

Identificação de Processo Não-linear Usando Rede Neural com Método de Treinamento Híbrido Baseado em Filtro de Kalman e Máxima Descida

Leandro dos Santos Coelho e Luiz Fernando Villa
Pontifícia Universidade Católica do Paraná, PUCPR/CCET/PPGEPS/LAS
Grupo Produtrone, Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas
Laboratório de Automação e Sistemas, LAS/PPGEPS/CCET/PUCPR
Rua Imaculada Conceição, 1155, CEP 80215-901, Curitiba, PR, Brasil
E-mail: leandro.coelho@pucpr.br; lfvilla@uol.com.br

Abstract

There are a wide variety of identification methods and model structures forms to choose for system nonlinear identification applications. Neural networks have proved to be versatile and useful nonlinear models for industrial processes. This paper presents a comparative study of learning methods for training of radial function neural networks (RBF-NN). Simulations involving the RBF-NNs with training methods based on Kalman filter, gradient descent, and a Kalman-gradient descent hybrid approach. The simulation results indicate the potentialities of the hybrid approach in RBF-NNs learning for one step ahead identification of a pH neutralization case study.

1. Introdução

As redes neurais são metodologias da inteligência computacional inspiradas em estudos do cérebro e o sistema nervoso humano. As redes neurais podem ser consideradas como sistemas dinâmicos não lineares consistindo de elementos de processamento (neurônios), que são interconectados entre si, com ponderações ajustáveis. Entre as características relevantes das redes neurais têm-se: processamento paralelo, aprendizado, memória associativa e distribuída. Estas características são inspiradas nas redes neurais biológicas. As redes neurais providenciam, usualmente, conhecimento quantitativo não-paramétrico sendo adequadas para identificação de sistemas, aprendizado e adaptação em sistemas com comportamento dinâmico complexo [1].

Em particular, as redes neurais de função de base radial (RNs-RBF) são uma alternativa de modelo não-linear para problemas de regressão e classificação de padrões. Grande parte do interesse pelas RNs-RBF é proveniente do fato delas possuírem fundamentação estatística e são consideradas aproximadores universais de funções com dada precisão [2], realizando um mapeamento das entradas de rede de dimensão vetorial m , em uma saída de dimensão vetorial n de qualquer função vetorial contínua.

As RNs-RBF apresentam potencialidades de generalização local, em que a interferência no aprendizado é minimizada e o aprendizado é relativamente rápido, devido ao número mínimo de

pesos ajustados a cada vetor de treinamento apresentado à rede neural [1], [3].

Na literatura, várias abordagens de treinamento de redes neurais usando algoritmo de máxima descida (*gradient descent*) [4]-[6] e filtro de Kalman [7]-[12] têm sido propostas. A contribuição deste trabalho é avaliar as potencialidades de usar uma abordagem híbrida de treinamento de RNs-RBF baseada em algoritmo de máxima descida e filtro de Kalman estendido (EKF, *Extended Kalman Filter*).

Neste trabalho, cada um desses métodos é discutido e detalhado. Os resultados dos diferentes métodos de treinamento da RN-RBF são apresentados e analisados na identificação não-linear de um sistema multivariável de neutralização de pH [13] composto de um tanque agitado e de volume constante. Os resultados de simulação da identificação deste sistema utilizando RN-RBF foram promissores, mostrando a potencialidade da RN-RBF para obtenção de um aprendizado rápido usando um método de treinamento híbrido para previsões de curtíssimo prazo (um passo à frente) de sistemas não-lineares.

O artigo é organizado da seguinte forma. A descrição da RN-RBF e as abordagens de treinamento da RN-RBF são detalhadas na seção 2. Uma breve descrição do processo de neutralização de pH e a análise dos resultados obtidos são detalhadas na seção 3. Finalizando, a conclusão e comentários em relação aos resultados obtidos são apresentados na seção 4.

2. Rede neural função de base radial

O processamento da entrada de uma rede neural se realiza de acordo com sua topologia e o tipo da ativação dos neurônios. Em uma RN-RBF clássica, este aspecto consiste na alimentação adiante (*feedforward network*) de uma entrada de dimensão m em uma camada oculta, que possui c neurônios ocultos que implementam uma função de ativação baseada em uma medida de similaridade entre os vetores de entrada e os protótipos. Cada neurônio da camada oculta possui um protótipo. As saídas da camada oculta são interligadas às unidades da camada de saída por ramos com pesos sinápticos que ponderam cada saída dos neurônios presentes na camada oculta. Cada unidade da camada de saída implementa uma soma ponderada das saídas da

camada oculta. A resposta das camadas de saída forma os elementos do vetor de resposta da RN-RBF. A Figura 1 mostra o diagrama em grafo de fluxo de sinal de uma RN-RBF.

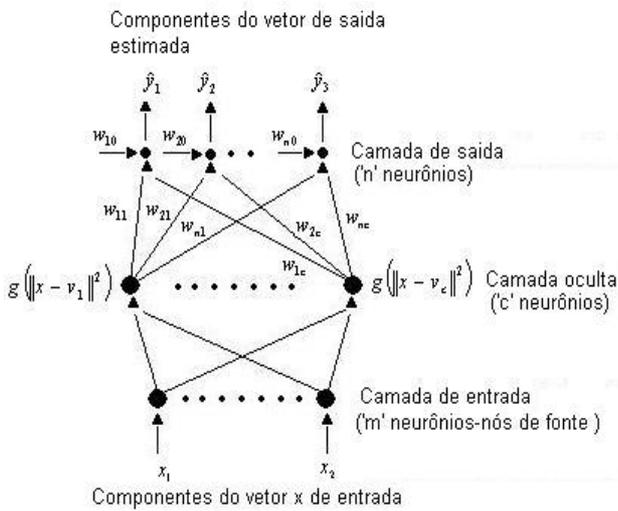


Figura 1: Topologia de uma RN-RBF.

Uma função de base radial, ϕ , apresenta uma saída simétrica em torno de um centro associado, μ_c , tal que $\phi_c = \phi(\|x - \mu_c\|)$, onde $\|\cdot\|$ é a norma vetorial. Uma condição suficiente para uma função ser candidata à função de base radial é a de ser radialmente simétrica e possuir primeira derivada monotônica. A função Gaussiana é o tipo de função de base radial utilizada neste artigo. As funções Gaussianas são caracterizadas por um parâmetro de escala (ou comprimento), σ , e isto é verdade para muitas outras classes de funções de base radial. Tais classes podem ser representadas como:

$$\phi_c(x) = \phi(\|x - \mu_c\|; \sigma) \quad (1)$$

Um conjunto de funções de base radial pode servir como uma base para representação de uma diversificada classe de funções, que são expressas como combinações lineares de funções de base radial, tal que:

$$y(x) = \sum_{j=1}^M \omega_j \phi(\|x - \mu_c\|) \quad (2)$$

Para identificação de sistemas, as RN-RBFs modelam uma função implícita de um fenômeno físico. O modelo neural de identificação é paramétrico do tipo “caixa-preta”, pois a RN-RBF contém parâmetros livres sem significado físico a serem ajustados para que a rede consiga representar a função implícita do processo [3].

Os vetores de protótipos e pesos sinápticos são os parâmetros da estrutura da RN-RBF. Deve-se ressaltar que os valores desses parâmetros não acrescentam nada

de conhecimento a respeito do sistema, porém devem cumprir o determinado: aproximar a resposta do sistema a uma determinada entrada. Para tanto a estimação dos parâmetros das redes neurais em geral, incluindo as RNs-RBF pode ser concebido como um problema de aprendizado com uma “possível” interpretação biológica e também com equivalência matemática (problema de otimização não-linear na estimação dos parâmetros do modelo segundo um critério de otimalidade) [1].

Alguns pesquisadores têm treinado as RNs-RBF, escolhendo os centros das unidades ocultas aleatoriamente no conjunto de treinamento. Outros têm utilizado métodos não-supervisionados (por exemplo, agrupamento pelo método de k -médias), como também algoritmos supervisionados para a seleção dos centros [12]. Esses métodos de treinamento separam as tarefas de determinação dos protótipos e a otimização dos pesos. A vantagem dessa abordagem é a rapidez no treinamento da rede como resultado da separação das tarefas e aplicação de um método híbrido de treinamento em alternativa ao treinamento global e a otimização não-linear explícita da descida de encosta (incluindo o algoritmo de retropropagação do erro) [2].

A separação das tarefas no treinamento da rede é possível devido a estrutura da RN-RBF e seu tipo de função de ativação que age localmente no espaço de entrada. Foi dada uma considerável atenção na literatura das RNs-RBF em como obter um método de treinamento baseado em técnicas lineares explorando características estruturas das RNs-RBF. Observa-se na Figura 1 que se os protótipos são fixados e a função da camada escondida $g(\cdot)$ conhecida, a rede é linear em seus pesos sinápticos w . Assim, a estrutura da RN-RBF possibilita a separação de tarefas no processo de aprendizado, com a vantagem que na estimação dos pesos w o treinamento da rede se torna uma tarefa rápida de ser resolvida através de métodos de mínimos quadrados [2].

Segundo Chen *et al.* [2], “o problema do mal-condicionamento nas estratégias híbridas pode, por exemplo, ocorrer devido aos centros estarem próximos, resultando em uma dependência linear entre ambos os centros”. Assim o mal-condicionamento numérico da rede pode ser contornado pelos métodos de agrupamento (*clustering*) que faz a escolha dos protótipos como sendo representantes de populações encontradas nos dados de entrada por aprendizado não supervisionado. Observa-se nos métodos que exploram a localidade da RN-RBF que somente as entradas similares aos protótipos serão capazes de contribuir de forma efetiva na resposta da rede e também não usam toda informação fornecida dos exemplos de entrada - saída do conjunto de treinamento na fase de estimação dos parâmetros, acarretando em uma pobre generalização no aprendizado da rede [12].

Tem-se na literatura outras opções de treinamento de RNs-RBF, tais como o algoritmo de máxima descida e o

filtro de Kalman, estes descritos nas subseções apresentadas a seguir.

2.1. Filtro de Kalman estendido

Para um sistema dinâmico linear com ruído branco de processo de medição, o filtro de Kalman é um estimador ótimo dos estados do sistema. Para sistemas não-lineares com ruído colorido, o filtro de Kalman pode ser estendido pela linearização da matriz de transição não-linear da descrição em variáveis de estado do sistema em torno dos parâmetros estimados correntes [14]. O filtro de Kalman atualiza os parâmetros de forma a ser consistente com todos os dados medidos do processo e geralmente converge em poucas interações [12], [15].

A formulação dos filtros de Kalman está fundamentada na representação em espaço de estados de um sistema dinâmico linear discreto de dimensão finita, ou seja, o filtro de Kalman é descrito em termos de equações a diferenças, porém se o sistema for não-linear, pode-se estender o uso do filtro de Kalman com um procedimento de linearização de um sistema da forma

$$\begin{aligned}\theta_{k+1} &= f(\theta_k) + \omega_k \\ y_k &= h(\theta_k) + \nu_k\end{aligned}\quad (3)$$

onde o vetor θ_k é o estado do sistema no instante de tempo K , ω_k é o ruído provocado pela própria dinâmica do processo, y_k é o vetor de observação, ν_k é o ruído de observação (ou de medida), e $f(\cdot)$ e $h(\cdot)$ são funções vetoriais não-lineares e representam esse sistema possivelmente variante no tempo.

A idéia básica do filtro de Kalman estendido consiste em linearizar a equação (3) a cada instante de tempo em torno do estado estimado recente. Se as não-linearidades são suficientemente suaves, pode-se fazê-lo aplicando a aproximação de Taylor de primeira ordem nas funções não-lineares ν e $h(\cdot)$ em torno do estado estimado $\hat{\theta}$ para obter

$$f(\theta_k) = f(\hat{\theta}_k) + F_k(\theta_k - \hat{\theta}_k) + \text{termos de ordem elevada} \quad (4)$$

$$h(\theta_k) = h(\hat{\theta}_k) + H_k^T(\theta_k - \hat{\theta}_k) + \text{termos de ordem elevada} \quad (5)$$

sendo adotada a seguinte notação para as derivadas parciais:

$$F_k = \left. \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \hat{\theta}_k} \quad (6)$$

$$H_k^T = \left. \frac{\partial h(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta = \hat{\theta}_k} \quad (7)$$

Desconsiderando os termos de ordem mais elevada na equação (5), um sistema linear aproximado é obtido de (4), onde

$$\theta_{k+1} = F(\theta_k) + \phi_k \quad (8)$$

$$y_k = H_k^T(\theta_k) + \varphi_k \quad (9)$$

Neste caso, ϕ_k e φ_k são definidos por

$$\phi_k = f(\hat{\theta}_k) - F_k(\hat{\theta}_k) \quad (10)$$

$$\varphi_k = h(\hat{\theta}_k) - H_k^T(\hat{\theta}_k) \quad (11)$$

A obtenção da aproximação linear do sistema representado pela equação (4) é o primeiro passo para utilização do filtro de Kalman. O problema do filtro de Kalman consiste em resolver simultaneamente e de maneira ótima as equações de processo e de medida para um estado desconhecido.

Pode-se formular o problema de filtragem de um sistema linear achando um valor ótimo de $\hat{\theta}_k$, tal que o sistema deve satisfazer as restrições impostas pelos teoremas do estimador médio condicional e o do princípio da ortogonalidade [14].

Finalmente, pode-se mostrar que a estimação desejada $\hat{\theta}_k$ pode ser obtida recursivamente pelas equações do filtro de Kalman:

$$\hat{\theta}_k = f(\hat{\theta}_{k-1}) + K_k[y_k - h(\hat{\theta}_{k-1})] \quad (12)$$

$$K_k = P_k H_k (R + H_k^T P_k H_k)^{-1} \quad (13)$$

$$P_{k+1} = F_k (P_k - K_k H_k^T P_k) F_k^T + Q \quad (14)$$

onde K_k é o ganho de Kalman e P_k a matriz de covariância do erro de estimação do estado θ_k . As matrizes Q e R são as matrizes de covariância dos ruídos artificiais ω_k e ν_k , respectivamente. Como o sistema descrito nas equações (8) e (9) é uma aproximação de um sistema não-linear, o filtro não é ótimo e a estimação é somente uma aproximação da média condicional.

O problema de otimização da matriz de pesos sinápticos W e as coordenadas dos vetores protótipos v_j sob o ponto de vista da estimação ótima de parâmetros com filtro de Kalman de uma RN-RBF pode ser tratado como um problema de minimização do tipo mínimos quadrados ponderados. Neste caso, para aplicar o EKF, faz-se com que os elementos da matriz de pesos W e os elementos dos vetores de protótipos v_j constituam o estado do sistema discreto não-linear em que o filtro de Kalman é aplicado [12].

2.2. Método híbrido de EKF e máxima descida

A convergência de RNs-RBF para determinada aplicação é muito afetada pela eficiência do método de treinamento escolhido. A proposta de utilizar uma abordagem híbrida de EKF e máxima descida é usar o EKF durante uma época e o método de máxima descida nas épocas seguintes. Os detalhes do algoritmo de máxima descida podem ser encontrados em [5] e [6].

A justificativa desta escolha de abordagem é que, conforme mencionado na seção anterior, o EKF apresenta rápida convergência no treinamento da RN-RBF. Entretanto, como a escolha correta das matrizes de ruído não pode ser baseada em teorias clássicas, a escolha dos parâmetros P , R e Q pode levar a obtenção de um ponto de mínimo local para a RN-RBF. Neste caso, a escolha dos parâmetros P , R e Q é uma tarefa complexa para o projetista [16], [17]. Neste trabalho, a escolha dos parâmetros P , R e Q foi realizada por intermédio de heurísticas de tentativa e erro. No entanto, pesquisas dos autores já estão em andamento objetivando a utilização de métodos de otimização da computação evolutiva para lidar com este problema de projeto do filtro de Kalman. Neste contexto, o método de máxima descida (quando hibridizado com EKF) realiza a busca local para tentar melhorar o resultado obtido pelo EKF.

3. Resultados de simulação

A identificação de sistemas é uma área do conhecimento que envolve o estudo de formas de modelar e analisar matematicamente fenômenos a partir de dados. Um estudo de caso de identificação não-linear de um sistema de controle pH foi abordado neste trabalho, este disponível na base de dados *Database for the Identification of Systems* (Daisy) [13].

Os dados de simulação do processo de neutralização de pH com um tanque de mistura com volume constante (1100 litros), concentração de solução ácida de 0,0032 mol/l e concentração de solução básica (NaOH) de 0,05 mol/l. O período de amostragem adotado foi 10 segundos. O processo possui 2 entradas (u_1 : fluxo de solução ácida em litros e u_2 : fluxo de solução básica em litros) e a saída, y , é o pH da solução no tanque.

Foram utilizadas 1500 amostras (amostras 1 a 1501) na fase de estimação (treinamento da RN-RBF) e 500 amostras (amostras 1502 a 2002) na fase de validação (teste da RN-RBF).

A configuração da RN-RBF adotada foi com 5 entradas ($u_1(t)$, $u_2(t)$, $u_1(t-1)$, $u_2(t-1)$, $y(t)$) e uma saída de previsão para o pH, $\hat{y}(t+1)$. Nas simulações foram testadas RNs-RBF com 2 e 3 protótipos (funções de ativação) para cada entrada, na camada oculta, da RN-RBF para previsão um passo à frente.

Na tabela 1 é apresentado um resumo dos resultados obtidos com os algoritmos de treinamento da RN-RBF:

(i) máxima descida, (ii) EKF, e (iii) método híbrido de EKF (primeira época) e máxima descida (demais épocas). Em cada simulação foram consideradas 30 condições iniciais diferentes para cada uma das três abordagens testadas.

No EKF e EKF híbrido foram usados valores $P=Q=R=40$. O critério de parada do treinamento da RN-RBF foi de 600 (RN-RBF com 2 centros) e 1000 (RN-RBF com 3 centros) épocas. No método de máxima descida, o fator de aprendizado usado foi de $\eta=0,0003$.

Nota-se que o melhor resultado obtido de MSE (*Mean Squared Error* ou erro médio quadrático) tanto nas fases de estimação quanto validação foi obtido usando o método de treinamento híbrido composto de EKF e máxima descida. Entretanto, nota-se que o EKF sozinho converge rapidamente (1 época) para um resultado aceitável. Nas figuras 2, 3 e 4 são apresentados os melhores resultados obtidos com os diferentes métodos de treinamento de RN-RBF validados neste trabalho. Observa-se a boa aproximação das RNs-RBF na fase de estimação, contudo o resultado da RN-RBF com treinamento híbrido (EKF e máxima descida) foi superior as outras abordagens considerando a fase de validação.

4. Conclusão

As RNs-RBF apresentam vantagens devido à capacidade de aproximação de funções não-lineares, rapidez e eficiência do aprendizado, possibilitando a obtenção de resultados precisos, oferecendo soluções eficientes para problemas de identificação de sistemas não-lineares.

Neste trabalho foi avaliada uma abordagem híbrida de treinamento de RNs-RBF, esta baseada nos algoritmos de máxima descida e EKF. Os resultados de simulação da identificação do processo de controle de pH foram precisos, mostrando a potencialidade de aplicação de RNs-RBF para aproximação de mapeamentos não-lineares quando usa o método híbrido de EKF e máxima descida. Entretanto, durante os experimentos realizados foi observado que o desempenho do EKF depende de uma escolha adequada das matrizes de covariância de ruído e do erro de estimação [18].

Neste contexto, a RN-RBF apresentou potencialidades para a previsão um passo a frente para o processo de controle de pH. Entretanto, necessita-se de estudos aprofundados em pesquisas futuras quanto aos aspectos de projeto da RN-RBF, usando o método híbrido proposto neste artigo, na otimização dos parâmetros de projeto do EKF para: (i) problemas de previsão k passos à frente, (ii) análise de parâmetros de aprendizado adaptativos para o método de máxima descida, (iii) mais casos de teste, e (iv) validação de redes neurais de maior dimensão.

Tabela 1: Resumo dos resultados da aplicação de métodos de treinamento de RNs-RBF.

método de treinamento: máxima descida						
número de centros	MSE (estimação)	MSE (validação)	erro máximo	erro médio	desvio padrão do erro	épocas
2	0,000536	0,903830	3,890649	0,099849	0,630233	600
3	0,000655	1,003331	3,777388	0,047213	0,670663	1000
método de treinamento: EKF						
número de centros	MSE (estimação)	MSE (validação)	erro máximo	erro médio	desvio padrão do erro	épocas
2	0,005731	3,381121	2,656965	0,211344	1,216617	10
3	0,005751	0,899872	3,921051	0,079803	0,633532	10
método de treinamento híbrido: EKF (primeira época) + máxima descida (seguintes épocas)						
número de centros	MSE (estimação)	MSE (validação)	erro máximo	erro médio	desvio padrão do erro	épocas
2	0,000517	0,815537	4,387748	-0,003609	0,606131	600
3	0,000402	0,617205	4,018789	0,025288	0,526709	1000

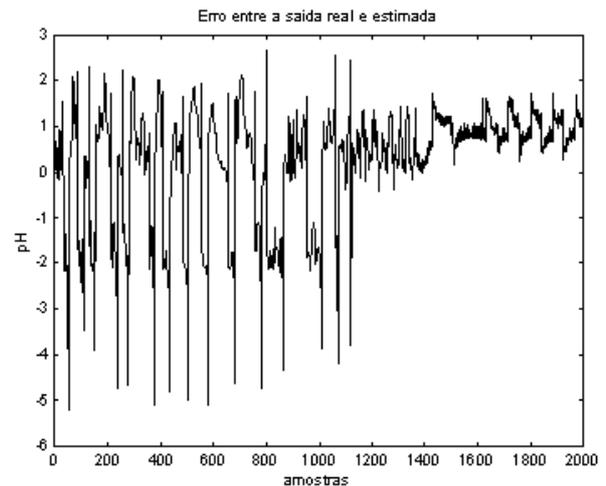
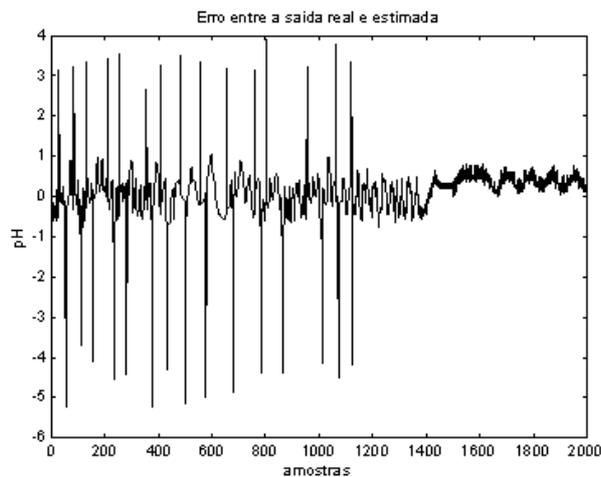
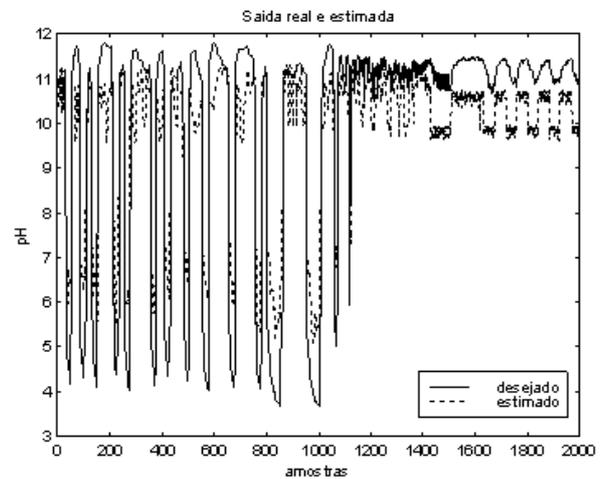
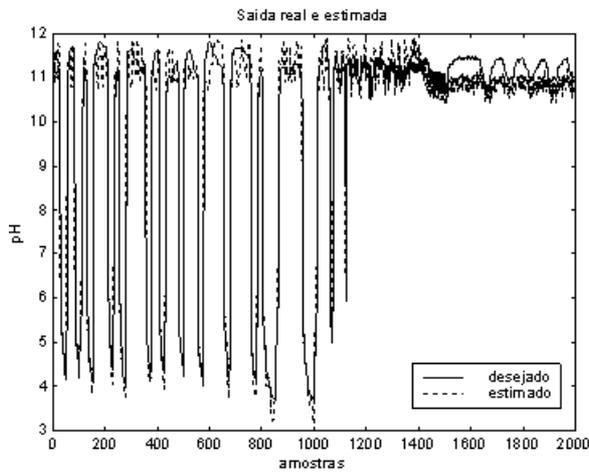


Figura 2. RN-RBF com treinamento usando máxima descida (2 protótipos).

Figura 3. RN-RBF com treinamento usando EKF (2 protótipos).

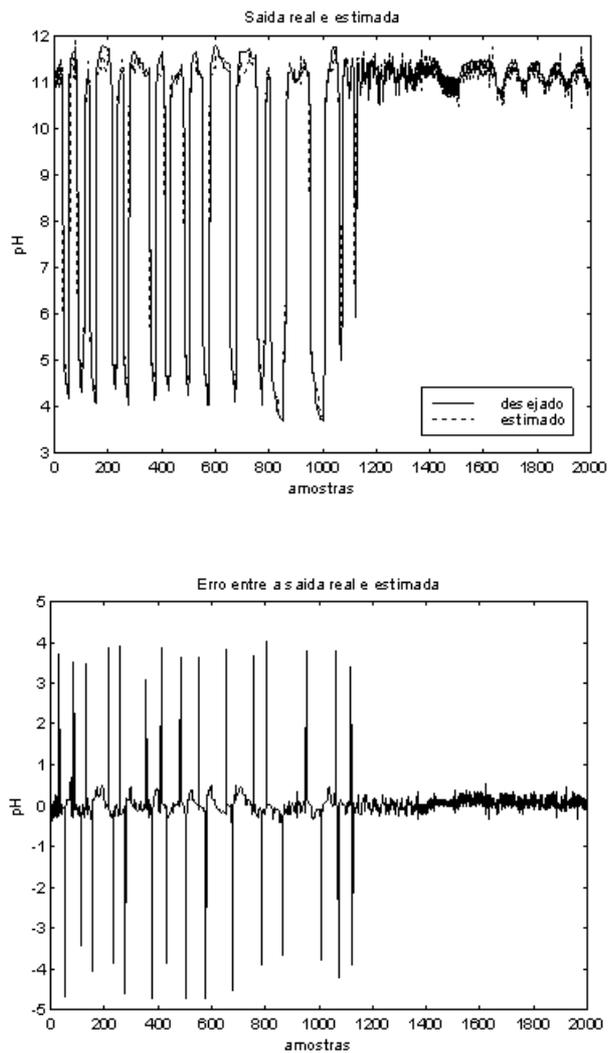


Figura 4. RN-RBF com treinamento usando método híbrido de EKF e máxima descida (3 protótipos).

Agradecimento

Os autores agradecem o suporte financeiro dado pelo Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica, PIBIC/PUCPR, ao bolsista Luiz Fernando Villa no período 2003-2004.

Referências

- [1] S. Haykin, *Neural networks*, 2nd edition, Prentice-Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1996.
- [2] S. Chen, C. Cowan e P. Grant, "Orthogonal least squares learning algorithm for radial basis function networks", *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 2, no. 2, pp. 302-309, 1991.
- [3] M. J. L. Orr, "Introduction to radial basis function networks, Centre for Cognitive Science, University of Edinburgh, Edinburgh, Scotland, UK, 1996.
- [4] D. L. Lee, "Improving the capacity of complex-valued neural networks with a modified gradient descent learning rule", *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 12, no. 2, pp. 439-443, 2001.
- [5] N. B. Karayiannis, "Reformulated radial basis neural networks trained by gradient descent", *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 10, no. 3, pp. 657-671, 1999.
- [6] N. B. Karayiannis e M. M. Tandolph-Gips, "On the construction and training of reformulated radial basis function neural networks", *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 14, no. 4, pp. 835-846, 2003.
- [7] M. Birgmeier, "A fully Kalman-trained radial basis function network for nonlinear speech modeling, Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks", vol. 1, pp. 259-264, 1995.
- [8] L. Zhang e P. B., Luh, "Neural network-based market clearing price prediction and confidence interval estimation with an improved extended Kalman filter method", *IEEE Transactions on Power Systems*, vol. 20, no. 1, pp. 59-66, 2005.
- [9] S. -S. Xiong e Z. -Y. Zhou, "Neural filtering of colored noise based on Kalman filter structure", *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 52, no. 3, pp. 742-747, 2003.
- [10] L. Bai e P. Guo, "A novel approach to stellar recognition by combining EKF and RBF-net", *Advances in Neural Networks, International Symposium on Neural Networks, Dalian, China, Lecture Notes in Computer Science*, vol. 3173/2004, Springer, pp. 1002-1007, 2004.
- [11] G. V. Puskorius e L. A. Feldkamp, "Neurocontrol of nonlinear dynamical systems with Kalman filter trained recurrent networks", *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 5, no. 2, pp. 279-297, 1994.
- [12] D. Simon, "Training radial basis neural networks with the extended Kalman filter", *Neurocomputing*, vol. 48, no. 1-4, pp. 455-475, 2002.
- [13] Daisy, *Database for the identification of systems*, <http://www.esat.kuleuven.ac.be/sista/daisy/> [04/03/2004].
- [14] S. Haykin, *Kalman filtering and neural networks*, John Wiley & Sons, Inc, New York, 2001.
- [15] G. Welch e G. Bishop, *An introduction to the Kalman filter*, Technical Report TR- 95-041, Department of Computer Science, University of North Carolina at Chapel Hill, NC, USA, 1995.
- [16] L. Salvatore, S. Tasi e L. Tarchioni, "A new EKF-based algorithm for flux estimation in induction machines", *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, vol. 40, pp. 496-504, 1993.
- [17] S. Bolognani, R. Oboe e M. Zigliotto, "Sensorless full-digital PMSM drive with EKF estimation of speed and rotor position", *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, vol. 46, pp. 184-191, 1999.
- [18] L. F. Villa, *Estudo comparativo de técnicas de treinamento de redes neurais de base radial para identificação de sistemas dinâmicos*, Projeto de conclusão de curso, Engenharia Mecatrônica (Controle e Automação), Pontifícia Universidade Católica do Paraná, PR, Brasil, 2004.