

SCC5871 – Introdução ao Aprendizado de Máquina

Aula 10 – Redes Neurais: Redes RBF e Regressão Não Linear

Prof. Ricardo J. G. B. Campello

PPG-CCMC / ICMC / USP

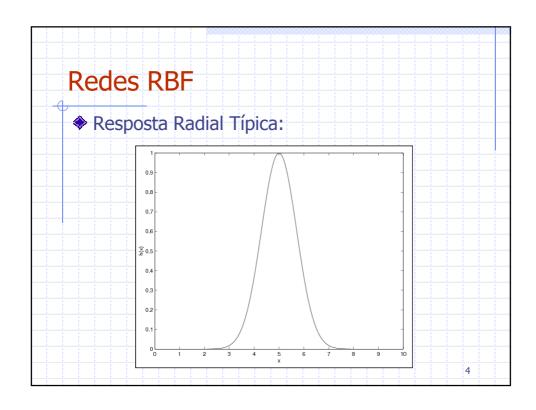


Aula de Hoje

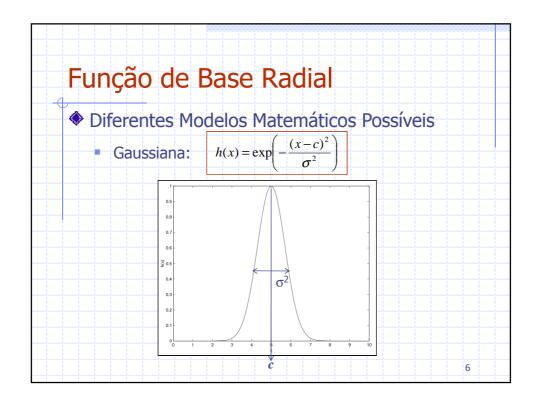
- Modelos RBF
- Estimação dos Pesos de Redes RBF
 - Mínimos Quadrados
 - Back-propagation
- Determinação das Funções Radiais
- Aplicações em Regressão Não Linear
 - Mapeamentos Estáticos, Séries Temporais e Sistemas Dinâmicos

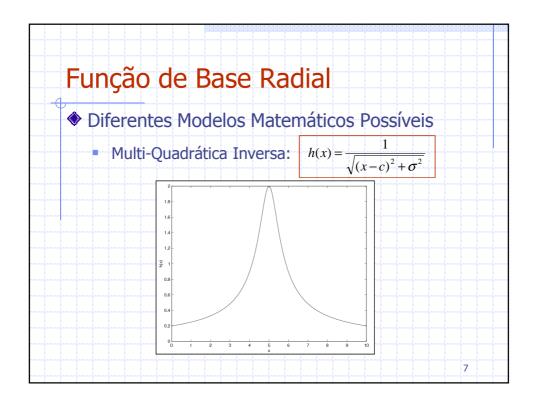
Redes RBF

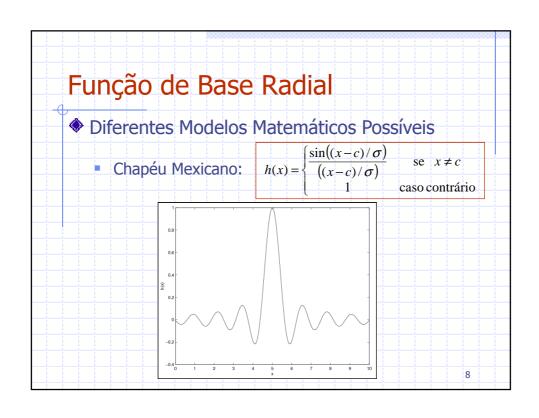
- Redes RBF (Radial Basis Functions) são uma classe de redes com arquitetura feedforward
 - Assim como as MLPs, os valores das entradas se propagam na rede em um único sentido
- Essas redes diferem das MLPs especialmente no modelo de neurônio que utilizam
 - Neurônios com resposta radial a excitações
 - Modelam o conceito biológico de campo receptivo

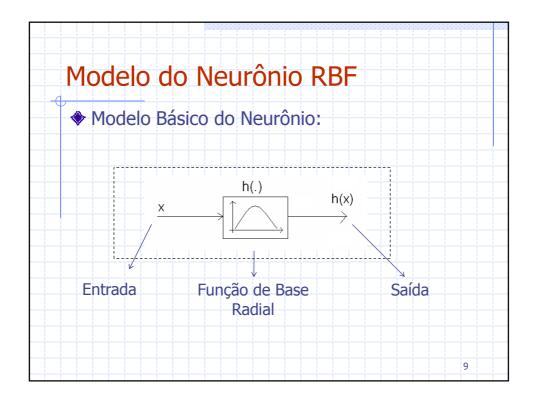


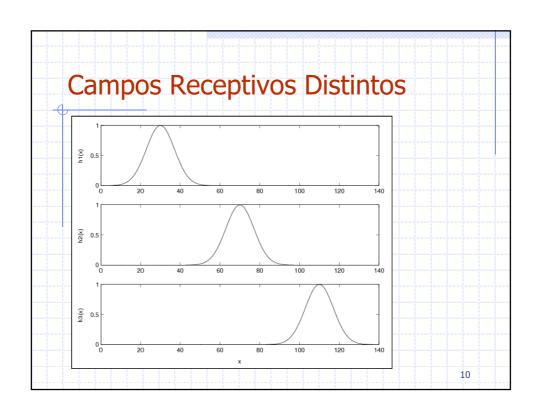


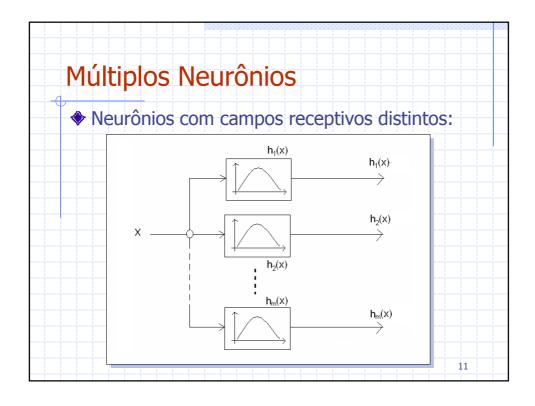


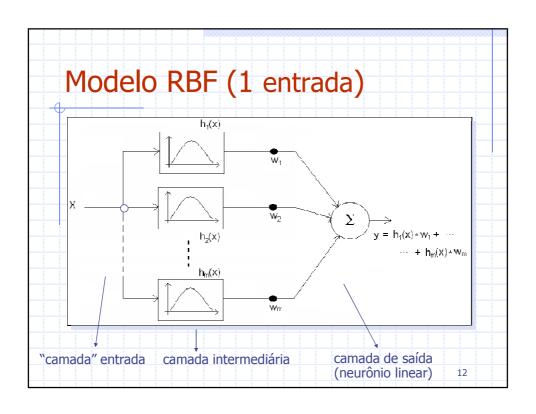


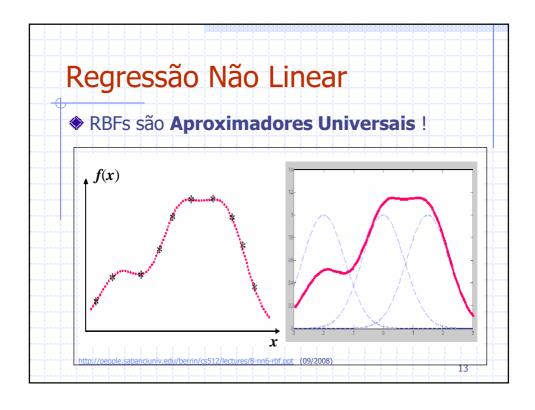


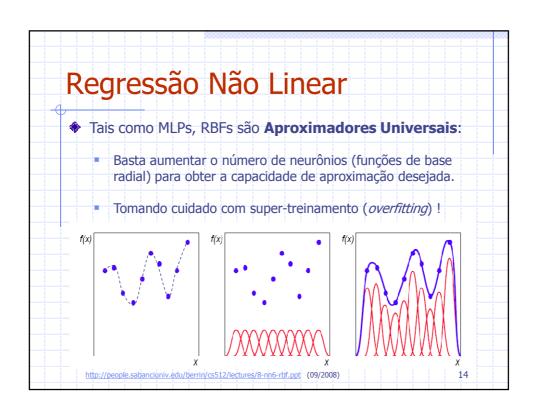


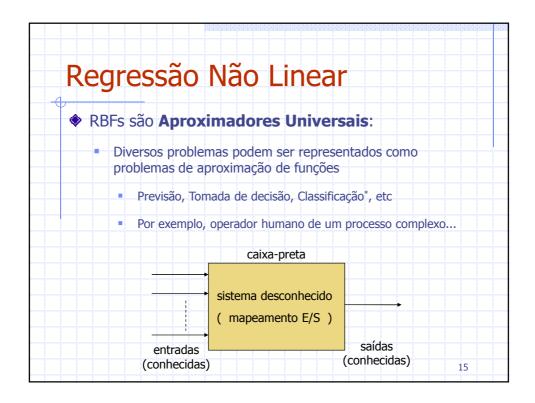


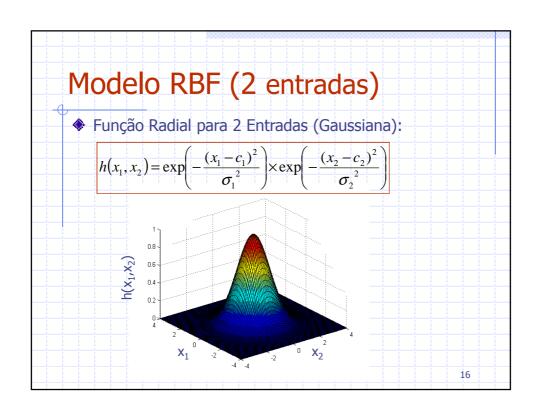


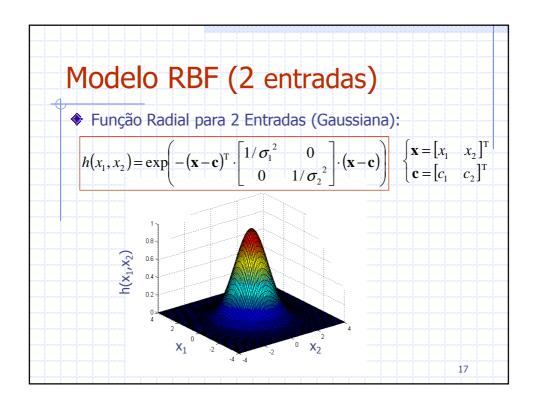


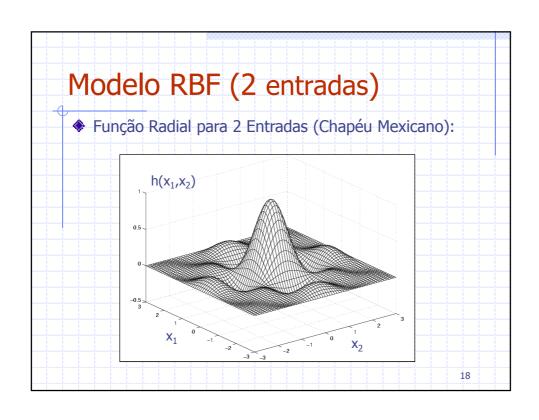


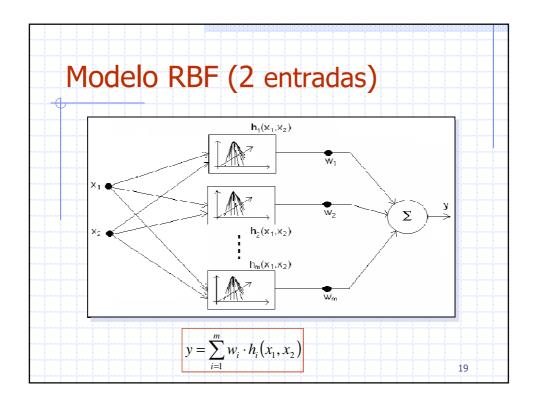


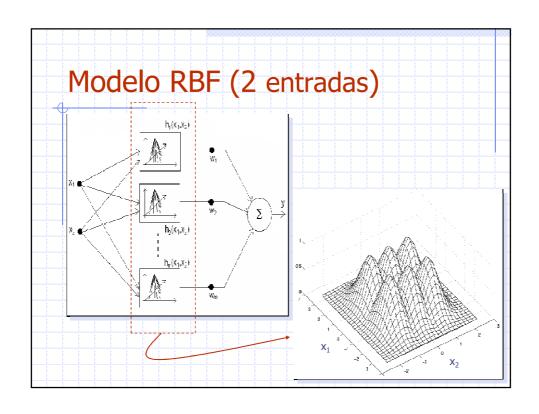












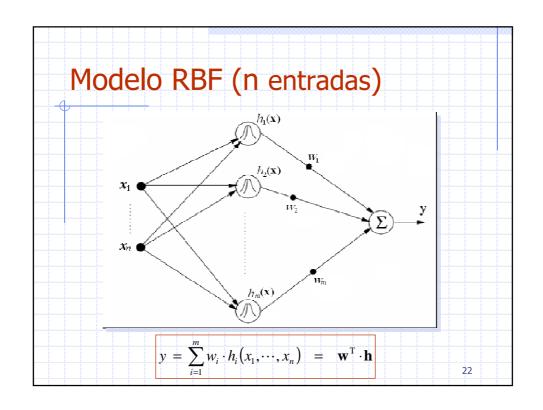
Modelo RBF (n entradas)

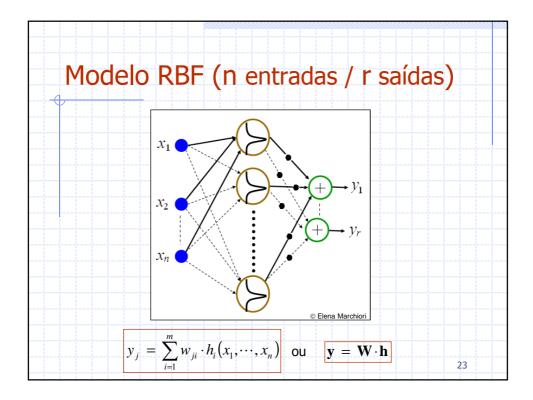
♦ Função Radial para n Entradas (Gaussiana):

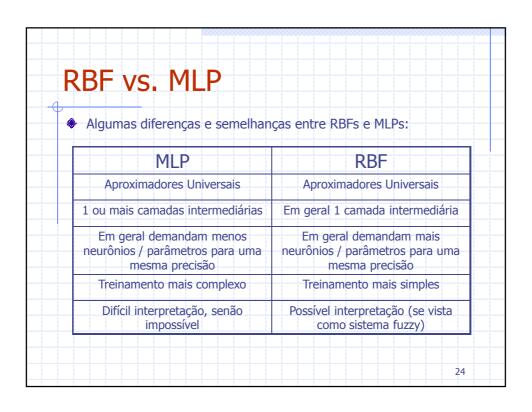
$$h(x_1, \dots, x_n) = \exp(-(\mathbf{x} - \mathbf{c})^{\mathrm{T}} \cdot \Phi^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{c}))$$

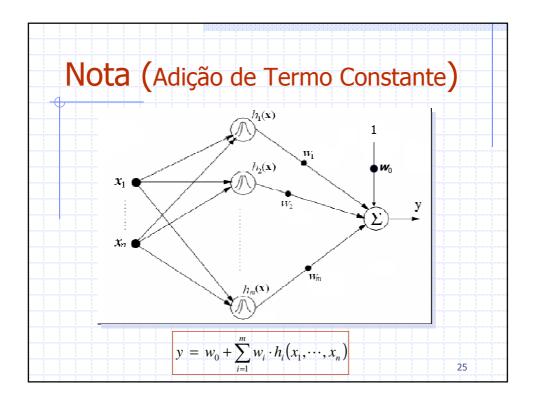
$$\begin{cases} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_n \end{bmatrix}^T \\ \mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_1 & \cdots & c_n \end{bmatrix}^T \\ \mathbf{\Phi} = \operatorname{diag}(\sigma_1^2, \cdots, \sigma_n^2) \end{cases}$$

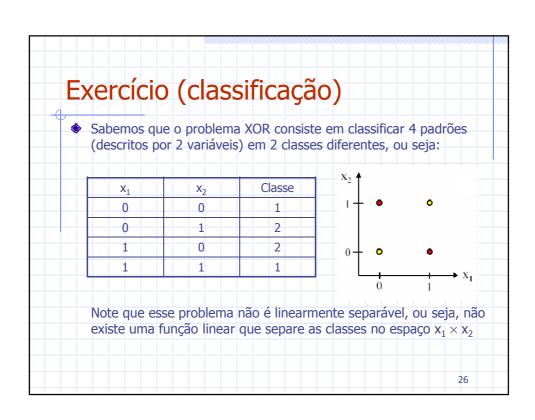
- Nota: matriz Φ não precisa ser diagonal
 - flexibilidade x complexidade (no. de parâmetros)



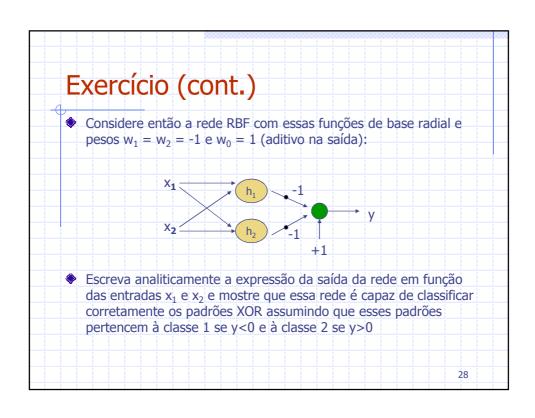








Exercício (cont.) No entanto, os padrões podem passar a ser linearmente separáveis após serem processados por funções de base radial, desde que essas sejam escolhidas de forma apropriada. P. ex., escolhendo 2 funções Gaussianas h_1 e h_2 com centros dados por [0,0] e [1,1], respectivamente, e desvios padrão unitários para ambas, tem-se: $h_2(x_1, x_2)$ $h_1(x_1, x_2)$ $h_2(x_1, x_2)$ (1,1)1.0 0 0 1 0,1353 0.8 0 0,3679 0,3679 0.6 0 0,3679 0,3679 0.4^{-1} $_{(1,0)}^{(0,1)}$ • 1 0,1353 1 0.2 0.2 0.4 0.6 0.8 1.2 $h_1(x_1, x_2)$



Treinamento de Redes RBF

- Problemas:
 - Dadas as funções de base radial, como determinar o melhor vetor de pesos w ?
 - Como determinar bons parâmetros para as funções de base radial (centros e aberturas) ?
 - reduzir no. de funções para dada precisão, ou
 - aumentar precisão para dado no. de funções

29

Treinamento de Redes RBF

- Problemas:
 - Dadas as funções de base radial, como determinar o melhor vetor de pesos w ?
 - Como determinar bons parâmetros para as funções de base radial (centros e aberturas)?
 - reduzir no. de funções para dada precisão, ou
 - aumentar precisão para dado no. de funções

Determinação dos Pesos

- Queremos determinar os pesos de uma rede RBF com funções radiais conhecidas para aproximar a função (mapeamento) entre um conjunto de N padrões de entrada $\mathbf{x}_k = [\mathbf{x}_{1k} \dots \mathbf{x}_{nk}]^T$ e saída $\mathbf{y}(\mathbf{x}_k)$ para k=1,...,N
 - Por simplicidade, assume-se aqui que a saída é única
- Exemplo:
 - para N = 100 clientes de um banco, descritos por n = 5 variáveis (salário, idade, tempo de relacionamento com o banco, sexo, estado civil), queremos obter uma rede que, dado um cliente x_k, responda se este cliente possui maior risco de ser caloteiro (y(x_k) = 1) ou não (y(x_k) = 0)

31

Determinação dos Pesos

- Como as m funções radiais são conhecidas, podemos calcular o valor dessas funções para cada padrão x_k
- Representando esses valores em uma matriz tem-se:

$$\mathbf{H} = egin{bmatrix} h_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & h_m(\mathbf{x}_1) \ dots & \ddots & dots \ h_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & h_m(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

As saídas desejadas (conhecidas) também podem ser representadas em um vetor:

$$\mathbf{y} = [y(\mathbf{x}_1) \quad \cdots \quad y(\mathbf{x}_N)]^{\mathrm{T}}$$

Determinação dos Pesos

Para uma representação ideal da saída, deseja-se que a rede RBF possua pesos w tais que:

$$\begin{bmatrix} h_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & h_m(\mathbf{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & h_m(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ y(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

ou seja: $\mathbf{H} \cdot \mathbf{w} = \mathbf{y}$

Se H fosse quadrada, poderíamos multiplicar por H-1 em ambos os lados e resolver o problema como:

$$\mathbf{w} = \mathbf{H}^{-1} \cdot \mathbf{y}$$

33

Determinação dos Pesos

Podemos obter uma matriz quadrada multiplicando ambos os lados da equação por H^T:

$$\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{w} = \mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{v}$$

◆ Agora sim podemos multiplicar ambos os lados da equação pela inversa (H^TH)⁻¹ e obter a solução como:

$$\mathbf{w} = \left(\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{H}\right)^{-1} \cdot \mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{y}$$

Determinação dos Pesos

Se houver o termo aditivo w₀ na saída, é preciso somente redefinir H e w de tal forma que:

$$\begin{bmatrix}
1 & h_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & h_m(\mathbf{x}_1) \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & h_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & h_m(\mathbf{x}_N)
\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ y(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{H}$$
o que não afeta a solução:

 $\mathbf{w} = (\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{H})^{-1} \cdot \mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{y}$

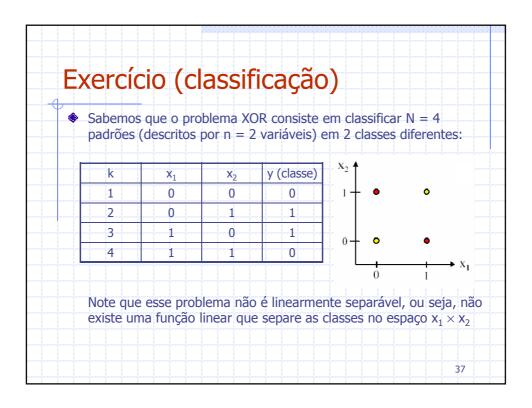
35

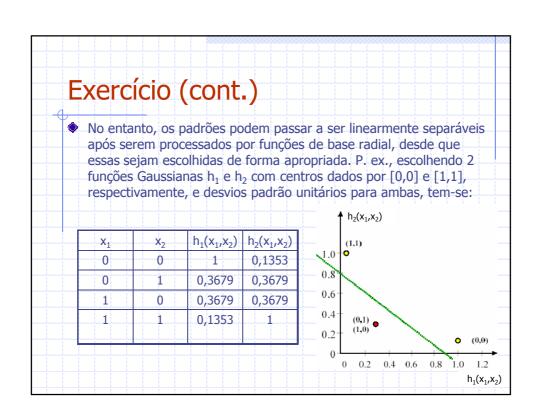
Determinação dos Pesos

- Algoritmo:
 - Para um conjunto de k = 1, ..., N padrões de entrada e saída, {x_k, y(x_k)}, calcule a matriz H, construa o vetor y e calcule os pesos da rede segundo a equação:

$$\mathbf{w} = \left(\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{H}\right)^{-1} \cdot \mathbf{H}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{y}$$

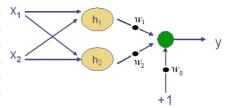
Nota: É possível demonstrar que, se a representação não for exata, a solução acima é aquela que minimiza o erro quadrático entre a saída da rede e a saída desejada (Mínimos Quadrados)!





Exercício (cont.)

Considere então a rede RBF com essas funções de base radial e pesos w₁ e w₂, além do peso adicional w₀ (aditivo na saída), conforme abaixo:



- Obtenha os valores dos pesos w₀, w₁ e w₂ para que a rede consiga indicar precisamente em sua saída a classe correta (0 ou 1) de cada um dos 4 padrões de entrada do problema XOR.
 - Apresente a solução passo a passo, em detalhes e de forma justificada!

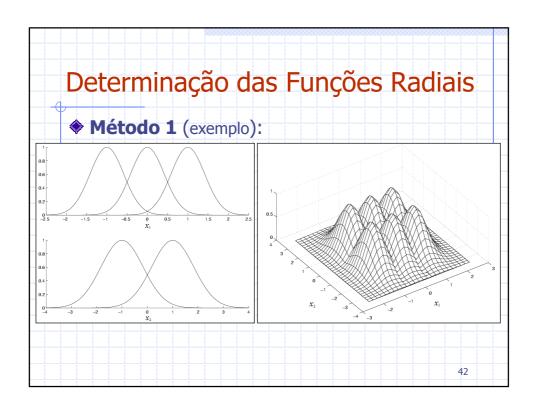
39

Determinação das Funções Radiais

- Método 1 (Heurística Simples):
 - Distribuir as funções de maneira homogênea sobre o domínio das variáveis de entrada
 - Por exemplo, se a rede possui duas entradas, x₁ e x₂, que assumem valores no intervalo [-10,+10], então o domínio das funções são todos os pontos (x₁,x₂) tais que x₁ ∈ [-10,+10] e x₂ ∈ [-10,+10]

Determinação das Funções Radiais

- Método 1 (cont.):
 - Os centros das funções com relação a cada variável (dimensão) podem ser distribuídos uniformemente (eqüidistantes) ao longo do domínio daquela var.
 - As aberturas das funções (desvios padrão) com relação a cada variável podem ser feitas iguais à distância entre dois centros consecutivos.



Determinação das Funções Radiais

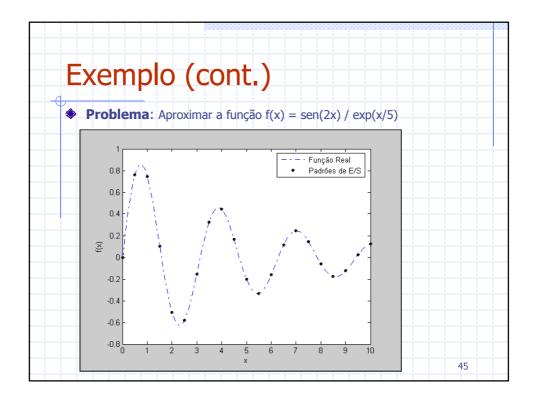
- Método 2 (back-propagation):
 - Análogo ao treinamento de MLPs
 - A cada iteração ajusta-se o conjunto de parâmetros (centros e aberturas das funções) no sentido de minimizar o erro entre a saída da rede e a saída desejada para um conjunto de padrões
 - Usualmente tenta-se minimizar: $J = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} (y(\mathbf{x}_k) y_{RBF}(\mathbf{x}_k))^2$
 - Demanda o cálculo do gradiente (derivadas) de J com relação aos parâmetros...
 - Usualmente aplica-se para refinar o resultado inicial obtido com o método 1 ou método 3 (visto depois)

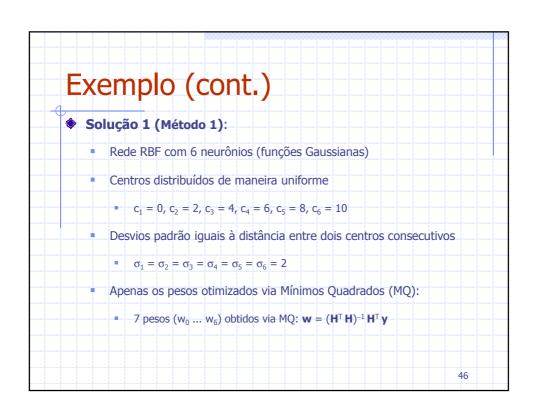
Exemplo (regressão)

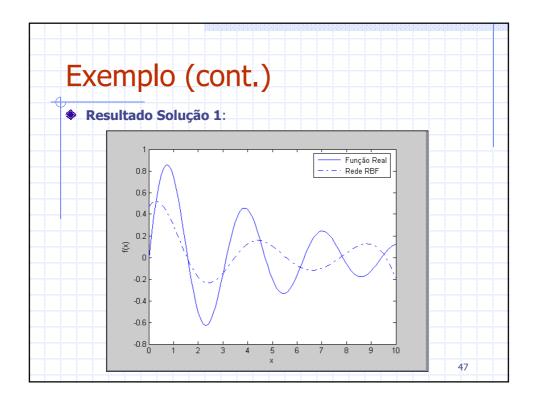
- Problema:
 - Aproximar a função f(x) = sen(2x) / exp(x/5)
- N = 21 padrões de entrada e saída (k = 1, ..., 21):

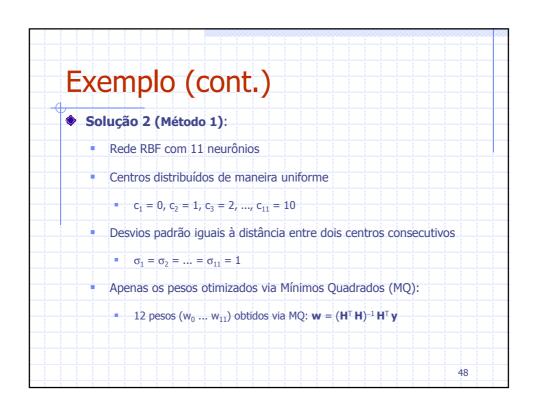
Padrão E/S	X	f(x)
1	0	0
2	0.5	0.7614
3	1.0	0.7445
4	1.5	0.1045
5	2.0	-0.5073
6	2.5	-0.5816
7	3.0	-0.1533
8	3.5	0.3262
9	4.0	0.4445
10	4.5	0.1676

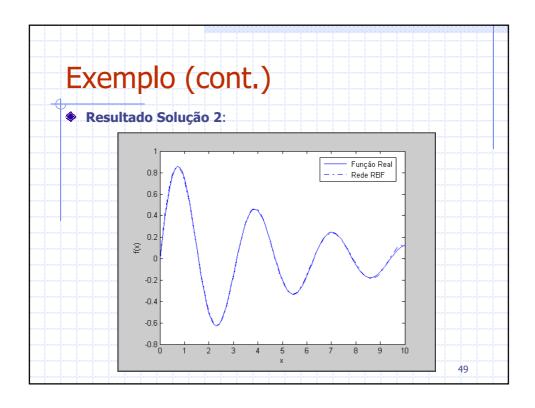
11	5.0	-0.2001
12	5.5	-0.3329
13	6.0	-0.1616
14	6.5	0.1145
15	7.0	0.2443
16	7.5	0.1451
17	8.0	-0.0581
18	8.5	-0.1756
19	9.0	-0.1241
20	9.5	0.0224
21	10.0	0.1236

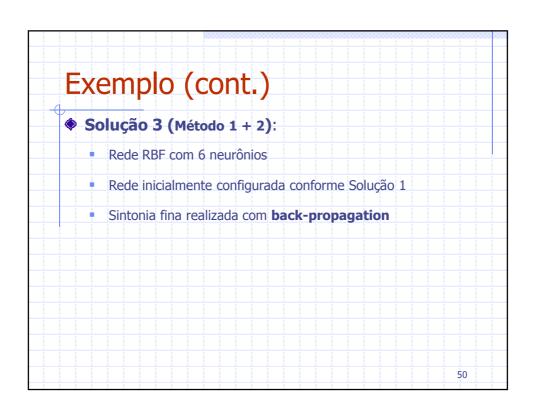


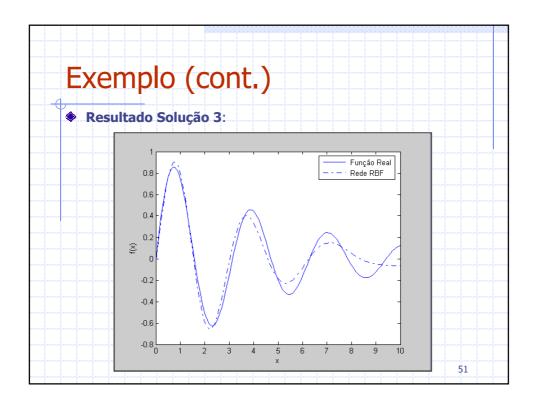


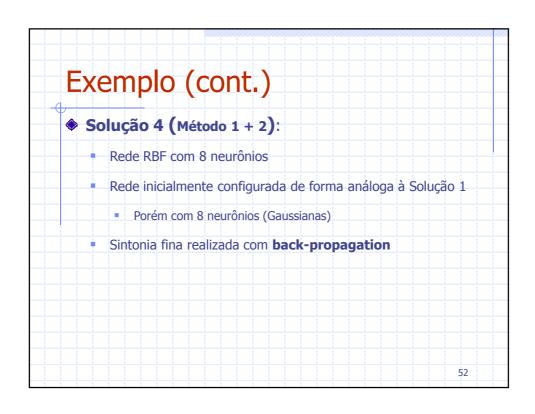


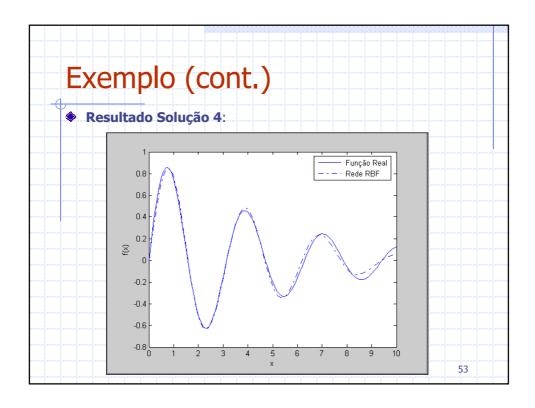


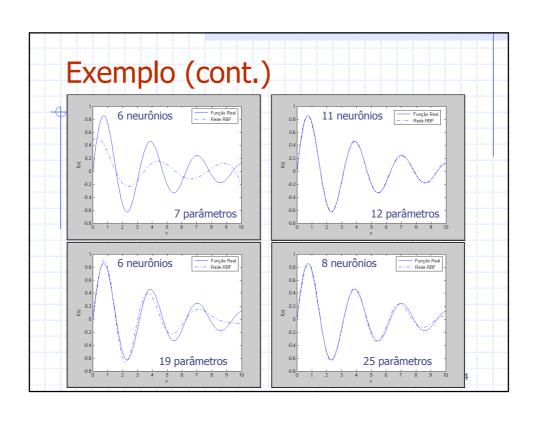












Exemplo (cont.)

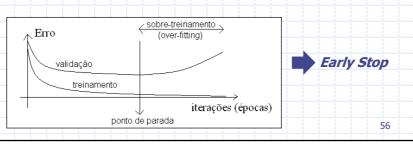
Comparação:

- A heurística de distribuição homogênea das funções radiais (método 1) foi muito eficaz nesse exemplo agindo sozinha, mas não necessariamente é sempre assim
- Embora a rede com 8 neurônios refinados com backpropagation tenha uma quantidade de parâmetros maior durante a fase de **treinamento**, é um modelo mais simples e compacto do que aquele com 11 neurônios (para **utilização**).
- A rede com 11 neurônios poderia ficar ainda mais precisa se seus parâmetros também fossem refinados com backpropagation

55

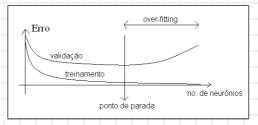
Dicas Básicas

- Usualmente utiliza-se apenas uma parcela dos padrões disponíveis para treinar a rede e reserva-se uma outra parcela para teste ou validação
- Uma boa heurística para saber quando interromper o treinamento (sintonia fina) dos parâmetros via backpropagation é observar os erros de ambas as parcelas:



Dicas Básicas

A mesma idéia pode ser usada para determinar quando parar de acrescentar neurônios à rede...

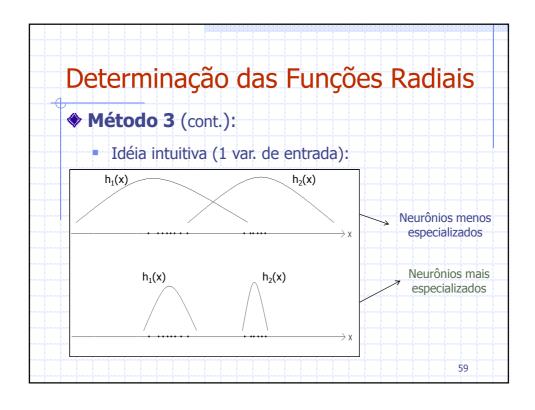


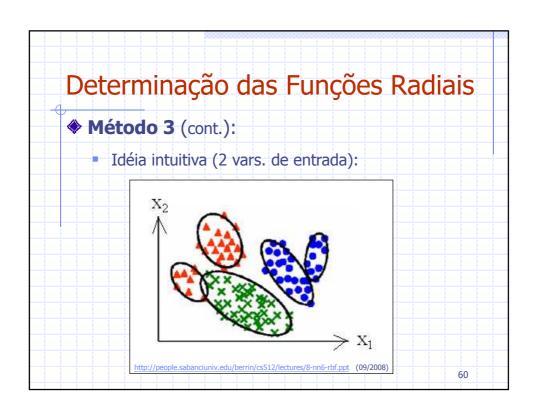
- Uma outra boa dica é normalizar os padrões de E/S de forma que cada variável tenha valores entre –1 e +1
 - Isso minimiza problemas numéricos durante o treinamento

57

Determinação das Funções Radiais

- Método 3 (Clustering Vide Próxima Aula):
 - Agrupar os padrões em grupos (clusters) de padrões mais similares entre si do que aos demais padrões.
 - Associar um neurônio (função radial) para cada grupo de padrões, otimizando a representatividade de cada neurônio / função.
 - Idéia é que cada neurônio responda de forma apropriada e similar a um determinado conjunto de padrões similares
 - Tipicamente (sub)classes em problemas de classificação





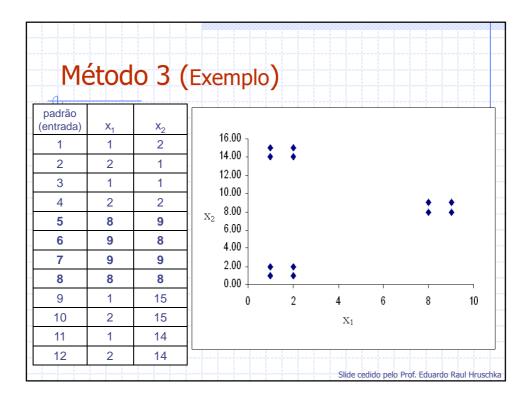
Determinação das Funções Radiais

- Método 3 (cont.):
 - Um dos algoritmos de agrupamento mais populares é o K-means, que agrupa N padrões em K grupos
 - fornece K protótipos (centróides) dos grupos
 - K-means agrupa os N padrões em K grupos com o objetivo de minimizar as distâncias entre os padrões pertencentes a um mesmo grupo e seu protótipo
 - veremos na próxima aula...
 - Mas como aplicar K-means para determinação das funções radiais...?

61

Determinação das Funções Radiais

- Método 3 (cont.):
 - Executa-se K-means com K igual ao número m de neurônios (funções radiais) desejado na rede RBF
 - Toma-se o protótipo (centróide) de cada grupo resultante como centro de uma função radial
 - cada componente do centróide é o centro da função radial correspondente na respectiva variável
 - Toma-se os desvios padrão de cada grupo, em cada variável, como o desvio padrão da função radial correspondente na respectiva variável
 - forma simplificada...



Método 3 (Exemplo)

- ♦ K-means com K = 3 produziria tipicamente os protótipos (1.5 , 1.5), (8.5 , 8.5), (1.5 , 14.5)
- O terceiro grupo, por exemplo, possui desvios padrão em x₁ e em x₂ respectivamente iguais a:

$$\sigma_{1} = \sqrt{\frac{(1-1.5)^{2} + (2-1.5)^{2} + (1-1.5)^{2} + (2-1.5)^{2}}{4}} = 0.5$$

$$\sigma_{2} = \sqrt{\frac{(15-14.5)^{2} + (15-1.5)^{2} + (14-14.5)^{2} + (14-14.5)^{2}}{4}} = 0.5$$

Logo, a função radial (Gaussiana) correspondente pode ser definida como:

$$h_3(x_1, x_2) = \exp\left(-\frac{(x_1 - 1.5)^2}{0.5^2}\right) \times \exp\left(-\frac{(x_2 - 14.5)^2}{0.5^2}\right)$$

RBFs em Problemas de Regressão

- Em problemas de regressão não linear, a mesma arquitetura RBF é usada para modelar uma função F:
 - Na aproximação de mapeamentos estáticos
 - $y = F(x_1, x_2, ..., x_n)$
 - Exemplo: $y = (1/x_1) + (x_2)^{1/2}$
 - Em previsão de séries temporais
 - $y_t = F(y_{t-i}, y_{t-j}, ..., y_{t-k})$
 - Exemplo: $y_t = 10y_{t-3} (y_{t-5})^3 + \exp(-y_{t-8})$
 - Na modelagem de sistemas dinâmicos
 - $y_t = F(u_{t-1}, u_{t-2}, ..., u_{t-p}, y_{t-1}, y_{t-2}, ..., y_{t-q})$
 - Exemplo: $y_t = 3y_{t-1} + (u_{t-1})^{-1/2}$



Leitura e Exercícios

Seção 9.1 de (Braga et al., 2007)

ou

Capítulo 5 de (Haykin, 1999)



Referências

- Haykin, S., Neural Networks: A Comprehensive Foundation, Prentice Hall, 2nd Edition, 1999
- Braga, A. P., Carvalho, A. C. P. L. F., Ludemir, T. B., Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações, LTC, 2a Edição, 2007
- Kovács, Redes Neurais Artificiais: Fundamentos e Aplicações, Collegium Cognitio, 2ª Edição, 1996