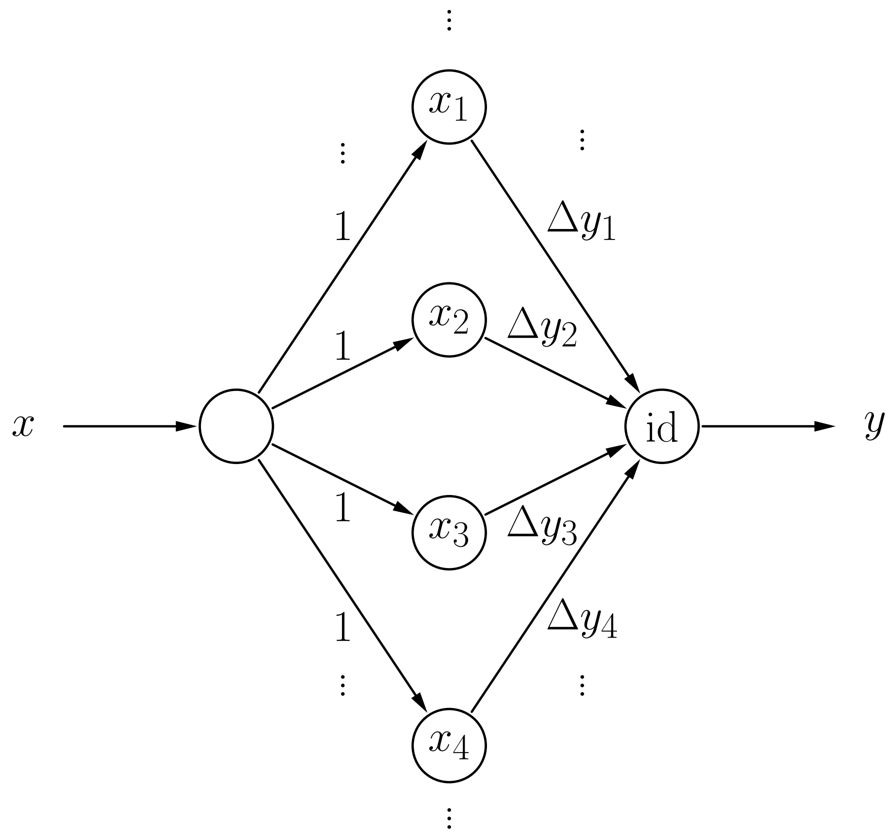
Mehrschichtige Perzeptren: Funktionsapproximation





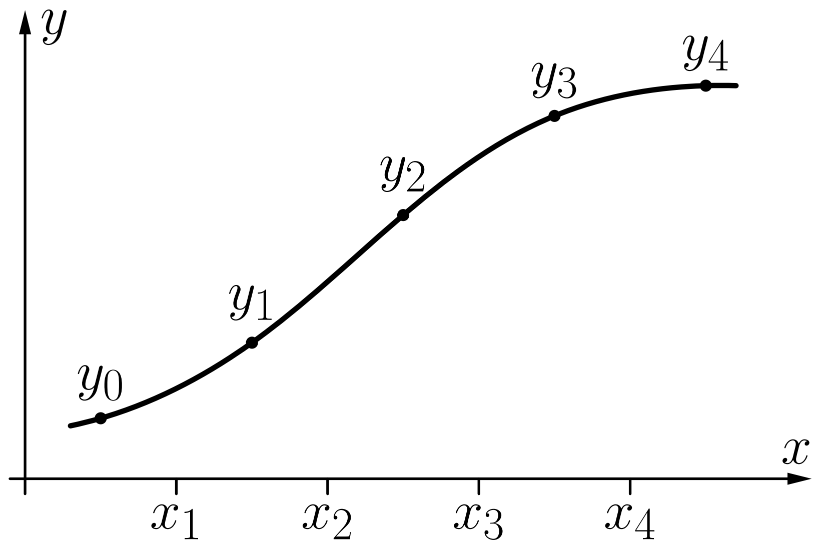


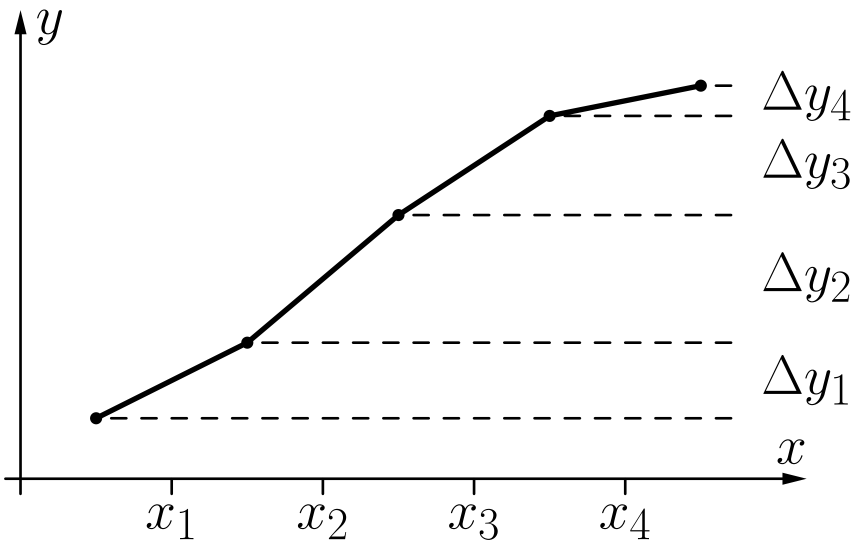
Mehrschichtige Perzeptren: Funktionsapproximation

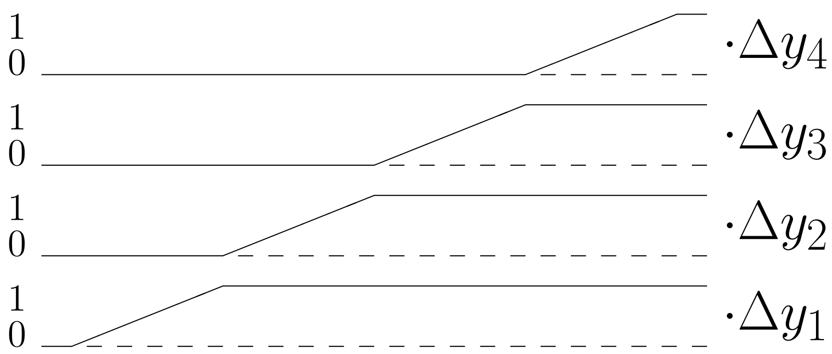


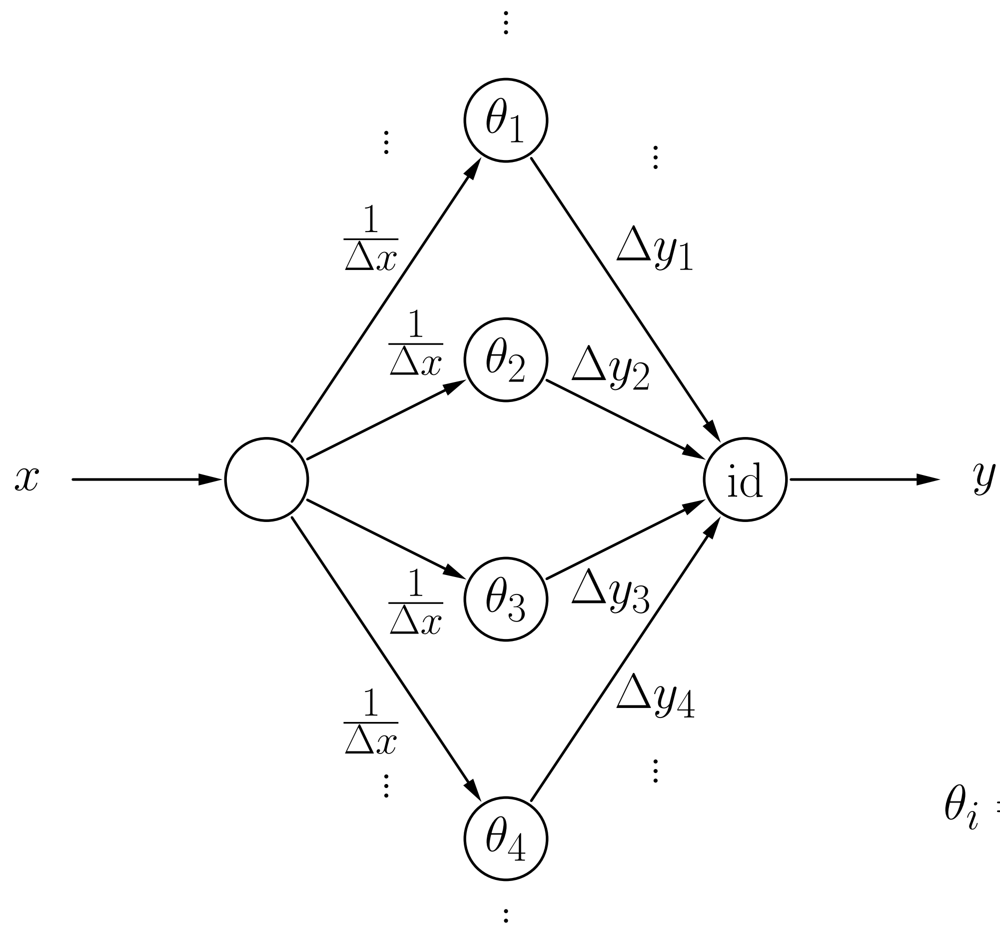
Ein neuronales Netz, das die Treppenfunktion von der vorherigen Folie als gewichtete Summe von Sprungfunktionen berechnet.

Mehrschichtige Perzeptren: Funktionsapproximation









$$\theta_i = \frac{x_i}{\Delta x}$$

Ein neuronales Netz, das die stückweise lineare Funktion von der vorherigen Folie durch eine gewichtete Summe von semi-linearen Funktionen berechnet, wobei $\Delta x = x_{i+1} - x_i$.

Mathematischer Hintergrund: Regression

Das Trainieren von NN ist stark verwandt mit Regression

Geg:
- Ein Datensatz $((x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n))$ aus n Daten-Tupeln und
- Hypothese über den funktionellen Zusammenhang, also z.B. $y = g(x) = a + bx$.

Idee: Minimiere die Summe der quadrierten Fehler, d.h.

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (g(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (a + bx_i - y_i)^2.$$

Notwendige Bedingungen für ein Minimum:

$$\frac{\partial F}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} 2(a + bx_i - y_i) = 0 \qquad \text{und}$$

$$\frac{\partial F}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} 2(a + bx_i - y_i)x_i = 0$$

Mathematischer Hintergrund: Lineare Regression

Resultat der notwendigen Bedingungen: System sogenannter **Normalgleichungen**, d.h.

$$na + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right) b = \sum_{i=1}^{n} y_i,$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \right) b = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$$

Zwei lineare Gleichungen für zwei Unbekannte a und b.

System kann mit Standardmethoden der linearen Algebra gelöst werden.

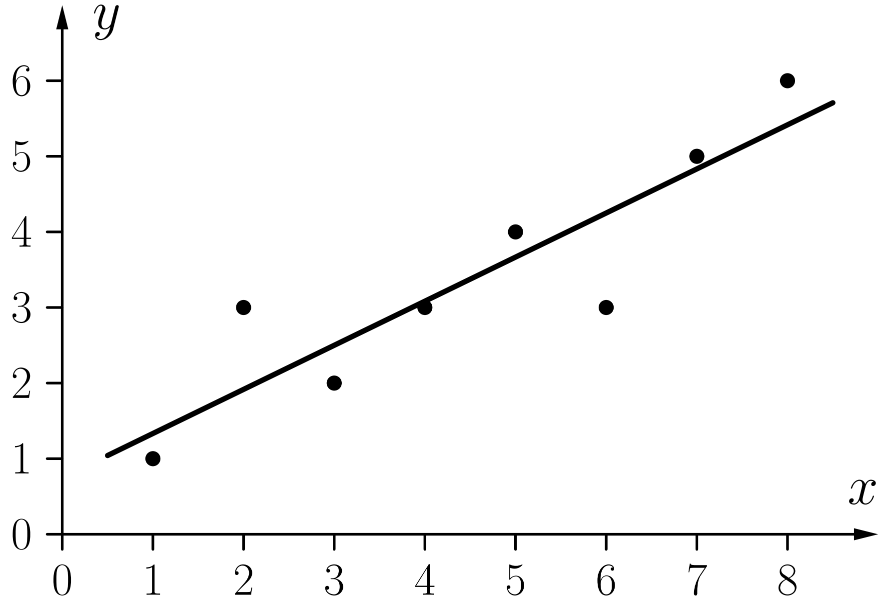
Die Lösung ist eindeutig, falls nicht alle x-Werte identisch sind.

Die errechnete Gerade nennt man **Regressionsgerade**.

Lineare Regression: Beispiel

x	1	2	3	4	5	6	7	8
y	1	3	2	3	4	3	5	6

$$y = \frac{3}{4} + \frac{7}{12}x.$$



Generalisierung auf Polynome

$$y = p(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m$$

Idee: Minimiere die Summe der quadrierten Fehler, d.h.

$$F(a_0, a_1, \ldots, a_m) \;=\; \sum_{i=1}^{n} (p(x_i) - y_i)^2 \;=\; \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i + \ldots + a_m x_i^m - y_i)^2$$

Notwendige Bedingungen für ein Minimum: Alle partiellen Ableitungen verschwinden, d.h.

$$\frac{\partial F}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial a_1} = 0, \quad \ldots \quad , \frac{\partial F}{\partial a_m} = 0.$$

System von Normalgleichungen für Polynome

$$
\begin{aligned}
na_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i\right) a_1 + \ldots + \left(\sum_{i=1}^n x_i^m\right) a_m &= \sum_{i=1}^n y_i \\
\left(\sum_{i=1}^n x_i\right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right) a_1 + \ldots + \left(\sum_{i=1}^n x_i^{m+1}\right) a_m &= \sum_{i=1}^n x_i y_i \\
&\vdots \\
\left(\sum_{i=1}^n x_i^m\right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^{m+1}\right) a_1 + \ldots + \left(\sum_{i=1}^n x_i^{2m}\right) a_m &= \sum_{i=1}^n x_i^m y_i,
\end{aligned}
$$

$m+1$ lineare Gleichungen für $m+1$ Unbekannte $a_0, \ldots, a_m$.

System kann mit Standardmethoden der linearen Algebra gelöst werden.

Die Lösung ist eindeutig, falls nicht alle x-Werte identisch sind.

Generalisierung auf mehr als ein Argument

$$z = f(x, y) = a + bx + cy$$

Idee: Minimiere die Summe der quadrierten Fehler, d.h.

$$F(a, b, c) \;=\; \sum_{i=1}^{n} (f(x_i, y_i) - z_i)^2 \;=\; \sum_{i=1}^{n} (a + bx_i + cy_i - z_i)^2$$

Notwendige Bedingungen für ein Minimum: Alle partiellen Ableitungen verschwinden, d.h.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial a} &= \sum_{i=1}^{n} 2(a + bx_i + cy_i - z_i) &&= 0, \\
\frac{\partial F}{\partial b} &= \sum_{i=1}^{n} 2(a + bx_i + cy_i - z_i)x_i &&= 0, \\
\frac{\partial F}{\partial c} &= \sum_{i=1}^{n} 2(a + bx_i + cy_i - z_i)y_i &&= 0.
\end{aligned}$$

System von Normalgleichungen für mehrere Argumente

$$\begin{aligned}
na + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b + \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right) c &= \sum_{i=1}^{n} z_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) b + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i\right) c &= \sum_{i=1}^{n} z_i x_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i y_i\right) b + \left(\sum_{i=1}^{n} y_i^2\right) c &= \sum_{i=1}^{n} z_i y_i
\end{aligned}$$

3 lineare Gleichungen für 3 Unbekannte a, b und c.

System kann mit Standardmethoden der linearen Algebra gelöst werden.

Die Lösung ist eindeutig, falls nicht alle x-Werte oder alle y-Werte identisch sind.

Multilineare Regression

Allgemeiner multilinearer Fall:

$$y = f(x_1, \ldots, x_m) = a_0 + \sum_{k=1}^{m} a_k x_k$$

Idee: Minimiere die Summe der quadrierten Fehler, d.h.

$$F(\vec{a}) = (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})^\top (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}),$$

wobei

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \ldots & x_{m1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & \ldots & x_{mn} \end{pmatrix}, \qquad \vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \qquad \text{und} \qquad \vec{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}$$

Notwendige Bedingungen für ein Minimum:

$$\nabla_{\vec{a}} F(\vec{a}) = \nabla_{\vec{a}} (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})^\top (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) = \vec{0}$$

Multilineare Regression

$\nabla_{\vec{a}}\ F(\vec{a})$ kann einfach berechnet werden mit der Überlegung, dass der Nabla-Operator

$$\nabla_{\vec{a}} = \left(\frac{\partial}{\partial a_0}, \ldots, \frac{\partial}{\partial a_m}\right)$$

sich formell wie ein Vektor verhält, der mit der Summe der quadrierten Fehler "multipliziert" wird.

Alternativ kann man die Differentiation komponentenweise beschreiben.

Mit der vorherigen Methode bekommen wir für die Ableitung:

$$\begin{aligned}
&\nabla_{\vec{a}}\,(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})^\top(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) \\
&\quad= \left(\nabla_{\vec{a}}\,(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})\right)^\top(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) + \left((\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})^\top\left(\nabla_{\vec{a}}\,(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})\right)\right)^\top \\
&\quad= \left(\nabla_{\vec{a}}\,(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})\right)^\top(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) + \left(\nabla_{\vec{a}}\,(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})\right)^\top(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) \\
&\quad= 2\mathbf{X}^\top(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) \\
&\quad= 2\mathbf{X}^\top\mathbf{X}\vec{a} - 2\mathbf{X}^\top\vec{y} \quad = \quad \vec{0}
\end{aligned}$$

Multilineare Regression

Einige Regeln für Vektor-/Matrixberechnung und Ableitungen:

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{A}+\mathbf{B})^\top &= \mathbf{A}^\top + \mathbf{B}^\top \\
(\mathbf{A}\mathbf{B})^\top &= \mathbf{B}^\top \mathbf{A}^\top \\
\nabla_{\vec{z}}\, \mathbf{A}\vec{z} &= \mathbf{A}
\end{aligned}
\qquad
\begin{aligned}
\nabla_{\vec{z}}\, f(\vec{z})\mathbf{A} &= (\nabla_{\vec{z}}\, f(\vec{z}))\mathbf{A} \\
\nabla_{\vec{z}}\, (f(\vec{z}))^\top &= (\nabla_{\vec{z}}\, f(\vec{z}))^\top \\
\nabla_{\vec{z}}\, f(\vec{z})g(\vec{z}) &= (\nabla_{\vec{z}}\, f(\vec{z}))g(\vec{z}) + f(\vec{z})(\nabla_{\vec{z}}\, g(\vec{z}))^\top
\end{aligned}
$$

Ableitung der zu minimierenden Funktion:

$$
\begin{aligned}
\nabla_{\vec{a}} F(\vec{a}) &= \nabla_{\vec{a}} (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})^\top (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) \\
&= \nabla_{\vec{a}} ((\mathbf{X}\vec{a})^\top - \vec{y}^\top)(\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) \\
&= \nabla_{\vec{a}} ((\mathbf{X}\vec{a})^\top \mathbf{X}\vec{a} - (\mathbf{X}\vec{a})^\top \vec{y} - \vec{y}^\top \mathbf{X}\vec{a} + \vec{y}^\top \vec{y}) \\
&= \nabla_{\vec{a}}\, (\mathbf{X}\vec{a})^\top \mathbf{X}\vec{a} - \nabla_{\vec{a}}\, (\mathbf{X}\vec{a})^\top \vec{y} - \nabla_{\vec{a}}\, \vec{y}^\top \mathbf{X}\vec{a} + \nabla_{\vec{a}}\, \vec{y}^\top \vec{y} \\
&= (\nabla_{\vec{a}}\, (\mathbf{X}\vec{a})^\top) \mathbf{X}\vec{a} + ((\mathbf{X}\vec{a})^\top (\nabla_{\vec{a}}\, \mathbf{X}\vec{a}))^\top - 2\nabla_{\vec{a}}\, (\mathbf{X}\vec{a})^\top \vec{y} \\
&= ((\nabla_{\vec{a}}\, \mathbf{X}\vec{a})^\top) \mathbf{X}\vec{a} + (\nabla_{\vec{a}}\, \mathbf{X}\vec{a})^\top \mathbf{X}\vec{a} - 2(\nabla_{\vec{a}}\, (\mathbf{X}\vec{a})^\top) \vec{y} \\
&= 2(\nabla_{\vec{a}}\, \mathbf{X}\vec{a})^\top \mathbf{X}\vec{a} - 2(\nabla_{\vec{a}}\, \mathbf{X}\vec{a})^\top \vec{y} \\
&= 2\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\vec{a} - 2\mathbf{X}^\top \vec{y}
\end{aligned}
$$

Multilineare Regression

Notwendige Bedingungen für ein Minimum also:

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{a}} F(\vec{a}) &= \nabla_{\vec{a}} (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y})^\top (\mathbf{X}\vec{a} - \vec{y}) \\ &= 2\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\vec{a} - 2\mathbf{X}^\top \vec{y} \overset{!}{=} \vec{0}\end{aligned}$$

Als Ergebnis bekommen wir das System von **Normalgleichungen**:

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\vec{a} = \mathbf{X}^\top \vec{y}$$

Dieses System hat eine Lösung, falls $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ nicht singulär ist. Dann ergibt sich

$$\vec{a} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \vec{y}.$$

$(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$ wird die (Moore-Penrose-)**Pseudoinverse** der Matrix $\mathbf{X}$ genannt.

Mit der Matrix-Vektor-Repräsentation des Regressionsproblems ist die Erweiterung auf **Multipolynomiale Regression** naheliegend:
Addiere die gewünschten Produkte zur Matrix $\mathbf{X}$.

Generalisierung auf nicht-polynomiale Funktionen

$$\text{Einfaches Beispiel:} \qquad y = ax^b$$

Idee: Finde Transformation zum linearen/polynomiellen Fall.

$$\text{Transformation z.B.:} \qquad \ln y = \ln a + b \cdot \ln x.$$

Spezialfall: **logistische Funktion**

$$y = \frac{Y}{1 + e^{a+bx}} \qquad \Leftrightarrow \qquad \frac{1}{y} = \frac{1 + e^{a+bx}}{Y} \qquad \Leftrightarrow \qquad \frac{Y - y}{y} = e^{a+bx}.$$

Ergebnis: Wende sogenannte **Logit-Transformation** an:

$$\ln\left(\frac{Y - y}{y}\right) = a + bx.$$

Logistische Regression: Beispiel

x	1	2	3	4	5
y	0.4	1.0	3.0	5.0	5.6

Transformiere die Daten mit

$$z = \ln\left(\frac{Y - y}{y}\right), \qquad Y = 6.$$

Die transformierten Datenpunkte sind

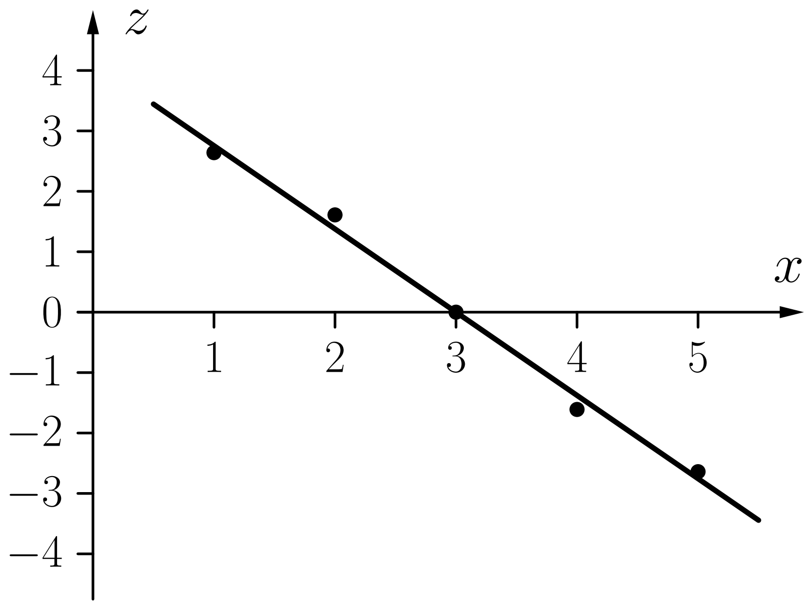
x	1	2	3	4	5
z	2.64	1.61	0.00	-1.61	-2.64

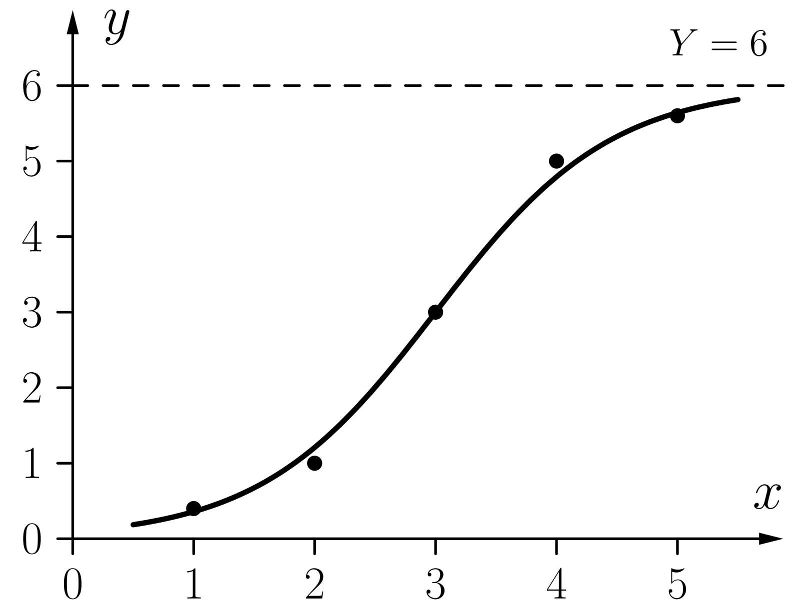
Die sich ergebende Regressionsgerade ist

$$z \approx -1.3775x + 4.133.$$

Somit lautet die Rücktransformation $y = \frac{6}{1+e^{-1.3775x+4.133}}$.

Logistische Regression: Beispiel





Die logistische Regressionsfunktion kann von einem einzelnen Neuron mit

Netzeingabefunktion $f_{\text{net}}(x) \equiv wx$ mit $w \approx -1.3775$,

Aktivierungsfunktion $f_{\text{act}}(\text{net}, \theta) \equiv (1 + e^{-(\text{net} - \theta)})^{-1}$ mit $\theta \approx 4.133$ und

Ausgabefunktion $f_{\text{out}}(\text{act}) \equiv 6\,\text{act}$

berechnet werden.