

基于 SOM 网络的特征选择技术研究*

廖广兰 史铁林 姜南 刘世元

(华中科技大学机械科学与工程学院 武汉 430074)

摘要: 讨论了一种 SOM 网络训练结果的可视化技巧, 结合该技巧提出了基于 SOM 网络的特征选择方法。该方法通过计算出 SOM 网络竞争层神经元权值中各维特征对输入模式聚类识别的影响, 可以选择出对于模式识别敏感的特征集。用 IRIS 和齿轮故障数据对该方法进行了检验, 研究结果表明, 采用该方法能较好地原始特征中选择出有效特征子集, 实现不同类别输入数据之间的模式聚类识别。

关键词: 模式识别 特征选择 SOM 网络 可视化

中图分类号: TP1.8 TH17

0 前言

模式识别在众多科学研究领域得到了广泛应用, 而从原始信号中提取的、对不同模式非常敏感的特征参数对于模式识别则是不可或缺的^[1]。例如, 在对复杂机械对象进行故障模式的诊断识别时, 为了全面获取设备状态信息进而识别出其中的故障模式, 通常需要测取为数众多的特征信号, 如 300 MW 发电机组所需测点数就达到 1 000 个左右^[2], 获取的原始数据十分巨大, 获得的信息还具有一定的不确定性和模糊性。在实际诊断过程中, 为了使诊断准确可靠, 对于测得的信号总希望通过预处理获得尽可能多的特征参数, 但是采用太多特征进行分类训练耗时费工、甚至妨碍训练的收敛, 最终影响分类精度。为了有效实现模式识别, 就需要对初始特征集进行变换, 得到最能反映分类本质的特征, 这就要用到特征选择或提取过程。可见, 特征选择是模式识别中的关键问题之一。

特征选择是在已有 n 个特征参数中挑选出 m 个特征参数 ($m < n$), 实质上就是从已有特征集中剔除对模式识别影响不大的特征参数, 形成新的特征子集用于识别。目前, 有众多的方法用于特征选择过程, 如遗传算法^[3]和神经网络等。在此讨论了一种 SOM 网络训练结果的可视化技巧, 并结合该技巧研究了 SOM 网络技术在特征选择中的应用。

1 SOM 网络可视化技术

1.1 SOM 网络

在生物神经系统中, 存在一种“侧抑制”现象, 即一个神经细胞兴奋后, 通过其分支对周围神经细胞产生抑制。这种侧抑制使神经细胞之间出现竞争。开始阶段各个神经细胞都处于不同程度的兴奋状态, 但由于侧抑制的作用, 各细胞之间相互竞争的最终结果是: 兴奋作用最强的神经细胞所产生的抑制作用战胜周围其他神经细胞的抑制作用而“赢”了, 周围神经细胞则“输”了。SOM(Selforganizing maps, 即自组织映射)^[4]网络正是基于上述生物结构和现象, 由 Helsinki 大学神经网络专家 Kohonen 教授提出的, 是以无教师示教的方式进行训练的、具有自组织功能的神经网络。SOM 网络的基本思想是网络竞争层各神经元竞争对输入模式的响应机会, 最后仅一个神经元成为竞争获胜者, 并相应调整那些与获胜神经元有关的联接权值, 使之在今后的竞争中更加有利, 而最终的竞争获胜神经元也就表示了对该输入模式的分类。因此, SOM 网络自组织自适应的学习能力进一步拓宽了神经网络在模式识别方面的应用。

1.2 可视化技术讨论

众所周知, 可视化技术在数据分析中起着重要作用, 简洁明了的可视化表示可以帮助人们更好地了解高维数据的内部结构。当前, 对于 SOM 网络的训练结果, 尚需借助于 U-矩阵^[5]、PCA 或其他一些降维映射方法来理解输入模式的内部结构。考虑到 SOM 网络的区域响应特点, 下面讨论一种 SOM 网络训练结果的可视化技巧。

设有训练好的 SOM 网络, 竞争层采用二维矩

* 国家重大基础研究项目基金(2003CB716207)和国家自然科学基金(50375047 和 50205009)资助项目。20040401 收到初稿, 20040930 收到修改稿

形或六边形结构, 所有竞争层神经元都处于该二维平面的固定网格点上, 拥有二维坐标 x_i 和相应的权值 w_i , $i=1,2,\dots,m$, m 为竞争层神经元总数。需要指出的是, 在 SOM 网络自组织学习过程中, 只有竞争层神经元权值 w_i 进行了调整以逼近输入矢量的分布, 而神经元彼此之间位置 x_i 并没有改变。

对于输入矢量 p , 由 $\|p - w_g\| = \min_j \|p - w_j\|$, $j=1,2,\dots,m$, 可求得其 BMU (Best matching unit, 即最匹配神经元) g , 进而确定 g 的邻域 N_g 。由于 SOM 网络训练中, 对于任意输入矢量, 竞争层将划分为不同区域, 各区域中邻近神经元通过相互作用和竞争, 自适应地形成对输入矢量的响应检测器, 即网络学习过程中, 竞争获胜神经元邻域内所有神经元对输入矢量都有响应, 为此采用下式计算竞争层神经元 j 对 p 的响应 $R_j(p)$

$$R_j(p) = \frac{N_g(j)f(d_j)}{\sum_{i=1}^m N_g(i)f(d_i)} \quad j=1,2,\dots,m \quad (1)$$

式中 $d_j = \|p - w_j\|$, 为 p 与神经元 j 权值之间欧氏距离; $N_g(j) = \begin{cases} 1 & j \in N_g \\ 0 & j \notin N_g \end{cases}$ 为指示函数, 表示当神经元 j 处于邻域 N_g 内时 $N_g(j)$ 取值 1, 否则取值 0;

$f(d_j)$ 为距离值 d_j 的函数, 随 d_j 增大而减小, 表示神经元 j 与矢量 p 的相似程度, 即距离值越小两者越相似。对于矢量 p , 有 $\sum_{j=1}^m R_j(p) = 1$, 即所有竞争层神经元对 p 的响应之和为 1。实际上, 对于 p , 如果其最匹配神经元 g 的邻域 N_g 只包含 g 本身, 即只有神经元 g 对 p 的响应非零, 则最终的可视化效果等同于通常的 U-矩阵法; 如果 g 邻域 N_g 取整个竞争层, 即所有竞争层神经元都处于该邻域内, 都对 p 有响应, 有 $N_g(j) \equiv 1$, 则式(1)简化为

$$R_j(p) = \frac{f(d_j)}{\sum_{i=1}^m f(d_i)} \quad j=1,2,\dots,m \quad (2)$$

而 p 在二维平面上的映像点位置 x_p 计算如下

$$x_p = \sum_{j=1}^m R_j(p) x_j \quad (3)$$

p 的模式位置 x_p^m 为

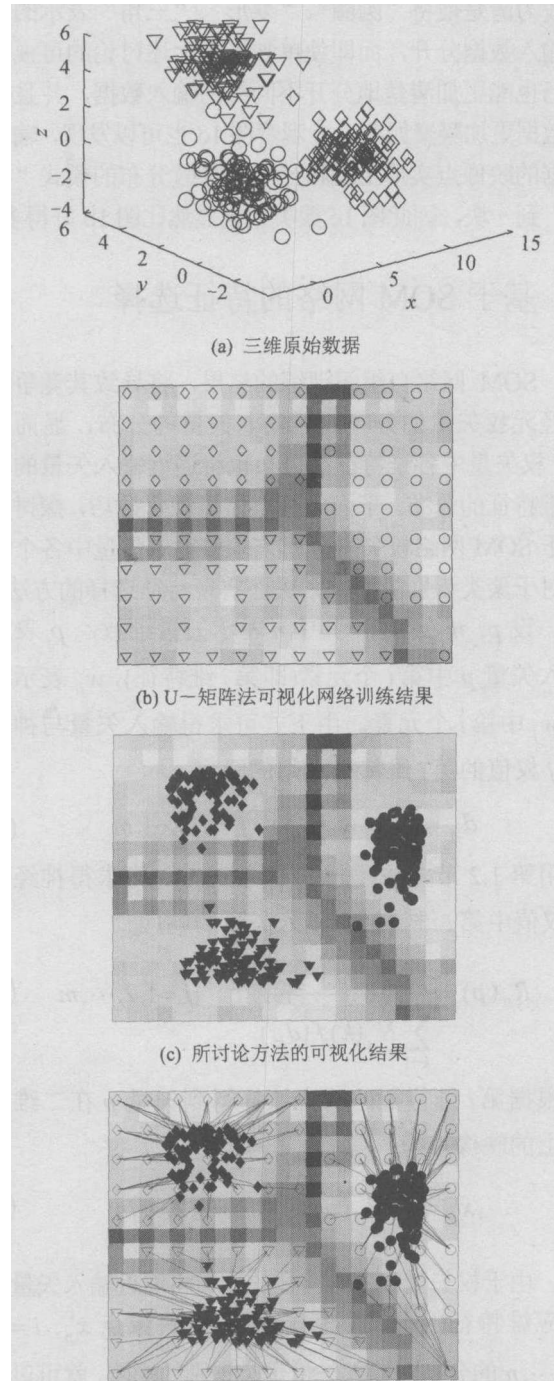
$$x_p^m = \arg \max_{x_j} \{R_j(p)\} = x_g \quad j=1,2,\dots,m \quad (4)$$

即输入矢量的模式分布就等同于其 BMU 的分布。得到所有输入矢量在二维平面上的映像点及模式

后, 就能直观分析 SOM 网络的聚类训练结果了。需要强调的是, 上述可视化技巧所得到的网络训练结果也只是揭示了输入数据的空间拓扑结构, 得到的映像点分布也只表示输入矢量的空间分布, 其坐标值不具有实际的物理意义, 即量纲一的参数。

1.3 仿真分析

下面是一个仿真实例, 以检验上述可视化方法的效果。图 1a 为一组三维量纲一的仿真数据, 可以清楚看到原始数据分为三类, 分别用“圆圈”、“三角”和“菱形”表示。图 1b 为采用 U-矩阵法可视



(d) 结合模式和映像点分布的训练结果

图 1 三维仿真数据的试验结果

化 SOM 网络的训练结果, 图中空心图例为对应输入矢量的 BMU 也即模式的分布, 灰度对应相应位置的 U 矩阵值, 表示数据的聚类倾向: 深色区域表示类别边界, 浅色则表示聚类中心。为便于比较, 结合 U 矩阵分布并采用上述可视化技巧得到的网络训练结果如图 1c, 其中实心图例为相应输入数据的映像点。图 1d 则是图 1c 结合输入数据模式的分布图, 其中映像点用实心图例表示, 而模式则采用空心图例, 并且输入矢量的映像点和对应模式之间用直线相连接。

从图中可以看出, 如图 1b 所示, 采用 U-矩阵法能较为清楚地将“圆圈”、“菱形”、“三角”表示的三类输入数据分开, 而即使单独采用上述讨论的可视化技巧也能更加清楚地分开不同类的输入数据, 并且类内数据更加凝聚如图 1c。观察图 1d 也可以发现, 输入数据的映像点实质上就相当于把分散分布的模式“凝聚”到一块, 因此图 1c 聚类效果显然比图 1b 好得多。

2 基于 SOM 网络的特征选择

SOM 网络自组织训练的结果, 将导致其竞争层神经元权矢量的分布逼近输入矢量的分布, 显而易见, 权矢量中各维特征的分布也将逼近输入矢量的相应维特征的分布。下面结合上述可视化技巧, 探讨借助于 SOM 网络权矢量分布来求出输入矢量中各个特征对于聚类识别的影响, 进而实现特征选择的方法。

设 $p, w_j \in \mathbf{R}^n$, 其中 n 表示矢量维数, p_i 表示输入矢量 p 中第 i 个元素(即第 i 维特征), w_{ji} 表示权值 w_j 中第 i 个元素。由下式可求得输入矢量与神经元 j 权值的第 i 维特征之间的距离

$$d_{ji} = \|p_i - w_{ji}\| \quad j=1, 2, \dots, m \quad (5)$$

采用第 1.2 节方法, 把 d_{ji} 代入式(1), 可求得神经元 j 权值中第 i 维特征对输入矢量的响应

$$R_{ji}(p) = \frac{N_g(j)f(d_{ji})}{\sum_{k=1}^m N_g(k)f(d_{ki})} \quad j=1, 2, \dots, m \quad (6)$$

而根据第 i 维特征的响应计算得到矢量 p 在二维平面上的映像点为

$$x_p^i = \sum_{j=1}^m R_{ji}(p)x_j \quad i=1, 2, \dots, n \quad (7)$$

由于权矢量中各维特征的分布将逼近输入矢量中相应维特征的分布, 因此, 考察映像点 $x_p^i, i=1, 2, \dots, n$ 的分布对输入矢量聚类识别的影响, 就可以从 n 个特征中选择出对于输入矢量聚类识别比较敏感的特征。下面采用两个基本参量来表征数据的聚类程度^[6]

$$S_i = \sum_{x \in \psi_i} (x - m_i)(x - m_i)^T \quad (8)$$

$$S_{ij} = (m_i - m_j)(m_i - m_j)^T \quad (9)$$

式中 m_i 表示数据类 ψ_i 聚类中心, S_i 表示 ψ_i 的类内离散度矩阵, 而 S_{ij} 为类 ψ_i 与 ψ_j 的类间离散度矩阵。通过比较聚类结果中不同类的类内和类间离散度, 就可以选择出其中的敏感特征。需要补充的是, 上述类内和类间离散度也都是量纲一的量, 只表示空间分布的一种度量, 其值也不具有实际的物理意义。

2.1 实例分析

下面选用判别分析和模式分类中常用的 IRIS^[7] 数据集来检验 SOM 网络的特征选择性能。该数据集以花瓣长度、宽度、萼片长度和宽度共 4 个参数作为特征, 包含 3 类植物刚毛草、变色草和光叶草, 每类植物各 50 个共 150 个样本, 数据为 150×4 维矩阵。采用 SOM 网络进行训练, 四个特征对三类数据模式分类的影响结果见图 2a、b、c、d, 图中植物刚毛草、变色草和光叶草数据的映像点分别用“圆圈”、“三角”和“菱形”表示。



图2 特征花瓣长度、宽度, 萼片长度、宽度对刚毛草、光叶草和变色草三类数据的聚类结果

从图 2 中可以看出, 三类植物刚毛草、变色草和光叶草数据的聚类识别效果以图 2c 最好, 图 2b 最差, 后者基本上分辨不出三类数据, 也即特征花瓣长度对上述三类数据的聚类识别最为敏感, 其他依次为花瓣宽度(见图 2d)、萼片长度(见图 2a), 而萼片宽度(见图 2b)最差。由上述四个特征计算得到的三类植物数据的类内和类间离散度值见表 1。

表 1 IRIS 不同特征对聚类结果的影响比较

	花瓣长度	花瓣宽度	萼片长度	萼片宽度
类间离散度	2.018 4	1.128 7	0.966 9	0.143 3
类内离散度	0.217 6	0.126 8	0.338 3	0.107 1

很明显, 特征萼片宽度导致的类间离散度远小于其他三个特征。因此, 可以确定从初始 4 个特征中选择出类间离散度大的特征花瓣长度、花瓣宽度和萼片长度构成聚类识别的有效特征子集。图 3 即为选择上述三个特征, 采用 SOM 网络聚类训练, 并单独应用讨论的可视化技巧(没有结合灰度表示的 U 矩阵分布)得到的结果。可以清楚看出, “圆圈”、“三角”、“菱形”表示的植物刚毛草、变色草、光叶草分类效果很明显。可见, 采用 SOM 网络结合上述可视化方法进行特征选择是行之有效的。

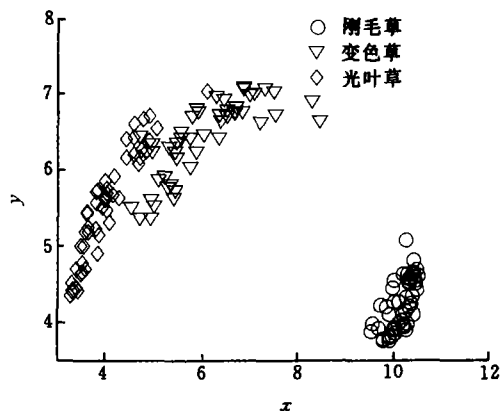


图 3 SOM 网络对特征花瓣长度、宽度和萼片长度组成数据的聚类结果

2.2 应用实例

下面应用一组齿轮副传动数据^[8]进行分析, 试验数据采自一对齿数比 41:37, 模数 5 mm 的低碳钢螺旋齿轮副, 齿轮转速 10 Hz, 数据采样频率为 10 kHz, 采样数据包括齿轮正常、点蚀和磨损三种状态, 每种状态包含 37 组原始加速度振动信号共 111 组。描述齿轮工作状态的指标很多, 考虑到只分析齿轮运行状态与特征之间的对应关系, 而不考虑其状态变化原因, 为简单起见只选择了 11 个常用的时域统计指标来构成齿轮状态的原始特征集, 分别是最大值 max、最小值 min、标准差 std、绝对均

值 pro、峰值因子 c、脉冲因子 i、裕度系数 l、有效值 rms、峭度 kur、偏斜度 skew 和方差 var, 特征参数具体计算方法见参考文献[9]。采用 SOM 网络训练这 111 组 11 维齿轮特征数据, 并分别求出训练结果中每个特征对齿轮数据聚类识别的类内和类间离散度值如表 2。

根据表 2 结果, 可从 11 个原始齿轮特征中选择类间离散度大、类内离散度小的 6 个特征, 包括最大值 max、最小值 min、标准差 std、绝对均值 pro、有效值 rms、方差 var, 组成 111×6 的特征数据, 仍旧采用 SOM 网络进行训练, 并单独应用所讨论的可视化技巧显示聚类结果如图 4。可以明显看出, 图中圆圈、三角、菱形表示的齿轮正常、点蚀和磨损状态特征数据区分较为明显, 尤其以磨损与其他两种状态区分得很开。可见, 采用上述特征选择方法得出的特征子集能较好地进行不同状态齿轮数据的模式分类。

表 2 原始特征对齿轮数据聚类结果的影响比较

	类间离散度	类内离散度
最大值max	0.498	0.069
最小值min	0.494	0.065
标准差std	0.510	0.040
绝对均值pro	0.509	0.040
峰值因子c	0.270	0.154
脉冲因子i	0.246	0.163
裕度系数l	0.279	0.151
有效值rms	0.510	0.040
峭度kur	0.342	0.103
偏斜度skew	0.206	0.123
方差var	0.507	0.039

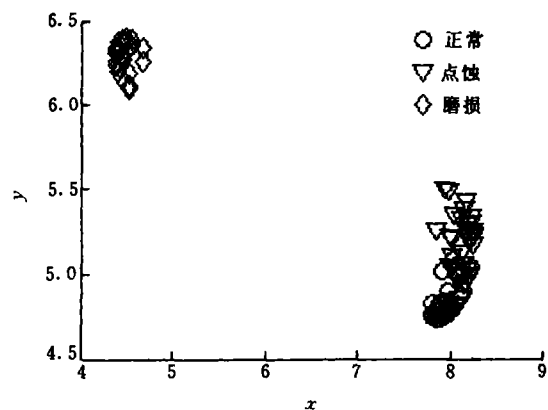


图 4 SOM 网络对特征选择后的齿轮正常、点蚀和磨损状态数据的聚类训练结果

3 结论

(1) 讨论了一种 SOM 网络训练结果的可视化

技巧, 仿真实例表明, 该可视化技巧能非常清晰地显示 SOM 网络的聚类训练结果。

(2) 结合该可视化技巧, 提出了基于 SOM 网络的特征选择方法。该方法计算出 SOM 网络竞争层神经元权值中各维特征对输入模式聚类识别的影响, 进而根据影响的大小可以选择出对于模式识别敏感的特征集。对 IRIS 和齿轮故障数据的实例研究表明, SOM 网络结合该可视化技巧能有效地从原始特征中选择出对模式识别敏感的特征子集, 进而实现输入模式的聚类识别。

综上所述, SOM 网络结合上述可视化技巧可广泛用于模式识别中的特征选择。

参 考 文 献

- 1 Matuyama H. Diagnosis algorithm. Journal of Japan Society Professional Engineers, 1991, 75(3): 35~37
- 2 韩西京, 陈培林, 史铁林, 等. 300 MW 汽轮发电机组状态监测与故障诊断专家系统. 汽轮机技术, 1997, 39(1): 35~37
- 3 Chen P, Toshio Toyota, Lin Y, et al. Failure diagnosis of machinery by self-reorganization of symptom parameters in time domain using genetic algorithms. International Journal of Intelligent Control and Systems, 1999, 3(4): 571~585
- 4 Kohonen T. Self-organizing maps. Third Edition, Berlin, Heidelberg: Springer, 2001
- 5 Ultsch A. Self-organizing neural networks for visualization and classification. In: Proc. Conf. Soc. for Information and Classification, Berlin, 1993: 307~313
- 6 边肇祺, 张学工. 模式识别. 北京: 清华大学出版社, 2000
- 7 Vapnik V N. Statistical Learning Theory. New York: John Wiley & Sons, 1998
- 8 Vibroacoustic gear signatures with time-frequency spectro-

grams. <http://www.ulb.ac.be/polytech/laborulb/gearvi/gear-jtfa.htm>

- 9 黄文虎, 夏松波, 刘瑞岩, 等. 设备故障诊断原理、技术及应用. 北京: 科学出版社, 1996

FEATURE SELECTION BASED ON SOM NETWORKS

Liao Guanglan Shi Tielin

Jiang Nan Liu Shiyuan

(School of Mechanical Science and Engineering,
Huazhong University of Science and Technology,
Wuhan 430074)

Abstract: A technique to visualize the trained self-organizing maps (SOM) networks results is discussed, and an approach for feature selection based on SOM networks combining with the visualization technique is presented. In the approach, the responsibilities of every dimensional feature in SOM networks competitive neurons weights to the input data are computed, and then the feature sets being, sensitive to pattern recognition, which have the main responsibilities, are selected accordingly. The experimental data sets including the well-known IRIS data and gearbox failure data are used to test the approach. It is proved from the investigation that efficient feature sets are chosen easily from raw feature sets, and then pattern recognition of input data is realized.

Key words: Pattern recognition Feature selection

Self-organizing maps networks Visualization

作者简介: 廖广兰, 男, 1974 年出生, 博士, 讲师。主要研究方向为智能故障诊断、模式识别和微电子制造, 发表论文 20 余篇。

E-mail: jasmine.liao@263.net