Multivariate Verfahren

MSc Klinische Psychologie und Psychotherapie

MSc Umweltpsychologie/Mensch-Technik-Interaktion

MSc Psychologie

Prof. Dr. Dirk Ostwald | Wintersemester 2025/2026

(13) Neuronale Netze

Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

Lernen

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

Lernen

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Anwendungsszenarien

Klinische Psychologie und Psychotherapie

Vorhersage der Treatmentresponse bei Psychotherapie basierend auf klinischen Tests

- Featurevariablen: $x_1^{(i)}$ BDI-II Wert, $x_2^{(i)}$ Glucorticoidplasmawert
- Targetvariable: $y^{(i)} = 0$ No Treatmentresponse, $y^{(i)} = 1$ Treatmentresponse
- $i = 1, ..., 60$ Patient:innendatenpunkte (vgl. Peacock et al. (2025))

Umweltpsychologie

Vorhersage der Effektivität einer umweltpsychologischen Intervention basierend auf Kampagnenmerkmalen

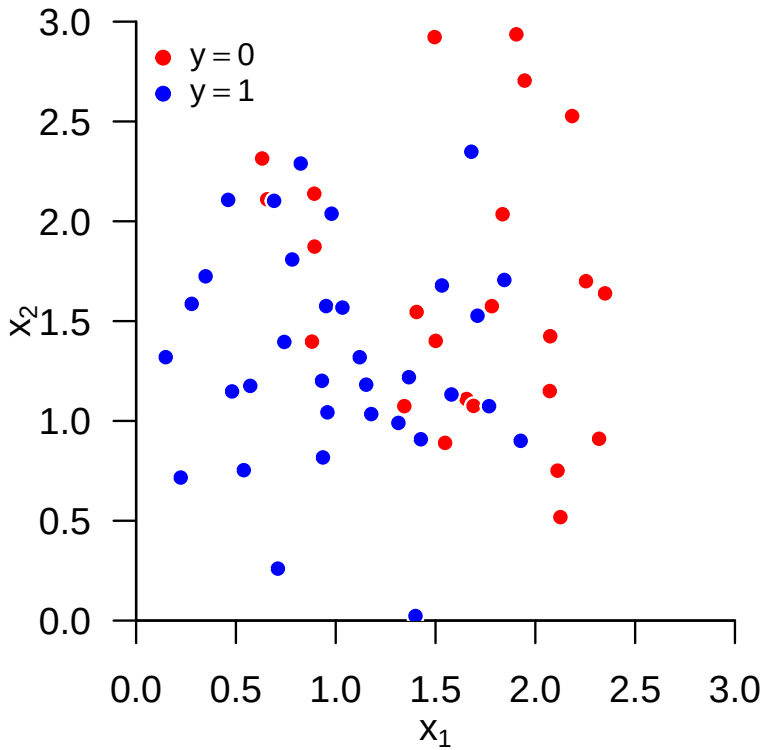
- Featurevariablen: $x_1^{(i)}$ Didaktische Qualität, $x_2^{(i)}$ Emotionalisierung
- Targetvariable: $y^{(i)} = 0$ Geringe Effektivität, $y^{(i)} = 1$ Hohe Effektivität
- $i = 1, ..., 60$ Kampagnendatenpunkte (vgl. Wein (2025))

Kognitive Neurowissenschaft

Vorhersage eines wahrgenommenen visuelle Bewegungsreizes bei binokulärer Rivalität

- Featurevariablen: $x_1^{(i)}$ BOLD Signal Voxel 1, $x_2^{(i)}$ BOLD Signal Voxel 2
- Targetvariable: $y^{(i)} = 0$ Bewegung nach links, $y^{(i)} = 1$ Bewegung nach rechts
- $i = 1, ..., 60$ Wahrnehmungsintervalle (vgl. Kamitani & Tong (2006))

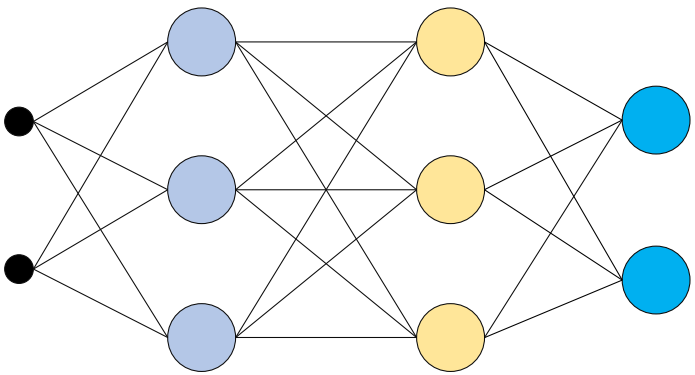
Normalisierte Featurevariablenwerte und Targetvariablenwerte

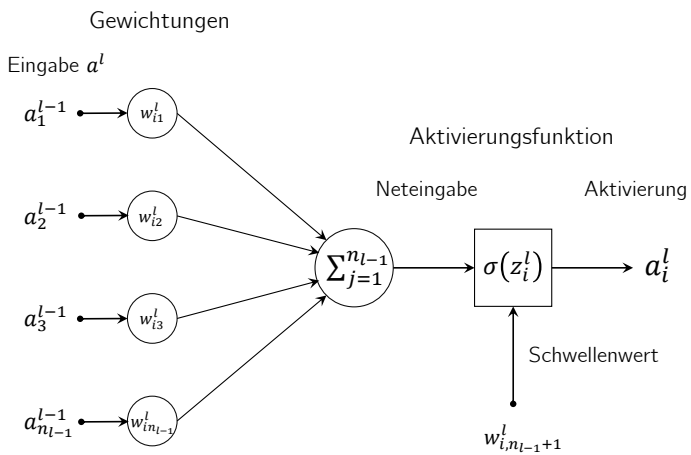


Neuronale Netze (Neural Networks)

- AKA *Künstliche Neuronale Netze (Artificial Neural Networks)*.
- Keine Modelle für biologische neuronale Netze.
- Mathematische Modelle zur Approximation multivariater vektorwertiger Funktionen.

Typische Visualisierungen





Zur Geschichte neuronaler Netze

Anfänge

- McCulloch & Pitts (1943) | Analyse der mit biologischen Neuronen möglichen logischen Operationen.
- Rosenblatt (1958) | Implementation eines Mustererkennungsalgorithmus in einem frühen Computer.
- Minsky & Papert (1969) | Mathematische Analyse der logischen Stärken und Schwächen eines Perzeptrons.

$\Rightarrow$ Erster Winter Neuronaler Netze

Erste Renaissance

- Hopfield (1982) | Mehrschichtige neuronale Netze beleben das Interesse an neuronalen Netzen erneut.
- Rumelhart et al. (1986) | Popularisierung des Backpropagation Algorithmus.
- Hauptinteresse in den 1990er und 2000er Jahren im Machine Learning gilt aber SVMs und Bayesian Inference.

$\Rightarrow$ Zweiter Winter Neuronaler Netze

Zweite Renaissance

- 2009 - 2012 | Schmidhuber (2015) gewinnen Klassifikationswettbewerbe mit neuronalen Netzen.
- LeCun et al. (2015) | Neuronale Netze unter dem Label "Deep Learning" wieder sehr in Mode.
- 2015 - 2025 | Viele Menschen verwechseln die Begriffe "Künstliche Intelligenz" und "Neuronales Netz".
- Ostwald & Usée (2021) | Beweis der Validität des Backpropagation Algorithmus in Matrixform.

Neuronale Netze und Prädiktive Modellierung

Explanatorische Modellierung ⇔ Grundlagenforschung

Bestimmung von $\hat{\phi} \coloneqq \operatorname{argmin} \|\hat{\phi} - \phi\|$

Bestimmung von $\hat{f} \coloneqq \operatorname{argmin}_{f \in F} \|y - f(x)\|, F$ beliebig

Prädiktive Modellierung ⇔ Anwendungsorientierte Forschung

⇒ Neuronale Netze zur Approximation multivariater vektorwertiger Funktionen im prädiktiven Sinn.

Universelle Approximationstheoreme

Topologische Aussagen über die Dichten von Funktionenräumen (vgl. Friedman (1970)).

Neuronale Netze können eine Vielzahl von Funktionen sehr genau approximieren, wenn

- die Anzahl der Neurone gegen Unendlich geht (*arbitrary width case*) bzw.
- die Anzahl der Neuronenschichten gegen Unendlich geht (*arbitrary depth case*).

Arbitrary width case $\Rightarrow$ Cybenko (1989), Hornik (1991), Leshno et al. (1993), Pinkus (1999)

Arbitrary depth case $\Rightarrow$ Lu et al. (2017), Hanin (2019), Kidger & Lyons (2020)

Universelle Approximationstheoreme sind Existenzaussagen, keine Konstruktionsaussagen.

$\Rightarrow$ Parameter neuronaler Netze müssen durch Gradientenverfahren gelernt werden.

Beispiel eines Universellen Approximationstheorems

Theorem (Universelles Approximationstheorem nach Kidger (2020))

$\mathcal{X}$ sei eine kompakte Teilmenge von $\mathbb{R}^m$, $\sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sei eine nicht-affine stetige und zumindest in einem Punkt stetig differenzierbare Funktion mit einer von Null verschiedenen Ableitung in diesem Punkt. F sei die Menge der neuronalen Netze f mit Inputdimension m, Outputdimension n_k und einer beliebigen Anzahl verdeckter Schichten mit jeweils $m + n_k + 2$ Neuronen und Aktivierungsfunktion σ, sowie der Identitätsabbildung als Aktivierungsfunktion der Outputschicht. Dann existiert zu jeder stetigen multivariaten vektorwertigen Funktion

$$g : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^{n}k, x \mapsto g(x) \tag{1}$$

ein neuronales Netz $f \in F$, so dass für ein beliebig kleines $\epsilon > 0$ gilt, dass

$$\sup_{x \in \mathcal{X}} \|f(x) - g(x)\| < \epsilon. \tag{2}$$

Bemerkungen

- Das Supremum $\sup$ kann intuitiv als Maximum verstanden werden.
- $\|\cdot\|$ bezeichnet eine *Metrik* (Abstandsfunktion) auf $\mathbb{R}^{n}k$.
- Für jedes $x \in \mathcal{X}$ wird der Abstand zwischen dem Wert von g und dem Wert von f also beliebig klein.
- Man sagt dazu auch, dass F im Raum der stetigen multivariaten vektorwertigen Funktionen *dicht* ist.
- Man kann das Theorem sicherlich noch präziser formulieren und sollte es beweisen.
- Wir verzichten hier darauf und führen das Theorem nur als “intuitives Beispiel” auf.

Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

Lernen

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Definition (Potentialfunktionen)

$W \in \mathbb{R}^{m\times(n+1)}$ sei eine Matrix, die wir *Wichtungsmatrix* nennen und $a \in \mathbb{R}^n$ sei ein Vektor, den wir *Aktivierungsvektor* nennen. Dann nennen wir eine Funktion der Form

$$\Phi : \mathbb{R}^{m\times(n+1)} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, (W, a) \mapsto \Phi(W, a) := W \cdot \begin{pmatrix} a \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

eine *bivariate Potentialfunktion*. Für ein festes $a \in \mathbb{R}^n$ nennen wir eine Funktion der Form

$$\Phi_a : \mathbb{R}^{m\times(n+1)} \to \mathbb{R}^m, W \mapsto \Phi_a(W) := \Phi(W, a) \tag{4}$$

eine *Wichtungsmatrix-variate Potentialfunktion*. Weiterhin nennen wir für eine feste Matrix $W \in \mathbb{R}^{m\times(n+1)}$ eine Funktion der Form

$$\Phi_W : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, a \mapsto \Phi_W(a) := \Phi(W, a) \tag{5}$$

eine *Potentialfunktion*. Schließlich nennen wir $z := \Phi_W(a)$ einen *Potentialvektor*.

Definition (Aktivierungsfunktion)

Wir nennen eine multivariate vektorwertige Funktion der Form

$$\Sigma : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, z \mapsto \Sigma(z) := (\sigma(z_1), ..., \sigma(z_n))^T, \tag{6}$$

mit

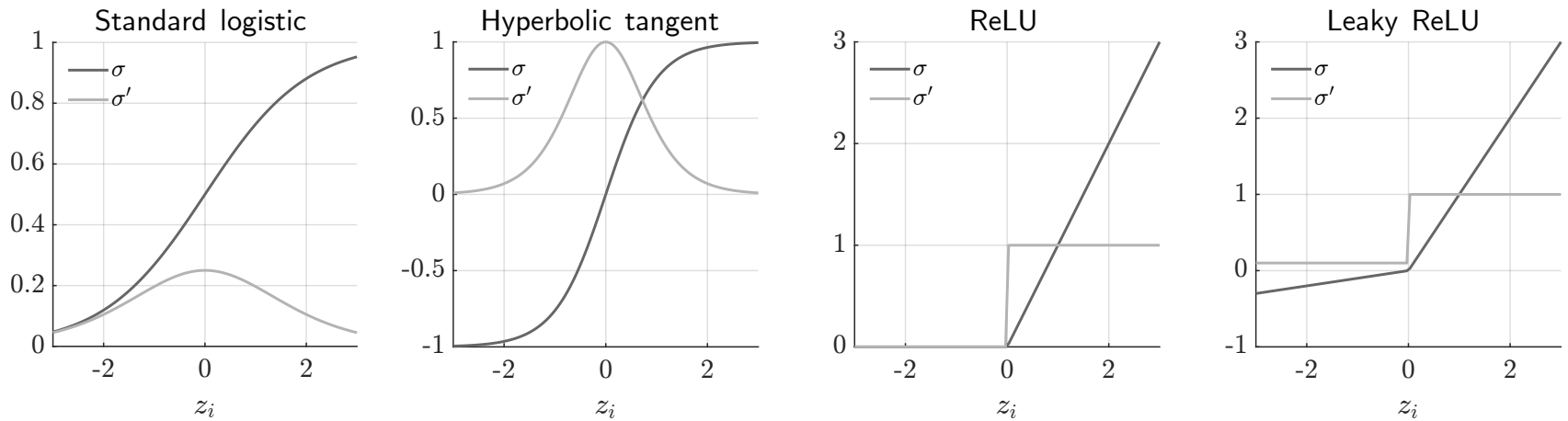
$$\sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, z_i \mapsto \sigma(z_i) =: a_i \text{ für alle } i = 1, ..., n, \tag{7}$$

eine *komponentenweise Aktivierungsfunktion* und die univariate reellwertige Funktion σ eine *Aktivierungsfunktion*.

Typische Aktivierungsfunktionen und ihre Ableitungen

Name	Definition	Ableitung
Standard logistic	$\sigma(z_i) := \frac{1}{1+\exp(-z_i)}$	$\sigma'(z_i) = \frac{\exp(z_i)}{(1+\exp(z_i))^2}$
Hyperbolic tangent	$\sigma(z_i) := \tanh(z_i)$	$\sigma'(z_i) = 1 - \tanh^2(z_i)$
ReLU	$\sigma(z_i) := \max(0, z_i)$	$\sigma'(z_i) = \begin{cases} 0, & z_i < 0 \\ \emptyset, & z_i = 0 \\ 1, & z_i > 0 \end{cases}$
Leaky ReLU	$\sigma(z_i) := \begin{cases} 0.1z_i, & z_i \leq 0 \\ z_i, & z_i > 0 \end{cases}$	$\sigma'(z_i) = \begin{cases} 0.01, & z_i \leq 0 \\ 1, & z_i > 0 \end{cases}$

Typische Aktivierungsfunktionen und ihre Ableitungen



Definition (k-schichtiges neuronales Netz)

Eine multivariate vektorwertige Funktion

$$f : \mathbb{R}^{n_0} \to \mathbb{R}^{n_k}, x \mapsto f(x) =: y \tag{8}$$

heißt *k-schichtiges neuronales Netz*, wenn f von der Form

$$f : \mathbb{R}^{n_0} \xrightarrow{\Phi^1_{W^1}} \mathbb{R}^{n_1} \xrightarrow{\Sigma^1} \mathbb{R}^{n_1} \xrightarrow{\Phi^2_{W^2}} \mathbb{R}^{n_2} \xrightarrow{\Sigma^2} \mathbb{R}^{n_2} \xrightarrow{\Phi^3_{W^3}} \\ \dots \xrightarrow{\Phi^{k-1}_{W^{k-1}}} \mathbb{R}^{n_{k-1}} \xrightarrow{\Sigma^{k-1}} \mathbb{R}^{n_{k-1}} \xrightarrow{\Phi^{k}_{W^{k}}} \mathbb{R}^{n_k} \xrightarrow{\Sigma^{k}} \mathbb{R}^{n_k}, \tag{9}$$

ist, wobei für $l = 1, \dots, k$

$$\Phi^l_{W^l} : \mathbb{R}^{n_{l-1}} \to \mathbb{R}^{n_l}, a^{l-1} \mapsto \Phi^l_{W^l}(a^{l-1}) := W^l \cdot \begin{pmatrix} a^{l-1} \\ 1 \end{pmatrix} =: z^l \tag{10}$$

Potentialfunktionen und

$$\Sigma^l : \mathbb{R}^{n_l} \to \mathbb{R}^{n_l}, z^l \to \Sigma^l(z^l) =: a^l \tag{11}$$

komponentenweise Aktvierungsfunktionen sind. Für ein $x \in \mathbb{R}^{n_0}$ nimmt ein k-schichtiges neuronales Netz den Wert

$$f(x) := \Sigma^k(\Phi^k_{W^k}(\Sigma^{k-1}(\Phi^{k-1}_{W^{k-1}}(\Sigma^{k-2}(\dots(\Sigma^1(\Phi^1_{W^1}(x))\dots)))))) \in \mathbb{R}^{n_k}. \tag{12}$$

an.

Funktionale Architektur

Bemerkungen

- Die Vektoren $a^l = (a_1^l, ..., a_{n_l}^l)^T \in \mathbb{R}^{n_l}, l = 0, 1, ..., k$ heißen *Aktivierungsvektoren der $l$ten Schicht*.
- Die Komponenten $a_i^l \in \mathbb{R}, i = 1, ..., n_l, l = 0, 1, ..., k$ heißen *Aktivierungen der $l$ten Schicht*.
- Die Schicht mit Index $l = 0$ und Dimension n_0 heißt *Inputschicht*.
- Der Aktivierungsvektor mit Index $l = 0$ heißt *Input* und wird mit $x := a^0$ bezeichnet.
- Die Schicht mit Index $l = k$ und Dimension n_k heißt *Outputschicht*
- Der Aktivierungsvektor mit Index $l = k$ heißt Output und wird mit $y := a^k$ bezeichnet.
- Die Schichten mit den Indizes $l = 1, ..., k-1$ heißen *verdeckte Schichten (hidden layers)*.
- $w_{ij}^l \in \mathbb{R}$ sei der ijte Eintrag der $l$ten Wichtungsmatrix, d.h.

$$W^l = (w_{ij}^l)_{1 \leq i \leq n_l, 1 \leq j \leq n_{l-1}+1} \in \mathbb{R}^{n_l \times (n_{l-1}+1)} \text{ für } l = 1, ..., k. \tag{13}$$

- w_{ij}^l heißt *(synaptisches) Gewicht* der Verbindung von Neuron j in Schicht $l-1$ und Neuron i in Schicht l.
- Für $i = 1, ..., n_l$ heißt $w_{i,n_{l-1}+1}$ *Bias* von Neuron i in Schicht l.
- Die letzte Spalte von W^l enkodiert also die Biases für die Neuronen in Schicht l.

Bemerkungen

Auf der Ebene einzelner Neurone ergibt sich damit folgende Nomenklatur:

- Das *Potential* von Neuron i in Schicht l für $i = 1, ..., n_l$ und $l = 1, ..., k$ ist gegeben durch

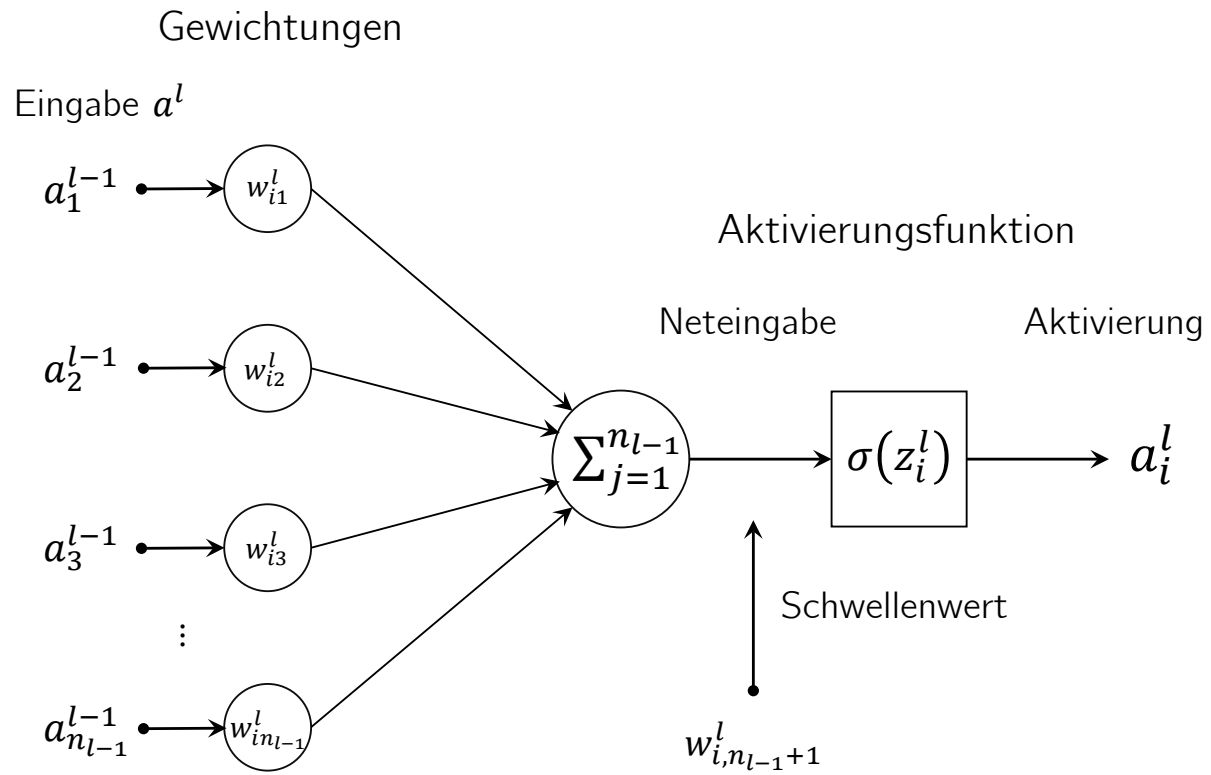
$$z_i^l = \sum_{j=1}^{n_{l-1}} w_{ij}^l a_j^{l-1} + w_{i,n_{l-1}+1} \in \mathbb{R}. \tag{14}$$

- Die *Aktivierung* von Neuron i in Schicht l für $i = 1, ..., n_l$ und $l = 1, ..., k$ ist gegeben durch

$$a_i^l = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n_{l-1}} w_{ij}^l a_j^{l-1} + w_{i,n_{l-1}+1}\right) \in \mathbb{R}, \tag{15}$$

- Die Aktivierung a_i^l kann als die mittlere Feuerungsrate des $i$ten Neuron in der $l$ten Schicht verstanden werden.

Funktionale Architektur



Beispiel

$k = 3, n_0 = 2, n_1 = 3,\ n_2 = 3, n_3 = 2$, Standard logistic function σ

$$\begin{pmatrix} a^0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^0 \\ a_2^0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} a^1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^1 \\ a_2^1 \\ a_3^1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} a^2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1^2 \\ a_2^2 \\ a_3^2 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad a^3 = \begin{pmatrix} a_1^3 \\ a_2^3 \end{pmatrix}$$

$$W^1 = \begin{pmatrix} w_{11}^1 & w_{12}^1 & w_{13}^1 \\ w_{21}^1 & w_{22}^1 & w_{23}^1 \\ w_{31}^1 & w_{32}^1 & w_{33}^1 \end{pmatrix} \quad W^2 = \begin{pmatrix} w_{11}^2 & w_{12}^2 & w_{13}^2 & w_{14}^2 \\ w_{21}^2 & w_{22}^2 & w_{23}^2 & w_{24}^2 \\ w_{31}^2 & w_{32}^2 & w_{33}^2 & w_{34}^2 \end{pmatrix} \quad W^3 = \begin{pmatrix} w_{11}^3 & w_{12}^3 & w_{13}^3 & w_{14}^3 \\ w_{21}^3 & w_{22}^3 & w_{23}^3 & w_{24}^3 \end{pmatrix}$$

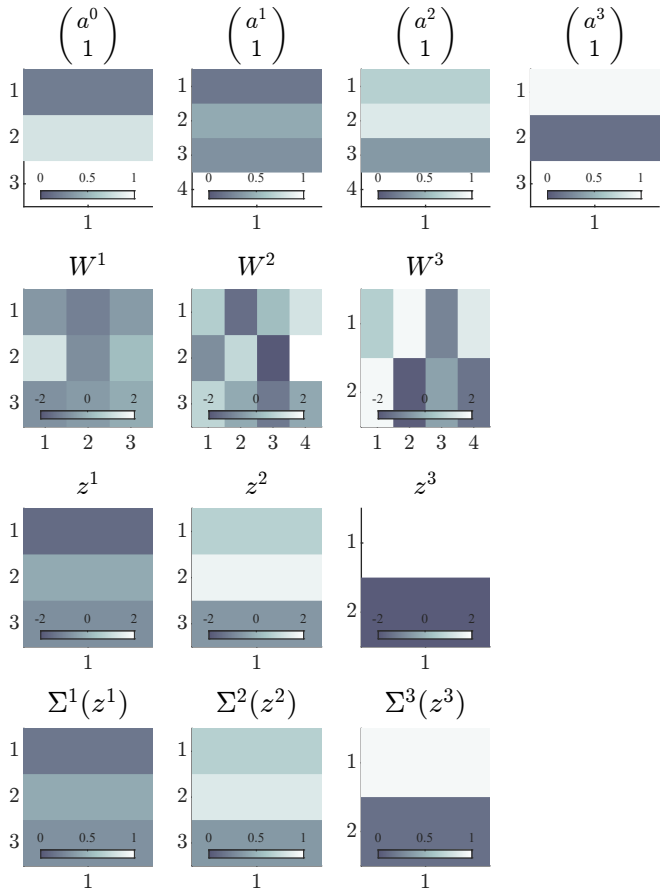
$$z^1 = \begin{pmatrix} z_1^1 \\ z_2^1 \\ z_3^1 \end{pmatrix} \qquad z^2 = \begin{pmatrix} z_1^2 \\ z_2^2 \\ z_3^2 \end{pmatrix} \qquad z^3 = \begin{pmatrix} z_1^3 \\ z_2^3 \end{pmatrix}$$

$$\Sigma^1(z^1) = \begin{pmatrix} \sigma(z_1^1) \\ \sigma(z_2^1) \\ \sigma(z_3^1) \end{pmatrix} \qquad \Sigma^2(z^2) = \begin{pmatrix} \sigma(z_1^2) \\ \sigma(z_2^2) \\ \sigma(z_3^2) \end{pmatrix} \qquad \Sigma^3(z^3) = \begin{pmatrix} \sigma(z_1^3) \\ \sigma(z_2^3) \end{pmatrix}$$

Es gilt $x = a^0$ und $a^3 = y$.

Beispiel

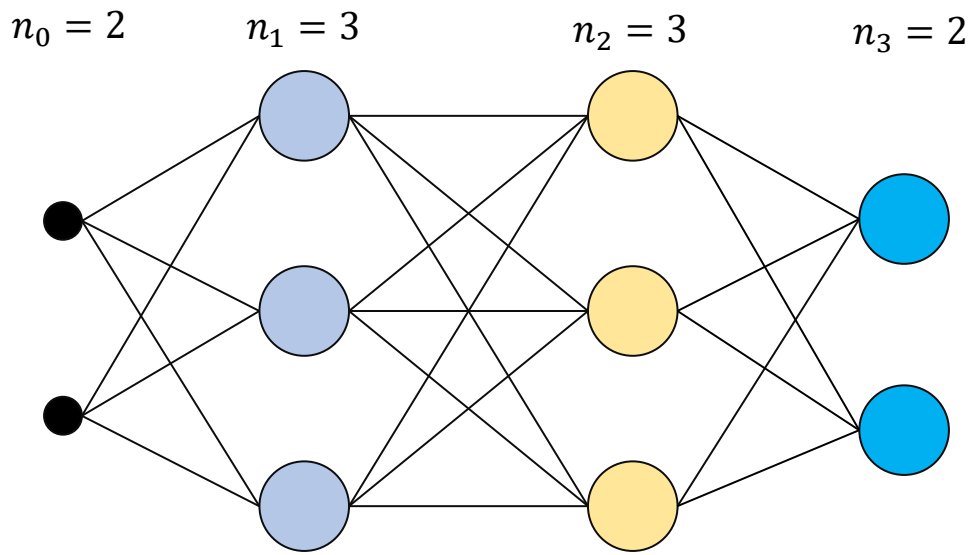
$k = 3, n_0 = 2, n_1 = 3,\ n_2 = 3, n_3 = 2$, Standard logistic function σ



Es gilt $x = a^0$ und $a^3 = y$.

Beispiel

$k = 3, n_0 = 2, n_1 = 3,\ n_2 = 3, n_3 = 2$



- Die Biases sind hier nicht visualisiert.

Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

Lernen

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Überblick

Anhand eines Trainingsdatensatzes werden die Parameter eines neuronalen Netzes wie folgt gelernt:

- Zunächst wird eine Funktion definiert, die misst, inwiefern sich bei einem gegebenen Inputvektor und Zielvektor der Output des neuronalen Netzes basierend auf einem Wert der Parameter unterscheidet. Diese Funktion nennt man eine *Kostenfunktion* oder *Zielfunktion*.
- Der summierte Wert der Kostenfunktion über alle Trainingsdatenpunkte wird dann durch Veränderung der Parameter minimiert, sodass Parameterwerte gefunden werden, für die die Abweichung zwischen Zielvektor und Output des neuronalen Netzes bei gegebenem Inputvektor möglichst gering ist.
- Zur Minimierung der Kostenfunktion wird üblicherweise ein Gradientenverfahren benutzt.
- Zur Berechnung der in diesem Verfahren auftretenden Zielfunktionsgradienten wird ein komputational effizienter Algorithmus eingesetzt, der die spezielle Struktur neuronaler Netze ausnutzt und unter dem Namen *Backpropagation Algorithmus* bekannt ist.

In der Folge wollen wir die Aspekte dieses Lernprozesses genauer betrachten.

Definition (Trainingsdatensatz)

Ein *Trainingsdatensatz* für ein neuronales Netz ist eine Menge

$$\mathcal{D} := \{(x^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^{n}, \tag{16}$$

wobei $x^{(i)} \in \mathbb{R}^{n_0}$ *Featurevektor* und $y^{(i)} \in \mathbb{R}^{n_k}$ *Zielvektor* genannt werden.

Bemerkungen

- Im Kontext der zuvor betrachteten multivariaten Verfahren gilt hier $n_0 = m$.
- Typische Zielvektorformate beim Training neuronaler Netze sind

  $y^{(i)} \in \{0, 1\}$ für binäre Klassifikationsprobleme,

  $y^{(i)} \in \{0, 1\}^{n_k}$ mit $\sum_{i=1}^{n_k} y_i = 1, n_k > 1$ für n_k-fache Klassifikationsprobleme,

  $y^{(i)} \in \mathbb{R}^{n_k}, n_k > 1$ für Regressionsprobleme.

Definition (Trainieren eine neuronalen Netzes)

f sei ein k-schichtiges neuronales Netz und $\mathcal{D}$ sei ein Trainingsdatensatz. Dann bezeichnet der Begriff des *Trainierens* den Prozess der Adaptation der Wichtungsmatrizen $W^1, ..., W^k$ des neuronalen Netzes mit dem Ziel, ein Abweichungskriterium zwischen der Ouptutaktivierung $f(x^{(i)})$ und dem assoziierten Wert des Zielvektors $y^{(i)}$ über alle Trainingsdatenpunkte $(x^{(i)}, y^{(i)}), i = 1, ..., n$ des Trainingsdatensatzes $\mathcal{D}$ hinweg zu minimieren.

Bemerkungen

- Wir erinnern an das Ziel $f := \text{argmin}_{\tilde{f} \in F} \|y - \tilde{f}(x)\|$ der prädiktiven Modellierung.
- Das erwähnte Abweichungskriterium wird in Form von *Kostenfunktionen* definiert.
- Wir benötigen noch den Begriff der *Wichtungsmatrix-variaten neuronalen Netzfunktion*.

Definition (Wichtungsmatrix-variate neuronale Netzfunktion)

f sei ein k-schichtiges neuronales Netz und x sei ein Input von f. Dann ist *Wichtungsmatrix-variate neuronale Netzfunktion f_x von f* definiert als die Funktion

$$\begin{aligned} f_x : \mathbb{R}^{n_1 \times (n_0+1)} \times \dots \times \mathbb{R}^{n_k \times (n_{k-1}+1)} &\to \mathbb{R}^{n_k}, (W^1, \dots, W^k) \mapsto f_x(W^1, \dots, W^k) \\ &:= \Sigma^k(\Phi^k(W^k, \Sigma^{k-1}(\Phi^{k-1}(W^{k-1}, \cdots (W^2, \Sigma^1(\Phi^1(W^1, x))) \cdots)))), \end{aligned} \tag{17}$$

wobei für $l = 1, \dots, k$, Φ^l die bivariate Potentialfunktion bezeichnet, die der Potentialfunktion $\Phi^l_{W^l}$ in der Definition des neuronalen Netzes entspricht. Weiterhin definieren wir für $l = 1, \dots, k$, die *Wichtungsmatrix-variate neuronale Netzfunktion der $l$ten Schicht* f_x^l für festes fixed $W^\ell \in \mathbb{R}^{n_\ell \times (n_{\ell-1}+1)}$m mit $\ell = 1, \dots, k$ und $\ell \neq l$ als

$$f_x^l : \mathbb{R}^{n_1 \times (n_{l-1}+1)} \to \mathbb{R}^{n_k}, W^l \mapsto f_x^l(W^l) := f_x^l(W^1, \dots, W^k). \tag{18}$$

Bemerkungen

- Die Definition von f in der Definition eines k-schichtiges neuronales Netzes ist eine Funktion des Inputs x bei festen Wichtungsmatrizen $W^1, \dots, W^l$. Zum Trainieren eines neuronalen Netzes ist es aber entscheidend, bei festem Input den Output des neuronalen Netzes bei Variation der Parameter $W^1, \dots, W^l$ zu monitoren. Dies motiviert den Begriff der Wichtungsmatrix-variaten neuronalen Netzfunktion: Die Definition von f_x in (17) ist eine Funktion der Wichtungsmatrizen $W^1, \dots, W^l$ bei festem Input x.

Definition (Output-spezifische Kostenfunktionen)

f sei ein k-schichtiges neuronales Netz und y sei ein Zielvektor von f. Dann wird eine multivariate reelwertige Funktion der Form

$$c_y : \mathbb{R}^{n}k \to \mathbb{R}, a^k \mapsto c_y(a^k) \tag{19}$$

Output-spezifische Kostenfunktion genannt.

Bemerkung

- Eine Output-spezifische Kostenfunktion c_y misst die Abweichung des Outputs a^k eines neuronalen Netzes von einem Zielvektor y. Untenstehende Tabelle führt zwei typische Beispiele für Output-spezifische Kostenfunktionen und ihre Gradienten, die in der Folge wichtig werden, auf.

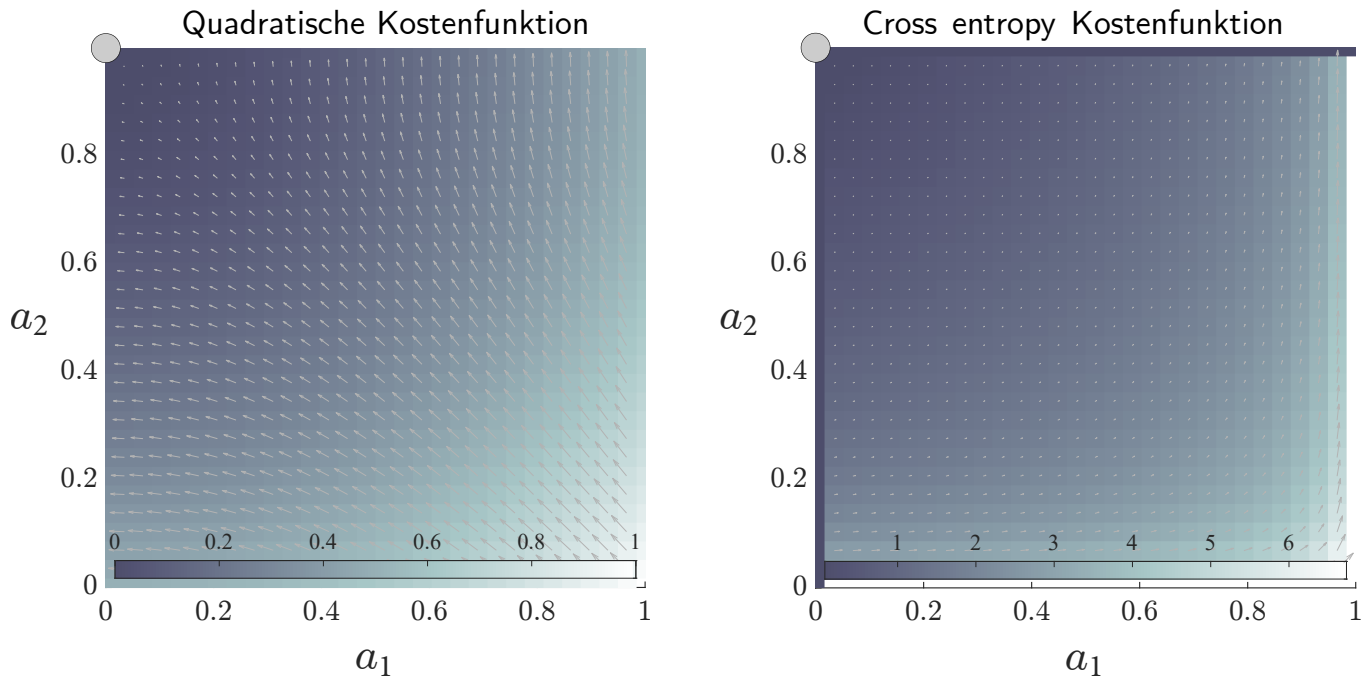
Quadratische Kostenfunktion

Definition	Gradient
$c_y(a^k) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n_k}(a_j^k - y_j)^2$	$\nabla c_y(a^k) := \left(a_j^k - y_j\right)_{j=1,\dots,n_k}$

Cross-entropy Kostenfunktion

Definition	Gradient
$c_y(a^k) := -\sum_{i=1}^{n_k} y_j \ln a_j^k + (1-y_j)\ln(1-a_j^k)$	$\nabla c_y(a^k) := \left(-\frac{y_j}{a_j^k} + \frac{1-y_j}{1-a_j^k}\right)_{j=1,\dots,n_k}$

Output-spezifische Kostenfunktionswerte für $y = (0, 1)^T$ bei logistischer Aktivierungsfunktion



- Beide Funktionen haben ihr Minimum bei $a = y$.
- Die Pfeile bilden die skalierten Gradientenwerte der jeweiligen Funktion ab.

Definition (Trainingsdatenpunkt-spezifische Kostenfunktionen)

f sei ein k-schichtiges neuronales Netz, f_x sei die zugehörige wichtungsmatrix-variate neuronale Netzfunktion, x und y seien Inputs und Outputs des neuronalen Netzes, $\mathcal{D}$ sei ein Trainingsdatensatz und c_y sei eine Output-spezifische Kostenfunktion. Dann heißt eine multimatrixvariate reellwertige Funktion der Form

$$c_{xy} : \mathbb{R}^{n_1 \times (n_0+1)} \times ... \times \mathbb{R}^{n_k \times (n_{k-1}+1)} \to \mathbb{R},$$
$$(W^1, ..., W^k) \mapsto c_{xy}(W^1, ..., W^k) := c_y(f_x(W^1, ..., W^k)) \quad (20)$$

Trainingsdatenpunkt-spezifische Kostenfunktion.

Bemerkung

- Eine Trainingsdatenpunkt-spezifische Kostenfunktion c_{xy} misst die Abweichung des Outputs a^k eines neuronalen Netzes von einem Zielvektor y mithilfe einer Output-spezifischen Kostenfunktion c_y für einen festen Input x als Funktion der (also bei variablen) Wichtungsmatrizen.

Definition (Gewichtsvektor)

f sei ein k-schichtige neuronales Netz mit $n_l \times n_{l-1} + 1$-dimensionalen Gewichtsmatrizen $W^l, l = 1, .., k$ und es sei

$$p := \sum_{l=1}^{n_k} n_l(n_{l-1} + 1). \tag{21}$$

die Anzahl der Gewichtsparameter des neuronalen Netzes. Dann heißt

$$\mathcal{W} := \left(\text{vec}\left(W^l\right)\right)_{1 \leq l \leq k} \in \mathbb{R}^p \tag{22}$$

der *Gewichtsvektor* des neuronalen Netzes.

Bemerkung

- Die Vektorisierung und Konkatenation der Wichtungsmatrizen im Sinne des Gewichtsvektors erlaubt es, dass Trainieren eines neuronalen Netzes als ein Standardoptimierungsproblem einer multivariaten (nicht multimatrixvariaten) reellwertigen zu formulieren.

Definition (Additive Kostenfunktion)

$\mathcal{D}$ sei ein Trainingsdatensatz und c_{xy} sei eine Trainingsdatenpunkt-spezifische Kostenfunktion. Dann nennt man eine multivariate reellwertige Funktion der Form

$$c_{\mathcal{D}} : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}, \mathcal{W} \mapsto c_{\mathcal{D}}(\mathcal{W}) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} c_{x^{(i)}y^{(i)}}(W^1, ..., W^k) \tag{23}$$

eine *additive Kostenfunktion*.

Bemerkung

- Die additive Kostenfunktion ist die zentrale Zielfunktion beim Trainieren eines neuronalen Netzes.
- $c_{\mathcal{D}}$ ist eine multivariate reellwertige Funktion, es liegt also ein Standardoptimierungsproblem vor.
- Wir nehmen dabei stillschweigend an, dass die sinnvolle Aufteilung des Gewichtsvektors $\mathcal{W}$ auf die Wichtungsmatrizen $W^1, ..., W^k$ in der Auswertung der Funktion $c_{\mathcal{D}}$ geschieht.

Definition (Batch Gradientenverfahren für neuronale Netze)

f sei ein k-schichtiges neuronales Netz mit Gewichtsvektor $\mathcal{W}$, $\mathcal{D}$ sei ein Trainingsdatensatz bestehend aus n Trainingsdatenpunkten, und $c_{\mathcal{D}}$ sei eine additive Kostenfunktion mit assoziierter Trainingsexemplar-spezifischer Kostenfunktion c_{xy}. Dann ist ein Gradientenverfahren zur Minimierung der additiven Kostenfunktion $c_{\mathcal{D}}$ (und damit zum Lernen der Parameter von f) definiert durch

Initialisierung

Wahl eines Startpunktes $\mathcal{W}^{(0)}$ und einer Lernrate $\alpha > 0$.

Iterationen

Für $j = 1, 2, \ldots$ setze

$$\mathcal{W}^{(j)} := \mathcal{W}^{(j-1)} - \frac{\alpha}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla c_{x^{(i)}y^{(i)}}(W^1, \ldots, W^k), \tag{24}$$

wobei

$$\nabla c_{x^{(i)}y^{(i)}}(W^1, \ldots, W^k) = \left(\nabla_{W^l} c_{x^{(i)}y^{(i)}}(W^1, \ldots, W^k) \right)_{1 \leq l \leq k} \tag{25}$$

für $i = 1, \ldots, n$ den Gradienten der $i$ten Trainingsexemplar-spezifischen Kostenfunktion bezeichnet

Bemerkungen

- $\mathcal{W}^{(j)}$ wird in (22) in die negative Richtung des Gradientenmittelwerts über Trainingsdatenpunkte adaptiert. Wird der Gradientenmittelwert dagegen nur über eine zufällig gewählte Teilmenge der Trainingsdatenpunkte berechnet, so spricht man von einem *stochastischen Gradientenverfahren*.

Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

Training

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Wesen und Motivation des Backpropagation Algorithmus

Der Backpropagation (BP) Algorithmus dient der numerischen Bestimmung der Komponenten

$$\frac{\partial}{\partial w_{ij}^l} c_{xy}(W^1, ..., W^k) \text{ für alle } i = 1, ..., n_l, j = 1, ..., n_{l-1} + 1, \text{ und } l = 1, ..., k. \tag{26}$$

des Gradienten $\nabla c_{x^{(i)}y^{(i)}}(W^1, ..., W^k)$ der $i$ten Trainingsexemplar-spezifischen Kostenfunktion.

Prinzipiell können diese partiellen Ableitungen numerisch durch

$$\frac{\partial}{\partial w_{ij}^l} c_{xy}(W^1, ..., W^k) \approx \frac{c_{xy}(W^1, ..., \tilde{W}^l, ..., W^k) - c_{xy}(W^1, ..., W^l, ..., W^k)}{\epsilon}, \tag{27}$$

mit

- $\tilde{W}^l := W^l + 1_{ij}^l \epsilon$,
- einer Matrix $1_{ij}^l \in \mathbb{R}^{n_l \times (n_{l-1}+1)}$ aus 0en mit einer 1 an der w_{ij}^l Stelle in W^l und
- einem Schrittweitenparameter $\epsilon > 0$

approximiert werden (vgl. Definition der partiellen Ableitung).

Wesen und Motivation des Backpropagation Algorithmus

Dieses Vorgehen würde für jede Iteration des Gradientenverfahren und für jeden Trainingsdatenpunkt

$$K := 1 + \sum_{l=1}^{k} n_l(n_{l-1} + 1) \tag{28}$$

Auswertungen der Trainingsdatenpunkt-spezifischen Kostenfunktion c_{xy} und somit von f erfordern. Man nennt die Auswertung von f für einen Trainingsdatenpunkt x einen *Forward Pass*.

Die zentrale Eigenschaft des Backpropagation Algorithmus ist es, für die Auswertung von ∇c_{xy} die Anzahl der notwendigen *Forward Passes* pro Gradientenverfahrensiteration von K auf 1 zu reduzieren.

Um dies zu erreichen, nutzt der Backpropagation Algorithmus einen sogenannten *Backward Pass*, der die gleiche komputationale Komplexität wie der *Forward Pass* hat und auf einer multivariate Version der Kettenregel der Differentialrechnung sowie der repetitiven funktionalen Architektur neuronaler Netze beruht.

Der Backpropagation Algorithmus reduziert die Anzahl nötiger *Passes* zur Auswertung von ∇c_{xy} also von K *Forward Passes* auf 1 *Forward Pass* und 1 *Backward Pass*.

Theorem (Backpropagation Algorithmus)

f sei ein k-schichtiges neuronales Netz, $W_\bullet^l \in \mathbb{R}^{n_l \times n_{l-1}}$ seien für $l = 1, \dots, k$ Matrizen, die durch das Entfernen der letzten Spalte der Wichtungsmatrizen $W^l \in \mathbb{R}^{n_l \times n_{l-1}+1}$ entstehen, c_{xy} sei eine Trainingsdatenpunkt-spezifische Kostenfunktion, $\nabla c_y(a^k)$ sei der Gradient der Output-spezifischen Kostenfunktion, $\tilde{\Sigma}^l(z^l) := (\sigma'(z_1^l), \dots, \sigma'(z_{n_l}^l))^T$ sei der Vektor der Aktivierungsfunktionenableitungen ausgewertet an der Stelle z^l und $\Sigma^l(z^l)$ die komponentenweise Aktivierungsfunktion evaluiert an der Stelle z^l. Dann können die partiellen Gradienten von c_{xy} hinsichtlich der Wichtungsmatrizen W^l für $l = k, k-1, \dots, 1$ mit folgendem Algorithmus berechnet werden:

Initialisierung

Setze $W^{k+1} := (1 \quad 0)$ und $\delta^{k+1} := \nabla c_y(a^k)$.

Iterationen

Für $l = k, k-1, k-2, \dots, 1$, setze

$$\delta^l := \left(\left(W_\bullet^{l+1} \right)^T \cdot \delta^{l+1} \right) \circ \tilde{\Sigma}^l(z^l) \tag{29}$$

und

$$\nabla_{W^l} c_{xy}(W^1, \dots, W^k) := \text{vec}\left(\delta^l \cdot \left(\Sigma^{l-1}(z^{l-1})^T \quad 1 \right) \right), \tag{30}$$

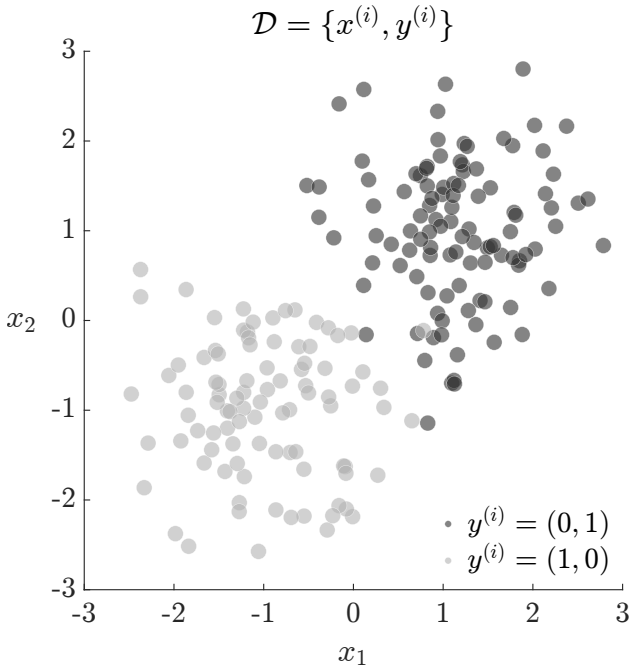
mit Rekursionstermination durch $\Sigma^0(z^0) := x^T$ und dem Hadamard-Produkt $\circ$.

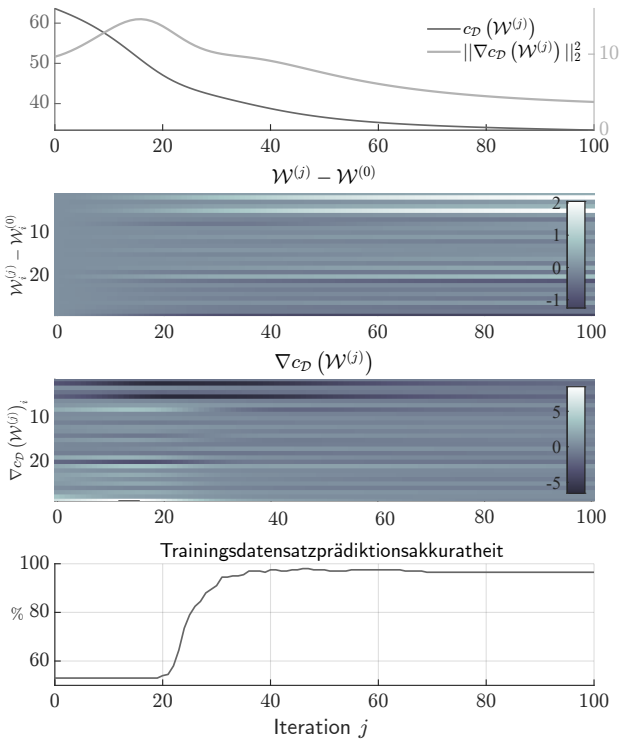
Für weitere Details und einen Beweis verweisen wir auf Ostwald & Usée (2021).

Backpropagation

Simulation und Analyse mit Matlab Implementation (Ostwald & Usée (2021))

- Neuronales Netz mit $k = 3, n_0 = 2, n_1 = 3,\ n_2 = 3, n_3 = 2$.
- Trainingsdatensatz anhand eines LDA Modells simuliert.





Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

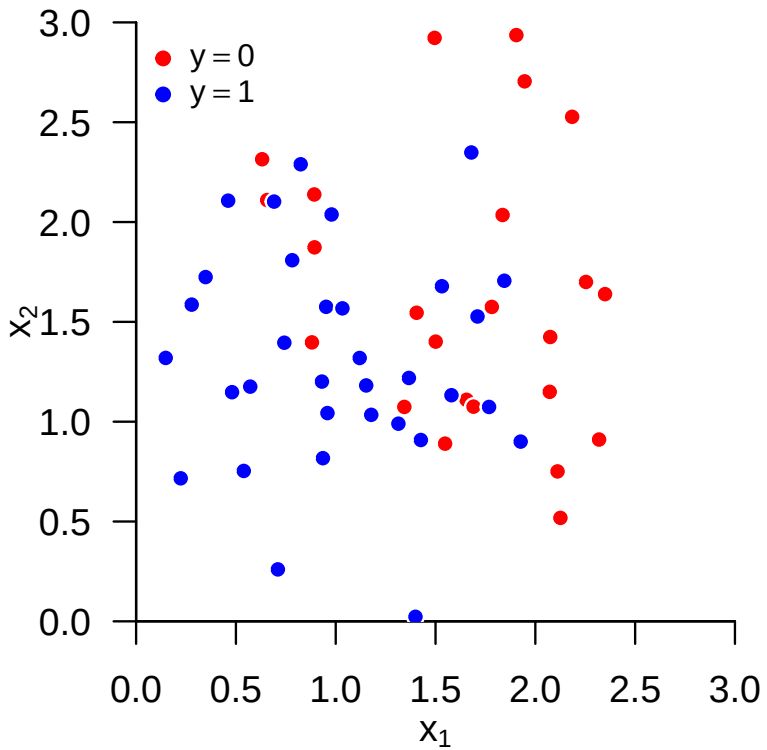
Training

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Normalisierte Featurevariablenwerte und Targetvariablenwerte



Normalisierte Featurevariablenwerte und Targetvariablenwerte

x_1	x_2	y
0.74	1.40	1
0.22	0.72	1
0.82	2.29	1
2.07	1.15	0
1.71	1.53	1
1.77	1.07	1
1.95	2.70	0
2.18	2.53	0
0.93	1.20	1
1.34	1.07	0
2.35	1.64	0
1.43	0.91	1
1.66	1.11	0
0.28	1.59	1
2.13	0.52	0
1.37	1.22	1
0.89	2.14	0
0.88	1.40	0
0.98	2.04	1
1.93	0.90	1

Prädiktive Modellierung mit `neuralnet()` (Günther & Fritsch (2010))

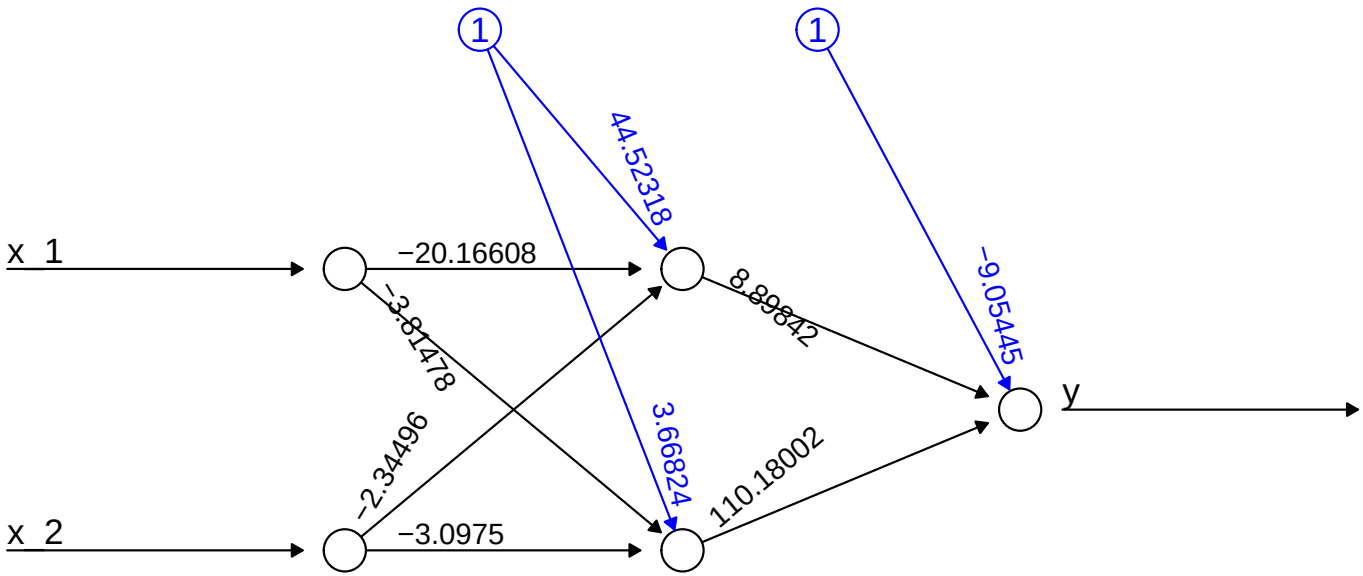
- Eine verdeckte Schicht mit zwei Neuronen

```
library(neuralnet)                                                  # R Paket
set.seed(1)                                                         # random number seed
D    = read.csv("13-Daten/13-klassifikationsdatensatz.csv")         # Datensatz
nn   = neuralnet(y             ~ x_1 + x_2,                         # y^{(i)}, x^{(i)} Definitionen
                 data          = D,                                 # Datensatz
                 hidden        = 2,                                 # 2 Neurone in 1 verdeckte Schicht
                 err.fct       = "ce",                              # Cross-Entropie Kostenfunktion
                 linear.output = FALSE)                             # Sigmoide Aktivierungsfunktion
R    = data.frame(x_1           = nn$covariate[,1],                  # x_1
                  x_2           = nn$covariate[,2],                  # x_2
                  y             = nn$response,                       # Y
                  PRE           = as.numeric(nn$net.result[[1]] > 0.5))  # Trainingsdatenklassifikation
print(sprintf("Prädiktionsakkuratheit = %0.2f", mean(R$PRE == R$y)))  # Trainingsdatenklassifikationsaccuracy
```

```
[1] "Prädiktionsakkuratheit = 0.72"
```

Prädiktive Modellierung mit `neuralnet()` (Günther & Fritsch (2010))

- Eine verdeckte Schicht mit zwei Neuronen



Error: 23.45107 Steps: 5302

Prädiktive Modellierung mit `neuralnet()` (Günther & Fritsch (2010))

- Eine verdeckte Schicht mit zwei Neuronen

```
# Leave-one-out cross-validation
set.seed(1)                                                                  # random number generator seed
D       = read.csv("13-Daten/13-klassifikationsdatensatz.csv")               # Datensatz
K       = nrow(D)                                                            # Anzahl Cross Folds
y_pred  = matrix(rep(NaN, K*2), nrow = K)                                    # Prädiktionsperformancearray
for(k in 1:K){                                                               # K-fold LOOCV
    D_train      = D[-k,]                                                    # Trainingsdatensatz
    D_test       = D[ k,]                                                    # Testdatensatz
    y_pred[k,1]  = t(D[k,3])                                                 # Testdatensatzfeaturevektorlabel
    nn           = neuralnet(y ~ x_1+x_2,                                    # y^{(i)}, x^{(i)} Definitionen
                             D_train,                                        # Trainingsdatensatz
                             hidden = 2,                                     # 1 verdeckte Schicht, 2 Neurone
                             err.fct = "ce",                                 # Cross-Entropie Kostenfunktion
                             linear.output = FALSE)                          # Sigmoide Aktivierungsfunktion
    pred         = predict(nn, D_test)                                       # Testdatenpunktprädiktion
    y_pred[k,2]  = as.numeric(pred[, 1] > 0.5)}                              # Klassifikationsregel
tp      = sum(y_pred[y_pred[,1] == 1,2] == 1)                                # |(1,1)|
tn      = sum(y_pred[y_pred[,1] == 0,2] == 0)                                # |(0,0)|
fp      = sum(y_pred[y_pred[,1] == 0,2] == 1)                                # |(0,1)|
fn      = sum(y_pred[y_pred[,1] == 1,2] == 0)                                # |(1,0)|
ACC     = (tp+tn)/(tp+fp+tn+fn)                                              # Accuracy
SEN     = tp/(tp+fn)                                                         # Sensitivity
SPE     = tn/(tn+fp)                                                         # Specificity
cat("Accuracy   : "  , ACC, ", Sensitivity: " , SEN, ", Specificity: " , SPE)   # Ergebnisausgabe
```

```
Accuracy   :  0.65 , Sensitivity:  0.7647059 , Specificity:  0.5
```

Anwendungsszenarien

Funktionale Architektur

Lernen

Backpropagation

Anwendungsbeispiel

Selbstkontrollfragen

Selbstkontrollfragen

1. Erläutern Sie die zentralen Ideen Universeller Approximationstheoreme im Kontext neuronaler Netze.
2. Geben Sie die Formel für das Potential z_i^l eines Neurons i in einer Schicht l eines neuronalen Netzes wieder und erläutern Sie die verschiedenen Komponenten dieser Formel und ihre intuitive Bedeutung.
3. Geben Sie die Formel für die Aktivierung a_i^l eines Neurons i in einer Schicht l eines neuronalen Netzes wieder und erläutern Sie ihre Bestandteile und deren intuitive Bedeutung.
4. Erläutern Sie das prinzipielle Vorgehen zum Trainieren eines neuronalen Netzes.

Referenzen I

Cybenko, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Math. Control Signals Systems*, *2*, 303–314.

Friedman, A. (1970). *Foundations of Modern Analysis*. Dover Publications.

Günther, F., & Fritsch, S. (2010). Neuralnet: Training of Neural Networks. *R Journal*, *2*.

Hanin, B. (2019). Universal Function Approximation by Deep Neural Nets with Bounded Width and ReLU Activations. *Mathematics*, *7*(10), 992. https://doi.org/10.3390/math7100992

Hopfield, J. J. (1982). Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proc. NatL Acad. Sci.*, *79*, 2554–2558.

Hornik, K. (1991). Approximation capabilities of multilayer feedforward networks. *Neural Networks*, *4*(2), 251–257. https://doi.org/10.1016/0893-6080(91)90009-T

Kamitani, Y., & Tong, F. (2006). Decoding Seen and Attended Motion Directions from Activity in the Human Visual Cortex. *Current Biology*, *16*(11), 1096–1102. https://doi.org/10.1016/j.cub.2006.04.003

Kidger, P., & Lyons, T. (2020). Universal Approximation with Deep Narrow Networks. *Proceedings of Machine Learning Research*, *125*, 1–22.

LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *Nature*, *521*(7553), 436–444. https://doi.org/10.1038/nature14539

Leshno, M., Lin, V. Ya., Pinkus, A., & Schocken, S. (1993). Multilayer feedforward networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function. *Neural Networks*, *6*(6), 861–867. https://doi.org/10.1016/S0893-6080(05)80131-5

Lu, Y., Stuart, A., & Weber, H. (2017). Gaussian Approximations for Probability Measures on R^d. *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification*, *5*(1), 1136–1165. https://doi.org/10.1137/16M1105384

Referenzen II

McCulloch, W. S., & Pitts, W. (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, *5*.

Minsky, M., & Papert, S. (1969). *Perceptrons: An introduction to computational geometry* (5th, expanded ed). MIT Press.

Ostwald, D., & Usée, F. (2021). *An induction proof of the backpropagation algorithm in matrix notation* (arXiv:2107.09384). arXiv. https://arxiv.org/abs/2107.09384

Peacock, S. M., Goodwin, I. H., Wood, R. K., McBride, C. J., Brock, A. C., Erekson, D. M., & Boyd, Z. M. (2025). MATCH: Client-therapist matching with machine learning. *Psychotherapy Research*. https://doi.org/10.1080/10503307.2025.2599248

Pinkus, A. (1999). Approximation theory of the MLP model in neural networks. *Acta Numerica*, *8*, 143–195. https://doi.org/10.1017/S0962492900002919

Rosenblatt, F. (1958). The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychological Review*, *65*(6), 386–408. https://doi.org/10.1037/h0042519

Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., & Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, (323), 533–536.

Schmidhuber, J. (2015). Deep learning in neural networks: An overview. *Neural Networks*, *61*, 85–117. https://doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003

Wein, E. F. (2025). *Künstliche Intelligenz und Maschinelles Lernen in Umweltbehörden – Potenziale, Herausforderungen und Handlungsempfehlungen*. https://doi.org/10.13140/RG.2.2.26391.69280