Introducción a los modelos computacionales

Práctica 3. Redes neuronales de funciones de base radial

Pedro Antonio Gutiérrez
pagutierrez@uco.es

Asignatura "Introducción a los modelos computacionales"
4º Curso Grado en Ingeniería Informática
Especialidad Computación
Escuela Politécnica Superior
(Universidad de Córdoba)

16 de noviembre de 2021

Objetivos de la práctica

- Familiarizar al alumno con el concepto de red neuronal de funciones de base radial (RBF).
- Implementar una red de este tipo.
- Familiarizar al alumno con el uso de `scikit-learn` como entorno para la creación de modelos de aprendizaje automático.

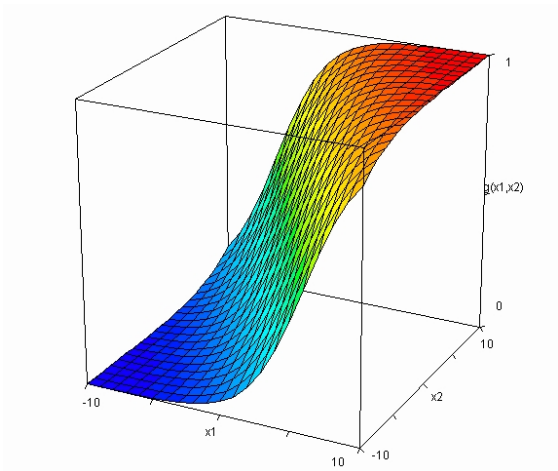
Redes neuronales de funciones de base radial

- Redes Neuronales de Funciones de Base Radial (RBFNN): se basan en una aproximación local.
  - Las neuronas de capa oculta son funciones de base radial (RBF): funciones locales.
  - Al contrario que en las redes tipo perceptrón multicapa, donde las neuronas de capa oculta son tipo sigmoide: funciones de proyección.
- Funciones de proyección: valor alto, distinto de cero, sobre una región amplia del espacio de entrada.
- Funciones locales: valor alto, distinto de cero, sólo sobre una región localizada del espacio de entrada.

Funciones globales Vs locales

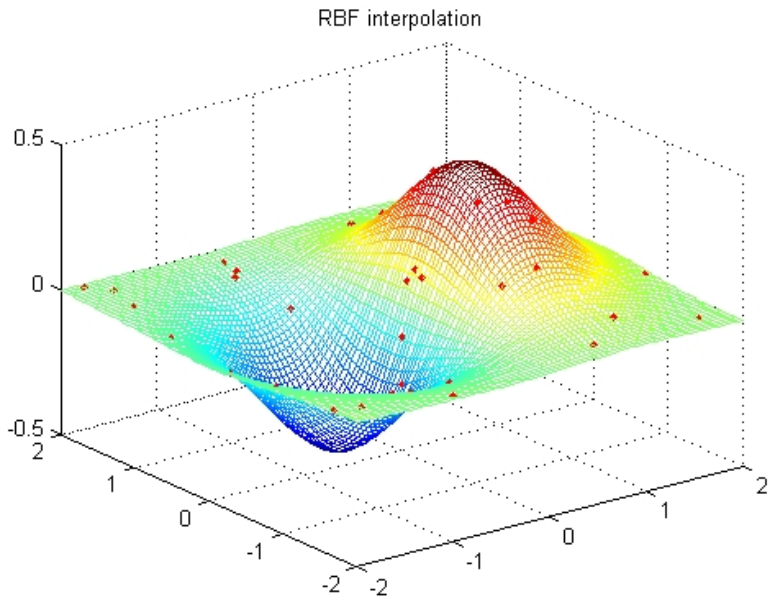
Unidades sigmoide

- Modelo aditivo de proyección.

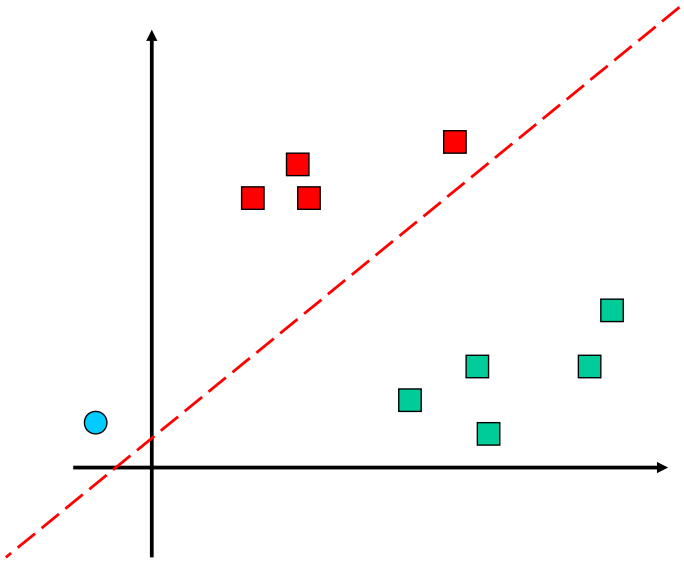


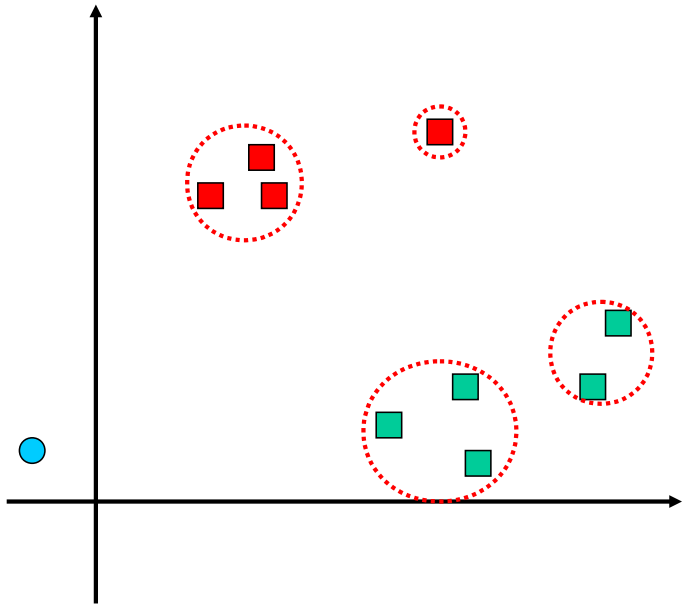
Funciones de Base Radial

- Modelo local.



Funciones globales Vs locales





Funciones RBF

- Una función se dice que es RBF si su salida depende de la distancia que hay entre el vector de entrada a la función y un vector almacenado en ella (centro).
- Cada RBF guarda un centro como referencia y, cada vez que se le presenta un patrón nuevo, se calcula la distancia a dicho centro.
  - Si la distancia es pequeña, la RBF se activa (su salida es 1).
  - Si la distancia es grande, la RBF no se activa (su salida es 0).
- ¿Qué consideramos como grande o pequeño? $\Rightarrow$ Para eso incorporamos un elemento adicional: el radio.
  - Si el radio es pequeño, la activación solo se producirá cuando el patrón esté muy cerca del centro.
  - Si el radio es grande, la activación se producirá a más distancia.

Funciones RBF

- Hay muchas funciones que cumplen estas propiedades: RBF de Cauchy, inversa multicuadrática...
- Pero la más común es la función Gaussiana:

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \sigma) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2}{2(\sigma)^2}\right)$$

donde $\mathbf{c}$ es el centro de la RBF, σ es su ancho y $\mathbf{x}$ es el patrón que estamos evaluando.

- $\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|$ es la norma del vector diferencia entre el centro y patrón, o lo que es lo mismo la distancia euclídea:

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - c_i)^2}$$

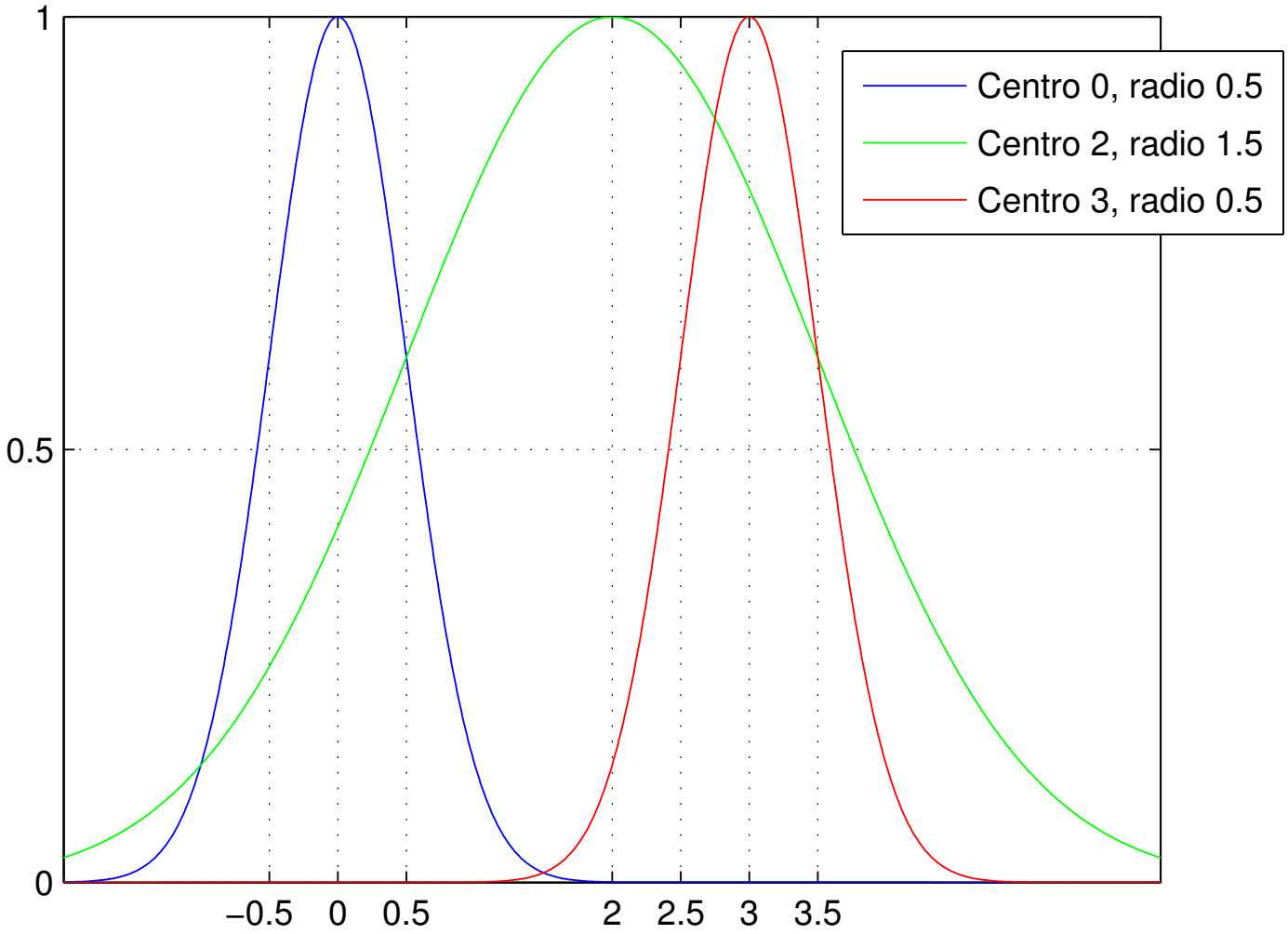
Funciones RBF

- Uniendo ambas expresiones y simplificando:

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \sigma) = \exp\left(-\frac{\left(\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - c_i)^2}\right)^2}{2(\sigma)^2}\right)$$

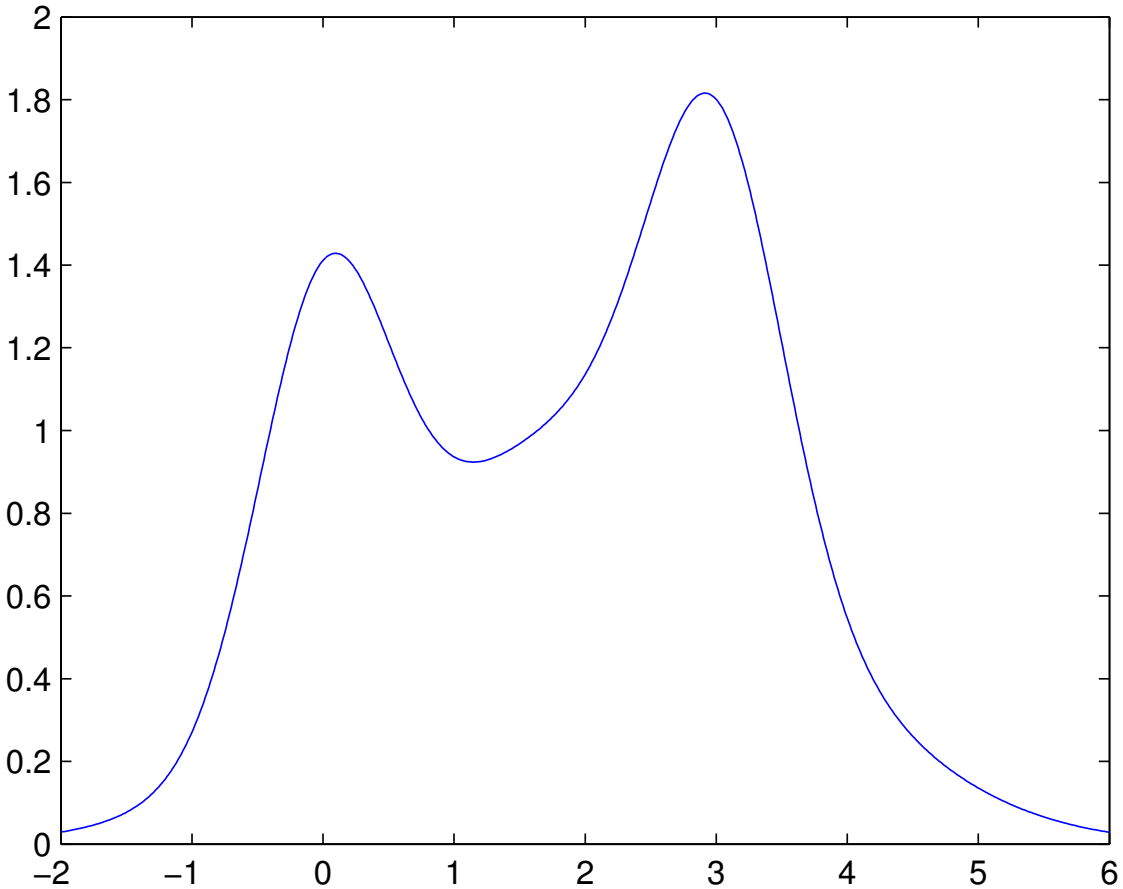
$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, \sigma) = \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - c_i)^2}{2(\sigma)^2}\right)$$

Funciones RBF: efecto del centro y del radio



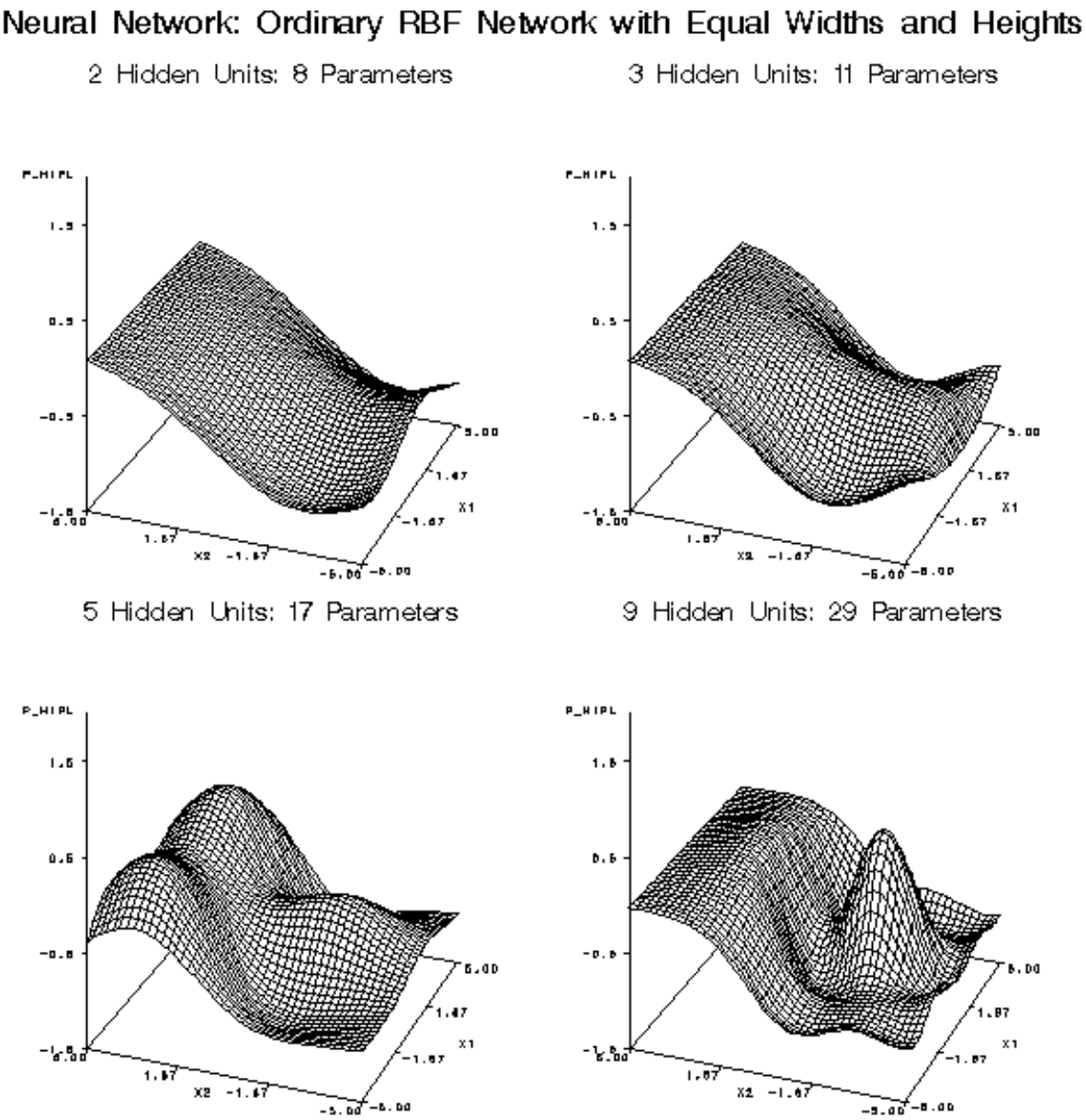
Red neuronal RBF

Suma de las RBF anteriores:



Red neuronal RBF

Ejemplo 2D:



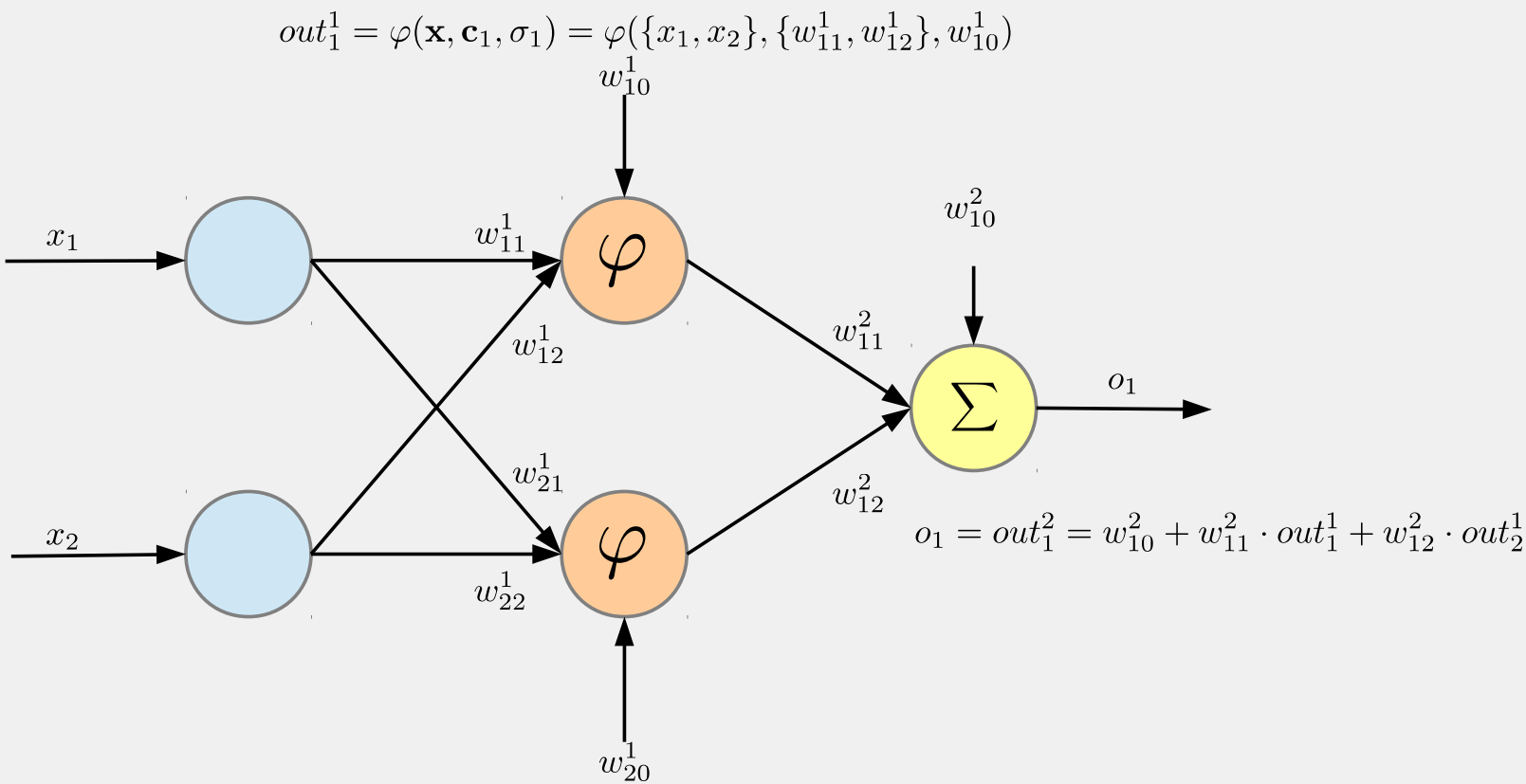
Arquitectura de una RBFNN

- Tres capas:
  - Capa de entrada.
  - Capa oculta (funciones RBF).
  - Capa de salida:
    - Regresión: función lineal (suma ponderada de la salidas de las RBFs).
    - Clasificación: función tipo *softmax*.

Arquitectura de una RBFNN

- Siguiendo la notación que utilizamos para el MLP:
  - Neuronas de tipo RBF:
    - $net_j^h = \sum_{i=1}^{n_{h-1}} \left(w_{ji}^h - out_i^{h-1} \right)^2$
    - $out_j^h = \exp\left(-\frac{net_j^h}{2\left(w_{j0}^h\right)^2} \right)$
  - Neuronas de tipo lineal (en nuestro caso, $h = H$):
    - $out_j^H = net_j^H = w_{j0}^h + \sum_{i=1}^{n_{H-1}} w_{ji}^h out_i^{H-1}$
  - Neuronas de tipo *softmax* (en nuestro caso, $h = H$):
    - $net_j^H = w_{j0} + \sum_{i=1}^{n_{H-1}} w_{ji} out_i^{H-1}$
    - $out_j^H = \frac{\exp(net_j^H)}{\sum_{i=1}^{n_H} \exp(net_i^H)}$

Arquitectura de una RBFNN (Regresión)



Entrenamiento de una red tipo RBF

- ¿Cómo ajustamos los parámetros?
  - Las funciones RBF son derivables $\rightarrow$ Aplicar el algoritmo de retropropagación (entrenamiento totalmente supervisado).
    - Habría que calcular las derivadas con respecto al radio y a los centros.
    - Son complejas y tiene un coste computacional algo mayor que para el perceptrón multicapa.
  - Entrenamiento híbrido: parte no supervisada (*clustering*) y parte supervisada (regresión logística o inversión de una matriz).
    - Las propiedades locales de las redes RBF se aprovechan mejor.
    - El coste computacional es, en general, menor que con un algoritmo de retropropagación.

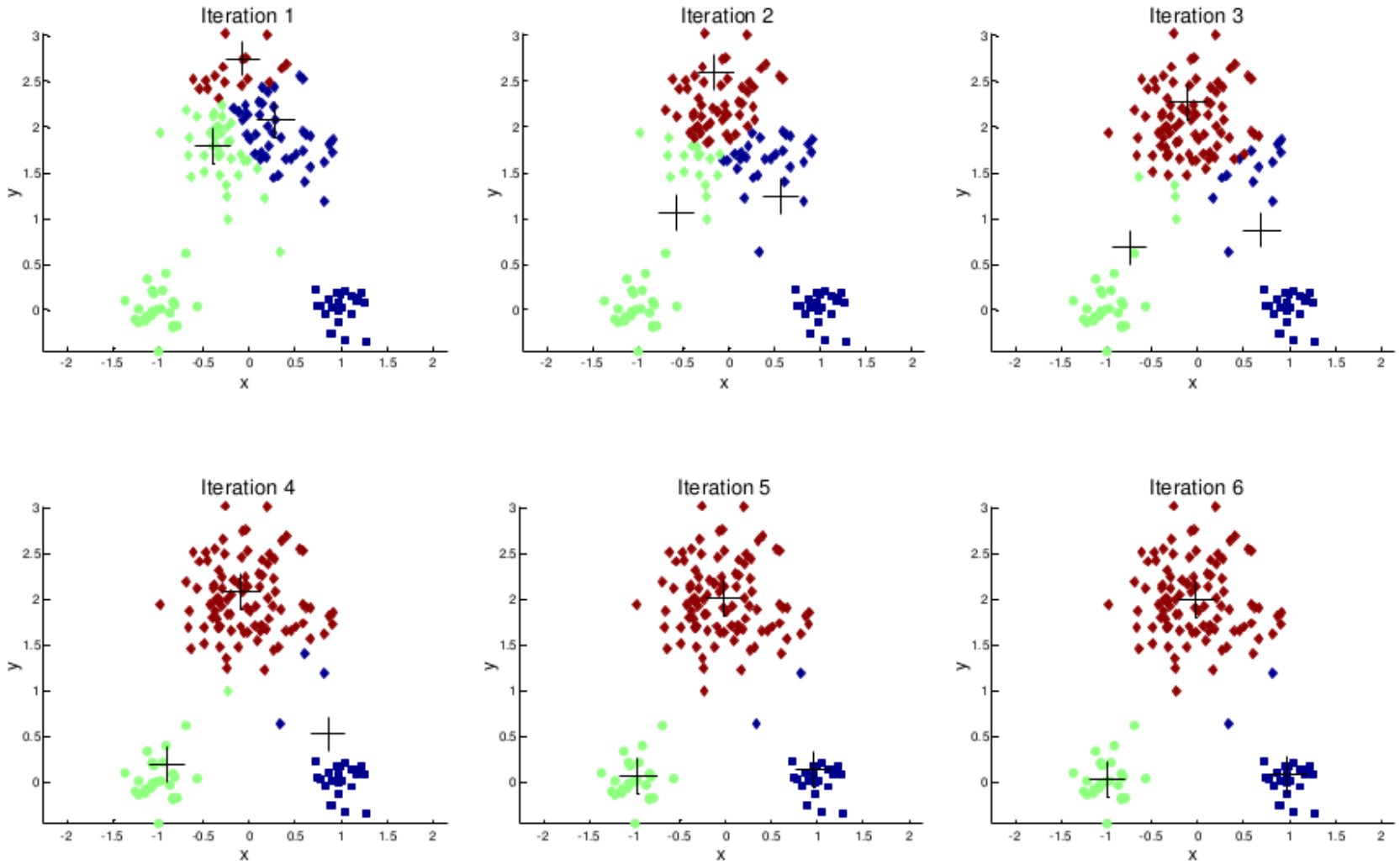
Entrenamiento de una red tipo RBF

- Tenemos que obtener tres cosas:
  1. Coordenadas de los centros de las RBF: $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \ldots, \mathbf{c}_{n_1}$.
     - Pesos de capa de entrada a capa oculta:
       $\mathbf{c}_1 = \{w^1_{11}, w^1_{12}, \ldots, w^1_{1n}\}$
       $\mathbf{c}_2 = \{w^1_{21}, w^1_{22}, \ldots, w^1_{2n}\}$
       $\ldots$
       $\mathbf{c}_{n_1} = \{w^1_{n_1 1}, w^1_{n_1 2}, \ldots, w^1_{n_1 n}\}$.
  2. Ancho de las RBF: $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_{n_1}$.
     - Usaremos el hueco del sesgo:
       $\sigma_1 = w^1_{10}, \sigma_2 = w^1_{20}, \ldots, \sigma_{n_1} = w^1_{n_1 0}$
  3. Pesos de capa oculta a capa de salida (con sesgo):
     $w^2_{10}, w^2_{11}, w^2_{12}, \ldots, w^2_{1n_1}$
     $w^2_{20}, w^2_{21}, w^2_{22}, \ldots, w^2_{2n_1}$
     $\ldots$
     $w^2_{k0}, w^2_{k1}, w^2_{k2}, \ldots, w^2_{kn_1}$

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 1 (clustering)

- El ajuste de los centros de la red puede hacerse mediante un procedimiento de *clustering*.
- La idea es detectar los grupos de patrones (o *clusters*) en el espacio de entrada y poner una RBF en cada *cluster*.
- Para este proceso vamos a utilizar el algoritmo de clustering más popular, el K-medias.
- Las coordenadas de los centroides de cada *cluster* serán las coordenadas de los centros de las RBF.

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 1 (clustering)



Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 1 (clustering)

- K-medias: algoritmo de agrupamiento por particiones.
  - Hay que decirle el número de *clusters*, en nuestro caso será el número de neuronas de la RBF.
  - Cada *cluster* tiene asociado un centroide (centro geométrico del *cluster*).
  - Los puntos se asignan al *cluster* cuyo centroide esté más cerca (utilizando cualquier métrica de distancia).
  - Iterativamente, se van actualizando los centroides en función de las asignaciones de puntos a *clusters*, hasta que los centroides dejen de cambiar.
  - Los resultados dependen de la inicialización de los centroides:
    - En clasificación, escogemos aleatoriamente, y de forma estratificada, n_1 patrones.
    - En regresión, escogemos aleatoriamente n_1 patrones.

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 2 (ajuste de los radios)

- Se pueden utilizar procedimientos más complejos (estimación de densidades) para ajustar bien los radios de las RBF.
- Sin embargo, nosotros ajustaremos los radios de una forma muy simple, tomaremos la mitad (por ser un radio y no un diámetro) de la distancia media al resto de centroides.
- Es decir, el radio de la neurona j será:

$$\sigma_j = w_{j0}^1 = \frac{1}{2 \cdot (n_1 - 1)} \sum_{i \neq j} \|c_j - c_i\| = \quad (1)$$

$$= \frac{1}{2 \cdot (n_1 - 1)} \sum_{i \neq j} \sqrt{\sum_{d=1}^{n} (c_{jd} - c_{id})^2} \quad (2)$$

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 1 clasificación)

- Los pesos de la capa de salida los ajustaremos de dos formas, dependiendo de si estamos ante un problema de clasificación o de regresión.
  - Si el problema es de clasificación, los pesos se ajustarán utilizando regresión logística.
  - Si el problema es de regresión, los pesos se ajustarán utilizando la pseudo-inversa.

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 1 clasificación)

- En ambos casos, necesitaremos la matriz de salidas de las RBF, que llamaremos **R**:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} out_1^1(\mathbf{x}_1) & out_2^1(\mathbf{x}_1) & \dots & out_{n_1}^1(\mathbf{x}_1) & 1 \\ out_1^1(\mathbf{x}_2) & out_2^1(\mathbf{x}_2) & \dots & out_{n_1}^1(\mathbf{x}_2) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ out_1^1(\mathbf{x}_N) & out_2^1(\mathbf{x}_N) & \dots & out_{n_1}^1(\mathbf{x}_N) & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

donde $out_j^1(\mathbf{x}_i)$ es la salida de la j-ésima neurona RBF cuando alimentamos las entradas con el patrón de entrenamiento $\mathbf{x}_i$. Para simular el sesgo hemos incluido una columna constante e igual a 1.

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 1 clasificación)

- Una vez construida la matriz, para el caso de clasificación, aplicaremos regresión logística.
  - Utilizaremos una función a la que le pasaremos la matriz **R** como si fuese la matriz de entradas de mi base de datos.
  - La regresión logística es un modelo lineal de clasificación, que aproxima la probabilidad de pertenencia a una clase de la siguiente forma (función *softmax*):

$$P(\mathbf{x} \in C_j) = o_j = \frac{exp(\beta_{j0} + \sum_{i=1}^{n} \beta_{ji} x_i)}{\sum_{l=1}^{k} exp(\beta_{l0} + \sum_{i=1}^{n} \beta_{li} x_i)} \quad (4)$$

  - El objetivo de la regresión logística es obtener los valores de β_{ji} que maximizan la entropía cruzada:

$$L = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^{N} \left(\frac{1}{k} \sum_{o=1}^{k} d_j \ln(o_j) \right) \quad (5)$$

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 1 clasificación)

- ...aplicaremos regresión logística.
  - La regresión logística puede incluir regularización, que es un mecanismo para lograr que el máximo número de parámetros β_{ji} tiendan a valores muy pequeños (o casi cero).
    - Regularización L2:

$$L = \left(\frac{1}{N} \sum_{p=1}^{N} \left(\frac{1}{k} \sum_{o=1}^{k} d_j \ln(o_j) \right) \right) - \eta \left(\sum_{j=1}^{k} \sum_{i=0}^{n} \beta_{ji}^2 \right) \quad (6)$$

    - Regularización L1:

$$L = \left(\frac{1}{N} \sum_{p=1}^{N} \left(\frac{1}{k} \sum_{o=1}^{k} d_j \ln(o_j) \right) \right) - \eta \left(\sum_{j=1}^{k} \sum_{i=0}^{n} |\beta_{ji}| \right) \quad (7)$$

  - El parámetro η lo debe fijar el usuario y establece la importancia que se le da a la regularización.

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 1 clasificación)

- ...aplicaremos regresión logística.
  - La regularización proporciona modelos más simples y que tienden menos a sobre-entrenar.
  - Diferencia entre L2 y L1:
    - La regularización L2 tiende a proporcionar pesos más pequeños (aunque no necesariamente iguales a cero).
    - La regularización L1 tiende a podar más variables, haciendo que muchos pesos sean iguales a cero (aunque los que no son cero no tienen porque ser pequeños en valor absoluto).

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 2 regresión)

- Una vez construida la matriz, para el caso de regresión, aplicaremos la pseudo-inversa.
  - Desde el punto de vista del álgebra lineal, la salida de la red se puede escribir como:

$$\mathbf{R}_{(N\times(n_1+1))} \times \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times k)} = \hat{\mathbf{Y}}_{(N\times k)} \tag{8}$$

dónde $\mathbf{R}$ es la matriz que contiene las salidas de las neuronas RBF, $\boldsymbol{\beta}$ es una matriz conteniendo un vector de parámetros por cada salida a predecir e $\hat{\mathbf{Y}}$ es una matriz con todas las salidas estimadas.

$$\begin{pmatrix} out^1_{11} & \dots & out^1_{n_1 1} & 1 \\ out^1_{12} & \dots & out^1_{n_1 2} & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ out^1_{1N} & \dots & out^1_{n_1 N} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{21} & \dots & \beta_{k1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{1n_1} & \beta_{2n_1} & \dots & \beta_{kn_1} \\ \beta_{10} & \beta_{20} & \dots & \beta_{k0} \end{pmatrix} \tag{9}$$

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 2 regresión)

- ...aplicaremos la pseudo-inversa.
  - Si queremos obtener los mejores valores posibles para los parámetros, planteamos la siguiente ecuación:

$$\mathbf{R}_{(N\times(n_1+1))} \times \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times k)} = \mathbf{Y}_{(N\times k)} \tag{10}$$

dónde $\mathbf{Y}$ es la matriz de salidas deseadas, es decir:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} d_{11} & \dots & d_{1k} \\ d_{21} & \dots & d_{2k} \\ \dots & \dots & \dots \\ d_{N1} & \dots & d_{Nk} \end{pmatrix} \tag{11}$$

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 2 regresión)

- ...aplicaremos la pseudo-inversa.
  - Si $\mathbf{R}$ fuese cuadrada ($N = (n_1 + 1)$), entonces $\mathbf{R}$ tiene inversa y podemos despejar directamente:

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times k)} = \left(\mathbf{R}_{(N\times N)}\right)^{-1} \mathbf{Y}_{(N\times k)} \tag{12}$$

  - Si $(n_1 + 1) > N$, entonces existen muchas soluciones y hay que usar algún tipo de algoritmo de reducción de características para bajar el valor de n_1.
  - Si $(n_1 + 1) < N$ (el caso más común), existe una solución única, pero como $\mathbf{R}$ no es cuadrada, tenemos que usar la pseudo-inversa de Moore Penrose.

Entrenamiento de una red tipo RBF: fase 3 (pesos de la capa de salida, caso 2 regresión)

- ...aplicaremos la pseudo-inversa.
  - Pseudo-inversa de Moore Penrose:

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times k)} = \left(\mathbf{R}^{+}\right)_{((n_1+1)\times N)} \mathbf{Y}_{(N\times k)} \quad (13)$$

$$\left(\mathbf{R}^{+}\right)_{((n_1+1)\times N)} = \left(\mathbf{R}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times N)} \times \mathbf{R}_{(N\times(n_1+1))}\right)^{-1} \mathbf{R}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times N)} \quad (14)$$

  - Utilizaremos una librería matricial para hacer estas operaciones y obtener $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}_{((n_1+1)\times k)}$.

Algoritmo de entrenamiento RBF *off-line*

Inicio

1. centroidesIniciales $\leftarrow$ aleatoriamente n_1 patrones (regresión) o n_1 patrones de forma estratificada (clasificación).
2. centroides $\leftarrow$ K-medias($\mathbf{X}$,n_1,centroidesIniciales) // $\mathbf{X}$ *es el conjunto de entradas para todos los patrones*
3. $\sigma_j \leftarrow$ (media de las distancias al resto de centroides)/2.
4. Construir la matriz $\mathbf{R}_{(N\times(n_1+1))}$, donde $\mathbf{R}_{ij} = out_j^1(\mathbf{x}_i)$ para $j \neq (n_1+1)$, y $\mathbf{R}_{ij} = 1$ para $j = (n_1+1)$.
5. **Si** clasificación
   1. pesosSalida $\leftarrow$ aplicarRegresionLogistica($\mathbf{R}$,*eta*)
6. **Si** regresión
   1. pesosSalida $\leftarrow$ calcularPseudoInversa($\mathbf{R}$)

Fin

Introducción a los modelos computacionales

Práctica 3. Redes neuronales de funciones de base radial

Pedro Antonio Gutiérrez
pagutierrez@uco.es

Asignatura "Introducción a los modelos computacionales"
4º Curso Grado en Ingeniería Informática
Especialidad Computación
Escuela Politécnica Superior
(Universidad de Córdoba)

16 de noviembre de 2021