

Metode neparametrice în instruirea automată a mașinilor: aplicații în robotică și analiza datelor

Raport științific

Lehel Csató

10 octombrie 2014

Rezumat

Documentul prezintă rezultatele științifice obținute în perioada 2011–2014 în cadrul proiectului **PN-II-RU-TE-2011-3-0278** dedicat grupurilor de cercetare cu cercetători tineri. În document sunt detaliate rezultatele științifice obținute în cadrul proiectului, defalcate pe sub-categorii, conform cu tabelul de mai jos.

Adresa de web a proiectului este: <http://datamin.ubbcluj.ro/index.php?a=projects>;
Tematica seminariilor - defalcată pe categorii – organizate cu membrii echipei de cercetare respectiv pentru atragerea de noi membri este la pagina: <http://datamin.ubbcluj.ro/index.php?a=semi#semi>.

Cuprins

1	Introducere	2
2	Algoritmi aproximativi de instruire automată prin întăriri	2
2.1	Îmbunătățirea aproximării funcțiilor de valori	2
2.2	Instruire prin întăriri cu căutare direcționată a strategiei și procese Gausiene	3
2.2.1	Influențarea direcției explorării în problemele de tip “reinforcement learning”	3
2.2.2	Reducerea varianței gradientului	3
2.3	Aproximări neparametrice bazate pe manifold-uri	4
2.4	Modele inteligente pentru modelarea comportamentului roboților	4
2.5	Metode de sparsificare a rezultatelor algoritmilor de tip “reinforcement learning”	5
2.5.1	Sparsificarea datelor	5
2.5.2	Îmbunătățiri aduse algoritmilor de sparsificare	5
3	Învățarea modelelor de roboți pentru control de urmărire	6
3.1	Metode de control pentru urmărire	6
3.2	Învățarea indirectă a modelelor în robotică	6
3.3	Experimente	8
3.4	Învățarea modelelor de roboți folosind metode de transfer	9
3.4.1	Metode de învățare prin transfer în robotică	9
3.4.2	Experimente	10
4	Studiul modelelor cu zgomot de intrare	11
4.1	Modele cu zgomot de intrare corectate de matricea Hesse	11
4.2	Simulație-extrapolare pentru procese Gaussiene	12
5	Metode hashing pentru căutare rapidă	12
6	Învățarea semi-supervizată aplicată la metode de hashing	14
7	Concluzii	15

1 Introducere

Domeniul de cercetare a metodelor neparametrice și a aplicării acestora în instruirea automată cuprinde mai multe subdomenii importante, toate aceste subdomenii au ca caracteristică comună potențialul ca mulțimea de date de intrare să fie mare. Proiectul se ocupă de studiul metodelor de instruire automată a mașinilor, axându-se pe metode de inferență neparametrice și pe metodologia Bayes, cu aplicații în robotică respectiv în procesul de analiză a datelor, cu accent pe analiza datelor textuale. Această caracteristică justifică eforturile de realizare a algoritmilor ce pot prelucra aceste date în mod *automat* – ca și în metodele de instruire prin întăriri – sau cu intervenții umane minimale – de exemplu în metodele semi-supervizate. Avantajul metodelor neparametrice este ajustarea “automată” – în funcție de caracteristicile datelor de instruire – a complexității rezultatelor, fapt realizat prin adăugarea sau ștergerea eficientă a unor parametri. Direcțiile de cercetare pe care ne-am concentrat de-a lungul proiectului au fost:

1. Aplicarea proceselor Gaussiene – metode neparametrice probabiliste – în dezvoltarea de algoritmi pentru instruirea prin întăriri, mai exact cu algoritmi aproximativi de instruire prin întăriri (approximate reinforcement learning).
2. Aplicarea proceselor Gaussiene în realizarea de algoritmi noi pentru robotică.
3. Aplicarea metodelor neparametrice pentru îmbunătățirea algoritmilor cu date de intrare imprecise.
4. Aplicarea metodelor neparametrice pentru algoritmi de căutare rapidă respectiv pentru realizarea de algoritmi semi-supervizați.

2 Algoritmi aproximativi de instruire automată prin întăriri

Un subdomeniu de aplicare cu succes a metodelor neparametrice este cea a instruirii prin întăriri aproximative – *approximate reinforcement learning (ARL)*. Importanța acestor cercetări este că – contrar metodelor clasice de instruire – ARL poate fi aplicat cu ușurință la probleme de control și de învățare robotică din lumea reală, fără modelarea dinamicii sau a cinematicii roboților. Caracteristicile principale ale acestor probleme sunt:

- Spații de stări și acțiuni continue și de dimensionalitate ridicată;
- Necesitatea de rulare a algoritmilor *on-line*;
- Diversitate problemelor la nivel de control, ceea ce duce la dificultatea construirii aproximatoarelor de funcții potrivite pentru fiecare domeniu de aplicație;
- Numărul limitat de încercări – *trial* – care pot fi executate pentru a facilita învățarea;
- Necesitate reducerii costurilor computaționale pentru a facilita aplicarea metodelor pe unități mobile.

Ținând cont de caracteristicile menționate, putem identifica direcții majore care constituie baza cercetării din cadrul proiectului. Asocierea unor valori de utilitate cu anumite stări sau perechi de stări și acțiuni stă la baza metodelor clasice de instruire prin întăriri. Îndată ce spațiul de stări sau stări-acțiuni devine infinit, trebuie să recurgem la aproximatoarele de funcții pentru realizarea acestui lucru. Metodele clasice de aproximare de funcții trebuie adaptate la fiecare domeniu de aplicare pentru a putea fi utilizate eficient. Metodele neparametrice pe de altă parte au posibilitatea de a adapta deoarece numărul parametrilor nu este fixată ci este determinată de datele de instruire și caracteristicile acestora. Utilizarea proceselor Gaussiene pentru acest scop și studiarea caracteristicilor acestora este una dintre temele principale a cercetării noastre.

Procesele Gaussiene pot fi folosite *on-line* ceea ce rezultă în metode folosibile pentru a acumula informații în același timp cu interacțiunea cu mediul înconjurător. Însă acesta dă naștere anumitor probleme precum: creșterea nelimitată a numerelor de parametri, schimbarea caracteristicilor funcțiilor approximate în timpul procesului de învățare și apariția relațiilor temporale între măsurătorile făcute la fiecare pas a experimentelor. În cadrul proiectului am studiat unele posibilități de reducere a costurilor computaționale prin eliminarea unor măsurători irelevante și prin asocierea unor factori de importanță cu fiecare *experiență* făcută în timpul învățării.

2.1 Îmbunătățirea aproximării funcțiilor de valori

În anul calendaristic 2011 ne-am ocupat cu aproximarea valorilor stărilor și a perechilor de stări-acțiuni, care este o metodă de bază în studiul problemelor de instruire prin întăriri. Cadrul teoretic generic este aceea a proceselor de decizii Markov – în engleză “*Markov Decision Processes*” – MDP [Puterman, 1994], definit printr-un quartet $M(S, A, P, R)$, unde S este spațiul stărilor, A spațiul acțiunilor posibile, $P(s'|a, s)$ descrie probabilitatea condițională ca starea s' să fie selectată în urma aplicării acțiunii a când suntem în starea s , iar $R(s)$ este funcția de câștig – reward – asociat fiecărei stări s a sistemului. Rezolvarea unui MDP constă în calculul unei *strategii*

optime, aceasta fiind definită ca $\pi(a|s)$ și este interpretată ca probabilitatea condițională a selecției unei acțiuni a în starea s . Determinarea strategiei optime se face prin funcțiile de valoare $V(s)$ respectiv $Q(s, a)$ [Sutton and Barto, 1998]. O funcție de valoare poate fi definită ca $V_\pi : S \rightarrow \mathbb{R}$, respectiv $Q_\pi : S \times A \rightarrow \mathbb{R}$:

$$V_\pi(s) = E_\pi \left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R_t | s_0 = s \right], \quad Q_\pi(s, a) = E_\pi \left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R_t | s_0 = s, a_0 = a \right]$$

În formulele de mai sus $s \in S$ reprezintă o stare, $a \in A$ reprezintă o acțiune și $\pi : S \times A \rightarrow [0, 1]$ reprezintă o strategie pe baza căruia se alege o acțiune într-o anumită stare. Aplicarea metodelor RL la probleme din lumea reală necesită introducerea unor aproximatori de funcții pentru a modela atât funcțiile de valori V și Q cât și modelarea strategiei $\pi(s, a)$. Folosirea proceselor Gaussiene pentru aproximarea funcțiilor de valori a fost cercetată în numeroase articole [Rasmussen and Williams, 2006, Ghavamzadeh and Engel, 2007, Deisenroth et al., 2009].

Una dintre problemele tratate de noi în [Jakab and Csató, 2011] este cea a continuității și a refolosirii datelor de antrenament pentru aproximarea funcțiilor de valori. Ideea de bază este de a folosi o versiune modificată a metodei de sparsificare bazată pe distanța Kullback-Leibler între distribuțiile posterioare a două procese Gaussiene.

2.2 Instruire prin întăriri cu căutare direcționată a strategiei și procese Gausiene

Aproximarea probabilistică a funcțiilor de valori poate fi exploatată și în cazul metodelor de tip *policy gradient* (PG) cu scopul de a micșora varianța gradientului estimat și de a influența direcțiile de explorare în timpul procesului de instruire. Inferența – găsirea – unui proces Gaussian pentru a aproxima o funcție de valoare poate fi realizată în felul următor: ca și date input de instruire folosim perechi de stări-acțiuni $x_t \stackrel{\text{def}}{=} (s_t, a_t)$, iar output-urile corespunzătoare sunt valorile de utilitate “discontate”: $\sum_{i=0}^{H-t} \gamma^i R(s_{t+i}, a_{t+i})$. Pentru antrenarea proceselor Gaussiene on-line folosim metodele dezvoltate în [Csató and Opper, 2002].

2.2.1 Influențarea direcției explorării în problemele de tip “reinforcement learning”

Metodele de tip PG necesită o reprezentare explicită a strategiei de luare de decizii $\pi_\theta(s, a)$ în forma unei aproximări de funcții parametriche. În [Jakab and Csató, 2012] am introdus două posibilități de îmbunătățire a explorării. Prima se referă la influențarea magnitudinii zgomotului adăugat la o strategie având forma:

$$\begin{aligned} \pi_\theta &= c(s, \theta_c) + \mathcal{N}(0, \sigma_{GP}^2 I) \\ \sigma_{GP}^2 &= \lambda (k_q(x^*, x^*) - \mathbf{k}^* \mathbf{C}_n \mathbf{k}^{*T}), \quad \text{având } x^* = \{s, c(s, \theta_c)\} \end{aligned} \quad (1)$$

În ecuația de mai sus $\mathbf{k}^* = [k_q(x^*, x_1), \dots, k_q(x^*, x_n)]$ este un vector compus din valorile covarianțelor punctului x^* cu restul datelor din setul de instruire \mathcal{D} , σ_{GP}^2 este varianța procesului Gaussian folosit pentru aproximarea funcției de valori, evaluat în punctul x^* compus dintr-o stare s și acțiunea selectată de către controlor în această stare, $c(s, \theta_c)$ – funcție care este dată de funcția medie a procesului Gaussian.

Pentru a influența atât magnitudinea varianței cât și a direcției explorării, în [Jakab and Csató, 2012] am introdus o strategie care folosește valoarea medie a procesului Gaussian, evaluat într-un număr de puncte din proximitatea perechii de stare-acțiune în care se află sistemul:

$$\pi(a|s) = \frac{e^{\beta E(s, a)}}{Z(\beta)}, \quad \text{unde } Z(\beta) = \int da e^{\beta E(s, a)} \text{ este constanta de normalizare a probabilității.} \quad (2)$$

Formularea de mai sus permite o strategie stohastică, a cărei fluctuație poate fi controlat de valoarea β , fiind inversa “temperaturii sistemului”. Alegerea acțiunii a “optime” din starea s , prin strategia $\pi(a|s)$, este făcută cu ajutorul prin formularea unei funcții de energie $E(s, a)$ care, lângă funcția valoare $Q(s, a)$, are și un factor multiplicativ de penalizare a acțiunilor la distanță mare de cea selectată $c_\theta(s)$:

$$E(s, a) = \hat{Q}_{GP}(s, a) \exp \left[-\frac{\|a - c_\theta(s)\|^2}{2\sigma_e^2} \right]$$

2.2.2 Reducerea varianței gradientului

O altă dificultate pe care am încercat să soluționăm este problema varianței în valoarea gradientului [Jakab and Csató, 2012]. În metodele “policy gradient”, în fiecare pas al procesului de instruire se calculează gradientul

funcției – *objective function* – $J^\pi = E_\pi [\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t r_{t+1}]$ relativ la parametrii funcției $\pi(a|s, \theta)$, θ . Gradientului se calculată folosind aproximări de tip Monte Carlo, având forma:

$$\nabla_\theta J = E_\tau \left[\sum_{t=0}^{H-1} \nabla_\theta \log \pi(a_t|s_t) \sum_{i=0}^{H-t} \gamma^i R(s_{t+i}, a_{t+i}) \right] \quad (3)$$

unde τ reprezintă o serie de înregistrări – en “rollout” – rezultate prin rularea controlorului având lungimea H , iar $E[\cdot]_\tau$ este valoarea medie relativă la distribuția “rollout-ilor” τ . Principala slăbiciune a metodelor PG este varianța mare a valorii gradientului, ca rezultat a estimării prin metoda Monte Carlo: $\sum_{i=0}^{H-t} \gamma^i R(s_{t+i}, a_{t+i})$. În [Jakab and Csató, 2012] am arătat că, prin folosirea unui proces Gaussian pentru aproximarea funcției de valori, respectiv prin înlocuirea mediei empirice cu valoarea medie procesului Gaussian posterior, varianța gradientului poate fi redusă în mod semnificativ:

$$\nabla_\theta J(\theta) = E_\tau \left[\sum_{t=0}^{H-1} \nabla_\theta \log \pi(a_t|s_t) \hat{Q}_{GP}(s_t, a_t) \right], \quad (4)$$

unde $\hat{Q}_{GP}(\cdot, \cdot)$ este funcția de valoare aproximată cu ajutorul unui proces Gaussian, iar articolul conține și analiza empirică a performanței acestei modificări a fost elaborată în articolul [Jakab and Csató, 2012].

2.3 Aproximări neparametrice bazate pe manifold-uri

Una dintre problemele aproximării funcțiilor de valori și a strategiilor cu ajutorul proceselor Gaussiene reprezintă apariția discontinuităților în suprafețele funcțiilor approximate. Pentru a reprezenta mai exact discontinuitățile, am introdus o familie de funcții kernel care profită de relația temporală între punctele de antrenament:

$$k_{sp}(x, x') = A \exp \left(-\frac{SP(x, x')^2}{2\sigma_{sp}} \right) \quad (5)$$

unde A și σ_{sp} sunt hyper-parametrii sistemului. Distanța cea mai scurtă dintre punctele x și x' poate fi calculată cu ajutorul conexiunilor unui graf construită on-line:

$$E_{x_t, x_i} = \begin{cases} \|x_i - x_t\|^2 & \text{dacă } \|x_i - x_t\| < \varepsilon \quad \varepsilon > 0 \\ 0 & \text{altfel} \end{cases} \quad (6)$$

Valoarea de prag ε limitează numărul vecinilor punctului x_t . Am folosit notația E_{x_t, x_i} pentru a nota o lamă din graful $G(V, E)$ întru nodurile x_t și x_i . Cu informația extrasă din relația temporară construim o măsură de distanță nouă care reflectă distanța cea mai scurtă de-a lungul suprafeței pe care se află punctele de antrenament întâlnite. Deoarece în majoritatea problemelor punctele de antrenament sunt continue, folosim două metode pentru a calcula distanța între x^* și punctul deja incorporat x_j :

$$\begin{aligned} SP(x^*, x_j) &\stackrel{(1)}{=} \|x^* - x_i\|^2 + \mathbf{P}_{i,j}, \quad \text{cu } x_i = \underset{x_\ell \in BV}{\operatorname{argmin}} \|x^* - x_\ell\|^2 \\ SP(x^*, x_j) &\stackrel{(2)}{=} \mathbf{k}_{x^*}^T \mathbf{P} \mathbf{e}_j = \sum_{i=1}^n k(x^*, x_i) \mathbf{P}_{i,j} \end{aligned}$$

unde matricea \mathbf{P} conține distanța cea mai scurtă între x_i și x_j , iar \mathbf{e}_j este al j -lea vector de unitate cu lungime n . Detaliile acestei metode, precum și evaluarea performanței cu ajutorul unor probleme de tip reinforcement learning simulate, au fost publicate în articolul [Jakab and Csató, 2012].

2.4 Modele inteligente pentru modelarea comportamentului roboților

În martie 2012 a avut loc susținerea tezei de doctorat al lui Jakab Hunor [Jakab, 2012] intitulată *Intelligent Models for Robotic Behavior, Decision Making and Environment Interaction*. Teza conține detaliile cercetării efectuate în perioada 2009-2012 din care o parte semnificativă a fost realizată în timp ce Jakab Hunor era implicat în proiectul de față. Teza conține 7 capitole și se ocupă de modalități de îmbunătățire a metodelor de instruire prin întăriri cu ajutorul metodelor neparametrice, în contextul aplicării lor la probleme de control din lumea reală.

2.5 Metode de sparsificare a rezultatelor algoritmilor de tip “reinforcement learning”

In anul calendaristic 2013 am studiat metodele de sparsificare a rezultatelor algoritmilor neparametrici. Pentru aceasta am considerat o metodă alternativă la aproximarea funcțiilor de valori, numită *Least squares value approximation* (LSVA) introdus în [Bradtke et al., 1996]. Principiul de bază a acestei metode este instruirea pe bază de diferențe temporale – engleză *temporal difference learning* (TD) – cunoscută din literatura clasică de instruire prin întăriri [Sutton and Barto, 1998]. Adaptarea acestui algoritm la problemele de dimensionalitate mare a fost realizată prin “kernelizarea” lor, ajungând astfel la forma care stă la baza metodelor introduse de noi:

$$\tilde{V}(s) = \sum_{i=0}^n \mathbf{w}_i^* k(s_i, s_t) \quad s \in S, \quad (7)$$

iar (re)calcularea \mathbf{w}_i^* este realizată prin actualizarea iterativă a unor structuri de date pe baza ecuațiilor:

$$\mathbf{w}^* = \tilde{A}^{-1} \tilde{b}, \text{ where } \tilde{A} = \frac{1}{n} \sum_{t=0}^n \mathbf{k}(s_t) [\mathbf{k}^T(s_t) - \gamma \mathbf{k}^T(s_{t+1})], \quad \tilde{b} = \frac{1}{n} \sum_{t=0}^n \mathbf{k}(s_t) R_t. \quad (8)$$

Aici, ca și în secțiunile anterioare, $k(\cdot, \cdot)$ este o funcție kernel, iar $\mathbf{k}(s) = [k(s, s_1), \dots, k(s, s_n)]^T$ este vectorul de valori ale funcției kernel evaluate pe punctul de date s și datele de antrenament $s_i \quad i = 1, n$. Forma aceasta a actualizărilor iterative permite tratarea metodei prezentate ca o aproximare neparametrică: în fiecare moment când primim un nou punct de instruire (prin măsurători de exemplu), putem decide dacă vrem să păstrăm acel punct și a-l încorpora în structurile de date. Acest proces se numește *sparsificare* și este necesară deoarece costul calculării inversei matricei \tilde{A} este cubic [Csató and Opper, 2002].

2.5.1 Sparsificarea datelor

În spiritul celor de sus, în 2013 ne-am ocupat de problema *dependenței lineare aproximative – Approximate linear dependency* –, o metodă frecvent întâlnită pentru realizarea sparsificării. Această metodă păstrează punctele de date care sunt greu expresibile prin combinarea lineară a punctelor deja existente. În [Jakab and Csató, 2013] am introdus o metodă de sparsificare bazată pe caracteristicile unui graf construit on-line între punctele de antrenament. Această metodă folosește operatorul Laplacian pentru formularea unei criterii $\mu(\cdot)$ pe baza căruia se decide incorporarea unui punct de instruire: importanța unui vertex $s_i \in \mathcal{V}$ este exprimată ca suma ponderată a diferenței pătrate între valoarea funcției de țintă a punctelor s_i și vecinilor lui: $\mu(s_i \in \mathcal{V}) = \sum_{v_j \in \text{neig}(s_i)} A_{ij} [f(s_i) - f(s_j)]^2$. Calitatea mulțimii \mathcal{V} se exprimă cu același operator Laplacian:

$$\sum_{s_i \in \mathcal{V}} \mu(s_i) = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} [f(s_i) - f(s_j)]^2 = \mathbf{f}^T \mathbf{L} \mathbf{f}. \quad (9)$$

Pentru construirea grafului $G(\mathcal{E}, \mathcal{V})$, $\mathcal{V} \subset S$ am studiat două metode diferite: construcție bazată pe k *nearest neighbour* (KNN) și construcția bazată pe *Extended sphere of influence* (eSIG). Detaliile algoritmilor de construcție și actualizare a acestora sunt detaliate în articolul [Jakab and Csató, 2013]. Rezultatele experimentale arată că, folosind metoda de sparsificare ajută la distribuirea mulțimii \mathcal{V} în regiunile importante ale spațiului de căutare, având ca rezultat funcții mai stabile și mai exacte decât cele bazate pe metodele clasice.

2.5.2 Îmbunătățiri aduse algoritmilor de sparsificare

În anul calendaristic 2014 – publicat în articolul [Jakab and Csató, 2014] – am îmbunătățit metodele LSVA “sparse”. Una dintre rezultatele importante este dezvoltarea regulilor de actualizare on-line a structurilor de date \tilde{A} și \tilde{b} din ecuația (8) prin care devine posibilă micșorarea costului computațional și de memorie al algoritmului. Principiul de bază a metodei este de a calcula incremental inversul matricei $C = \tilde{A}$ fără a păstra matricea originală. Ecuațiile de actualizare capătă forma următoare:

$$C_{t+1} = \tilde{A}_{t+1}^{-1} = \frac{t+1}{t} \left[\begin{array}{cc} \tilde{A}_t + \mathbf{u}\mathbf{v}^T & v^* \mathbf{u} \\ \mathbf{u}^* \mathbf{v}^T & u^* v^* \end{array} \right]^{-1} = \begin{bmatrix} C_t & -C_t \mathbf{u} / u^* \\ -\mathbf{v}^T C_t / v^* & \frac{1 + \mathbf{v}^T C_t \mathbf{u}}{u^* v^*} \end{bmatrix} \quad (10)$$

Pentru a obține o expresie mai compactă am folosit notațiile:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= [k(s_t, s_1), \dots, k(s_t, s_t)]^T & u^* &= k(s_t, s_{t+1}) \\ \mathbf{v} &= [k(s_t, s_1) - \gamma k(s_{t+1}, s_1), \dots, k(s_t, s_t) - \gamma k(s_{t+1}, s_t)]^T & v^* &= k(s_t, s_{t+1} - \gamma k(s_{t+1}, s_{t+1})) \end{aligned}$$

Pentru obținerea formei analitice am folosit regulile de inversie a matricelor bloc și formula Sherman-Woodbury, ca și în [Csató and Oppner, 2002]. Expresia finală pentru obținerea valorii coeficienților de aproximare devine surprinzător de simplă:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{t+1} &= C_{t+1} \tilde{\mathbf{b}}_{t+1} = \begin{bmatrix} C_t & -C_t \mathbf{u} / u^* \\ -\mathbf{v}^T C_t / v^* & \frac{1 + \mathbf{v}^T C_t \mathbf{u}}{u^* v^*} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{b}}_t \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ u^* \end{bmatrix} R_t \right) \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{w}_t \\ (R_t - \mathbf{v}^T \mathbf{w}_t) / v^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_t \\ (R_t - (\tilde{V}(s_t) - \gamma \tilde{V}(s_{t+1}))) / v^* \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (11)$$

unde forma actualizată a $\tilde{\mathbf{b}}_t$ este: $\tilde{\mathbf{b}}_{t+1} = \frac{t}{t+1} \left(\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{b}}_t \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ u^* \end{bmatrix} R_t \right)$ Posibilitatea de a executa calculele necesare on-line contribuie semnificativ la aplicabilitatea metodelor prezentate la probleme reale unde datele de antrenament sunt obținute secvențial prin interacțiune cu mediul în care se desfășoară procesul de instruire. Totodată datorită actualizărilor secvențiale costurile computaționale sunt reduse de la $O(n^3)$ la $O(nk)$ unde n este numărul punctelor de antrenament considerate semnificativ din punct de vedere a cantității de informație conținută.

De asemenea în articolul [Bócsi et al., 2014] am investigat noi posibilități de construire a grafurilor de proximitate pentru a îmbunătăți metodele de sparsificare relatate mai sus.

3 Învățarea modelelor de roboți pentru control de urmărire

În general, controlul roboților este bazat pe un modelul matematic al robotului. În mod tradițional acest model este definit prin parametri fizici ai robotului. Bazat pe acestea, configurația de articulație dorită – numit model cinematic, sau forțele dorite – numit modelul dinamic, au forme analitice. Această abordare este folosită în cazuri când arhitectura robotului este fixă și condițiile externe nu se schimbă. În condițiile în care arhitectura robotului și mediul de execuție sunt fixe, modelele analitice rezultă în control precis și eficient. În cazurile când condițiile externe sunt diferite sau modelul robotului nu este fixă, soluțiile analitice au dezavantaje serioase: ori modelul matematic este inadecvat robotului ori este prea complex pentru a putea fi modelat eficient. Am propus o abordare adaptivă pentru a obține modelul robotului. Scopul nu este de a defini un model de control bazat pe structura fizică a robotului ci ca o funcție dintre datele de intrare senzoriale și datele de ieșire de control, obținând o *aproximare eficientă a modelului*. În cele ce urmează, definim problema de control de urmărire.

3.1 Metode de control pentru urmărire

De obicei, problema de control de urmărire – en “tracking control – este formulată în spațiul de efortor – en “task-space” – când efortorul robotului trebuie să-și urmeze o traiectorie predefinită. Soluția problemei anterioare nu este unică. Pentru roboți redundanți, funcția din spațiul de efortor la spațiul de articulații (joint space) nu este unică: pentru o poziție de efortor există mai multe configurații de articulații care formează un spațiu neconvex de soluții. În [Bócsi et al., 2011b,a, 2012, 2014a] am propus un algoritm bazat pe învățarea automată care este capabil de a și controla roboți nerigizi unde soluțiile standarde nu funcționează.

Algoritmul de control de urmărire are trei pași: (1) aproximăm un model comun al coordonatelor de efortor și al coordonatelor de articulații folosind tehnici de învățare automată. (2) aplicăm optimizare locală pentru a obține cinematica inversă, notată cu f^{-1} ; (3) bazat pe cinematica inversă, folosim un controlor de articulații la toate gradele de libertate – en “degrees of freedom” DoF– ale robotului pentru a obține forțele necesare.

3.2 Învățarea indirectă a modelelor în robotică

Observația principală este că un model $E(\mathbf{x}, \theta)$ dintre datele de intrare și ieșire este bine definit, iar predicții pot fi obținute prin minimizarea erorii modelului la un punct de intrare dat, *i.e.*,

$$f^{-1}(\mathbf{x}) \stackrel{\circ}{=} \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmin}} E(\mathbf{x}, \theta), \quad (12)$$

unde \mathbf{x} este poziția de efortor și θ este poziția în spațiul de articulații. O întrebare importantă este minimizarea din ecuația (12), respectiv și problema de ne-unicitate a funcției de cinematică inversă: cum să efectuăm minimizarea în cazul în care o poziție de efortor $\mathbf{x}^{\text{desired}}$ poate fi atinsă de mai multe articulații θ_1 și θ_2 (Fig. 1)? În acest

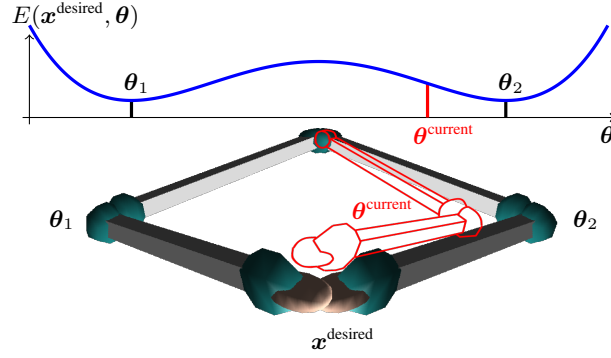


Figura 1: Ilustrația schemei de predicție a funcției de cinematică inversă. Poziția $\mathbf{x}^{\text{desired}}$ se poate obține din două configurații de articulație θ_1 și θ_2 , deci $E(\mathbf{x}^{\text{desired}}, \theta_1) = E(\mathbf{x}^{\text{desired}}, \theta_2)$. Algoritmul va alege θ_2 , această configurație fiind mai aproape de cea curentă θ^{current} .

caz, algoritmul trebuie să dea ca predicție θ_2 pentru a evita mișcări bruște. Acest comportament este favorabil pentru a obține traiectorii netede de articulații. Am propus de a începe căutarea de gradient de la poziția curentă de articulație θ^{current} a robotului.

A doua întrebare importantă este cel legat de modelul $E(\cdot, \cdot)$ pentru a obține un algoritm eficient, folosibil în aplicații din lumea reală. Am propus trei abordări posibile, folosind (1) *joint kernel support estimation*, (2) *structured output Gaussian processes*, și (3) o metodă bazată pe cinematica directă a robotului. Folosind metoda “**joint kernel support estimation**” (JKSE) [Bócsi et al., 2011b], modelăm funcția de energie ca neg-probabilitatea comună a datelor \mathbf{x} și θ , *i.e.*,

$$E(\mathbf{x}, \theta) \stackrel{\circ}{=} -p(\mathbf{x}, \theta). \quad (13)$$

JKSE modelează distribuția comună a datelor de intrare și ieșire ca un model log-linear al o funcției de feature. După simplificări, predicția pentru cinematica inversă arată astfel:

$$f^{-1}(\mathbf{x}) = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta} \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}, \theta),$$

unde \mathbf{w} sunt parametri care generează distribuția $p(\mathbf{x}, \theta)$ care explică datele $\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_i, \theta_i)\}_{i=1}^m$ cel mai bine. Valorile parametrilor \mathbf{w} sunt obținute folosind mașini cu suport vectorial cu o singură clasă (one-class support vector machines). Folosind metoda “*structured output Gaussian processes*” (SOGP) [Bócsi et al., 2011a], funcția de energie $E(\cdot, \cdot)$ este valoarea posterioră medie a unui GP negativă, *i.e.*,

$$E(\mathbf{x}, \theta) \stackrel{\circ}{=} -\mu_{(\mathbf{x}, \theta)}. \quad (14)$$

Datele de intrare la GP sunt datele comune de intrare și ieșire reprezentate de o funcție $\phi(\mathbf{x}, \theta)$ și datele de ieșire au valoarea 1 la toate datele. O astfel de mulțime de date poate conduce la overfitting; pentru evitarea acestui fenomen prior puternic trebuie aplicat: în cele ce urmează folosim un prior zero pentru a păstra notațiile simple. Valoarea medie de posterior arată astfel:

$$\mu_{(\mathbf{x}, \theta)} = \mathbf{k}_{(\mathbf{x}, \theta)}^\top (\mathbf{K} + \sigma_0^2 \mathbf{I}_m)^{-1} \mathbf{1},$$

unde $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ cu $\mathbf{K}^{ij} = k((\mathbf{x}_i, \theta_i), (\mathbf{x}_j, \theta_j))$, $\mathbf{k}_{(\mathbf{x}, \theta)} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ cu $\mathbf{k}_{(\mathbf{x}, \theta)}^i = k((\mathbf{x}_i, \theta_i), (\mathbf{x}, \theta))$, $k_{(\mathbf{x}, \theta)(\mathbf{x}, \theta)} = k((\mathbf{x}, \theta), (\mathbf{x}, \theta))$, \mathbf{I}_m este matricea identică, σ_0^2 este varianța zgomotului de măsurare, și $\mathbf{1}$ este vectorul cu valori 1 de dimensiune m .

A treia abordare, numită “**forward Gaussian process modeling**” (FWGP) [Bócsi et al., 2012], este bazată pe observația că modelul cinematic direct – notat cu $f(\cdot)$ – este mult mai ușor de modelat decât funcția inversă. Bazându-se pe această observație, construim funcția de energie astfel încât ea va depinde explicit pe cinematica directă. Odată ce știm funcția de cinematică directă, funcția de energie este definită ca și distanța Euclidiană dintre poziția dorită de efectör și poziția anticipată de modelul cinematic direct, *i.e.*,

$$E(\mathbf{x}, \theta) \stackrel{\circ}{=} \|\mathbf{x} - f(\theta)\|^2. \quad (15)$$

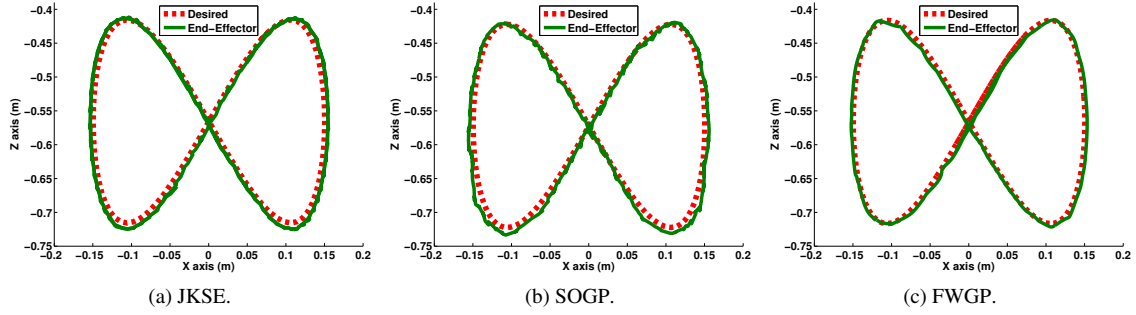


Figura 2: Rezultatele urmării formei opt cu învățare off-line. Se observă o precizie bună cu fiecare model.

Modelăm funcția de cinematică directă cu un GP. Fiind dat datele de instruire $D = \{(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}_i)\}_{i=1}^m$ cu datele de intrare $\boldsymbol{\theta}_i$ și de ieșire \mathbf{x}_i , predicția pentru o nouă $\boldsymbol{\theta}$ are o distribuție gaussiană cu valoare de medie $\mu_{\boldsymbol{\theta}}$

$$\mu_{\boldsymbol{\theta}} = \sum_{i=1}^m \alpha^i k(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_i) = \mathbf{k}_{\boldsymbol{\theta}}^{\top} \boldsymbol{\alpha}, \quad (16)$$

unde $k_{\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta}} = k(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta})$, $\mathbf{k}_{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ este un vector cu elemente $k_{\boldsymbol{\theta}}^i = k(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_i)$ și $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ este o matrice cu elemente $K^{ij} = k(\boldsymbol{\theta}_i, \boldsymbol{\theta}_j)$. Funcția $k: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ este un kernel și $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, unde $\boldsymbol{\alpha} = (\mathbf{K} + \mathbf{I}_m \sigma_0^2)^{-1} \mathbf{x}$ sunt parametri GP-ului. Valoare medie posterioară a procesului gaussian este folosită pentru predicția modelului cinematic direct din ecuația (16), *i.e.*, $f(\boldsymbol{\theta}) = \mu_{\boldsymbol{\theta}}$.

Gradientele pentru funcțiile de energie din ecuația (13), ecuația (14), și ecuația (15) au forme analitice, deci, căutarea gradient din ecuația (12) poate fi făcută eficient.

3.3 Experimente

Am evaluat empiric metodele prezentate pentru problema de control de urmărire. Algoritmul a fost aplicat pentru a învăța cinematica inversă a robotului Barrett WAM [Bócsi et al., 2011b] și pentru a urmări o figură de opt cu setări diferite. Rezultatele urmării sunt prezentate pe figura 2, unde se vede că o precizie bună a fost obținută. Experimentele arată că FWGP rezultă în modele mai precise decât JKSE sau SOGP care converg la precizia modelului analitic. Rezultatul este puțin surprinzător în lumina numărul punctelor pe care predicția era bazată. Modelul JKSE a fost bazat pe 8456 puncte, SOGP pe 200 puncte și FWGP pe 31 puncte.

Într-un experiment diferit, am modificat modelul simulat al robotului făcând-l mai complex prin fixarea unei mingi pe efectorul brațului de robot cu o coardă de 20 cm. Mișcarea oscilatoare a mingii a rezultat într-un sistem neliniar. Cu aceste setări, am făcut control de urmărire când poziția mingii a fost considerată în loc de poziția efectorului. Problema a fost de a urmări un cerc cu o rază de 20 cm (figura 3a) pe planul orizontal. Experimentul a fost efectuat cu două setări diferite: (1) când punctul de destinație a mișcat încet (o rotație a fost făcută în 24 de secunde) și (2) când punctul de destinație a mișcat rapid (o rotație a fost făcută în 0.62 de secunde).

În primul caz, FWGP a învățat să-și miște efectorul deasupra cercului dorit în timp ce mingea se mișcă de-a lungul traiectoriei dorite. Viteza efectorului era aceeași ca și viteza mingii. Pentru a învăța un model capabil de precizia din Fig 3a și 3b aveam nevoie de patru minute de interacțiune, iar modelul GP era bazat pe 20-25 de puncte. În al doilea caz efectorul s-a mișcat cu viteză mai mare pe forma circulară, și mingea a mișcat pe de-a lungul traiectoriei dorite (Fig. 3c). În acest experiment, după 20 de minute de interacțiune, modelul GP a folosit 13–15 puncte. Comparatie nu am putu să facem deoarece la această viteză ar fi deteriorat robotul. Precizăm faptul că aceleași valori ale parametrilor au fost folosiți în ambele experimente, deci comportamentul adaptiv depinde slab pe hyper-parametri modelului GP. În primul caz, FWGP a considerat mișcarea oscilatorie a mingii ca zgomot, iar în al doilea caz forța centrifugală a fost încorporată în modelul GP. Experimentele pot fi vizualizate și la link-urile următoare:

- <http://www.youtube.com/watch?v=o-ib-XNJVaM>,
- <https://www.youtube.com/watch?v=q4D7rQTbike>,
- <http://www.youtube.com/watch?v=nRyWlX8GXq0>

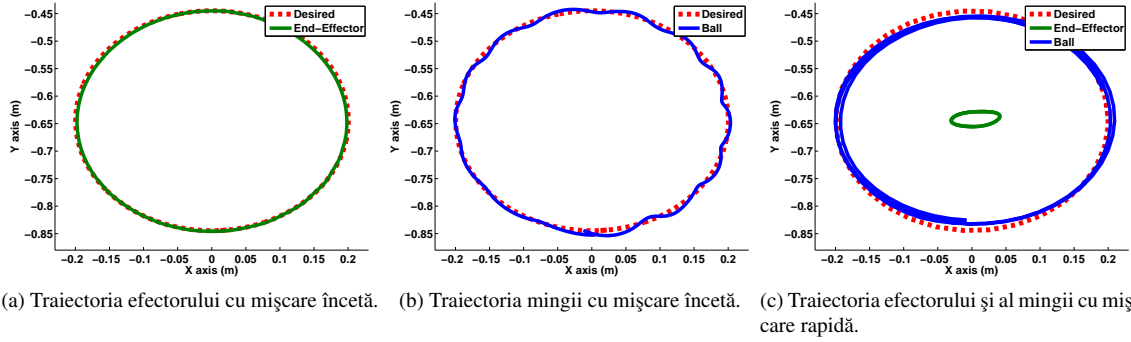


Figura 3: Control de urmărire al unui cerc cu un robot Barrett WAM simulat cu o minge fixată pe efector.

3.4 Învățarea modelelor de roboți folosind metode de transfer

Motivația folosirii metodelor de transfer vine din învățarea umană [Bócsi et al., 2013]. O diferență fundamentală dintre învățarea umană și învățarea automată este aceea că robotul nu are cunoștințe a-priori despre lume, în timp ce oamenii folosesc propriile experiențe din trecut. În acest context, deși task-ul nu a fost efectuat de către actorul uman, abilitățile rezultate din experiențele trecute va ușura învățarea problemei respective.

3.4.1 Metode de învățare prin transfer în robotică

Scopul a fost de a îmbunătăți procesul de învățare al modelului de robot când presupunem că informații din experimente trecute pot fi folosite în formă de date adiționale. Definim o sarcină sursă (source task), o problemă care este deja rezolvată, și o sarcină țintă (target task), o problemă care este dificil de învățat. Considerăm problema când sarcina sursă are datele $\mathbf{D}^s = \{(\theta_i^s, \mathbf{x}_i^s)\}_{i=1}^N$ cu N puncte și dorim să învățăm o sarcină țintă cu date de învățare $\mathbf{D}^t = \{(\theta_i^t, \mathbf{x}_i^t)\}_{i=1}^K$ cu K puncte.

Ca un prim pas, reducem dimensiunea datelor la aceeași dimensiune. În experimentele noastre am folosit metoda “*principal component analysis*” (PCA) pentru reducerea dimensiunii. Prin aplicarea metodei PCA se presupune o proiecție lineară dintre spațiile cu dimensiuni mici și mari. Mai întâi, centram datele, adică scădem valoarea medie, și le împărțim cu deviația, ajungând la:

$$\begin{aligned} \mathbf{s} &= \mathbf{B}_s(\mathbf{d}^s - \mu_s) \\ \mathbf{t} &= \mathbf{B}_t(\mathbf{d}^t - \mu_t), \end{aligned}$$

unde $\mathbf{d}^s \in \mathbf{D}^s$ și $\mathbf{d}^t \in \mathbf{D}^t$ sunt datele sarcinii sursă și sarcinii țintă, iar $\mathbf{s} \in \mathbf{M}^s$ și $\mathbf{t} \in \mathbf{M}^t$ sunt punctele respective din varietatea cu dimensiune redusă. Valorile $\mu_s = \mathbf{E}\{\mathbf{D}^s\}$ și $\mu_t = \mathbf{E}\{\mathbf{D}^t\}$ sunt valorile medii ale datelor originale. Matricele \mathbf{B}_s și \mathbf{B}_t sunt matrice de transformare astfel încât varianțele mulțimilor \mathbf{M}^s și \mathbf{M}^t să fie maximizate. Pentru detalii a se consulta [Bócsi et al., 2012].

În pasul al doilea modelăm funcția dintre cele două varietăți ca o proiecție lineară $f: \mathbf{M}^s \rightarrow \mathbf{M}^t$, cu

$$f(\mathbf{s}) = \mathbf{A}\mathbf{s}, \quad (17)$$

unde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ este o matrice de transformare cu dimensiune J . Definim două scenarii de aliniere.

În primul scenariu, știm o corespondență directă dintre punctele mulțimilor. Prin corespondență directă înțelegem că \mathbf{D}^s și \mathbf{D}^t au același număr de puncte și punctele sunt împerecheate. Această setare poate fi folosită când aceeași sarcină a fost efectuată în spațiul sursă și în spațiul țintă.

În al doilea scenariu, nu există nici o corespondență dintre punctele mulțimilor \mathbf{D}^s și \mathbf{D}^t . Este posibil că mulțimile nu au aceeași număr de puncte, *i.e.*, $|\mathbf{D}^s| \neq |\mathbf{D}^t|$.

- În primul caz – numit **aliniere prin corespondență directă** –, presupunem o funcție lineară și minimizăm eroarea transformării. Dorim să-l găsim valorile parametrilor \mathbf{A} din ecuația (17) astfel încât expectanța de eroare să fie minimizată, *i.e.*,

$$\mathbf{A} = \underset{\mathbf{A}}{\operatorname{argmin}} \mathbf{E} \left\{ (\mathbf{t} - \mathbf{A}\mathbf{s})^\top (\mathbf{t} - \mathbf{A}\mathbf{s}) \right\},$$

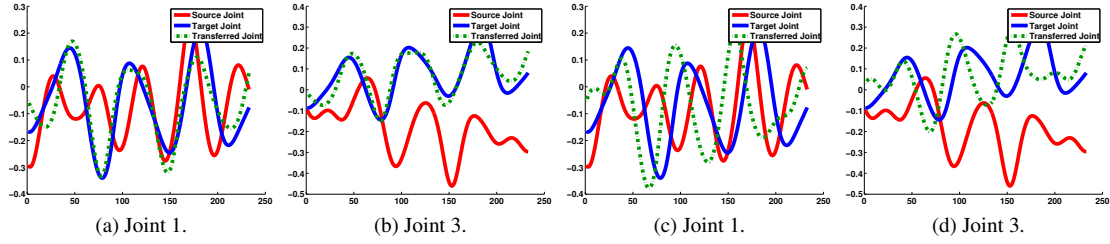


Figura 4: Rezultate pentru aliniere cu corespondență directă și aliniere dură.

unde $\mathbf{E}\{\cdot\}$ notează operatorul de expectanță. Soluția pentru matricea \mathbf{A} are următoarea formă:

$$\mathbf{A} = \Sigma_{ss}^{-1} \Sigma_{ts}, \quad (18)$$

unde Σ_{ss} , Σ_{tt} , și Σ_{ts} sunt matrice de covarianță.

- În cazul al doilea – numit **aliniere dură** –, distanța dintre distribuțiile definite de punctele mulțimilor \mathbf{M}^s și \mathbf{M}^t este minimizată. În ce urmează presupunem că datele au o distribuție Gaussiană, iar noi minimizăm distanța dintre două distribuții Gaussiene $p(\mathbf{M}^s)$ și $p(\mathbf{M}^t)$. Definită ca și divergența Kullback-Leibler, distanța dintre două Gaussiene are formă analitică. Ca rezultat, o matrice \mathbf{A} care minimizează această distanță este soluția ecuației următoare:

$$\Sigma_{tt} = \mathbf{A} \Sigma_{ss} \mathbf{A}^\top.$$

Această expresie este pătratică în \mathbf{A} și nu are o soluție unică. O matrice \mathbf{A} care este soluție a ecuației precedente poate fi obținută folosind decompoziția de valoare proprie a matricelor de covarianță [Trefethen and Bau, 1997]. Soluția propusă arată astfel:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_t \Lambda_t^{1/2} \Lambda_s^{-1/2} \mathbf{U}_s^\top,$$

unde \mathbf{U}_s și \mathbf{U}_t sunt matrice de rotație (*i.e.*, $\mathbf{U}_s \mathbf{U}_s^\top = \mathbf{I}$) cu vectori proprii ai Σ_{ss} și Σ_{tt} , iar Λ_s și Λ_t sunt matrice diagonali cu valori proprii ai Σ_{ss} și Σ_{tt} respectiv.

3.4.2 Experimente

Am condus experimente pe roboți cu diferite arhitecturi pentru a accentua două proprietăți ale metodei: (1) pierderea de informație indusă de reducția de dimensiune nu este semnificativă și (2) puterea expresivă a funcției lineare este suficientă pentru a obține aliniere eficientă.

Experimentul a fost efectuat cu un simulator al brațului Sarcos Master cu opt grade de libertate, respectiv cu un simulator al brațului Barrett WAM cu șapte grade de libertate. Scopul în ambele probleme au fost urmărirea unui nod trefoil (figura 5d) cu efortul roboților. Am folosit algoritmul de control analitic al roboților pentru a colecta date. După urmărirea figurii cu amândoi roboți pe timp de un minut, aveam puncte cu corespondență directă. Am folosit metoda de aliniere cu corespondență directă pe aceste date. Figura 4a și figura 4b arată că după estimarea matricei \mathbf{A} din ecuația (18), am transferat cu succes (verde) datele de la sarcina sursă (roșu) la sarcina țintă (albastru). Pentru a vedea câte informații pot fi păstrate cu metoda de aliniere dură am aplicat și metoda respectivă. Rezultatele sunt prezentate pe figura 4c. Se vede că transformarea nu este precisă dar valoarea media și varianța sunt păstrate, cum era de așteptat.

În experimentul următor, am transformat direct o figură de la brațul Master la brațul Barret prin folosirea matricei obținută din experimentul precedent. Am urmărit o figură de opt care a fost plasată în interiorul spațiului definit de nodul trefoil cu brațul Master. După transformarea coordonatelor de articulații și urmărirea acestei coordonate cu brațul Barrett, am obținut figura prezentată pe figura 5c. Prezentarea figurii dorite pe figura 5c este înșelătoare deoarece nu există o figura transformată *corect*. Am definit figura dorită ca și figura urmărită de controlerul analitic al brațului Barrett cu postura inițială asemănătoare cu cea folosită pentru nodul trefoil.

În experimentul final, am folosit aceleași arhitecturi de roboți pentru sarcina sursă și sarcina țintă ca și în experimentul anterior. Pentru sarcina sursă am folosit datele colectate în experimentul precedent. Sarcina țintă era de a accelera învățarea a funcției de cinematică directă a brațului Barrett. Modelul de cinematică directă a

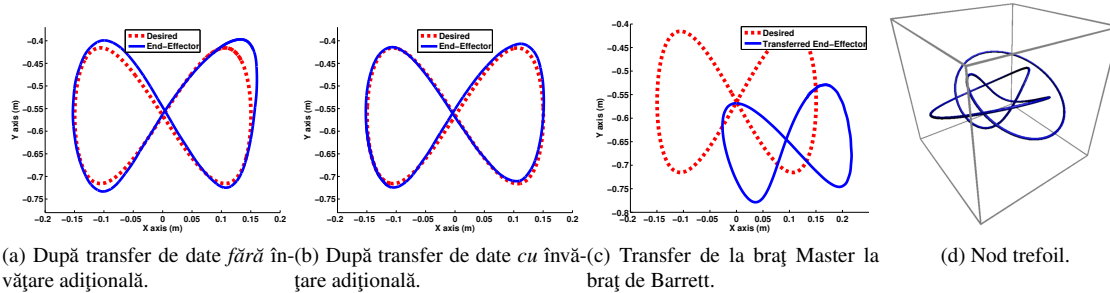


Figura 5: Rezultate de control de urmărire după trei secunde de interacțiune și folosirea metodei propuse.

fost aproximat folosind procese Gaussiene și acest model a fost folosit pentru control de urmărire. Fără a folosi metode de învățare prin transfer robotul are nevoie de timp între 20 de secunde și patru minute pentru a învăța acest model. După numai trei secunde de mișcări cvasi-stohastice am folosit metoda de aliniere dură. Am oprit procesul de învățare după trei secunde și am aplicat metoda noastră. Figura 5a prezintă figura de opt obținută. Forma figurii de opt nu este perfectă, dar a fost obținută după numai trei secunde de interacțiune. Am repetat experimentul dar acum procesul de învățare nu a fost oprit după trei secunde ci numai datele de la brațul Master au fost folosite. Figura 5b prezintă că dacă procesul de învățare nu este oprit o figura foarte precisă poate fi obținută.

Din articolele de mai sus a rezultat teza de doctorat a lui Botond Bócsi, membru în echipa proiectului [Bócsi, 2012]. Teza a avut titlul “*Model Learning for Robot Control*” și a fost susținut cu succes în 23 noiembrie 2012.

4 Studiul modelelor cu zgomot de intrare

În general într-o problemă de regresie se consideră zgomot în date de ieșire (label noise). În această cercetare am considerat problema regresiei când este zgomot și în datele de intrare (input noise).

Fiind dat datele $\mathbf{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$, unde $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ și $y_i \in \mathbb{R}$, *i.e.*,

$$y = \tilde{y} + \epsilon_y \quad \mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} + \epsilon_x,$$

unde y este ieșirea observată, \tilde{y} este ieșirea reală, $\epsilon_y \sim \mathcal{N}(0, \sigma_y^2)$ este procesul de zgomot, \mathbf{x} data de intrare observată, $\tilde{\mathbf{x}}$ este data reală de intrare, și $\epsilon_x \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ procesul de zgomot de intrare.

4.1 Modele cu zgomot de intrare corectate de matricea Hesse

Într-o primă abordare [Bócsi and Csató, 2013] am folosit expansiunea în șirul Taylor a funcției de regresie. Folosind proprietatea că procesul de zgomot este aditiv și Gaussian cu valoare de medie zero am ajuns la următoarea expresie pentru funcția de regresie corectată:

$$f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \sigma^\top H_g(\mathbf{x}) \sigma, \quad (19)$$

unde σ este varianța zgomotului de intrare, $g(\cdot)$ este o funcție de regresie arbitrară, $H_g(\cdot)$ este matricea Hesse a funcției și $f(\cdot)$ este funcția de regresie corectată.

Am condus experimente pe funcții unidimensionale și multidimensionale. Ca funcție de regresie am folosit procese Gaussiene (GP) și rețele neuronale (NN) și versiunea lor corectată de matricea Hesse (+H). Rezultatele sunt afișate pe figura 6. Aici se vede că îmbunătățirea impusă de metoda propusă este semnificativă. Mai mult, această îmbunătățire devine mult mai vizibilă, când varianța zgomotului crește.

Rezultatele experimentelor pe date multidimensionale sunt prezentate în tabelul 1. De aici reiese că îmbunătățirea impusă de metoda noastră nu este atât de relevantă în acest caz. O explicație posibilă este că în teorie preferăm funcții de regresie lineare pentru a evita over-fittingul. Iar funcțiile lineare au derivată de ordin doi zero. Astfel corectare cu matricea Hesse devine nesemnificativ. Această proprietate nu este o caracteristică a metodei noastre ci un fenomen general a datelor multidimensionale.

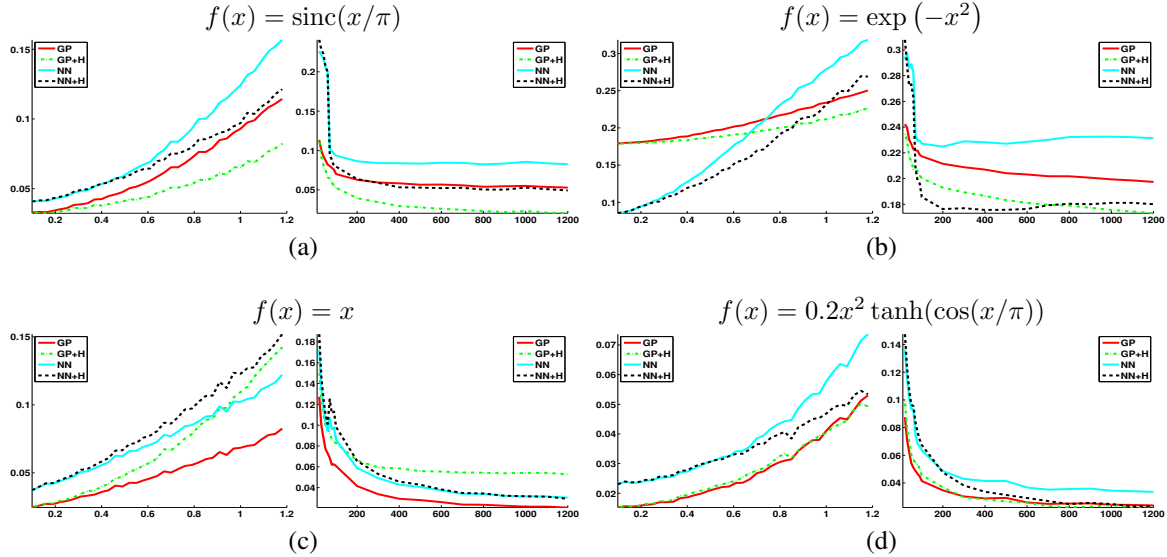


Figura 6: Performanța metodei SIMEX pe date artificiale.

Nume data-set	GP	GP+H	NN	NN+H	Zgomot (σ)	Dim.	Mărime
Boston housing (\$1000s)	2.2271	2.2271	3.4819	3.4819	0.1	13	506
Concrete (MPa)	4.1281	4.1280	6.1865	6.1864	1	8	1030
Barrett WAM 1 (mm)	2.9272	2.9242	2.8726	2.8488	0.01	4	1000
Barrett WAM 2 (mm)	13.707	13.731	12.439	9.3524	0.1	4	1000
CPU performance	17.762	17.763	16.846	16.846	5	7	209
Auto MPG (mpg)	4.0301	4.0322	2.2990	2.2988	3	7	301

Tabela 1: Performanța metodei SIMEX pe date multidimensionale.

4.2 Simulație-extrapolare pentru procese Gaussiene

În a doua abordare [Bócsi et al., 2014b] idea principală este să *generăm* mai multe seturi de date prin adăugarea unui zgomot de intrare cu varianță controlată:

$$\varphi_\lambda(x) \sim f(x + \sqrt{1 + \lambda} \epsilon_x), \quad (20)$$

unde $\varphi_\lambda(x)$ este funcția de regresia bazată de date de intrare când a fost adăugat zgomot cu varianță λ . Putem observa, că $\varphi_0(x)$ reprezintă funcția originală când nu a fost adăugat zgomot controlat. Astfel măsurăm efectul zgomotului adăugat și după câteva simulări de adăugare de zgomot de intrare facem o extrapolare unde nu ar fi zgomot de intrare, $\varphi_{-1}(x)$:

$$\varphi_3, \varphi_2, \varphi_1, \varphi_0 \rightarrow \varphi_{-1}. \quad (21)$$

O ilustrație a metodei propusă este prezentată pe figura 7.

La experimentele conduse am folosit procese Gaussiene pentru funcția de regresie. O consecință a acestei alegere este că caracteristica probabilistică a proceselor Gaussiene pot fi păstrată, astfel după extrapolare obținem o distribuție asupra funcțiilor de regresie. O ilustrare despre îmbunătățirea impusă de metodă este prezentată pe figura 8.

5 Metode hashing pentru căutare rapidă

Căutările cu metoda kNN – en “*k*-nearest neighbor” – sunt metode neparametrice foarte performante, fiind demonstrată consistența în limita unei baze de date cu număr infinit de elemente. Găsirea vecinilor cei mai apropiați este o problemă importantă în multe domenii: găsim aplicații importante în regăsirea informației, în prelucrarea

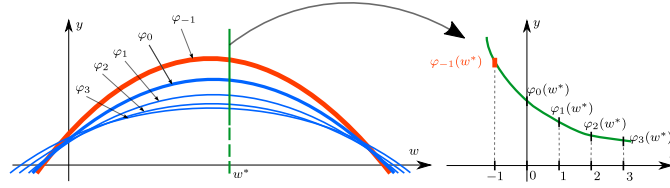


Figura 7: Ilustrație de simulare-extrapolare. (stânga) φ_λ pentru $\lambda = \{0, 1, 2, 3\}$ cu linii albastre; φ_{-1} este extrapolarea cu roșu. (dreapta) extrapolarea individuală $\varphi_\lambda(w^*)$ – ca a funcției de λ – pentru data de test w^* .

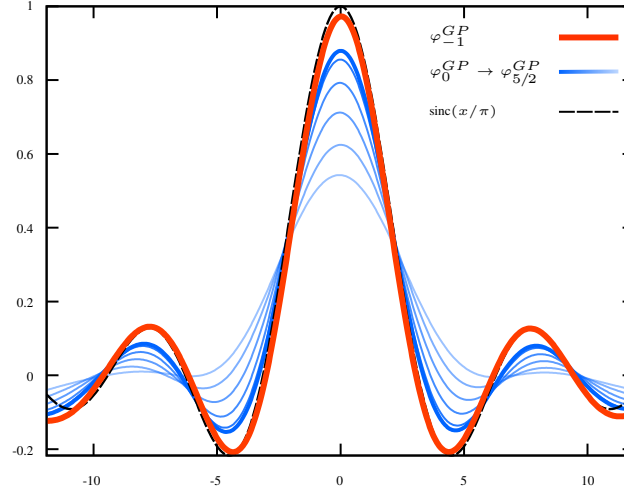


Figura 8: Rezultate pentru funcția $\text{sinc}(x/\pi)$ cu zgomot de intrare cu varianță $\Sigma = 0.8$. Curba neagră reprezintă funcția funcția reală $\text{sinc}(\cdot)$. Curbele albastre $\varphi_0^{GP} \rightarrow \varphi_{5/2}^{GP}$ reprezintă funcțiile de regresie când zgomotul de intrare a fost adăugat. Curba roșie este predicția de extrapolare φ_{-1}^{GP} .

imaginilor prin calculator (computer vision), în teoria codurilor, în sisteme de recomandare, geometrie computațională; lista completă este una foarte lungă. Găsirea exactă ai vecinilor cei mai apropiați este de complexitate liniară, aceasta deoarece distanța de la fiecare punct trebuie calculată. Metoda kNN suferă însă de timpul linear, de multe ori fiind nevoie de metode mai rapide – desigur cu o oarecare scădere a performanței. O clasă de metode având o complexitate subliniară folosește coduri binare de hashing: un șir binar *apropiat* este asociat fiecărui punct pentru calcularea rapidă a distanțelor între puncte; iar distanța Hamming este folosită pentru determinarea rapidă – *dar aproximativă* – a vecinilor.

În Bodó and Csató [2012] am propus o îmbunătățire a metodei hashing pentru a genera coduri binare, mai exact în metodele numite “*locality-sensitive hashing*” (LSH) bazat pe kerneluri (kLSH), în continuare producem o scurtă descriere a metodei. Algoritmul LSH se bazează pe generarea de vectori aleatori (\mathbf{r}), reprezentând hiperplane aleatori,

$$h_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{dacă } \mathbf{r}'\mathbf{x} \geq 0 \\ 0, & \text{în alte situații} \end{cases}$$

codul hash de lungime L asociat unui punct \mathbf{x} fiind $[h_{\mathbf{r}_1}(\mathbf{x}), \dots, h_{\mathbf{r}_L}(\mathbf{x})]'$. Generarea hiperplanurilor aleatori în spațiul kernel a fost realizată cu o metodă inteligentă, însă problema calculării valorilor de kernel reprezintă o problemă. Folosind o metodă simplă de găsire de pre-imagini, am reușit să îmbunătățim performanța algoritmului k-LSH, articolul a fost prezentat la conferința IJCNN 2012 [Bodó and Csató, 2012].

Pentru perfecționarea metodei, în Bodó and Csató [2013] și Bodó and Csató [2014a] am propus o variantă liniară de spectral hashing – o metodă performantă și des utilizată pentru căutare ANN (*approximate nearest neighbors*). În spectral hashing calcularea șirurilor binare pentru exemple din mulțimea de training este simplă, însă generalizarea pentru puncte nevăzute devine o problemă dificilă. În articolul nostru propunem o metodă liniară generalizată cu produse scalare în spații RKHS pentru calcularea vectorilor de “spectral hashing”, unde generarea codurilor binare este la fel de simplă și pentru punctele de test – adică pentru datele care nu sunt încă incluse în baza de date. Algoritmul *Linear Spectral Hashing* găsește un set de vectori ortogonali, care sunt vectori normali la hiper-plane de separare cu marjă maximă. Un pseudocod al algoritmului se găsește în Alg. 1. Lucrarea

Algorithm 1 Linear Spectral Hashing

Input: Datele în \mathbf{X} , $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{1})$, matricele de vectori proprii \mathbf{V} și \mathbf{U} , și un punct \mathbf{x}

Output: Codul $f(\mathbf{x})$

- 1: Calcularea primelor r vectori proprii a matricei $\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{D}^{-1/2}$ sau $\mathbf{X}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{X}'$, începând cu a doua cea mai mare valoare proprie:

$$\begin{aligned} & [\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_{r+1}] \quad \text{or} \\ & [\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_{r+1}] \end{aligned}$$

- 2: Definim funcția:

$$f_i(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'\mathbf{u}_i = \mathbf{x}'\mathbf{X}\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{v}_i e_i^{-1/2}, \quad i = 2, \dots, r+1$$

unde $e_i, i = 2, \dots, r+1$ desemnează valorile proprii a matricei $\mathbf{X}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{X}'$.

- 3: Codul lui \mathbf{x} este calculat după cum urmează:

$$f(\mathbf{x}) = [f_2(\mathbf{x}), f_3(\mathbf{x}), \dots, f_{r+1}(\mathbf{x})]'$$

a fost prezentată la conferința ESANN în 2013 [Bodó and Csató, 2013], o versiunea scurtă a apărut în volumul de conferinței, după aceea am fost invitați să publicăm lucrarea în jurnalul Neurocomputing [Bodó and Csató, 2014a].

6 Învățarea semi-supervizată aplicată la metode de hashing

Învățarea semi-supervizată este un subdomeniu important al instruirii automate. Din cauza că adnotarea umană a exemplelor de instruire în general solicită expertiză în domeniu, aceasta este costisitoare și consumatoare de timp. O soluție este utilizarea numai a unei mici proporții a datelor etichetate pentru a îmbunătăți performanța algoritmului de instruire. Dacă definim învățarea supervizată ca și găsierea unei funcții $\hat{f} : X \rightarrow Y$ care aproximează într-un mod optim o funcție necunoscută $f : X \rightarrow Y$, a cărei realizări sunt stocate în exemplele de instruire (\mathbf{x}, y) , $\mathbf{x} \in X, y \in Y$, atunci învățarea semi-supervizată se definește prin calculul funcției optime folosind un set de date *extins*: $\{(\mathbf{x}_i, y_i) | \mathbf{x}_i \in X, y_i \in Y, i = 1, 2, \dots, \ell\} \cup \{\mathbf{x}_j | \mathbf{x}_j \in X, j = \ell + 1, \ell + 2, \dots, N\}$. Prima mulțime este mulțimea datelor etichetate, iar a doua este mulțimea datelor neetichetate, $N - \ell = u, \ell \ll u$. În [Bodó and Csató, 2014b] am propus o tehnică de extindere a codurilor hash obținute printr-o metodă de hashing nesupervizată. Singura presupunție este cunoașterea a câtorva etichete atribuite unor elemente din baza de date. Extinderea este efectuată folosind coduri corectoare de erori și metode de învățare semi-supervizată. Algoritmul rezultat este unul generic: atât procedura de generare a codurilor corectoare cât și metoda de învățare semi-supervizată pot fi selectate arbitrar. Un cod corector de erori poate detecta $d_{min} - 1$ erori și poate corecta $\lfloor \frac{d_{min}-1}{2} \rfloor$ erori, unde d_{min} desemnează distanța minimă Hamming între codurile generate. Un cod corector de erori *favorabil* este caracterizat având rânduri și coloane bine separate. Pentru a obține coduri optime în acest sens, putem defini o problemă de optimizare pentru generarea unor astfel de coduri:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{k \times s}} \quad & \sum_{i,j=1}^k a_{ij} \|\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j\|^2 (= \text{tr}(\mathbf{C}'\mathbf{L}\mathbf{C})) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{C}'\mathbf{1} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{C}'\mathbf{C} = \mathbf{I} \end{aligned}$$

unde $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_k$ desemnează codurile, s este lungimea unui cod, $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$ este Laplacianul, \mathbf{A} conține similitudinile între clase, iar $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{A}\mathbf{1})$ este matricea de grad a matricei \mathbf{A} . Constrângerile sunt introduse pentru a obține o matrice de coduri echilibrată și necorelată. Soluția problemei este dată de vectorii proprii a Laplacianului, și am testat rezultatele la probleme concrete: în experimente am folosit codurile linear spectral hashing (propușe de tot de noi în [Bodó and Csató, 2013, 2014a]) și metodele “Laplacian regularized least squares” și SVM-uri transductive pentru învățare. Matricele de coduri corectoare de erori au fost generate folosind tehnicile 1-vs-rest, 2-vs-rest și de optimizare a codurilor cu diferite abordări pentru a calcula similitudinile între clase. Acest rezultat a fost prezentat la conferința ESANN în 2014.

În [Bodó and Csató, 2014c] analizăm algoritmul “label propagation” (LP) pentru învățare semi-supervizată. Algoritmul este unul transductiv și bazat pe graful de similitudini între exemple. Schema algoritmului este prezen-

Algorithm 2 Label propagation

```
1: repeat
2:    $\mathbf{Y} = \mathbf{T}\mathbf{Y}$ 
3:   (Normalizarea rândurilor din  $\mathbf{Y}$ .)
4:   Restaurarea datelor etichetate.
5: until convergență
```

tată în Alg. 2: rândul 2 realizează propagarea etichetelor, rândul 3 este un pas opțional, iar ultimul pas constă în restaurarea etichetelor ale datelor etichetate, modificate în pasul de propagare. Articolul compară două versiuni al algoritmului LP: diferența între cele două variante este în alegerea matricei de tranziție \mathbf{T} . Dacă definim matricea de similitudine între exemple ca \mathbf{W} , iar $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{W}\mathbf{1})$ desemnează matricea de grad, matricea probabilităților de tranziție este $\mathbf{P} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{W}$. În prima versiune a algoritmului matricea T este \mathbf{P}' (transpusa matricei \mathbf{P}), iar în a doua versiune este egală cu \mathbf{P} . Deși diferența pare subtilă, outputul algoritmului – cel puțin în ceea ce privește formulele – diferă:

$$\begin{aligned}\mathbf{Y}_U &= \mathbf{A}\mathbf{D}_L^{-1}\mathbf{Y}_L \\ \mathbf{Y}_U &= \mathbf{A}\mathbf{Y}_L\end{aligned}$$

Răspunsurile date de cele două algoritmi sunt analizate și comparate între ele și în experimente cu date reale. Articolul, de asemenea, încearcă să facă o recomandare, folosirea cărei variantă este mai favorabilă. Articolul a fost trimis spre publicare la Studia Universitatis Babeș-Bolyai, Series Informatica.

7 Concluzii

În urma analizelor făcute apreciem că metodele neparametrice pot fi folosite cu succes în procesarea bazelor de date. Deși cuantumul de procesare adăugată este mare, dacă modelul este destul de bine specificat, atunci cu alocarea mai multor resurse se pot obține rezultate superioare comparativ cu algoritmi clasici.

La algoritmi de învățare prin întăriri am constatat că este important să avem posibilitatea ca datele să fie procesate într-un mod on-line: odată ce datele sosesc, ele pot fi procesate fără a aștepta terminarea procesului de colecție a acestora. În acest sens este important formalismul din Secțiunea 2.5.2, formula (11), care produce un update rapid și eficient. În viitorul apropiat vrem să testăm rezultatul la modelele mai complicate din robotică și să-l publicăm în jurnale de referință.

Un al doilea rezultat important este acela al studiului modelelor cu zgomot de intrare: modelul considerat este unul greoi considerând timpul de execuție. Totodată nu studiul consistenței metodei SimExGP ar aduce beneficii vizavi de aplicabilitatea metodei SimExGP la sisteme din lumea reală. Considerăm că – de exemplu prin utilizarea calculului variațional – o să putem să realizăm alte metode de eliminare sau de tratare a zgomotului la punctele de intrare, iar comparațiile cu metoda SimExGP pot fi utile (modelele derivate bazate pe calculul variațional de obicei sunt mai rapide; credem că metoda SimExGP este una bună dar lentă, iar accelerarea metodei va fi benefică.

Mulțumiri: prin acesta dorim să mulțumim pentru sprijinul acordat de către UEFISCDI pentru derularea proiectului *PN-II-RU-TE-2011-3-0278*. Ca urmare a finanțării, au fost susținute două teze de doctorat, dintre care unul s-a realizat în co-tutelă.

Bibliografie

- B. Bócsi and L. Csató. Hessian corrected input noise models. In *Proceedings of the International Conference on Artificial Neural Networks (ICANN)*, volume 8131 of *LNCS*, pages 1–8, Sofia, Bulgaria, 2013. Springer. ISBN 978-3-642-40727-7. doi: 10.1007/978-3-642-40728-4_1.
- B. Bócsi, L. Csató, and J. Peters. Structured output gaussian processes. Technical report, Babes-Bolyai University, 2011a. URL http://www.cs.ubbcluj.ro/~bboti/pubs/sogp_2011.pdf.
- B. Bócsi, D. Nguyen-Tuong, L. Csató, B. Schoelkopf, and J. Peters. Learning inverse kinematics with structured prediction. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS)*, pages 698–703, San Francisco, USA, September 2011b. ISBN 978-1-61284-454-1. doi: 10.1109/IROS.2011.6094666.

- B. Bócsi, P. Hennig, L. Csató, and J. Peters. Learning tracking control with forward models. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA)*, pages 259–264, St. Paul, MN, USA, 2012. ISBN 978-1-4673-1403-9. doi: 10.1109/ICRA.2012.6224831.
- B. Bócsi, L. Csató, and J. Peters. Alignment-based transfer learning for robot models. In *Proceedings of the IEEE International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, pages 1–7, Dallas, USA, 2013. doi: 10.1109/IJCNN.2013.6706721.
- B. Bócsi, L. Csató, and J. Peters. Indirect robot model learning for tracking control. *Advanced Robotics*, 28(9): 589–599, 2014a. doi: 10.1080/01691864.2014.888371.
- B. Bócsi, H. Jakab, and L. Csató. Simulation-extrapolation gaussian processes for input noise modeling. In *Proceedings of the 16th International Symposium on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing (SYNASC)*, Timisoara, Romania, September 2014b.
- B. Bócsi. *Model Learning for Robot Control*. PhD thesis, Babeş-Bolyai University of Cluj-Napoca, Faculty of Mathematics and Computer Science, 2012.
- B. A. Bócsi, H. S. Jakab, and L. Csató. Simulation extrapolation gaussian processes for input noise modeling. In *16th International Symposium on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing, SYNASC 2014, Timisoara, Romania, September 21-25, 2014*, pages to-be-published, 2014.
- Z. Bodó and L. Csató. Improving kernel locality-sensitive hashing using pre-images and bounds. In *Proceedings of the 2012 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, pages 2710–2717, 2012.
- Z. Bodó and L. Csató. Linear spectral hashing. In *Proceedings of the 21th European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN)*, pages 303–308, 2013.
- Z. Bodó and L. Csató. Linear spectral hashing. *Neurocomputing*, 141:117–123, 2014a.
- Z. Bodó and L. Csató. Augmented hashing for semi-supervised scenarios. In *Proceedings of the 22nd European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning (ESANN)*, pages 53–58, 2014b.
- Z. Bodó and L. Csató. A note on label propagation for semi-supervised learning. *Studia Universitatis Babeş-Bolyai, Series Informatica*, 2014c. (submitted).
- S. J. Bradtke, A. G. Barto, and P. Kaelbling. Linear least-squares algorithms for temporal difference learning. In *Machine Learning*, pages 22–33, 1996.
- L. Csató and M. Opper. Sparse on-line Gaussian Processes. *Neural Computation*, 14(3):641–669, 2002.
- M. P. Deisenroth, C. E. Rasmussen, and J. Peters. Gaussian process dynamic programming. *Neurocomputing*, 72(7-9):1508–1524, 2009. ISSN 0925-2312. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.neucom.2008.12.019>.
- M. Ghavamzadeh and Y. Engel. Bayesian policy gradient algorithms. In B. Schölkopf, J. Platt, and T. Hoffman, editors, *NIPS '07: Advances in Neural Information Processing Systems 19*, pages 457–464, Cambridge, MA, 2007. MIT Press.
- H. Jakab and L. Csató. Improving Gaussian process value function approximation in policy gradient algorithms. In T. Honkela, W. Duch, M. Girolami, and S. Kaski, editors, *Artificial Neural Networks and Machine Learning – ICANN 2011*, volume 6792 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 221–228. Springer, 2011. ISBN 978-3-642-21737-1.
- H. Jakab and L. Csató. Reinforcement learning with guided policy search using Gaussian processes. In *The 2012 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), Brisbane, Australia, June 10-15, 2012*. IEEE, 2012. ISBN 978-1-4673-1488-6.
- H. Jakab and L. Csató. Manifold-based non-parametric learning of action-value functions. In M. Verleysen, editor, *European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN)*, pages 579–585, Bruges, Belgium., 2012. UCL, KULeuven, (c)Ciaco. ISBN 978-2-87419-047-6.

- H. S. Jakab. *Intelligent Models for Robotic Behavior, Decision Making and Environment Interaction*. PhD thesis, Joint PhD degree between: the Faculty of Computer Science, Eötvös Loránd University of Budapest, Hungary and Faculty of Mathematics and Computer Science, Babeş-Bolyai University of Cluj-Napoca, Romania, 2012.
- H. S. Jakab and L. Csató. Novel feature selection and kernel-based value approximation method for reinforcement learning. In *Artificial Neural Networks and Machine Learning – ICANN*, volume 8131 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 170–177. Springer, 2013. ISBN 978-3-642-407277.
- H. S. Jakab and L. Csató. Sparse approximations to value functions in reinforcement learning. In P. Koprinkova-Hristova, editor, *Springer Series in Bio-/Neuroinformatics, Artificial Neural Networks*, volume 4, pages 295–315. Springer International Publishing Switzerland, 2014. doi: 10.1007/978-3-319-09903-3_14.
- M. L. Puterman. *Markov Decision Processes: Discrete Stochastic Dynamic Programming*. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, 1994.
- C. E. Rasmussen and C. Williams. *Gaussian Processes for Machine Learning*. MIT Press, 2006.
- R. S. Sutton and A. G. Barto. *Reinforcement Learning: An Introduction*. MIT Press, 1998.
- L. N. Trefethen and D. Bau, III. *Numerical Linear Algebra*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1997. ISBN 0-89871-361-7.