

Clasificación de Cristales mediante Redes de Neuronas Artificiales

Maseda Dorado, Tomé

tome.maseda@udc.es

Facultade de Informática

Universidade da Coruña

A Coruña, Spain

INTRODUCCIÓN

Inicialmente, la base de datos de clasificación de cristales creada por B. German fue usada por Vina para llevar a cabo una prueba de comparación de su sistema basado en reglas, BEAGLE, el algoritmo *nearest-neighbor algorithm* y el análisis discriminante.

En esta base de datos se midieron 9 parámetros: el índice de refracción, Sodio (Na), Magnesio (Mg), Aluminio (Al), Silicio (Si), Potasio (K), Calcio (Ca), Bario (Ba), Hierro (Fe), todos ellos medidos por porcentaje de peso en el óxido correspondiente (excepto el índice de refracción). Asumimos que un cristal puede pertenecer a cualquiera de las seis clases siguientes: ventanas de edificios procesadas por flotación_(A), ventanas de edificios NO procesadas por flotación_(B), ventanas de vehículos procesadas por flotación_(C), recipientes_(D), vajilla_(E) y faros delanteros_(F) (se ignoran las ventanas de vehículos NO procesadas por flotación ya que no tenemos ningún patrón de dicha clase en esta base de datos).

El estudio de la clasificación de los tipos de vidrio fue motivado por la investigación criminológica. En la escena del crimen, el cristal puede ser usado como evidencia si es correctamente identificado. El propósito de esta base de datos es, dados los nueve parámetros, determinar a cuál de las seis clases pertenece un cristal. Es, por lo tanto, un problema de **clasificación**. Esta base de datos contiene datos de 214 cristales.

Los cuatro parámetros de entrada utilizados son valores numéricos, con lo que no ha sido necesario realizar ninguna codificación. Sin embargo, la salida ha tenido que ser codificada en distintos valores. La tabla 1 muestra una equivalencia entre las clases de pertenencia de cada patrón y los valores de salida deseada utilizadas.

Clase	Salidas deseadas					
A	1	0	0	0	0	0
B	0	1	0	0	0	0
C	0	0	1	0	0	0
D	0	0	0	1	0	0
E	0	0	0	0	1	0
F	0	0	0	0	0	1

Tabla 1. Codificación usada para la clase de salida

EXPERIMENTOS REALIZADOS

Para resolver este problema se han utilizado Redes de Neuronas Artificiales. En concreto, se han probado las siguientes arquitecturas:

- [] → Sin capas ocultas
- [4] → 1 capa oculta con 4 neuronas
- [7] → 1 capa oculta con 7 neuronas
- [10] → 1 capa oculta con 10 neuronas
- [12] → 1 capa oculta con 12 neuronas
- [15] → 1 capa oculta con 15 neuronas
- [20] → 1 capa oculta con 20 neuronas
- [5 3] → 2 capas ocultas con 5 y 3 neuronas
- [8 3] → 2 capas ocultas con 8 y 3 neuronas
- [8 5] → 2 capas ocultas con 8 y 5 neuronas
- [10 5] → 2 capas ocultas con 10 y 5 neuronas

Para cada arquitectura se ha entrenado la RR.NN.AA. 50 veces, obteniendo para cada entrenamiento la precisión para el conjunto de entrenamiento, validación y test y hallando la precisión media y desviación típica en cada uno de estos conjuntos posteriormente. La tabla 2 muestra los resultados obtenidos en el conjunto de test para cada una de las arquitecturas mencionadas previamente.

Arquitectura	Precisión media en test	Desviación típica en test
[]	59.69%	0.09
[4]	56.38%	0.09
[7]	57.38%	0.11
[10]	61.12%	0.09
[12]	60.81%	0.10
[15]	60.56%	0.09
[20]	62.00%	0.09
[5 3]	54.69%	0.10
[8 3]	54.75%	0.13
[8 5]	58.81%	0.12
[10 5]	56.00%	0.11

Tabla 2. Resultados obtenidos en test para cada arquitectura

CONCLUSIONES

- ¿Creéis que los resultados han sido buenos o malos para el problema que queréis resolver?

Creo que, para este problema, hemos obtenido una buena precisión, es cierto que comparado con otros problemas como el de las flores iris es una precisión considerablemente más baja, sin embargo, hay que tener en cuenta que aquí tenemos el doble de clases de salida lo que aumenta la probabilidad de que patrones de distintas clases se mezclen en el espacio creando formas más

complejas (se necesita un gran número de neuronas o más capas ocultas para dividir el espacio en formas más complejas y aumentar la precisión).

- ¿Ha habido alguna arquitectura cuyos resultados hayan sido claramente mejores que los del resto?

No, por lo general la mayoría de las arquitecturas han devuelto resultados bastantes próximos, aunque da la sensación de que es más útil, para este problema, aumentar considerablemente el número de neuronas en una sola capa oculta, que pasar a usar dos capas ocultas.

La mejor precisión obtenida ha sido con 20 neuronas en una sola capa oculta (62.00%), en cambio, al pasar a dos capas ocultas los resultados han vuelto a empeorar (todos por debajo del 60%).

- ¿Cuál ha sido el mayor problema que habéis encontrado al resolver este problema?

Respecto al problema en sí no he encontrado muchas complicaciones, la codificación tanto de las salidas como de las entradas era simple y sin complicaciones. El único “problema” que tuve con la base de datos fue que me encontré con qué no había patrones para una salida concreta (ventanas de vehículos NO procesadas por flotación) y una de las entradas era el número de identificación del patrón, simplemente opté por descartar los dos ya que no eran útiles para resolver el problema.

- ¿Creéis que es viable usar una RNA en un entorno real para realizar estas estimaciones?

No, hay que tener en cuenta que por mucho que aumentemos el número de neuronas para este problema no conseguiremos una precisión excepcional, sin una precisión superior al 90%, aproximadamente, pienso que no se debería usar en un entorno real. Pensando en un caso real, relacionado con la criminología en este caso, es cierto que puede servirnos como una estimación “poco fiable” de la escena del crimen, pero nunca nada definitivo. Hay que tener en cuenta que tenemos aproximadamente un 40% de probabilidades de identificar incorrectamente una evidencia de un crimen.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ping Zhong and Masao Fukushima. “A Regularized Nonsmooth Newton Method for Multi-class Support Vector Machines”. 2005.

S. Augustine Su and Jennifer G. Dy. “Automated hierarchical mixtures of probabilistic principal component analyzers”. ICML. 2004.

Richard Maclin and David W. Opitz. “An Empirical Evaluation of Bagging and Boosting”. AAAI/IAAI. 1997.