CPE 722 –

Redes Neurais Não Supervisionadas e Agrupamento

Luiz **Calôba**

caloba@ufrj.br , www.lps.ufrj.br/~caloba

2012 / 1º

Programa:

- **Introdução, motivação ao uso.**
- **Classificadores, Classificação por similaridade**
- **Aprendizado Supervisionado e Não Supervisionado**
- **Clusterização, propriedades das classes**
- **Pré-processamento**
- **Geração de padrões e classificação**
- **Clusterização, processos clássicos**
- **Redes Neurais em Clusterização**
- **Quantização Vetorial**
- **Camada de Kohonen Simplificada**
- **Rede ART**
- **Counterpropagation**
- **Classes não esféricas**
- **SOM**
- **Demonstrativos e exemplos**

Referências bibliográficas:

***1 -Wasserman, P. – "Neural Computing", Van Nostrand Reinhold, 1989, Cap 4, 8.**
www.lps.ufrj.br/~caloba/wassermann.pdf

*2 – Ivan Silva, I.; Spatti, D. e Flauzini, R. - "Redes Neurais Artificiais para Engenharia e Ciências Aplicadas", Artliber, 2010, cap 8-10.

***3 - Duda, R.O., Hart, P.E., "Pattern Classification and Scene Anal.", Wiley, 1973, Cap 6. www.lps.ufrj.br/~caloba/duda&hart1973cap6.pdf**

4 - Haykin, S., "Neural Networks and Learning machines", Pearson, 2009 ou "Redes Neurais, Teoria e Prática", Bookman, 2001, Cap. 8.1, 8.2, Cap. 9.
http://books.google.com.br/books?id=lBp0X5qfyjUC&pg=PA483&lpg=PP1 (parcial)

http://rapidshare.com/files/127507178/Neural_Networks_-_A_Comprehensive_Foundation_-_Simon_Haykin.pdf

5 – Duda, R.O.; Hart, P.E.; Stork, D.G., "Pattern Classification", Wiley, 2001, Cap 10.
www.lps.ufrj.br/~caloba/duda&hart2001cap10.pdf

6 – Gersho, A., Gray, R.M. – "Vector Quantization and Signal Compression", Kluwer, 1992, Part III.

Software:

Neuralworks, Neuroshell

Toolboxes: Matlab, Statistica

Freeware:

SNNS (Stuttgart Neural Network Simulator) ftp.informatik.uni-stuttgart.de

WEKA (Waikato Environment for Knowledge Analysis) www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/

Avaliação:

Listas de exercícios **(+ aprendizado)**

1 Teste

1 Projeto **(maior peso)**

1- Introdução

Redes Neurais (com treinamento) não Supervisionadas

uma família de redes:

Camada de Kohonen, SOM, ART,
Counterpropagation, LQV, etc.

Por que estudar isto ?

Propriedades importantes:

Aprendizado cego, não supervisionado (on line).

Plasticidade.

Estas redes realizam:

Classificadores por similaridade

Aplicações:

Reconhecimento de padrões;

Estatística de sinais;

Memórias associativas;

Filtragem não-linear;

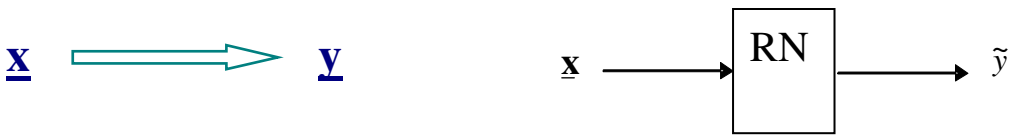
Compressão de dados;

Mapas auto-organizáveis;

etc...

2 - Noções iniciais sobre Classificadores

Mapeadores



Mapeadores lineares / não lineares

$$\underline{\tilde{y}} = \underline{M}\,\underline{x} \qquad \boxed{\underline{\tilde{y}} = \varphi(\underline{x})}$$

Tipos de mapeadores não lineares

Associadores

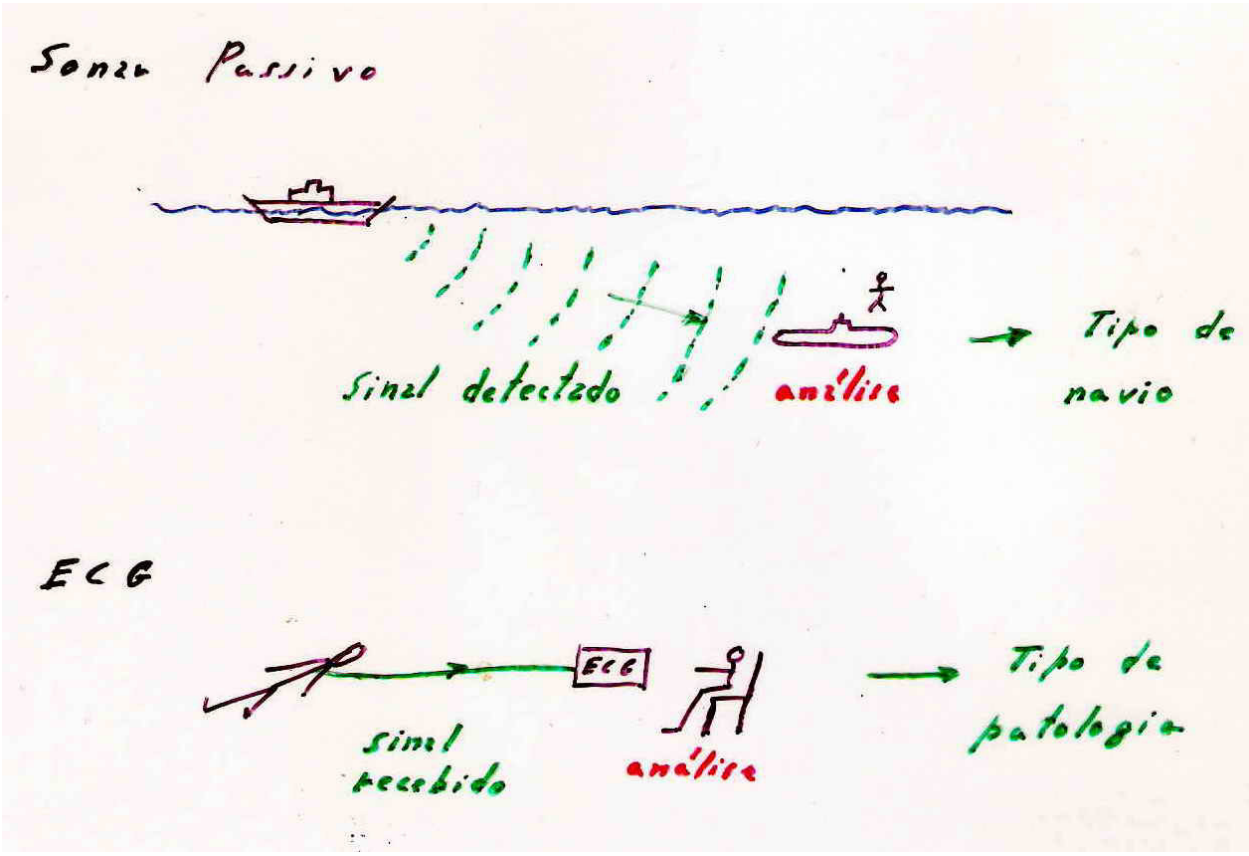
Associam saídas contínuas às entradas

Saídas contínuas $y_i \in (-1, +1)$

Classificadores

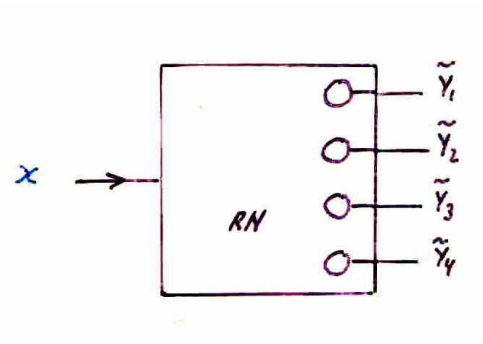
Associam saídas lógicas às entradas (classificam as entradas)

Saídas lógicas $y_i \in \{0,1\}$



2.1 Convenção / Estratégia:

Codificação da Saída (maximamente esparsa)



	C_1	C_2	C_3	C_4
y_1	1	0	0	0
y_2	0	1	0	0
y_3	0	0	1	0
y_4	0	0	0	1

Cada saída separa a sua classe das demais, i.e.

classe versus não classe (um contra todos)

Separação de N classes ⇒ **Separação de duas classes:**

classe vs. não classe

3 - Tipos de classificação / Tipos de aprendizado

Classificadores:

entrada $\underline{\mathbf{x}}$ → RN → $\tilde{y}$ **saída:** $\underline{y}$ **= classe da entrada** $\underline{\mathbf{x}}$

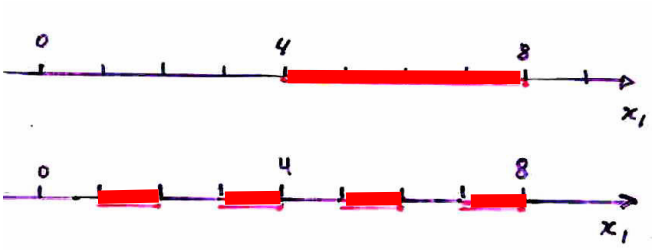
Critérios de classificação

Critérios "não conhecidos", arbitrários

Critérios conhecidos, determinados

Classificadores por similaridade

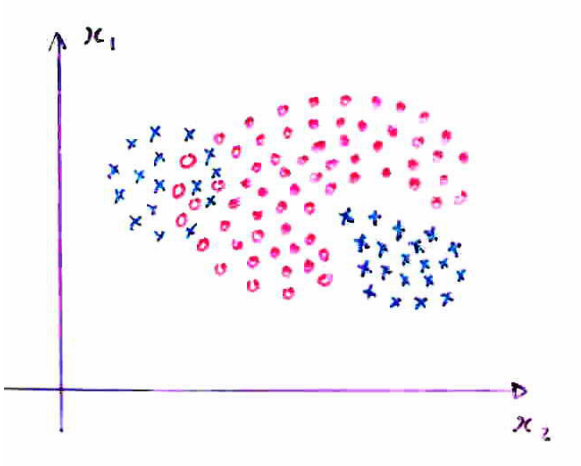
Classificações Arbitrárias

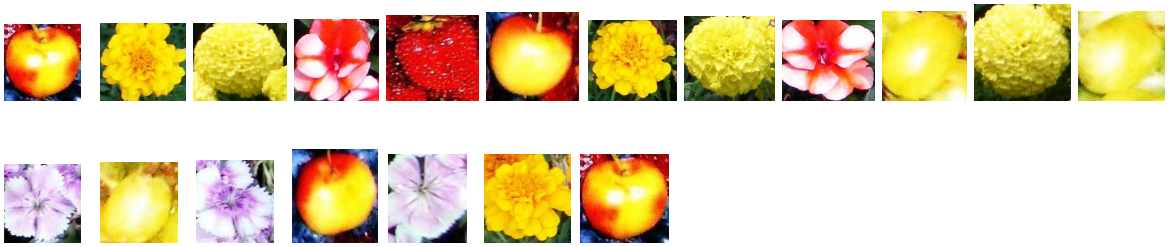


Regiões de fusão

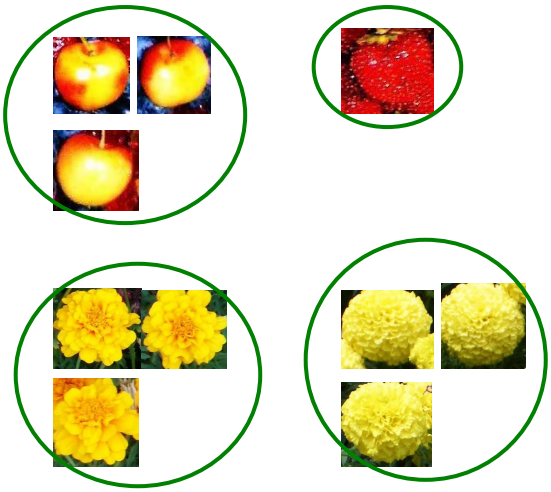
(confusão)

entre classes

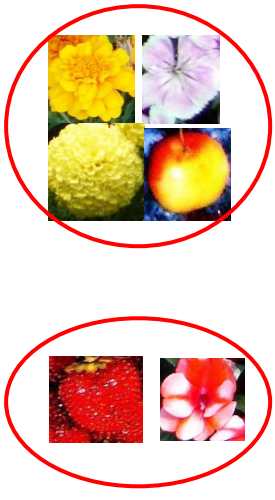




Agrupamentos por similaridade

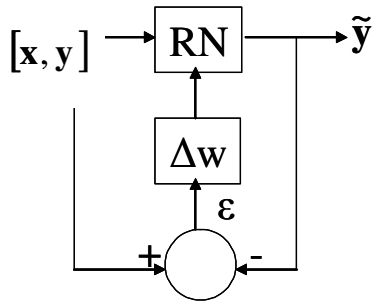


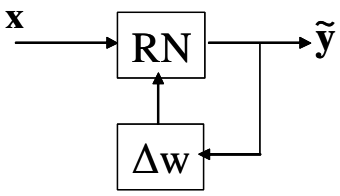
Agrupamentos arbitrários



3.1 - Tipo de aprendizado

Treinamento supervisionado / não-supervisionado





Pode realizar classificações arbitárias

Necessita algum critério: Similaridade

4 - Classificação, Agrupamento ou Clusterização por Similaridade

Agrupar, "de forma natural", conjuntos de dados com "similaridade interna"

Classes agrupam elementos `similares` entre si 'de forma natural' mas

O que significa "de forma natural ?"

O que significa "similaridade interna ?"

Quais são as classes ?

Classificadores supervisionados

As classes são informadas

Ação: apenas classifica as entradas

Classificadores não supervisionados

As classes não são informadas

Ações: determina as classes e

classifica as entradas

Sobrevivência vs.

Classificação por similaridade

Aprendizado não supervisionado

Plasticidade

Animais e vegetais venenosos ou comestíveis ?

4.1 – Dados reais vs. Representação matemática na

Classificação por Similaridade

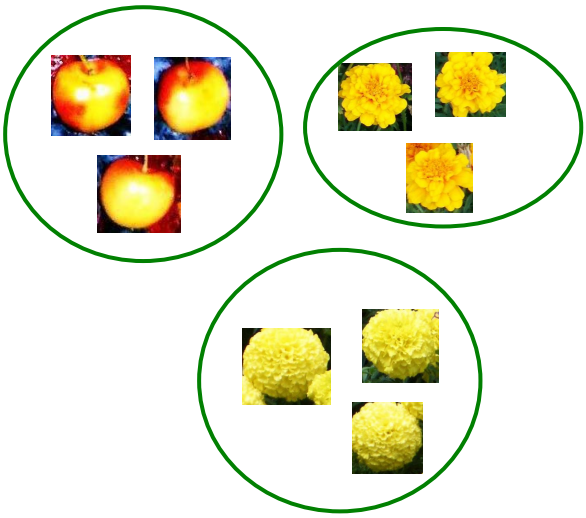
objetos físicos O_1 O_2 ⇒ objetos matemáticos

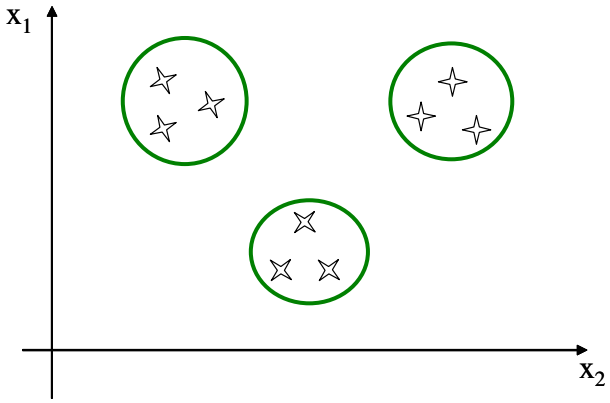
vetores $\underline{\mathbf{x}}_1$ $\underline{\mathbf{x}}_2$

similaridade física ⇒ similaridade matemática

$O_1 \approx O_2$ $\quad \underline{x}_1 \cong \underline{x}_2$ ou $|\underline{x}_1 - \underline{x}_2| <<<$

$O_1 \approx O_2$ ⇒ $\underline{x}_1 \cong \underline{x}_2$





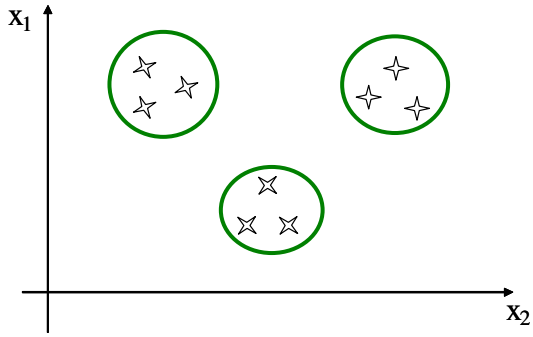
Classificar por similaridade : alocar na mesma classe vetores que estão relativamente próximos entre si.

Como traduzir matematicamente

"relativamente próximos entre si ?"

Como determinar as classes ?

Como realizar a alocação ?



Noções iniciais sobre

Clusterização

Agrupamento ou

Classificação

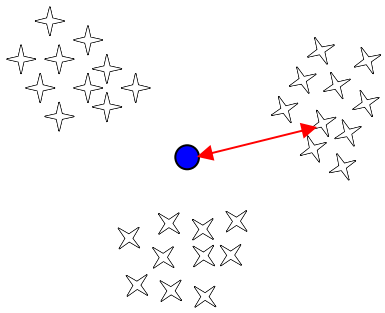
por similaridade

5 - Características de um Agrupamento

5.1 - Características do conjunto de todos os elementos

Média

$$\vec{m} = \underset{\forall i}{E}\,\vec{x}_i = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\vec{x}_i$$



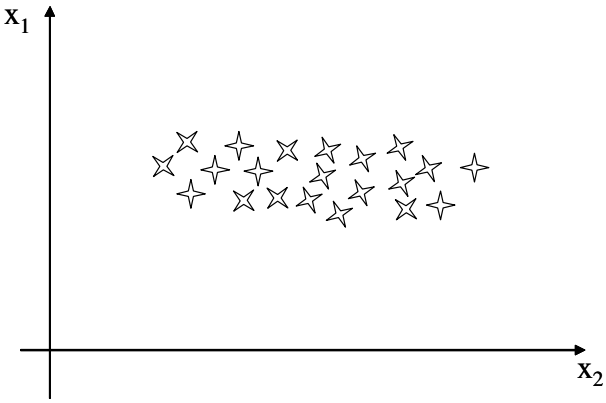
Dispersão, dissimilaridade total

$$F_0 = \sum \left|\vec{x}_i - \vec{m}\right|^2$$

m e F_0 são independentes da clusterização

5.2 Características de uma classe C_j

Características intra classe

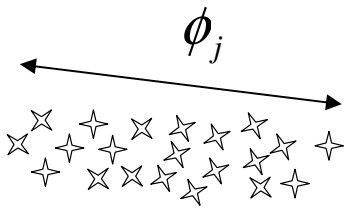


Classe C_j

número de elementos n_j

Diâmetro da classe:

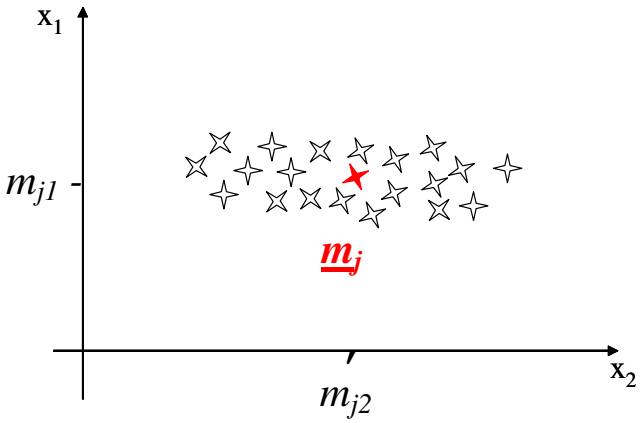
$$\phi_j = \underset{\forall \vec{x}_i, \vec{x}_k C_j}{Max}\left(\left|\vec{x}_i - \vec{x}_k\right|\right)$$



Centro, Baricentro ou Padrão da classe

$$\vec{m}_j = \underset{\forall \vec{x}_i \in C_j}{E}\ \vec{x}_i = \frac{1}{n_j} \sum_{\forall \vec{x}_i \in C_j} \vec{x}_i$$

$$\vec{m}_j = \left[m_{j1} \ldots m_{jk} \ldots \right]^t$$

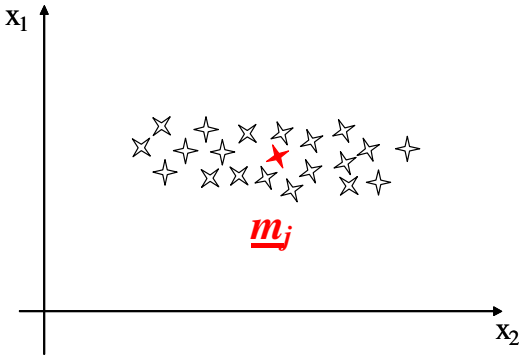


por componente k

$$m_{jk} = \underset{\forall \vec{x}_i \in C_j}{E}\ x_{ik} = \frac{1}{n_j} \sum_{\forall \vec{x}_i \in C_j} x_{ik}$$

Dispersão média intra classe,
Erro (médio quadrático) de representação

$$\sigma_j^2 = \underset{\forall \vec{x}_i \in C_j}{E} \left\| \vec{x}_i - \vec{m}_j \right\|^2 = \frac{1}{n_j} \sum_{\forall \vec{x}_i \in C_j} \left\| \vec{x}_i - \vec{m}_j \right\|^2$$



por componente k

$$\sigma_{jk}^2 = \underset{\forall \vec{x}_i \in C_j}{E} \left(x_{ik} - m_{jk} \right)^2 = \frac{1}{n_j} \sum_{\forall \vec{x}_i \in C_j} \left(x_{ik} - m_{jk} \right)^2$$

e $$\sigma_j^2 = \sum_{\forall k} \sigma_{jk}^2$$

Obs: Valor do padrão p_j que minimiza a dispersão intra classe da classe j:

$$\sigma_j^2 = \sum_{\forall k} \sigma_{jk}^2 \qquad \sigma_{jk}^2 = \frac{1}{n_j} \sum_{\forall \vec{x} \in C_j} \left(x_{jk} - p_{jk} \right)^2$$

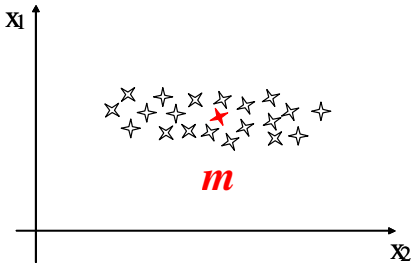
após pequena álgebra

$$\frac{\partial \sigma_{jk}^2}{\partial p_{jk}} = 0 \quad \Rightarrow \quad p_{jk} = m_{jk} \quad \Rightarrow \quad \vec{p}_j = \vec{m}_j$$

o padrão que minimiza a dispersão intra classe (ou erro de representação) de uma classe é o seu baricentro

Dispersão total intra classe da classe *Cj:*

$$F_j = n_j \sigma_j^2 = \sum_{\forall \vec{x}_i \in C_j} \left\| \vec{x}_i - \vec{m}_j \right\|^2$$

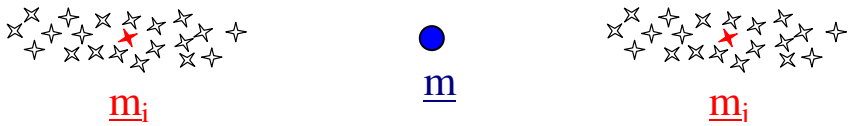


Dispersão total intra classe para todas as classes:

$$F_{in} = \sum_{\forall C_j} F_j \qquad \geq 0$$

F_{in} - parâmetro à minimizar

5.3 – Características (medidas) Inter Classes



M – número de classes

Dissimilaridade total inter classes

$$F_{out} = \sum_{\forall j} n_j \left\| \vec{m}_j - \vec{m} \right\|^2 \qquad \geq 0$$

F_{out} - parâmetro à maximizar

Para um bom agrupamento
escolher as classes de forma a

Minimizar a dispersão intra classe total F_{in}

Maximizar a dissimilaridade inter classes total F_{out}

Com alguma álgebra é possível mostrar que

$F_{in} + F_{out} = F_0$ = constante, independente da clusterização

Logo a clusterização que minimiza F_{in}
ao mesmo tempo maximiza F_{out}, i.e.,

basta que o processo de clusterização minimize F_{in}

Obs:

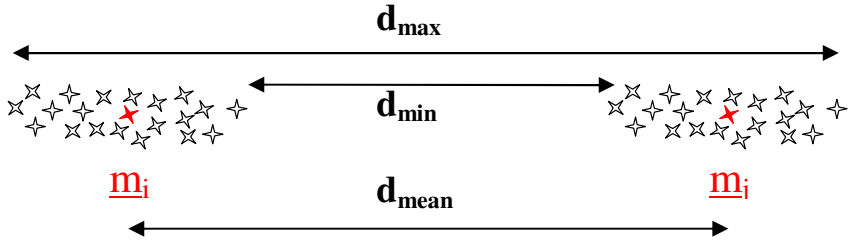
Usamos como medida inter classes a maximizar a

Dissimilaridade total inter classes

$$F_{out} = \sum_{\forall j} n_j \left\| \vec{m}_j - \vec{m} \right\|^2 \qquad \geq 0$$

mas existem outras medidas de disssimilaridade (distância, separação) inter classes:

Outras medidas de disssimilaridade (distância, separação) inter classes:



vizinho + próximo

$$d_{\min}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i, \mathbf{x}'\in\mathcal{X}_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$$

vizinho + distante

$$d_{\max}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \max_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i, \mathbf{x}'\in\mathcal{X}_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$$

distância média

$$d_{\text{avg}}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \frac{1}{n_i n_j} \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}_i} \sum_{\mathbf{x}'\in\mathcal{X}_j} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|$$

distância entre médias

$$d_{\text{mean}}(\mathcal{X}_i, \mathcal{X}_j) = \|\mathbf{m}_i - \mathbf{m}_j\|.$$

(assim como existem também outras medidas de dispersão intra classe)

6 – Processos de Agrupamento

Como realizar a

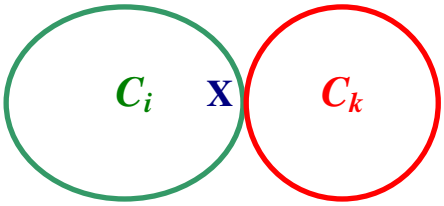
Minimização interativa de F_{in}

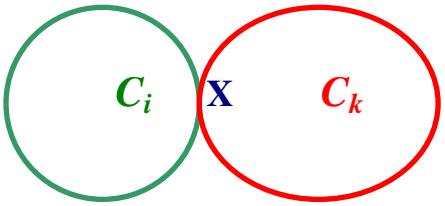
(e simultaneamente a maximização de F_{out}) ?

$$F_{in} = \sum_j F_j$$

Rearranjando os elementos entre as classes para reduzir F_{in}

Deslocando um elemento $\hat{\vec{x}}$ da classe C_i para a classe C_k





Após alguma álgebra:

$$\vec{m}_k = \frac{1}{n_k}\sum_{\forall \vec{x}\in C_k}\vec{x} \quad \Rightarrow \quad \vec{m}'_k = \frac{1}{n'_k}\sum_{\forall \vec{x}\in C'_k}\vec{x} = \frac{1}{n_k+1}\left(\hat{\vec{x}} + n_k\vec{m}_k\right) = \vec{m}_k + \frac{\hat{\vec{x}} - \vec{m}_k}{n_k+1}$$

$$F_k = \sum_{\forall \vec{x}\in C_k}\left|\vec{x} - \vec{m}_k\right|^2 \quad \Rightarrow \quad F'_k = \sum_{\forall \vec{x}\in C'_k}\left|\vec{x} - \vec{m}'_k\right|^2 = \ldots = F_k + \frac{n_k}{n_k+1}\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_k\right|^2$$

$$\vec{m}_i = \frac{1}{n_i}\sum_{\forall \vec{x}\in C_i}\vec{x} \quad \Rightarrow \quad \vec{m}'_i = \frac{1}{n'_i}\sum_{\forall \vec{x}\in C'_i}\vec{x} = \frac{1}{n_i-1}\left(-\hat{\vec{x}} + n_i\vec{m}_i\right) = \vec{m}_i - \frac{\hat{\vec{x}} - \vec{m}_i}{n_i-1}$$

$$F_i = \sum_{\forall \vec{x}\in C_i}\left|\vec{x} - \vec{m}_i\right|^2 \quad \Rightarrow \quad F'_i = \sum_{\forall \vec{x}\in C'_i}\left|\vec{x} - \vec{m}'_i\right|^2 = \ldots = F_i - \frac{n_i}{n_i-1}\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_i\right|^2$$

$$\Delta F_{in} = \left(F'_k - F_k\right) + \left(F'_i - F_i\right) = \frac{n_k}{n_k+1}\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_k\right|^2 - \frac{n_i}{n_i-1}\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_i\right|^2$$

F_{in} é reduzido quando

deslocamos um elemento $\hat{\vec{x}}$ da classe C_i para a classe C_k

se

$$\frac{n_i}{n_i - 1}\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_i\right| > \frac{n_k}{n_k + 1}\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_k\right|^2$$

como $\frac{n_i}{n_i - 1} > 1 > \frac{n_k}{n_k + 1}$ **podemos simplificar a condição, basta que**

$$\left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_i\right| > \left|\hat{\vec{x}} - \vec{m}_k\right|^2$$

i.e. que a distância do elemento ao baricentro da nova classe seja menor que ao da antiga.

6.1 Um processo de clusterização interativo simples e eficaz:

K-means, C-means, Isodata ou Lloyd

entradas: $\vec{x}_i \quad i = 1,2,...,N$

centros de classe: $\vec{m}_j \quad j = 1,2,...,K$

Inicialização: Arbitre K centros $\vec{m}_j \quad j = 1,2,...,K$

sugestão: use as K primeiras entradas $\vec{x}_i \quad i = 1,2,...,K$
não muito próximas entre si (à discutir mais tarde)

Loop

Reclassificação das entradas

$$\forall \ \vec{x}_i \quad i = 1,2,\ldots,N$$

Se $\vec{m}_j$ é a melhor representação de $\vec{x}_i$, i.e. se

$$\left|\vec{x}_i - \vec{m}_j\right| < \left|\vec{x}_i - \vec{m}_k\right| \quad \forall k \neq j \quad \textbf{então} \quad \vec{x}_i \in C_j$$

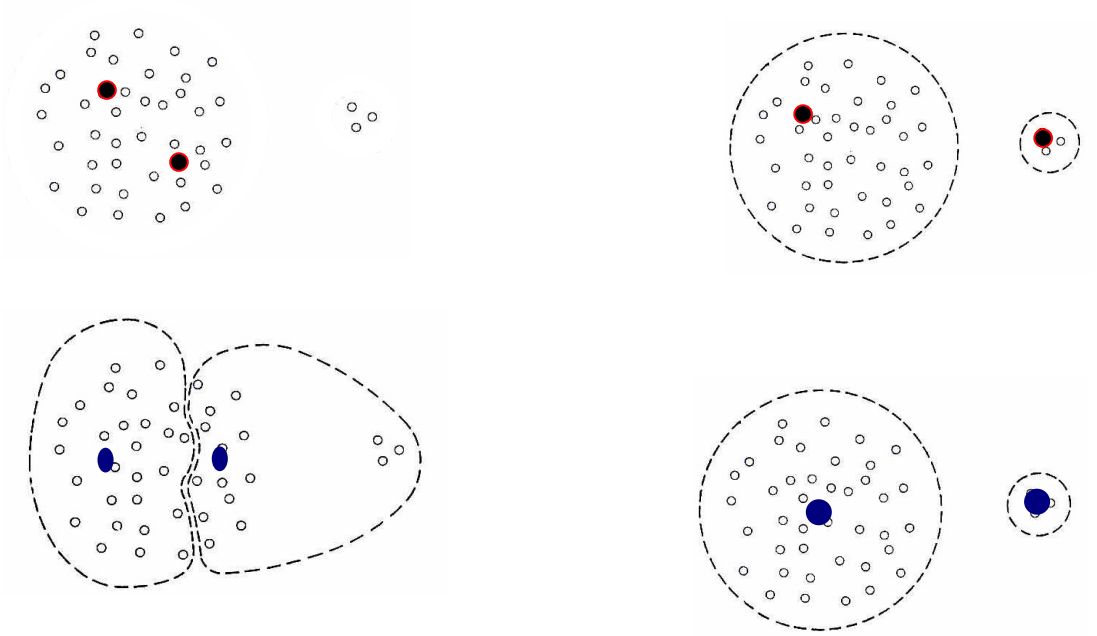
Atualização dos centros de classe

$$\forall \quad j = 1,2,\ldots,K$$

$$\vec{m}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{\forall \vec{x} \in C_j} \vec{x}$$

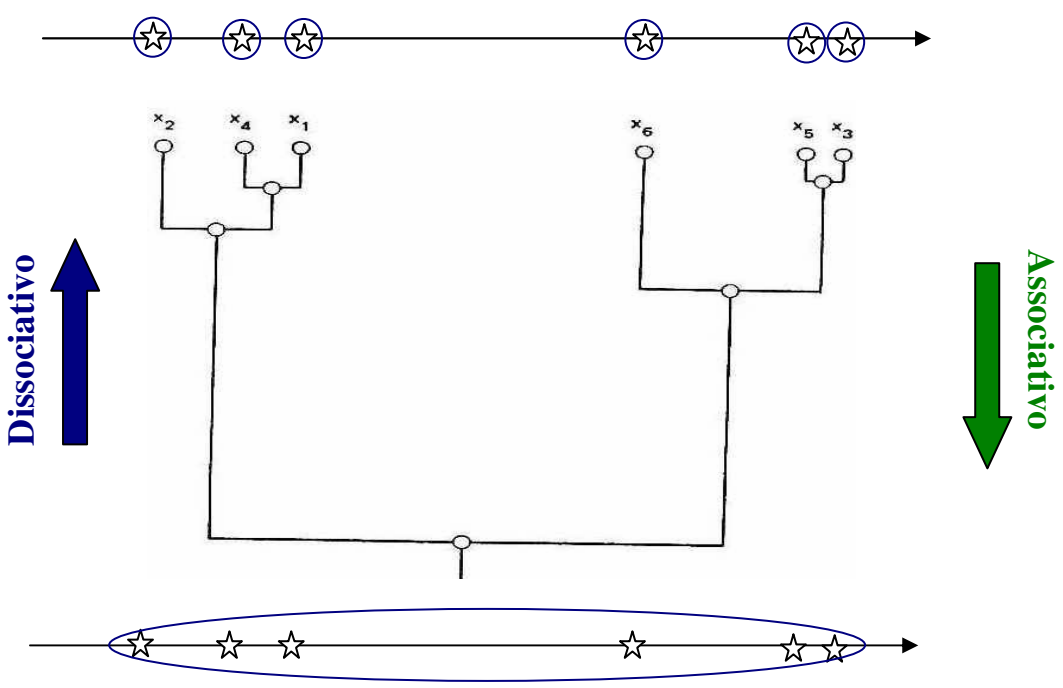
Quando nenhum elemento trocar de classe: Fim.

Inicialização, mínimos locais



inicializar com entradas não muito próximas

7 - Algorítmos Hierárquicos: dendogramas, árvores

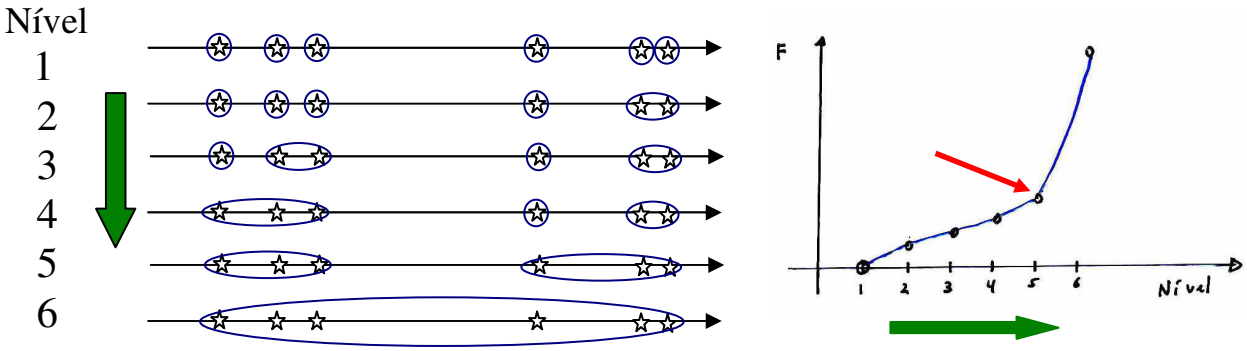


7.1 Algorítmo Aglomerativo, Associativo:

n elementos c classes

c = n n-1 n-2 ... 2 1

F_{in} = F_n=0 < F_{n-1} < F_{n-2} < F_2 < F_1



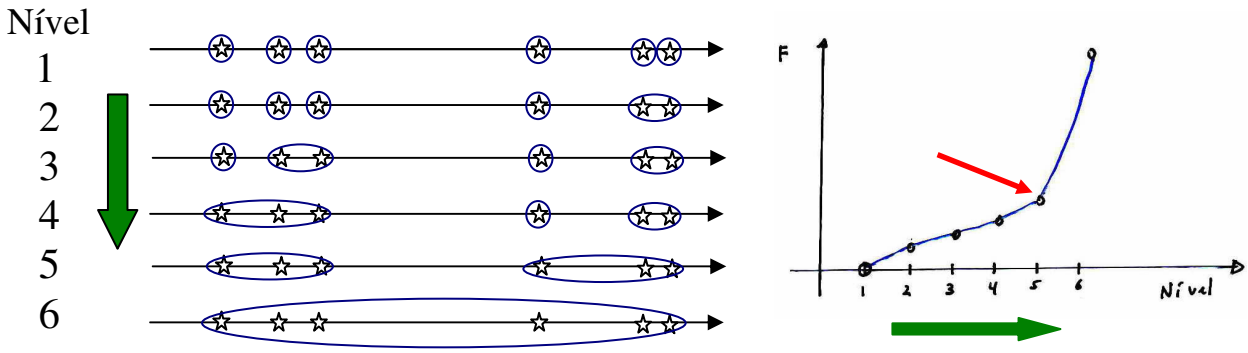
Algoritmo Hierárquico Associativo:

Inicialização: n elementos $\Longrightarrow$ n clusters

Loop:

Junte os dois clusters que aumentam F_{in} o mínimo possível

Repetir até chegar ao número de clusters desejado ou F_{in} crescer muito



Obs: se $\underline{x}_i$ e $\underline{x}_j$ estão em um mesmo cluster, permanecerão juntos. É dito um algorítmo hierárquico.

Que clusters juntar ?

$$C_j \qquad \vec{m}_j = \frac{1}{n_j}\sum_{\forall \vec{x}\in C_j}\vec{x} \qquad F_j = \sum_{\forall \vec{x}\in C_j}\left|\vec{x}\right|^2 - n_j\left|\vec{m}_j\right|^2$$

$$C_k \qquad \vec{m}_k = \frac{1}{n_k}\sum_{\forall \vec{x}\in C_k}\vec{x} \qquad F_k = \sum_{\forall \vec{x}\in C_k}\left|\vec{x}\right|^2 - n_k\left|\vec{m}_k\right|^2$$

$$C_{jk} = C_j \cup C_k \qquad \vec{m}_{jk} = \frac{n_j\vec{m}_j + n_k\vec{m}_k}{n_j + n_k} \qquad F_{jk} = \sum_{\forall \vec{x}\in C_j, C_k}\left|\vec{x}\right|^2 - (n_j + n_k)\left|\vec{m}_{jk}\right|^2$$

$$\Delta F = F_{jk} - \left(F_j + F_k\right) = \frac{n_j\, n_k}{n_j + n_k}\left|\vec{m}_j - \vec{m}_k\right|^2$$

$$\Delta F = \frac{n_j\, n_k}{n_j + n_k}\left|\vec{m}_j - \vec{m}_k\right|^2$$ **deve ser pequeno**

escolher centros próximos:

$$\vec{m}_j \approx \vec{m}_k$$

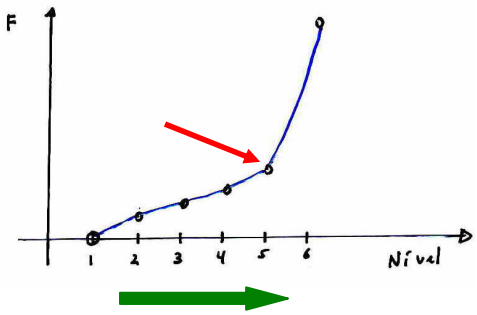
de preferência com populações desiguais:

$$\frac{n_j n_k}{n_j + n_k} \approx \begin{cases} n_j & se \quad n_j << n_k \\ \dfrac{n_j}{2} & se \quad n_j \approx n_k \end{cases}$$

Quando parar o processo ?

Um agrupamento "natural" (um número "bom" de classes) é alcançado no algorítmo associativo imediatamente antes de F_{in} apresentar um grande acréscimo em um único passo.

Por este critério o ponto de parada está indicado pelas seta vermelha no exemplo anterior.

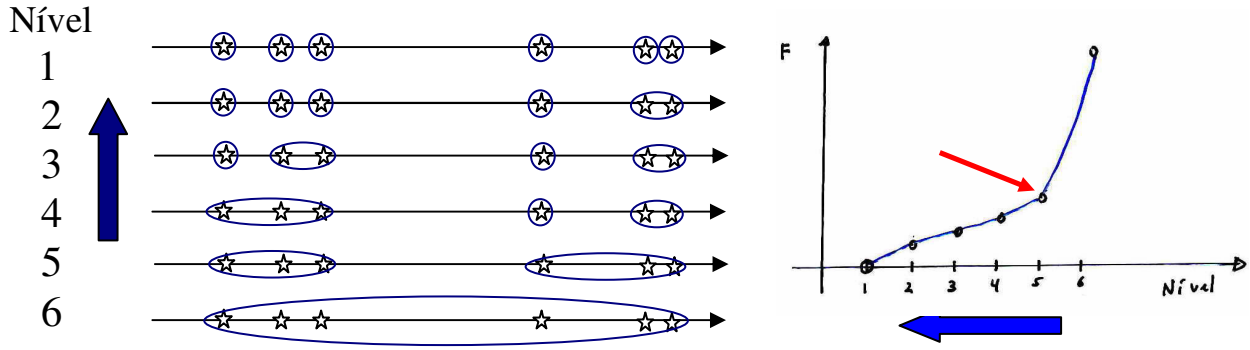


7.2 Algorítmo Divisivo, Dissociativo:

n elementos c classes

c = 1 2 3 ... n-1 n

F_{in} = F_1 < $F_{2<}$ F_3 < F_{n-1} < F_n=0



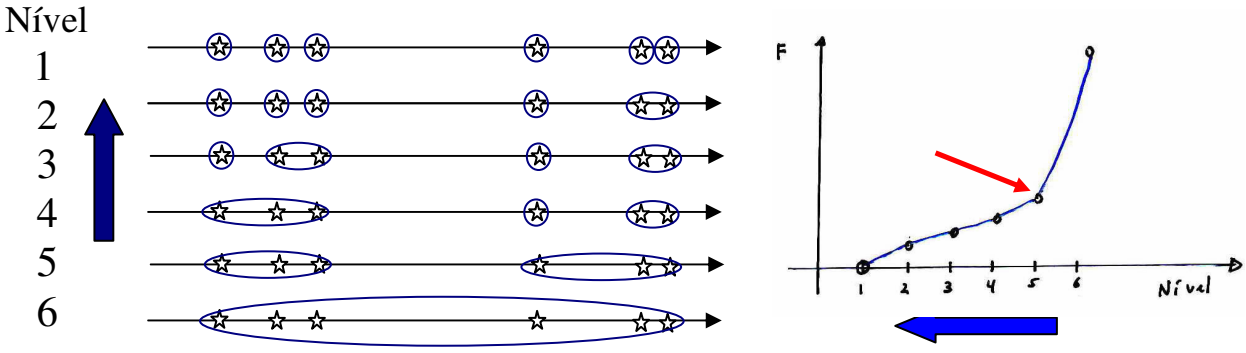
Algoritmo Hierárquico Dissociativo:

Inicialização: n elementos ⇨ 1 cluster

Loop:

Divida o cluster que reduz F_{in} o máximo possível

Repetir até chegar ao número de clusters desejado ou F_{in} quase não decair



Que cluster dividir ?

Critério: maior F_j , por exemplo

Método:

$$\vec{m}_j \nearrow \vec{m}_j + \vec{\delta}$$
$$\vec{m}_j \searrow \vec{m}_j - \vec{\delta}$$

$\Rightarrow$ **K-means**

Quando parar o processo ?

Um agrupamento "natural" (um número "bom" de classes) é obtido no algorítimo dissociativo imediatamente após F_{in} apresentar um grande decréscimo em um único passo.

Por este critério o ponto de parada esta indicado pela seta vermelha no exemplo anterior.