1° Congresso Brasileiro de Redes Neurais

Escola Federal de Engenharia de Itajuba
Itajuba, 24 a 27 de outubro de 1994

NEURÔNIO COM ENTRADA QUADRÁTICA E CENTRO DE ATIVAÇÃO

A. L. C. Canella e L. P. Caloba

COPPE / EE / UFRJ
CP 68504 CEP 21945-970, Rio de Janeiro, Brasil
e.mail : caloba@coe.ufrj.br

RESUMO

Neste trabalho é apresentada uma configuração alternativa para a entrada do neurônio do tipo perceptron. Com esta entrada e utilizando-se um treinamento com erro-retro-propagado modificado, o neurônio é habilitado a reconhecer rapidamente classes cujas distribuições geométricas no espaço de entrada sejam linear ou esfericamente separáveis.

1. INTRODUÇÃO

Sabe-se que a rede neural de uma camada composta de neurônios do tipo perceptron só é capaz de separar classes cujas distribuições no espaço de entrada sejam linearmente separáveis[1]. Com a arquitetura multicamada, treinada pelo algoritimo do erro-retro-propagado, esta limitação não existe[1], mas a rede se torna mais complexa e o treinamento mais lento.

É apresentada neste trabalho uma configuração alternativa para a entrada do perceptron que habilita a rede neural de uma camada a reconhecer classes cujas distrubuições no espaço de entrada sejam linear ou esfericamente separáveis. Esta nova configuração é composta de duas alterações na entrada do modelo de perceptron: a primeira é a inclusão de uma nova entrada, denominada de entrada quadrática; a segunda é a inclusão da informação do centro de ativação, que é o baricentro das entradas englobadas pela superfície hiperesférica.

Para se obter o centro de ativação é necessário utilizar um outro algorítimo de treinamento em paralelo com o do erro-retro-propagado, sendo o algorítimo do erro-retro-propagado usado para alterar os valores das sinapes, enquanto que o outro algorítimo é utilizado para obter o baricentro das entradas a serem englobadas.

2. MODELO

Neste tópico é apresentado o modelo do neurônio com entrada quadrática e centro de ativação. Na figura 1 é mostrado o modelo e em seguida é definida a nomenclatura empregada.

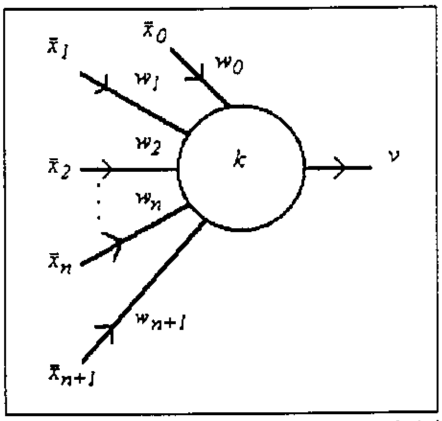

Figura 1 : Neurônio com entrada quadrática e centro de ativação.

Nomenclatura:

v : saída;
u : variável auxiliar;
k : ganho;
n : dimensão da entrada;
x_0 : entrada de polarização fixa em +1;
w_0 : sinapse de polarização;
$x_1, x_2, \ldots, x_n$: valores dos sinais de entrada;
$w_1, w_2, \ldots, w_n$: valores das sinapses;

x_{n+1} : entrada quadrádica:
w_{n+1} : sinapse da entrada quadrádica;
x : vetor de entrada;
w : vetor sinapse:
f(.) : função de ativação;

A equação (1) define as coordenadas do centro de ativação como o valor esperado das entradas da classe a ser separada. As equações (2) e (3) definem respectivamente as novas entradas e a entrada quadrádica. As equações (4) e (5) definem respectivamente a variável auxiliar u e a saída v, onde a função de ativação adotada é a função tangente hiperbólica.

(1) $$m_i = E(x_i) \quad \forall x_i \mid v = 0$$

(2) $$\bar{x}_i = x_i - m_i \text{ , p/ } i = 0,\cdots,n$$

(3) $$\bar{x}_{n+1} = \sum_{i=0}^{n}(x_i - m_i)^2$$

(4) $$u = \sum_{i=0}^{n+1}\bar{x}_i w_i$$

(5) $$v = tgh(u)$$

Aplicando (2) e (3) em (4) obtem-se a equação (6), que igualada a zero fornece a equação da "superfície separadora" da classe.

(6) $$u = \sum_{i=0}^{n}(x_i - m_i)w_i + w_{n+1}\sum_{i=0}^{n}(x_i - m_i)^2$$

Denomina-se de superfície separadora a superfície formada pelos pontos do espaço das entradas que anulam a variável auxiliar u dos neurônios da camada de saída.

3. NEURÔNIO COM ENTRADA LINEAR

O modelo do neurônio com entrada linear é um caso particular do modelo apresentado, onde a sinapse da entrada quadrática e as coordenadas do centro de ativação possuem valores nulos. Da equação (6) obtem-se a equação (7) que determina o valor da variável auxiliar neste modelo de neurônio.

(7) $$u = x_0 w_0 + x_1 w_1 + x_2 w_2 + \cdots + x_n w_n$$

Igualando a equação (7) a zero obtem-se a forma da superfície separadora. No espaço aumentado, espaço de dimensão n+1 obtido quando se considera a entrada de polarização x_0 livre, a superfície separadora é um hiperplano de ordem n+1 que passa necessariamente pela origem. No espaço de entrada considerado como um subespaço do espaço aumentado obtido quando se fixa a entrada de polarização x_0 em 1, a superfície separadora é um hiperplano do ordem n que não passa necessariamente pela origem.

É dado a seguir um exemplo hipotético em duas dimensões que pode ser projetado em uma dimensão sem perda de generalidade. Desta forma, é possível visualisar num plano o espaço de entrada ou o aumentado conforme for o caso.

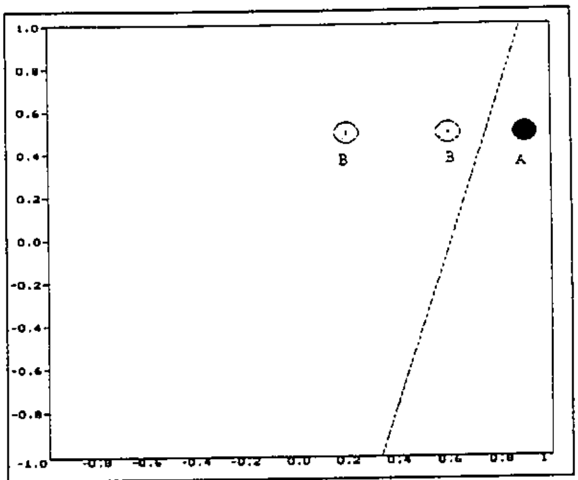

Figura 2 : Classes linearmente separáveis no espaço de entrada.

Na figura 2 é mostrado num plano o espaço de entrada com a disposição geométrica das classes a serem identificadas do sistema em duas dimensões. Na mesma figura é desenhada a reta que separa a classe A da classe B.

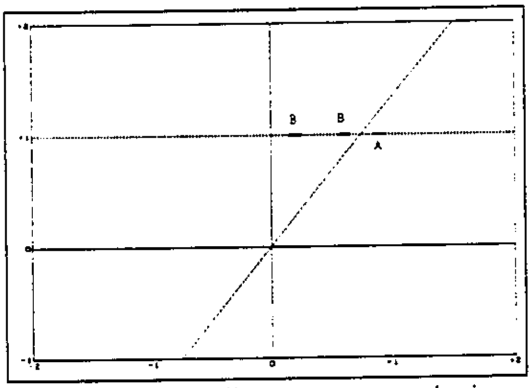

Figura 3 : Classes linearmente separáveis no espaço aumentado.

Na figura 3 é mostrado num plano o espaço aumentado do sistema em uma dimensão com a disposição geométrica das classes a serem identificadas. Na mesma figura é desenhada a reta que passa necessariamente pela origem e cuja interseção com o subespaço das entradas determina um ponto que separa a classe A da B no espaço de entrada.

4. NEURÔNIO COM ENTRADA QUADRÁTICA

Neste tópico é apresentado um outro caso particular do modelo proposto, onde apenas as coordenadas do centro de ativação são nulas. Da equação (6) obtem-se a equação (8) que define a variável auxiliar u para este caso.

(8) $$u = \sum_{i=0}^{n+1} x_i w'_i = \sum_{i=0}^{n} x_i w'_i + w'_{n+1} \sum_{i=0}^{n} x_i^2$$

Ao introduzir a entrada quadrática no modelo do neurônio linear modifica-se a forma da superficie separadora, que pode ser, conforme o valor da sinapase correspondente, um hiperplano (w_{n-1}=0) ou uma superficie hiperesférica ($w_{n-1} \neq 0$). Também, conforme o sinal da sinapse correspondente, é possivel que o neurônio defina se será a parte interior ou exterior da superficie hiperesférica que fornecerá saida positiva. Deste modo, é possível que o neurônio identifique ou exclua uma determinada região esférica.

Igualando a equação (8) a zero obtem-se a forma da superficie separadora no espaço aumentado. Manipulando algebricamente a equação resultante obtem-se a equação (9), que é a forma de uma superficie hiperesférica. Da onde se obtem, após algumas manipulações algébricas, as equações (10) e (11) que definem respectivamente o raio r o as coordenadas c_i do centro da superficie hiperesférica separadora no espaço aumentado.

(9) $$u = -\frac{1}{w_{n+1}}\left[\sum_{j=0}^{n}\left(\frac{w_j}{2w_{n+1}}\right)^2 - \sum_{j=0}^{n}\left(x_j + \frac{w_j}{2w_{n-1}}\right)^2\right]$$

(10) $$r = \sqrt{\sum_{j=0}^{n}\left(\frac{w'_j}{2w'_{n-1}}\right)^2}$$

(11) $$c_i = -\frac{w'_i}{2w_{n+1}}$$

Observa-se na equação (9) que o sinal da sinapse correspondente à entrada de polarização determina se será o interior ou o exterior da superficie hiperesférica que fornecerá saída positiva. Quando esta sinapse tem um valor positivo, o exterior fornece saida positiva. Caso contrário, é o interior que fornece saida positiva.

Fazendo x_0 igual a 1 e igualando a equação (8) a zero obtem-se a forma da superficie separadora no espaço de entrada. Manipulando algebricamente a equação resultante obtem-se a equação (12), que é a forma de uma superficie hiperesférica. Após algumas manipulações algébricas, obtem-se da equação (12) a definição matemática do raio r' e das coorcenadas c_i' do centro da superficie hiperesférica separadora no espaço de entrada, dadas respectivamente pelas equações (13) e (14).

(12)
$$u = -\frac{1}{w'_{n-1}}\left[\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{w'_i}{2w'_{n+1}}\right)^2 - 1 - \sum_{i=1}^{n}\left(x_i + \frac{w'_i}{2w'_{n-1}}\right)^2\right]$$

(13) $$r' = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{w'_i}{2w'_{n+1}}\right)^2 - 1}$$

(14) $$c_i' = -\frac{w'_i}{2w'_{n-1}}$$

Verifica-se da equação (13) a possibilidade da hiperesfera de ordem n possuir raio complexo no espaço de entrada. Isto apenas significa que a hiperesfera de ordem n+1 no espaço aumentado não intercepta o subespaço que define o espaço de entrada.

É dado a seguir o mesmo exemplo do tópico anterior com outra definição de classes. Na atual configuração o sistema não é mais linearmente separável, porém, o sistema é esfericamente separável.

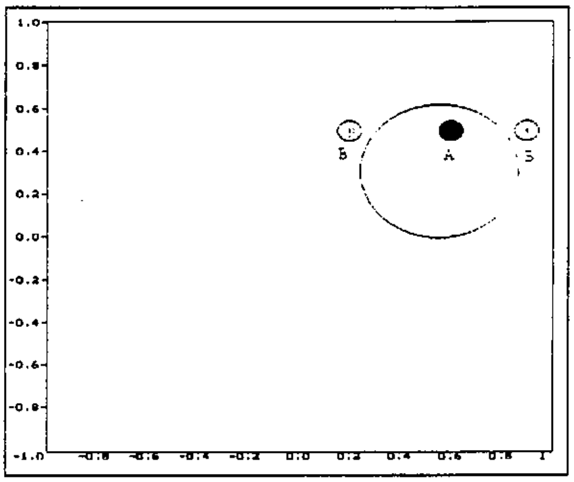

Figura 3 : Sistema esfericamente separável em duas dimensões.

Na figura 3 é mostrado num plano o espaço de entrada com a distribuição geométrica das classes a serem identificadas. Nota-se a impossibilidade de se realizar o classificador com uma rede neural de apenas uma camada, devido à distribuição geométrica das classes no espaço de entrada não ser separável por um hiperplano [1]. Entretanto, utilizando a entrada quadrática torna-se possível implementar este classificador com uma rede neural de apenas uma camada com apenas um neurônio. Na mesma figura é mostrada a superfície separadora traçada pelo neurônio, que é um circulo.

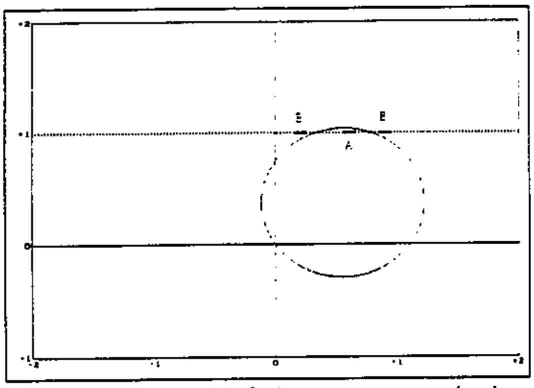

Figura 4 : Sistema esfericamente separável em uma dimensão.

Na figura 4 é possível visualizar o espaço aumentado e a distribuição geométrica das classes do sistema unidimensional. Nota-se que o circulo gerado pelo neurônio passa necessariamente pela origem no espaço aumentado. Este, intercepta o subespaço das entradas em dois pontos, que determinam a faixa na qual a classe A esta contida.

5. NEURÔNIO COM ENTRADA QUADRÁTICA E CENTRO DE ATIVAÇÃO

Com a introdução do centro de ativação, que no caso da rede ser de uma camada é o baricentro da classe a ser identificada, a superfície hiperesférica não tem que passar necessariamente pela origem no espaço aumentado. Fato este que acelera o treinamento por ter a hiperesfera um ponto fixo diretamente relacionado com a disposição geométrica das entradas a serem englobadas. Neste caso, a hiperesfera passa pelo ponto definido pelas coordenadas do baricentro da classe a ser identificada no espaço de entrada fazendo a coordenada referente a entrada de polarização nula.

Manipulando algebricamente a equação (6) obtem-se a equação (15) da qual pode-se extrair o raio r e as coordenadas c_i do centro da hiperesfera de ordem $n+1$, no espaço aumentado, representados pelas equações (16) e (17), respectivamente.

(15)
$$u = -\frac{1}{w_{n+1}}\left\{\sum_{i=0}^{n}\left(\frac{w_i}{2w_{n+1}}\right)^2 - \sum_{i=0}^{n}\left[x_i + \left(\frac{w_i}{2w_{n+1}} - m_i\right)\right]^2\right\}$$

(16)
$$r = \sqrt{\sum_{i=0}^{n}\left(\frac{w'_i}{2w'_{n+1}}\right)^2}$$

(17)
$$c_i = -\frac{w'_i}{2w'_{n+1}} + m_i$$

Por definição m_0 é uma constante nula e x_0 é uma constante unitária. Substituindo estes valores na equação (15) obtem-se a forma da superfície separadora no espaço de entrada, que é uma hiperesfera de ordem n. Esta é definida matematicamente pela equação (18), com raio r' e coordenadas c_i' definidos pelas equações (19) e (20), respectivamente.

(18)
$$u = -\frac{1}{w'_{n+1}}\left\{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{w'}{2w'_{n+1}}\right)^2 - \frac{w'_0}{w'_{n+1}} - 1 + \sum_{i=1}^{n}\left[x_i + \left(\frac{w'}{2w'_{n+1}} - m_i\right)\right]^2\right\}$$

(19)
$$r' = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{w'_i}{2w'_{n+1}}\right)^2 - \frac{w'_0}{w'_{n+1}} - 1}$$

(20)
$$c_i' = -\frac{w'_i}{w'_{n+1}} + m_i$$

Para exemplificar é utilizado o mesmo exemplo do tópico anterior com a mesma definição de classes que torna à classe A não linearmente separável, porém esfericamente separável.

Na figura 5 é mostrado num plano a disposição geométrica das classes no espaço de entrada. Na mesma figura é mostrada a superfície separadora gerada pelo neurônio, que é um circulo.

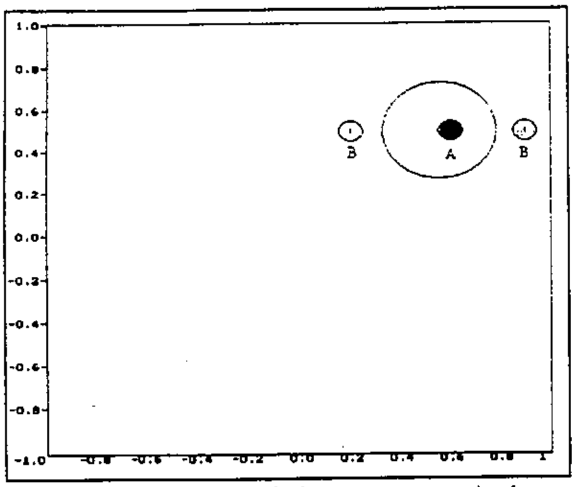

Figura 5 : Sistema esfericamente separável em duas dimensões com centro de ativação.

Na figura 6 é mostrado o espaço aumentado e a distribuição das classes no subespaço normal do sistema unidimensional. Pode-se visualisar a superficie separadora, que é um circulo, não passando pela origem e interceptando o subespaço das entradas em dois pontos. Este pontos definem a faixa onde está contida a classe A no espaço de entrada.

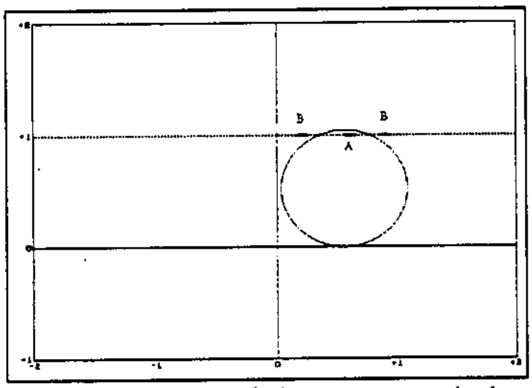

Figura 6 : Sistema esfericamente separável em uma dimensão com centro de ativação.

6. REDE NEURAL MULTICAMADA

Com a rede neural multicamada é possivel realizar sistemas classificadores cujas distribuições das classes formadoras não sejam separáveis por hiperplanos[1]. Com a introdução da configuração alternativa para a entrada do neurônio do tipo perceptron nos neurônios da primeira camada intermediária. é possivel obter grandes simplificações na estrutura da rede.

É dado a seguir um exemplo não possível de ser resolvido com uma rede neural de apenas uma camada, mesmo que se utilize a configuração alternativa para as entradas dos neurônios.

Observando a disposição geométrica das classes a serem identificadas pode-se claramente notar não se tratar de um sistema linearmente separável. Logo, a princípio seria necessário utilizar pelo menos uma camada intermediária para ser possível realizar este classificador com uma rede neural composta por neurônios do tipo Perceptron com entrada normal. Também, por haver necessidade de formar duas regiões fechadas, para poder separar a classe A da B, a princípio seria necessário utilizar pelo menos seis neurônios na camada intermediária. Portanto, observando a geometria das classes a serem identificadas, possível de ser feito por se tratar de um exemplo hipotético, conclui-se que a estrutura mínima necessária, porém, possa ser não suficiente, é uma rede com duas camadas com: seis neurônios na camada intermediária e um na de saída.

Um sistema classificador para o caso acima foi implementado por uma rede neural com uma camada intermediária com dois neurônios, utilizando-se a configuração alternativa para a entrada dos neurônios desta camada, e com apenas um neurônio, com entrada linear, na camada de saída. Neste exemplo, os neurônios não utilizam a informação do centro de ativação.

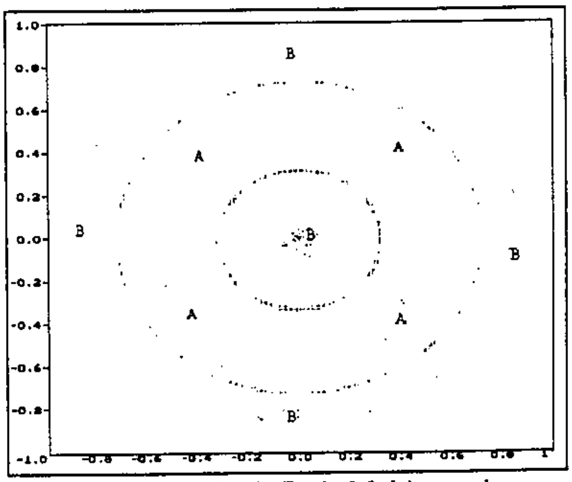

Figura 7 : Exemplo de Rede Multicamada com entrada quadrática.

Na figura 7 é mostrado o plano que define o espaço de entrada com a disposição geométrica das classes que definem o sistema classificador. Também é mostrada na figura a superfície separadora gerada pela rede neural, que é composta por dois circulos.

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Pode-se verificar que o uso da entrada quadrática, que aumenta de uma unidade a dimensão da entrada, torna o neurônio do tipo perceptron mais versátil, com capacidade de formar, através de treinamento, superfícies separadoras no formato de calotas esféricas com qualquer nível de curvatura. Podendo, inclusive, formar uma superfície esférica fechada que identifica ou exclua uma região do espaço de entrada.

O uso da entrada quadrática só faz sentido quando os sinais de entrada não são normalizados, pois caso contrário a entrada quadrática seria uma constante. Devido à isto, numa estrutura multimacadas o uso da entrada quadrática só faz sentido nos neurônios da primeira camada intermediária, pois conforme a rede é treinada na maioria dos casos as saídas dos neurônios da camada intermediária tendem a saturação e normalização.

A introdução do centro de ativação, que acarreta no acréscimo de n parâmetros em cada neurônio, onde n é a dimensão da entrada, torna o neurônio ainda mais versátil, pois quebra a condição obrigatória de no espaço aumentado a superfície separadora ter que passar pela origem. Fato este indiferente quando se trata apenas de hiperplanos, porém essencial quando se utiliza superfícies hiperesféricas.

A determinação do centro de ativação, que é o baricentro das entradas englobadas pela superfície hiperesférica, só é direta em redes de uma camada. Neste caso, o centro de ativação é o baricentro da classe a ser identificada. Para redes multicamadas, como não se sabe a priori quais são as entradas que cada neurônio da primeira camada intermediária irá englobar, a determinação do centro de ativação torna-se bastante complexa. Uma solução possível é direcionar no início do treinamento todos os centros de ativação para o baricentro de todo o sistema. No decorrer do treinamento, conforme as saídas dos neurônios da primeira camada intermediária forem se saturando, encaminha-se o centro de ativação de cada neurônio para o baricento das entradas por eles englobadas. O algorítimo de treinamento das coordenadas do baricentro é dado pela equação (21), onde $\mathbf{m}$ é o vetor de coordenadas, β é a taxa de treinamento e k é o contador de iteração, idêntico ao treinamento de uma rede counterpropagation.

$$\mathbf{m}(k+1) = (1-\beta)\mathbf{m}(k) + \beta\mathbf{x}(k) \tag{21}$$

8. CONCLUSÕES

A introdução de uma entrada quadrática no neurônio tipo perceptron aumenta consideravelmente a sua capacidade de classificação com um pequeno aumento da sua complexidade, e uma redução na complexidade global da rede. O treinamento, entretanto, pode ficar mais lento, mas esta desvantagem pode ser superada usando-se o treinamento com centro de ativação.

9. REFERÊNCIA

[1] J. Hertz, A. Krogh e R. G. Palmer, "Introduction to the theory of neural computation", Santa Fe Institute Editorial Board, 1990.