Universidade Federal de São Carlos

Bruna Zamith Diego Roberto Gonçalves de Pontes Elaine Cecília Gatto

Comparação das Redes Neurais Multi-Layer Perceptron, Radial Basis Function Network e Self Organizing Maps na classificação do dataset Iris

Trabalho apresentado à disciplina de Introdução a Redes Neurais Artificiais do curso de Ciência da Computação do Departamento de Computação da Universidade Federal de São Carlos.

Professor Dr. Ricardo Cerri.

São Carlos Abril 2018

Conteúdo

1	Introdução e objetivos	2					
2	Configuração das Redes Neurais e estratégias para classificação						
	2.1 Multi-Layer Perceptron	2					
	2.2 Radial Basis Function Network	3					
	2.3 Self Organizing Maps	3					
3	Metodologia de Comparação						
4	Resultados						
5	Conclusões						

1 Introdução e objetivos

Redes Neurais Artificiais são modelos matemáticos quem simulam os neurônios biológicos e suas sinapses. Tais redes são capazes de aprender padrões, classificar e agrupar dados através de treinamento e ajustes matemáticos[1].

Neste relatório serão abordados três tipos de implementações de Redes Neurais: (i) Multi-Layer Perceptron; (ii) Radial Basis Function Network; e (iii) Self Organizing Maps.

Como as redes neurais podem ser utilizadas para classificar padrões, após um treinamento prévio, este trabalho tem como objetivo ajustar cada tipo de implementação para classificar o conjunto de dados Iris¹, fazendo comparações entre suas acurácias e matrizes de confusão.

O presente trabalho está organizado e apresentado da seguinte forma: na Seção 2 vê-se a configuração e detalhes de implementação de cada rede neural. A Seção 3 aborda a metodologia de comparação utilizada no desenvolvimento deste trabalho. Na Seção 4 é apresentado os resultados obtidos e por fim na Seção 5 estão as conclusões.

2 Configuração das Redes Neurais e estratégias para classificação

Para a execução das comparações entre as redes neurais para com o conjunto de dados Iris, foram definidas configurações e estratégias para classificação de cada arquitetura de rede, as quais são descritas nas subseções seguintes.

2.1 Multi-Layer Perceptron

Para a configuração da Multi-Layer Perceptron foram utilizados 4 neurônios na camada de entrada, sendo cada um para um atributo do conjunto de dados, 3 para a camada escondida e 3 para saída, um para cada classe do problema; com taxa de aprendizagem de 0.3 e com erro de $1e^{-2}$. A configuração é ilustrada na Tabela 1.

Tabela 1: Configuração da Rede Neural Multi-Layer Perceptron

Qtd neurônios por camada				
Entrada	Escondida	Saída	Taxa de Aprendizagem	Erro
4	3	3	0.3	$1e^{-2}$

¹https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/iris

De acordo com a Tabela 1 pode-se observar que há 3 neurônios de saída, atribuindo cada um para uma determina da classe. Após o treinamento, com os pesos calculados e atualizados, fornecendo uma entrada para a rede, iniciase a fase de propagação e posterior retropropagação. A classe atribuida ao exemplo é com base no neurônio de saída que retorna a maior probabilidade.

Exemplo: Com uma entrada 4.9, 2.5, 4.5 e 1.7 (classe virginica) na rede e obtendo como saída nos neurônios os valores 0.25, 0.05 e 0.7, respectivamente, atribui-se para essa entrada a classe virginica, pois definiu-se que o primeiro neurônio da saída classifica como setosa, o segundo neurônio como versicolor e o terceiro como virginica.

2.2 Radial Basis Function Network

Na configuração da Radial Basis Function Network utilizou-se 4 neurônios na camada de entrada, um para cada atributo do conjunto de dados, 5 neurônios na camada oculta (K=5) e 1 neurônio na saída. Sendo o valor de $\gamma = 1.0$ e a função gaussiana para ϕ . A configuração pode ser observada na Tabela 2.

Tabela 2: Configuração da Radial Basis Function Network

Qtd neurônios por camada				
Entrada	Escondida (K)	Saída	Gama	RBF
4	5	1	1.0	Gaussiana

De acordo com a Tabela 2, optou-se por utilizar apenas um neurônio na camada de saída. A lógica para predição de uma das três classes dispostas no conjunto de dados (setosa, versicolor e virginica) utilizando-se apenas um neurônio deu-se da seguinte maneira: Primeiramente transformou-se cada classe em um fator numérico, sendo 1 para setosa, 2 para versicolor e 3 para virginica. Tendo que a saída da rede RBF é linear e utilizando apenas um neurônio, o valor obtido por este é comparado por proximidade ao fator numérico atribuído para a respectiva classe.

Exemplo: Considerando que a saída foi de 1.9 e o valor da classe versicolor é 2, então a saída da rede está mais próxima da classe 2, ou seja, a versicolor. Ou ainda, se a saída da rede for 3.2, por aproximação, a classe predita será da classe 3, a virginica.

2.3 Self Organizing Maps

E por fim para o SOM foi utilizada uma taxa de aprendizagem inicial de 0.1 com uma vizinhança igual a 8, sendo os valores de $Tau1(\tau_1)$ e $Tau2(\tau_2)$

 $1000/\log(8)$ e 1000 respectivamente, o valor de 30 para o número máximo de interações e 8 para a dimensão do mapa. A configuração geral do SOM está descrita na Tabela 3.

Tabela 3: Configuração do Self Organizing Maps

Taxa de aprend.	Largura	_	_	Nro. max	Dimensão
inicial	Vizinhança	γ_1	$ au_2$	interações	Mapa
0.1	8	$1000/\log(8)$	1000	30	8

Sabendo-se que o SOM organiza dimensionalmente dados de entrada em clusters e o objetivo deste trabalho é usar o modelo para classificar uma entrada ou conjunto de entradas, tomou-se da seguinte estratégia para essa possível classificação: (i) o modelo SOM retorna, depois de treinado, um vetor de pesos e um mapa; (ii) o mapa permite a visualização da organização em clusters de acordo com as características de entrada; (iii) para que o SOM possa funcionar como um classificador, criou-se uma função que recebe o mapa com seus vetores de pesos já treinados e uma entrada, retornando a predição da classe; e (iv) a predição é feita de maneira análoga ao treinamento, porém manteve-se os valores dos pesos pós treinamento, como dito no item (iii), e fornecendo uma entrada é possível encontrar o neurônio de menor distância, verificando-se no mapa qual a classe correspondente a posição deste neurônio, deste modo tendo a predição final.

Exemplo: Avaliando que após o treinamento a classe setosa ficou, hipoteticamente, agrupada nas posições [1][1], [1][2], [1][3], [2][1], [2][2], [2][3] e a entrada fornecida ficou o mais próximo dessas posições, então será classificada como setosa.

3 Metodologia de Comparação

Considerando o objetivo de comparar as classificações dadas por cada rede neural para o conjunto de dados Iris, utilizou-se a matriz de confusão, calculando acurácia entre a classificação desejada e a classificação obtida. Além disso, implementamos a estratégia de K-Fold $Cross\ Validation$, com K=10.

Nas subseções seguintes serão ilustradas as matrizes de confusão obtidas após o treinamento dos três tipos de redes neurais abordadas por este trabalho.

4 Resultados

Para sumarização dos testes gerou-se matrizes de confusão, obtendo a acurácia média de cada rede neural. No Listing 1 é ilustrada a matriz de confusão da rede *Multi-Layer Perceptron*.

```
Confusion Matrix and Statistics
                   Reference
                    setosa versicolor virginica
      setosa
                         50
                                        0
                                   47
      virginica
                           0
                                        3
                                                    48
    Overall Statistics
                       Accuracy : 0.9667
95% CI : (0.9239, 0.9891)
11
         No Information Rate: 0.3333
P-Value [Acc > NIR]: < 2.2e-16
13
14
15
16
                           Kappa : 0.95
     Mcnemar's Test P-Value : NA
17
18
19
    Statistics by Class:
20
21
                               Class: setosa Class: versicolor Class: virginica
22
23
    Sensitivity
                                       1.0000
                                                              0.9400
                                                                                    0.9600
                                                                                   0.9700
                                       1.0000
                                                              0.9800
    Specificity
24
25
    Pos Pred Value
Neg Pred Value
                                        1.0000
                                        1.0000
    Prevalence
Detection Rate
26
                                       0.3333
                                                              0.3333
                                                                                   0.3333
                                       0.3333
                                                              0.3133
                                                                                   0.3200
28
    Detection Prevalence
Balanced Accuracy
                                       0.3333
                                                              0.3267
                                                                                    0.3400
```

Listing 1: Matriz de Confução MLP

De acordo com o Listing 1, a rede MLP teve uma acurácia média próxima de 97%, conforme pode ser visto na linha 11. Já a rede *Radial Basis Function* teve uma acurácia média próxima de 79% de acordo com o Listing 2.

```
Confusion Matrix and Statistics
                  Reference
    Prediction
                   setosa versicolor virginica
                                  0
      setosa
      versicolor
                                     41
                                                 19
      virginica
10
                     Accuracy: 0.7867
95% CI: (0.7124, 0.8493)
ton Rate: 0.3333
12
14
        P-Value [Acc > NIR] : < 2.2e-16
    Kappa : 0.68
Mcnemar's Test P-Value : NA
16
18
19
20
21
22
    Statistics by Class:
    Sensitivity
                                     0.9200
                                                          0.8200
                                                                               0.6200
23
24
                                     1.0000
                                                           0.7700
0.6406
    Pos Pred Value
    Neg Pred Value
\frac{25}{26}
                                     0.9615
                                                           0.8953
                                                                               0.8273
    Prevalence
                                     0.3333
                                                           0.3333
                                                                               0.3333
27
   Detection Rate
                                     0.3067
                                                           0.2733
                                                                               0.2067
    Detection Prevalence
                                     0.3067
                                                           0.4267
                                                                               0.2667
    Balanced Accuracy
                                     0.9600
                                                           0.7950
```

Listing 2: Matriz de Confução RBF

E por fim o Listing 3 mostra uma acurácia média de 44% para Self Organizing Maps.

```
Confusion Matrix and Statistics
                    Reference
    Prediction
                     setosa versicolor
                          25
       versicolor
                                                      21
       virginica
    Overall Statistics
                        Accuracy
95% CI
                                      0.44
(0.3591,
         No Information Rate P-Value [Acc > NIR]
\frac{13}{14}
                                      0.3333
                                      0.004184
\frac{15}{16}
                            Kappa : 0.16
     Mcnemar's Test P-Value
    Statistics by Class:
19
20
21
22
23
24
25
                                Class: setosa
0.5000
                                                  Class: versicolor Class:
    Specificity
Pos Pred Value
Neg Pred Value
                                         0.7900
                                                                 0.6800
                                                                                       0.6900
                                         0.7596
                                                                 0.7234
                                                                                       0.6765
    Prevalence
    Detection Rate
                                         0.1667
                                                                 0.1600
                                                                                       0.1133
    Detection Prevalence
                                         0.3067
                                                                 0.3733
                                                                                       0.3200
    Balanced Accuracy
                                         0.6450
                                                                 0.5800
                                                                                       0.5150
```

Listing 3: Matriz de Confução SOM

Em conformidade com as matrizes de confusão a Tabela 4 expõe uma visão geral da acurácia média de cada rede neural.

Tabela	a 4: Acurácia média obtidas
Rede	Acurácia
nede	${f M\'edia}$
MLP	0.9666667 + / - 0.04714045
RBF	0.7866667 + / - 0.156505
SOM	0.44 + / - 0.2089362

5 Conclusões

Neste trabalho foram abordadas três tipos de redes neurais: A Multi-Layer Perceptron (MLP), Radial Basis Function Network (RBF) e Self Organizing Maps (SOM). A MLP torna possível classificar dados onde é necessário mais de uma reta para separá-los, ou seja, mais de uma classe. A RBF, onde os dados não são linearmente separáveis, é capaz de aumentar a dimensionalidade do conjunto de dados através de funções de ativação base, que neste trabalho foi utilizado a gaussiana, transformando os dados em linearmente separáveis e por fim o SOM, este que apresenta agrupamento das informações em clusters em um mapa, visualmente, onde cada cluster pode ser uma classe

ou uma característica especifica. Com os resultados obtidos através das matrizes de confusão, descritas na seção 4, a MLP mostrou-se mais precisa na classificação do conjunto de dados Iris.

Este trabalho também mostrou que é possível ajustar certas redes neurais com estratégias de classificação com o proposito de se adequar as entradas fornecidas e resultando em valores que são plausíveis de interpretação para classificação.

Referências