



Vilnius universitetas
Matematikos ir informatikos fakultetas
Informatikos katedra

Skaitmeninis intelektas ir sprendimų priėmimas (saviorganizuojantys neuroniniai tinklai)

doc. dr. Olga Kurasova
Olga.Kurasova@mii.vu.lt

2017

Saviorganizuojantys neuroniniai tinklai (1)

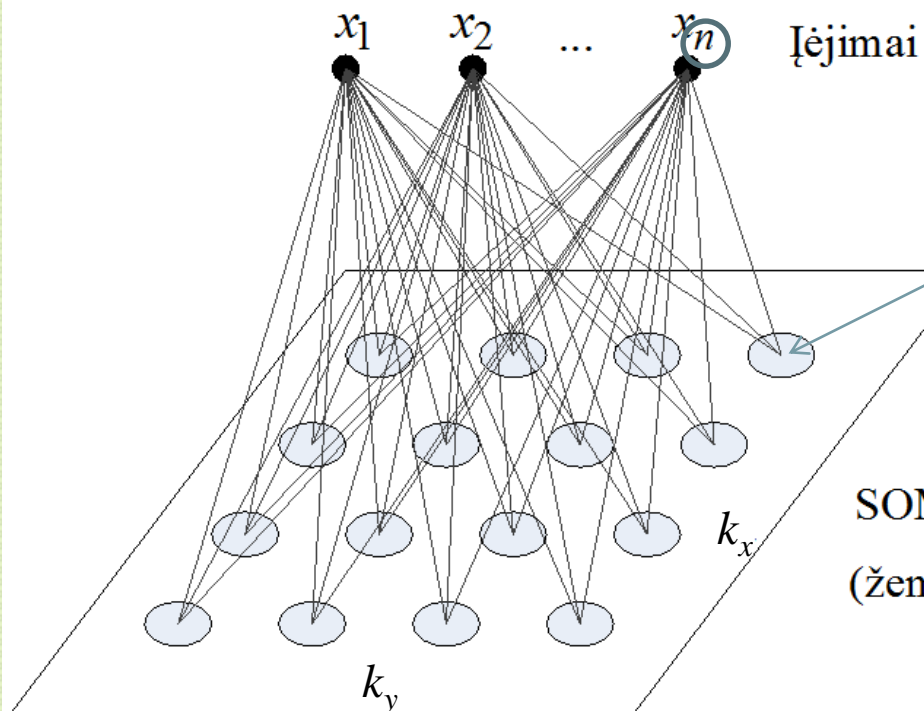
- **Saviorganizuojančius neuroninius tinklus** (žemėlapius, *self-organizing maps*, **SOM**) Suomijos mokslininkas T. Kohonenas pradėjo tyrinėti apie 1982 m., todėl jie dar vadinami Kohoneno neuroniniais tinklais, arba **Kohoneno saviorganizuojančiais žemėlapiais**.
- Iki šiol jie yra **nagrinėjami** daugelio pasaulio mokslininkų ir **plačiai taikomi** įvairiose srityse.
- **Pavadinimas kilo** iš to, kad saviorganizuojantis žemėlapis, naudodamas mokymo (įėjimo) aibę, pats save sukuria (**save organizuoja**).

Saviorganizuojantys neuroniniai tinklai (2)

- Pagrindinis **SOM tinklo tikslas** – išlaikyti duomenų topologiją.
- Taškai, **esantys arti** įėjimo vektorių erdvėje, yra atvaizduojami **arti vieni kitų ir SOM** tinkle.
- SOM tinklai gali būti naudojami siekiant **vizualiai pateikti duomenų klasterius** (grupes) ir ieškant daugiamatinių duomenų **projekcijų** į mažesnio skaičiaus matmenų erdvę, paprastai į plokštumą.
- Todėl SOM yra ir **klasterizavimo**, ir **vizualizavimo** metodas.

Saviorganizuojantys neuroniniai tinklai (3)

Saviorganizuojantis neuroninis tinklas yra neuronų, paprastai išdėstytų **dvimačio tinklelio**, dar vadinamo **žemėlapiu** arba **lentele**, mazguose, **masyvas** $M = \{M_{ij}, i = 1, \dots, k_x, j = 1, \dots, k_y\}$.



Neuronai (svoriai)

$$M_{ij} = (m_{ij}^1, m_{ij}^2, \dots, m_{ij}^n)$$

$i = 1, \dots, k_x$ (tinklelio eilutės)

$j = 1, \dots, k_y$ (tinklelio stulpeliai)

SOM tinklas
(žemėlapis)

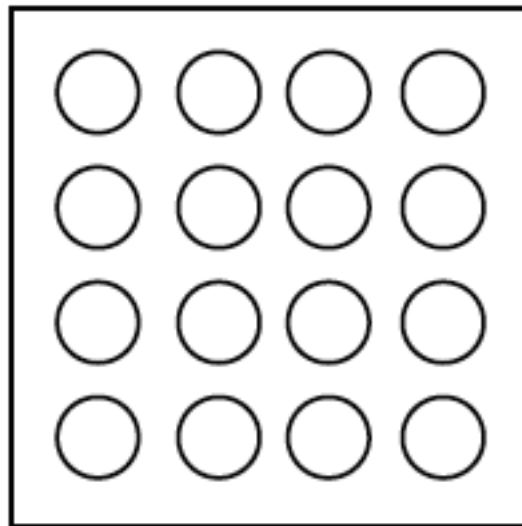
Saviorganizuojantys neuroniniai tinklai (4)

- Būtina suprasti, kad po kiekvienu SOM tinklo neuronu (paveiksle pažymėtu apskritimu) „**slepiasi**“ **vektorius** (*codebook vector*), kurio komponentų skaičius sutampa su analizuojamų duomenų požymių skaičiumi.
- Priešingai nei anksčiau nagrinėti tiesioginio sklidimo neuroniniai tinklai, **nulinio įėjimo** SOM tinklas neturi.

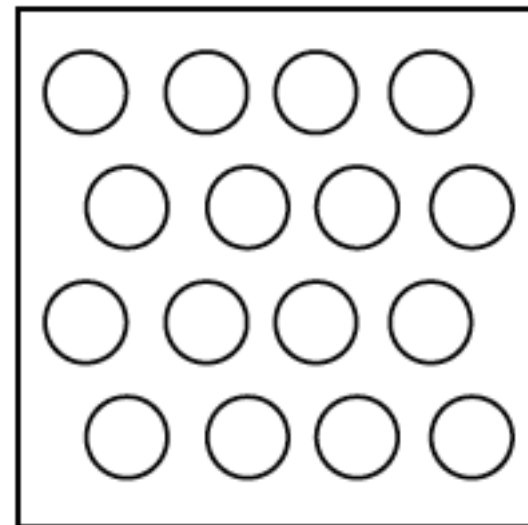
SOM tinklo struktūra

Galimos SOM tinklo struktūros:

- **stačiakampė** (*rectangular*) (a)
- arba **šešiakampė** (*hexagonal*) (b)



a)



b)

SOM tinklo mokymas (1)

- SOM tinklas mokomas **mokymo be mokytojo** būdu.
- Vektorių, apibūdinantį i -osios eilutės j -ajame stulpelyje esantį **neuroną**, pažymėkime $M_{ij} = (m_1^{ij}, m_2^{ij}, \dots, m_n^{ij})$
- Mokymo pradžioje neuronų (vektorių) M_{ij} komponentų $m_1^{ij}, m_2^{ij}, \dots, m_n^{ij}$ **pradinės** reikšmės dažniausiai **nustatomos atsitiktinai** intervale $(0, 1)$.
- Neuroniniam tinklui **daug kartų pateikiama** skirtingų objektų, nusakomų n -mačiais vektoriais X_1, X_2, \dots, X_m .

SOM tinklo mokymas (2)

- Kiekviename mokymo žingsnyje (iteracijoje) **vienas** mokymo aibės **vektorius** X_k **pateikiamas** į tinklą.
- Vektorius X_k **palyginamas** su visais neuronais M_{ij} : dažniausiai skaičiuojamas **Euklido atstumas** tarp šio vektoriaus ir kiekvieno neurono ($||X_k - M_{ij}||$).
- Randama, iki kurio neurono $M_c \in \{M_{ij}\}$ atstumas yra mažiausias; rastas neuronas vadinamas **neuronu (vektoriumi) nugalėtoju** (*neuron (vector) winner*).

SOM tinklo mokymas (3)

- Visų tinklo neuronų **komponentės keičiamos** naudojantis iteracine formule:

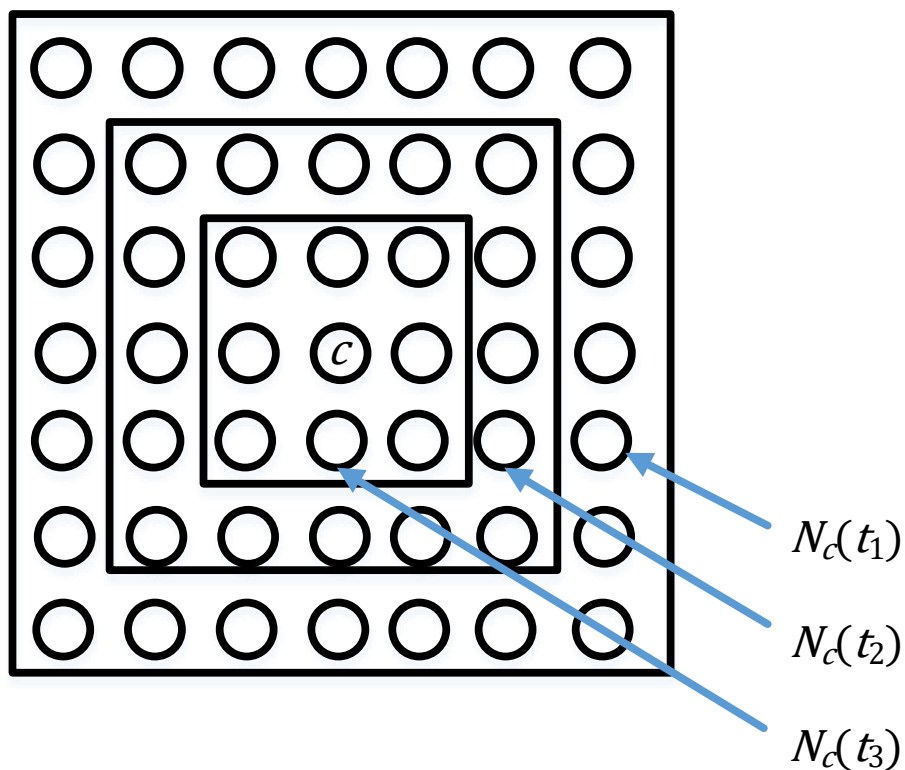
$$M_{ij}(t + 1) = M_{ij}(t) + h_{ij}^c(X_k - M_{ij}(t))$$

- Čia c nurodo **neuroono nugalėtojo indeksus** SOM žemėlapyje.
- t – **iteracijos** numeris,
- h_{ij}^c – **kaimynystės funkcija**, kuri yra mažėjanti funkcija ir artėjanti į 0, kai iteracijų skaičius artėja į begalybę; be to jos reikšmės **priklauso ir nuo neuroono nugalėtojo vietos** perskaičiuojamo neuroono atžvilgiu.

SOM kaimynystės funkcijos

- Galimos įvairios SOM **kaimynystės funkcijos** h_{ij}^c . Populiariosios šios:
 - Burbuliuko:
$$h_{ij}^c(t) = \begin{cases} \alpha(t), & (i, j) \in N_c \\ 0, & (i, j) \notin N_c \end{cases}$$
 - Gauso:
$$h_{ij}^c(t) = \alpha(t) \cdot \exp\left(\frac{-\|R_c - R_{ij}\|^2}{2(\eta_{ij}^c(t))^2}\right)$$
- Čia N_c yra kaimyninių neuronų indeksų aibė aplink neuroną su indeksu c . Dvimačiai vektoriai R_c ir R_{ij} yra neuronų M_c ir M_{ij} indeksai. Indeksai parodo SOM žemėlapyje esančio neurono vietą (eilutės ir stulpelio numerį).
- Parametras η_{ij}^c yra neurono M_{ij} kaimynystės eilės numeris neurono-nugalėtojo M_c atžvilgiu.

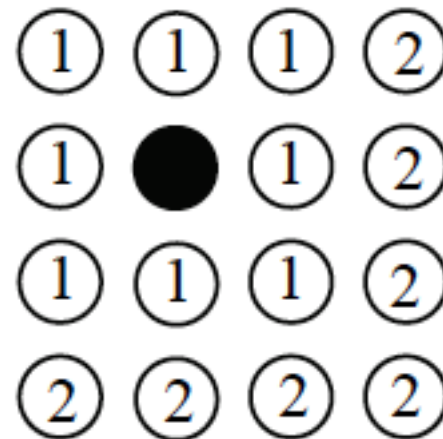
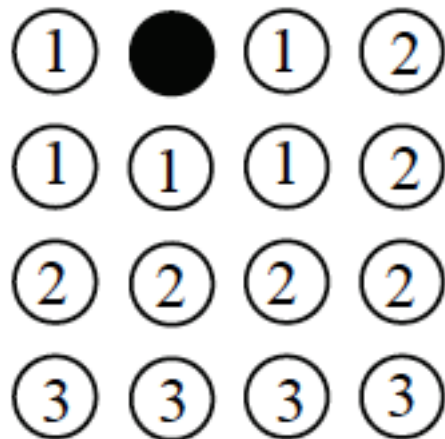
SOM kaimynystės aibės



Kaimynystės aibės $N_c(t_1)$, $N_c(t_2)$, $N_c(t_3)$, čia $(t_1 < t_2 < t_3)$

SOM kaimynystės eilė

- Greta vektoriaus nugalėtojo M_c esantys neuronai vadinami **pirmosios eilės kaimynais** (kaimynystės eilė $\eta_{ij}^c = 1$).
- Greta pirmosios eilės kaimynų esantys neuronai, išskyrus jau paminėtus, vadinami **antrosios eilės kaimynais** (kaimynystės eilė $\eta_{ij}^c = 2$) ir t. t.



SOM mokymo parametras

- Kaimynystės funkcija $\alpha(t)$ yra **mokymo parametras**.
- Dažniausiai:
 - $\alpha(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right)$
 - $\alpha(t) = \frac{1}{t}$
 - $\alpha(t) = (0,005)^{\frac{t}{T}}$
- T yra iteracijų (epochų) skaičius.

function SOM_training(X, M, \hat{e}, k_x, k_y)

// įvestis: X – duomenų aibė, M – pradiniai neuronai, \hat{e} – tinklo mokymo epochų skaičius,

// k_x, k_y – eilučių ir stulpelių skaičius

// išvestis: M – neuronai

BEGIN

FOR $t=1$ **TO** \hat{e}

FOR $l=1$ **TO** m // duomenų aibės vektorius X_l pateikiamas į neuroninį tinklą

FOR $i=1$ **TO** k_x

FOR $j=1$ **TO** k_y

$\|M_{ij} - X_l\| := \sqrt{\sum_{p=1}^n (m_p^{ij} - x_{lp})^2}$ // skaičiuojamas Euklido atstumas

END

END

$c := \arg \min_{i,j} \{ \|X_l - M_{ij}\| \}$ // \hat{M}_c – vektoriaus X_l neuronas nugalėtojas

FOR $i=1$ **TO** k_x

FOR $j=1$ **TO** k_y

$M_{ij}(t+1) := M_{ij}(t) + h_{ij}^c(t)(X_l - M_{ij}(t))$ // SOM mokymo taisyklė

END

END

END // visų vektorių peržiūrėjimo pabaiga

END // mokymo pabaiga

RETURN M

END

SOM tinklo rezultatas (1)

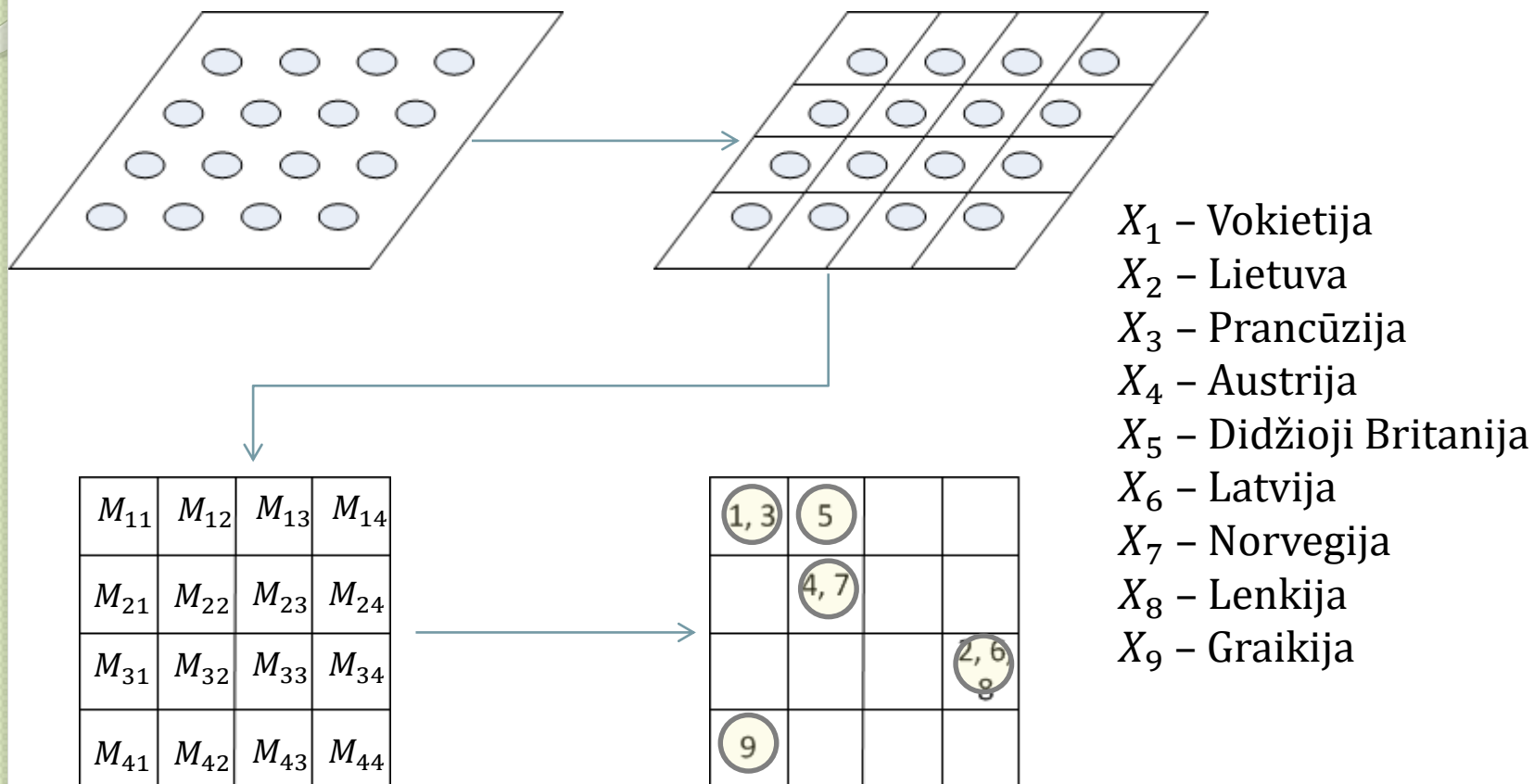
- **Po SOM tinklo** mokymo į tinklą pateikiami mokymo aibės arba nauji, dar tinklui „nematyti“, duomenų vektoriai.
- Randamas kiekvieno vektoriaus **neuronas nugalėtojas** ir jis pažymimas SOM žemėlapyje neurono nugalėtojo vietoje.
- Tokiu būdu vektoriai **išsidėsto tarp žemėlapių** (lentelės) elementų.

SOM tinklo rezultatas (2)

Irisų duomenys, pateikti **SOM** tinkle $[10 \times 10]$. Čia pavaizduojami klasių numeriai, bet gali būti pavaizduojami ir duomenų numeriai.

3		3	3	2				1	1
3				2				1	1
3	3		2	2				1	1
3	3	3		2					1
3		3		2					1
		3	2	2	2	2			
3	3	3			2				
2,3	3			2		2			2
2				2		2	2		2
3		2	2	3	2	2	2	2	2

SOM rezultatas



SOM tinklo kokybės nustatymas (1)

- Baigus SOM tinklo mokymus, būtina nustatyti jo kokybę.
- Dažniausiai vertinamos dvi paklaidos:
 - **kvantavimo** (*quantization error*)
 - ir **topografinė** (*topographic error*).
- **Kvantavimo paklaida** parodo, kaip tiksliai jau išmokyto tinklo neuronai prisiderina prie mokymo aibės vektorių.
- Tai **vidutinis atstumas** tarp duomenų vektorių ir jų vektorių nugalėtojų:

$$E_{SOM(q)} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \| X_k - M_{c(k)} \|$$

SOM tinklo kokybės nustatymas (2)

- **Topografinė paklaida** parodo, kaip gerai SOM tinklas išlaiko analizuojamų duomenų **topografiją**, t. y. tarpusavio išsidėstymą.
- Ji skaičiuojama pagal formulę:

$$E_{SOM(t)} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m u(X_k)$$

- Jeigu SOM žemėlapyje vektoriaus X_k neuronas nugalėtojas **yra šalia neurono**, iki kurio atstumas nuo X_k yra mažiausias, neskačiuojant iki neurono nugalėtojo, tai formulėje $u(X_k) = 0$, priešingu atveju $u(X_k) = 1$.

SOM vizualizavimo būdai

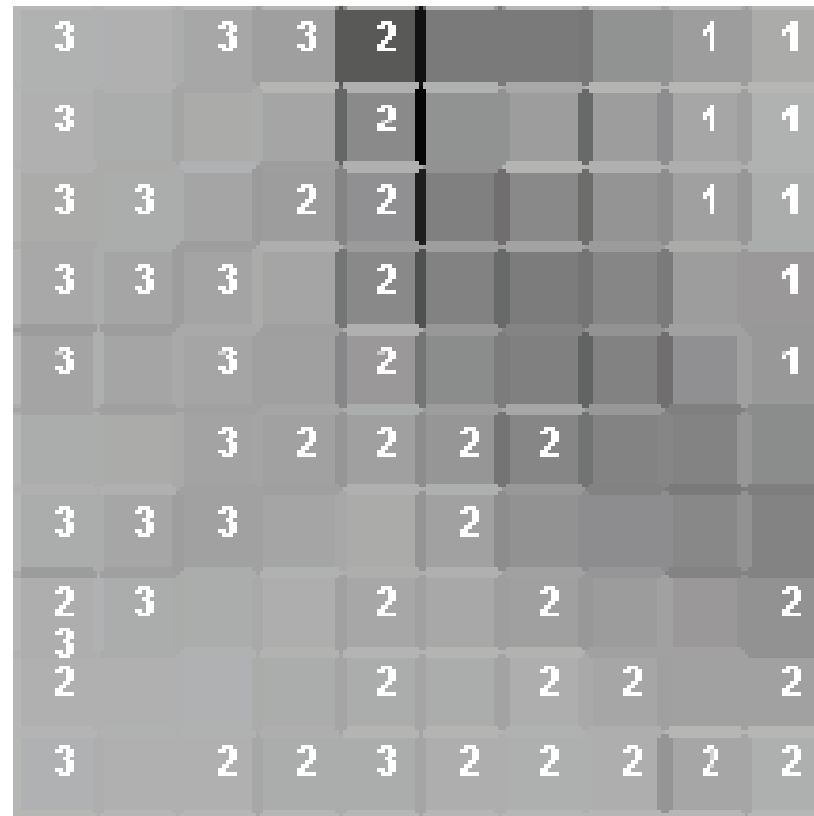
- Paprasčiausia SOM lentelė nėra labai informatyvi, **sunku pasakyti**, kaip toli yra duomenys, esantys gretimuose SOM lentelės langeliuose.
- Todėl **būtina ieškoti** būdų, kaip pagerinti tokio vizualizavimo kokybę.
- **Unifikuota atstumų matrica** (U-matrica, *unified distance matrix*) yra vienas populiariausių SOM vizualizavimo būdų.
- U-matricą sudaro atstumai tarp **kaimyninių** SOM neuronų.

U-matrica

- Paprastumo dėlei nagrinėkime **vienmatį SOM** $[1 \times 5]$ (M_1, M_2, \dots, M_5) .
- **U-matrica** bus vienos eilutės ir devynių stulpelių $(u_1, u_{12}, u_2, u_{23}, u_3, u_{34}, u_4, u_{45}, u_5)$.
- Čia $u_{ij} = ||M_i - M_j||$ yra **atstumas** tarp kaimyninių neuronų M_i ir M_j , o u_i yra tam tikra reikšmė, pavyzdžiui, vidutinis atstumas tarp kaimyninių reikšmių

$$u_i = \frac{u_{(i-1)i} + u_{i(i+1)}}{2}$$

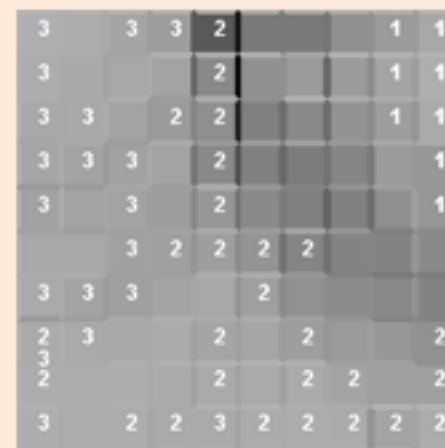
Irisų duomenys, vizualizuoti u-matrica



Irisai įvairiais vizualizavimo būdais

3		3	3	2				1	1
3				2				1	1
3	3		2	2				1	1
3	3	3		2					1
3		3		2					1
		3	2	2	2	2			
3	3	3			2				
2,3	3			2		2			2
2				2		2	2		2
3		2	2	3	2	2	2	2	2

paprasčiausia SOM lentelė



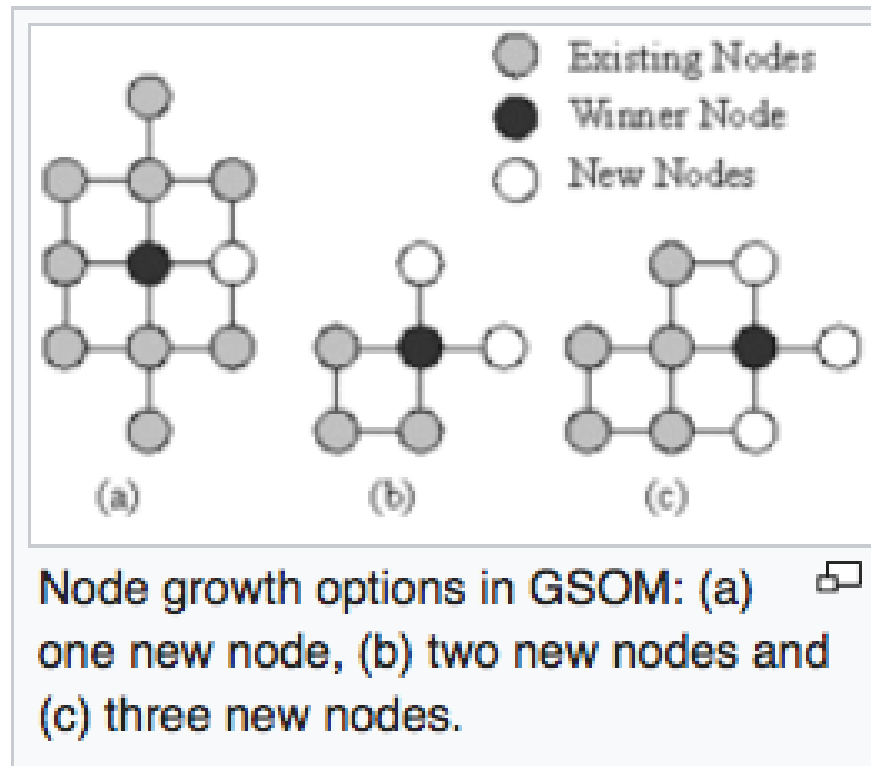
SOM lentelė vizualizuota
U-matricos pagalba



SOM lentelė su
skritulinėmis
diagramomis

SOM praplėtimai

Augantis SOM (*growing self-organizing map*, GSOM).



SOM praplėtimai

- **Laike prisitaikantis SOM** (*time adaptive self-organizing map, TASOM*), kur kiekvienas neuronas turi prisitaikantį savo mokymo parametą ir kaimynystės dydį.
- **Generatyvinis topografinis žemėlapis** (*generative topographic map, GTM*) – tai alternatyva SOM'ui.