

### 3.3 SOM 模式改善與分析

由前面章節所介紹的基本原理與發展脈絡得知，SOM 屬於非監督式學習，具有將高維輸入資料非線性映射到二維拓樸的視覺化能力，並且同時可作為一特殊的分群工具，將原始資料萃取其摘要，達到資料縮減與群集分析的目的。而同樣由 Kohonen 提出相對於 SOM 的 LVQ(learning vector quantization)則為監督式學習，主要用於統計樣式識別的分類上。兩者同為類神經網路的基本模式，並且已有許多成功的實務應用與硬體設計【Kangas & Kohonen, 1996】。本節接著針對先前以檢索策略所搜尋到的 121 篇相關論文，經條件篩選獲得 32 篇 SOM 改善模式之目標文獻，並進一步加以探討分析。至於分析方式則採用 3.1.2 節所選擇的四項 SOM 演算法特色作為構面，進行上述改善研究之闡述，最後綜合整理包括目標文獻集合之統計列表。

#### 3.3.1 競爭式學習

競爭式學習 (competitive learning) 又可稱作「贏者全拿」(winner-take-all)學習法。基本上可視為一種神經網路趨向局部化的自組織學習過程，其基本精神為在未經標示的樣本群體中尋找某些相似的特徵、規則或關係，然後再將這些有共同特色的樣本聚集成同一類別。就類神經網路的學習而言，當輸入資料出現時，網路上的類神經元會彼此競爭以獲得被活化的機會，而競爭的結果只有對輸入最有反應者成為優勝單元，也才有機會進行權重調整。另一方面，傳統競爭式學習網路是透過側向抑制(lateral inhibition)機制來完成競爭式學習。但是 SOM 神經網路的競爭學習方式卻採用不同的「有福同享」原則，也就是說，自組織映射完成學習後，不只優勝單元有資格學習，連同周圍鄰近區域內的神經元也能夠學習，而學習方式則是常採用墨西哥帽的側向作用函數或是高斯函數。Kohonen's SOM 並以鄰近區域概念取代側向連結作用，簡化後理想的神經元輸出值在鄰近區域內者

均可獲得 1 的活化極限值，其餘區域外的神經元則為 0。

一般而言，類神經網路的訓練為朝向局部化發展的競爭式學習過程，而最後將形成一種回應輸入信號(刺激)的空間次序，如同生物大腦地圖般。然而 SOM 的學習法則雖定義輸入向量權重向量及優勝單元之間的數學關係(如公式 3-1 所示)，但是對於輸入資料的機率分部大多假設為均一分布(uniform distribution)，這顯與現實環境大相逕庭。【Kohonen, 1990】提出加權式歐幾里得距離(weighted euclidean distance)來改善因輸入資料分佈的變異使拓樸網格產生不當扭曲的情形，並採用移動平均法，使得權重的更新更能反映資料的局部性行為  $\|x - m_i\|$ 。

基本上競爭式學習法的共同目的是在可能的高維度空間中描述一定數量的向量，而這些向量的分布亦同樣將反映出輸入資料的機率分布。根據 Bernd Fritzke (1997)將競爭式學習分成硬式(hard)及軟式(soft)兩類，前者如著名的 k-means 法，與傳統競爭式學習一樣，對於單一輸入信號而言，只允許一個優勝者有被活化的機會；而後者則相對地允許不只一個神經元可同時被活化，並針對輸出層的網路拓樸區進一步分成固定維度與非固定維度，前者如 SOM、Growing Cell Structure【Fritzke, 1994】與 Growing Grid【Fritzke, 1995】；而後者則包括 Neural Gas【Martinetz, 1991, 1993, 1994】、Competitive Hebbian Learning 與 Growing Neural Gas【Fritzke, 1995】等演算法，如表 3.2 所示。固定維度的網路拓樸，其特性如 SOM 映射在二維拓樸上方便人工判讀，而 Growing Grid 大致上採行 GCS 與 GNG 的基本原理，稍加修改後應用於矩形拓樸上，可視為一種漸增式 SOM；Growing Cell Structure 則藉著隨維度 k 值變化的單體(simplex)作為拓樸組成與增長的基本元素，不過一般仍大多採用 k=2 的二維拓樸與三角形單體(triangle)，以方便視覺判斷與應用。另外，非固定維度的網路拓樸如 GNG，其網路單元同樣在自組織過程中會逐漸增加，並將 GCS 的增長機制與 Competitive Hebbian Learning 的拓樸產生方式相互結合，可在不限定維度的輸入空間中趨向原始輸入資料分佈發展。

以上 Fritzke 所提出的 SOM 改善模式如 GCS、GG 與 GNG 等，其網路拓樸均具有動態適應特性，可依據輸入資料進行拓樸增長，並且基本上均採用由簡而繁的動態網路架構。若就競爭式學習角度來看，這些模式均設計一個局部變數來統計每個競爭神經元對於輸入資料所累積的誤差量，並以此誤差量作為拓樸新增單元與控制拓樸增長之依據。

表 3.9 競爭式學習法分類【Fritzke, 1997】

Competitive learning	Hard		Batch Update: LBG On-line Update Constant Learning Rate k-means 【MacQueen, 1967】 Exponentially Decay Learning Rate
	Soft	With fix dimensionality	Self-organizing feature map (SOM) Growing Cell Structure (GCS) 【Fritzke, 1994】 Growing Grid (GG) 【Fritzke, 1994】
		Without fix dimensionality	Neural Gas (NG) 【Martinetz, 1991, 1993, 1994】 Competitive Hebbian Learning 【Martinetz & Schulten, 1991】 NG+ Competitive Hebbian Learning Growing Neural Gas (GNG) 【Fritzke, 1995】

### 3.3.2 資料/集群視覺化

由前一節所述可知，為滿足視覺化方便與人工判讀的需要，SOM 的改善模式大多傾向在二維的拓樸平面上發展。基本上，科學性資料的視覺化需要許多數學方法以便將多變量的資料集合轉換成較為簡單的圖像物件，以提供科學家與工程師對於複雜的系統行為能有更清楚的理解。因此，為因應大量、高維與複雜化的資料分析需求，彈性架構的 SOM 改善模式亦相繼提出，使其具有更進一步的問題解決能力與更廣泛的應用領域。不過本節將以資料視覺化的角度加以探討。

SOM 最初是在輸出的網路拓樸上以視覺檢視 (visual inspection) 的方式判斷分群數目與群集的空間關係。最常用的方法就是聯合距離矩陣法(U-matrix)【Ultsch & Siemon, 1990; Kraaijveld, Mao & Jain,

1995】，便是以灰階陰影的深淺代表拓樸單元間的距離(即權重向量差)，以協助視覺化判斷【Iivarinen et al., 1994】。這樣的神經元著色策略即便在資料分配與群集結構並沒有正確映射在拓樸上時，仍可使群集邊界便於識別。另一個視覺化的方法就是將映射次數顯示在拓樸單元上，並在群集間插入單元的方式來進行訓練，如此將使得群集邊界模糊化。不過可利用 Voronoi sets (即最靠近群心的樣本點集合)的概念將沒有映射到單元(zero hit)作為明確的集群邊界【Zhang & Li, 1993】。

另外，一般常用的向量映射(vector projection)或向量量化(vector quantization)的方法也可以派上用場，與上述方法相較之下更適用於任意向量集合，例如原始(raw)資料集合。這類方法的優點就是當高維度向量映射至低維度時，其樣本間的距離關係以及重要的拓樸屬性皆可以儘可能忠實地被保存下來以供視覺化處理，而常用方法如 Sammon's mapping【Sammon, 1969】與 Colored projection methods【Varfis, 1993; Kaski, Venna, & Kohonen, 1999】。當然基於視覺化理由可以進行人工分群，但不僅耗時，也無法保證執行結果的一致性，因此發展自動分群方法確有其必要性【Vesanto & Alhoniemi, 2000】。

一般而言，SOM 被視為便利有效的資料視覺化工具，且廣泛應用在許多不同的工程問題上。因為 SOM 具有可將高維度資料映射在低維度的視覺化空間的非線性映射能力。為要進一步洞悉資料的群集結構，有研究提出針對 SOM 模式向量進行不同顏色編碼，並以樹狀結構來趨近群集結構，達到更高的視覺化結果【Himberg, 1999】。

另外，ViSOM (visualization-induced SOM)可同時保存神經元之間的距離資訊與拓樸圖形，並限制神經元之間的側向收縮力(lateral contraction force)，藉此調整資料空間中神經元間的距離，使其與圖形空間中的距離成比例。如此可針對資料獲得一個平滑且均分的網格，其效能與 Sammon's mapping 相當，但卻具更低的計算複雜度且允許新的輸入值加入。因此更適合用於多變量資料的視覺化分析與高維資料的非線性映射【Yin, 2002a,b】。

有鑒於傳統 SOM 受限於固定的網格拓樸而無法正確反映輸入空

間中的群集結構，又因拓樸單元之間的完全連結關係而無法產生群集邊界。為要解決上述問題，並使 SOM 的訓練結果更便於視覺化，以下有幾種同樣具備彈性或階層性架構的改善模型便相繼提出。Blackmore & Miikkulainen 於 1992 年提出 IGG 的動態網格模式，可根據不限維度的輸入分配進行拓樸單元及其間聯結之增減。最後訓練結果所得到的拓樸圖形可清楚展現高維資料的群集結構【Blackmore & Miikkulainen, 1992】。

比起 IGG 利用拓樸單元及其連結來達到資料群集的視覺化，ADSOM(adaptive double SOM)則是結合 SOM 特色與二維的位置向量(position vectors)，並可在群數未知下，同時進行資料分割與群集視覺化，另外並使用一個植基於位置向量的創新性階層分群指標，以取代人為判讀，作為偵測資料中群集數目的有效工具【Ressom, 2003】

另一種可展現高維度資料結構的 SOM 改善方法是 Su & Chang 所提出的 Double SOM，該演算法可使網路架構隨著學習階段進行適應性調整，同時讓神經元對於類似輸入刺激產生相近的權重向量並在二維輸出的散佈圖中相互靠近。該模式之訓練結果將可產生高維輸入資料本身固有的群集結構，且創新的拓樸初始策略【Su & Chang, 2000】可迅速在數個訓練循環後達到良好的拓樸次序【Su & Chang, 2001】。

若是進一步探討在 3D 空間的資料視覺化時，SOFM (spherical self-organizing feature map)利用非監督式分群法，將隨機構成的 N 維資料映射到三維空間來進行視覺化的樣式分析。換句話說，在球形格點上的每個單元均可與一個由輸入向量所構成的群集相對應，而這些輸入向量在原始特徵空間中必須具有緊密的空間鄰近性。結果所得到的著色圖形物件(colourized graphical objects)可在 3D 虛擬實境(immersive virtual reality)進行資料互動分析【Sangole & Knopf, 2003】

至於應用在動作偵測時，需要針對如物體移動軌跡的動態影像進行資料分析，Seiffert 指出多維度神經網路的層級架構更有利於多維度的輸入資料，因此進一步提出 GSOM (growing multi-dimensional

SOM)使用超立方拓樸(hypercube topology)來進行移動圖像分析【Seiffert, 2001】。

### 3.3.3 拓樸映射與次序保存

SOM 與其他競爭式神經網路之主要不同是每個神經元均擁有與其相關的鄰近區域。當某神經元競爭得勝後，其鄰近區域內的神經元連同優勝單元本身均可獲得修正權重的機會。如前所述，這項特徵來自於哺乳動物大腦中二維神經層內單元之間的側向作用，不過這也正是 SOM 拓樸次序特性的主要原理。由此可知，整體拓樸的次序保存(topology projection and order preservation)與鄰近區域之定義實在具有密不可分之關係。

在大部分的傳統競爭式學習中，對於特徵敏感的優勝單元幾乎不考慮其空間關係；換句話說，這些單元所反應的空間座標與輸入空間並無關聯，因此可稱之為「無序拓樸網路」(zero-order topology networks)【Kangas, Kohonen, & Laaksonen, 1990】。但在 SOM 中卻具有如生物大腦般，隨著訓練過程逐漸形成一反應的空間次序。從數學演算而言，優勝神經元會以局部化模式為基礎，針對特定特徵重複進行自我適應直到學習完成。一旦次序形成後，學習系統便可得到向量量化(vector quantization)的形式【Makhoul, Roucos & Gish, 1985】，亦即輸入向量、權重向量與優勝單元之間的數學關係。Putten 指出當前研究大多著重於 SOM 的網路拓樸可表現出輸入的資料結構，但對於拓樸次序(topology ordering)卻鮮少進一步探討應用【Peter van der Putten, 1994, 1996】。另有一些研究深入探討拓樸保存之衡量與評估【Zrehen, 1993】【Villmann, Der, Herrmann & Martinetz, 1997】【Bauer, Herrmann & Villmann, 1997】【Bezdek & Pal, 1998】。簡言之，網路拓樸的次序保存之良窳實與其能否正確詮釋或表現輸入空間的資料結構分佈有極密切的關係。

承上所述，NG 與 GNG 為不限網路維度的軟性競爭模式，其演

算法的主要特色就是具有傳統 SOM 所缺乏對輸入空間資料分佈的詮釋性。因其具有可依任意維度的資料分布而自我修正，直到均勻分布在輸入空間為止，而且其自組織的演算過程亦可動態展示，具有高度視覺化的優點。不過其缺點便是完成訓練的網路拓樸無法以視覺判斷資料的分群結果。

因此，若要兼顧輸入空間的詮釋性與分群結果的可判斷性，Blackmore & Miikkulainen 便先後提出 IGG (incremental growing grid)，分別解決三方面的問題。其一是諸多分群法與傳統 SOM 強調高度視覺化與分群結果詮釋性等優點，但這些方法卻無法擷取輸入資料固有的重要結構特性；其次，雖然傳統 SOM 宣稱具有擷取原始資料關係的保存性，但卻無法在輸出拓樸上顯示資料的結構性次序，如群集的邊界與不連續性。最後是像一些合併分群法(merging clustering)雖可獲得較明確的分群結果，但卻無法得知整體資料拓樸的分布次序。因此，IGG 動態網路架構的提出乃結合 SOM 的拓樸保存特性，並透過拓樸單元與其聯結的增減機制，來學習輸入資料的群集邊界(cluster boundary)，並呈現在網路拓樸上以供分群判斷【Blackmore & Miikkulainen, 1992, 1995】。同時期由 B. Fritzke 提出的 Growing Grid 與 IGG 相似，都是由簡單的矩形架構開始以整行或整列的方式來增長學習。不同的是，GG 沒有如 IGG 一般的刪除連結機制，且權重更新的方式也不盡相同。

儘管 SOM 已被證實具有將高維資料非線性映射到二維拓樸，並同時具有良好的鄰近區域保存能力。然而卻有研究提出這樣的降維動作尤其當降幅顯著時，將可能無法產生最佳的拓樸保存。有鑑於此，Jin 等提出 ESOM(expanding SOM)使輸入與輸出空間兩者之間獲得更佳的拓樸保存性。ESOM 採用一擴展機制使系統可以偵測並保存其次序關係。根據該研究實驗結果顯示，ESOM 可建構比傳統 SOM 更優良的映射圖，並達到更精確的分群結果，且計算複雜度與 SOM 相當【Jin et al., 2004】。而 Su & Cheng 提出的 Double SOM 同樣可使神經元對類似刺激產生相似的權重向量，並同時在二維拓樸相互接近，以

確保高維資料的拓樸保存性【Su & Cheng, 2001】。

以上探討拓樸保存的改善模式除了 NG 與 GNG 外，皆針對二維的輸出拓樸。而隨著多階層的網路架構之普遍發展，網路拓樸的型態也朝向多維度演進。如 GHSOM 可在樹狀網路結構中，讓相似的輸入向量映射到網格上相互鄰近的單元。而映射到同一單元的異質性資料，將於下一階層新增 SOM 的網路拓樸中展現出來，以產生高維資料所應具備的網路拓樸次序【Dittenbach, Rauber & Merkl, 2001】。

如本節開始提到拓樸次序保存與鄰近區域定義之間關聯密切，而在 Koh 提出 MLSOM(multiplayer SOM)中對此有進一步闡述【Koh, Suk & Bhandarkar, 1995, pp.78-79】。MLSOM 為具有多階層競爭且宛如三角錐的彈性網路架構，並可依據特徵空間產生一個由不同等級的萃取資訊所建構的樹狀結構，最後產生分割影像。在低階的電腦視覺領域用來處理區域性影像分割(range image segmentation)，可達到影像強化之目的。Bhandarhar, Koh & Suk 稍後所提出的 HSOM(hierarchical SOM)也是同樣主題之研究【Bhandarhar, Koh & Suk, 1997】。

不過另有一派看法認為若是輸出空間的拓樸大致近似於輸入資料空間的實際結構時，便可透過學習演算法來達到最佳的鄰近區域保存性。GSOM(growing SOM)便是在學習過程中，限定輸出空間的網格結構以超立方體(hypercubical)的型態進行調整，而拓樸修正則考量整體網格的維度與其朝不同方向之延伸增長，來強化拓樸圖形的自組織機制，以達到鄰近區域保存之最佳化【Bauer & Villmann, 1997】、【Villmann & Bauer, 1998】。

因此，適當的鄰近區域之定義對於 SOM 拓樸映射與保存功能相當重要。而神經元的鄰近區域之拓樸結構將決定輸入向量的拓樸次序之維度，因此定義鄰近區域的拓樸(不論是矩形或六邊形)皆會對最終整體拓樸的次序保存產生影響【Koh, 1995】。



### 3.3.4 網路拓樸之動態網格模式

如前一節所述，傳統 SOM 受限於固定的網格拓樸架構，不僅無法充分且正確地反映出輸入與輸出空間中的群集結構或邊界(特別是高維資料)；另外也缺乏因應輸入資料變動之動態適應能力。因此，為符合當今資料型態與分析趨勢所需，動態的網格模式(dynamic grid model)與網路架構儼然成為 SOM 改善模式不可或缺的主要特色。

綜觀 SOM 的彈性架構或動態網格之改善模式，大致上可依照輸出空間的拓樸維度區分為無固定維度與具有固定維度等兩類改善模式，如表 3.10 所示。在無固定維度的改善模式中，GNG 演算法可使完成訓練的權重向量均勻映射回任意分布與維度的輸入資料空間中，達到拓樸次序之良好保存。而 Bauer & Villmann 所提出的 GSOM 則是限定輸出空間的網格結構，採用超立方體(hypercubical)的型態朝不同方向之延伸增長，以實踐拓樸的自組織。至於 Alahakoon, Halgamuge & Srinivasan 所提出的 GSOM 為使用與 IGG 相似的增長機制，並使用獨立於資料維度的散佈因子(spread factor)來控制與權衡網路的增生，以達到資料之階層分群。

另一方面，若就固定維度的改善模式而言，拓樸架構屬於二維的 IGG，如前所述，為在二維拓樸增長，並以聯結之增減來建立群集邊界之動態模式。其次是 Fritzke 所提出的 GG，乃將 GCS 與 GNG 套用在矩形網格上，並以整行或整列方式進行增長，因此可視為 SOM 的延伸版本。另外當維度為三維時的 GHSOM，網路架構為階層式的樹狀結構，其演算法以兩個控制參數分別進行垂直與水平兩個方向的網路增長直到終止條件滿足為止(請參見 A10)。最後是由 Seiffert 所提出拓樸維度類似四維的 GSOM，該模式所提出之 QFDN 是由多個二維次拓樸構成的二維超結構。換句話說，就是以多個 SOM 網路拓樸構成一個 2 乘 2 類似四度空間的單元座標系統，來進行移動圖像分析。

表 3.10 SOM 動態網路架構分類表(本研究整理)

拓樸維度		改善模式名稱與文獻	模式特色
無固定維度		GNG【Fritzke, 1995】	可學習任意輸入分布，似 GCS
		GSOM【Bauer & Villmann, 1997】、 【Villmann & Bauer, 1998】	以超立方體在輸出空間進行非監督式拓樸學習
		GSOM【Alahakoon, Halgamuge, & Srinivasan, 2000】	以散佈因子控制各維度之階層分群，似 IGG
固定維度	類四維	GSOM【Seiffert, 2001】	以多個 SOM 網路拓樸再構成一座標系統(2*2)
	三維	GHSOM【Dittenbach, Rauber, & Merkl, 2001】	以參數同時控制樹狀結構的垂直與水平增長
	二維	SOM【Kohonen, 1982】	二維固定拓樸
		IGG【Blackmore & Miikkulainen, 1992, 1995】	在二維拓樸增長並以聯結之增減來建立群集邊界
		GG【Fritzke, 1994】	將 GCS 與 GNG 套用在矩形網格
	K 維	GCS【Fritzke, 1994】	常設定為二維，以三角形為單體

### 3.3.5 綜合分析

根據本研究之文獻檢索策略及條件篩選，從 121 篇相關文獻中擷取出 SOM 改善模式計 31 篇，並進行以上章節的構面分析。綜合上述研究文獻，在此以簡單的敘述統計來找出較具有指標性的重點期刊。

由表 3.11 可看出，本研究所獲得 SOM 改善模式所屬之研究期刊，其比重由高到低分別為：IEEE transaction on Neural Networks (13 篇)、Neural Networks (6 篇)、Neurocomputing (5 篇)、Pattern Recognition Letters (2 篇)、Computers & Graphs (1 篇)、Information Sciences (1 篇) 與其他 (3 篇)，並以前三者佔顯著多數達 75% 強。

表 3.11 本研究 SOM 模式改善之文獻統計表

期刊名稱	篇數	比重(%)
<b>IEEE transaction on Neural Networks</b>	<b>13</b>	<b>41.9%</b>
<b>Neural Networks</b>	<b>6</b>	<b>19.4%</b>
<b>Neurocomputing</b>	<b>5</b>	<b>16.1%</b>
Pattern Recognition Letters	2	6.5%
Computers & Graphs	1	3.2%
Information Sciences	1	3.2%
Others	3	9.7%
合 計	31	100

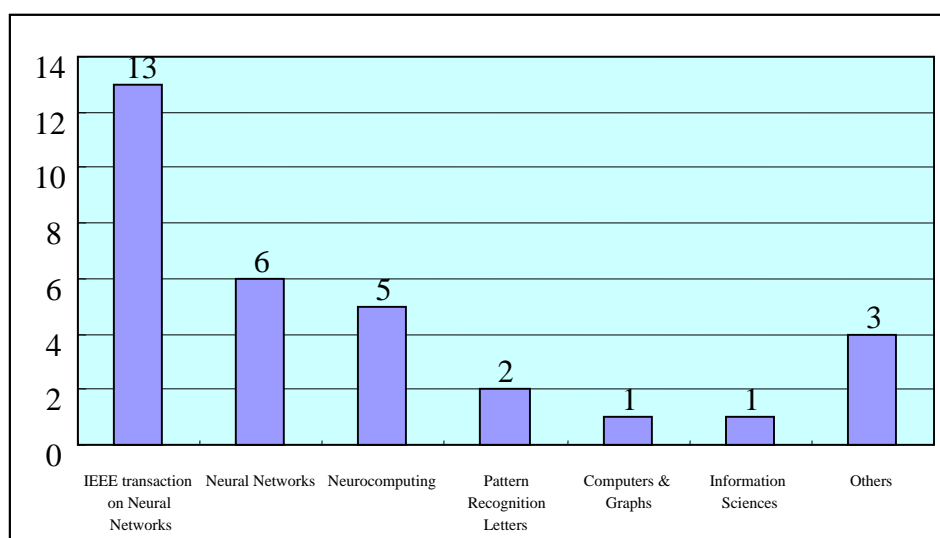


圖 3.7 本研究 SOM 模式改善之文獻統計圖