# Модель Кохонена

Евгений Борисов

### Задача кластеризации

#### Дано:

 $X^\ell=\{x_i\}_{i=1}^\ell$  — обучающая выборка объектов,  $x_i\in\mathbb{R}^n$   $ho^2(x,w)=\|x-w\|^2$  — евклидова метрика в  $\mathbb{R}^n$ 

#### Найти:

центры кластеров  $w_y \in \mathbb{R}^n$ ,  $y \in Y$ ; алгоритм кластеризации «правило жёсткой конкуренции» (WTA, Winner Takes All):

$$a(x) = \arg\min_{y \in Y} \rho(x, w_y)$$

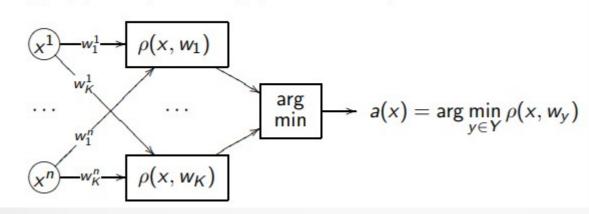
Критерий: среднее внутрикластерное расстояние

$$Q(w; X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} \rho^{2}(x_{i}, w_{a(x_{i})}) \to \min_{w_{y}: y \in Y}$$

### Модель Кохонена. Конкурентное обучение.

T.Kohonen. Self-organized formation of topologially orret feature maps. 1982.

Структура алгоритма — двухслойная нейронная сеть:



Градиентный шаг в методе SG: для выбранного  $x_i \in X^\ell$ 

$$w_{y} := w_{y} + \eta(x_{i} - w_{y})[a(x_{i}) = y]$$

Если  $x_i$  относится к кластеру y, то  $w_y$  сдвигается в сторону  $x_i$ 

### Модель Кохонена. Конкурентное обучение.

T.Kohonen. Self-organized formation of topologially orret feature maps. 1982.

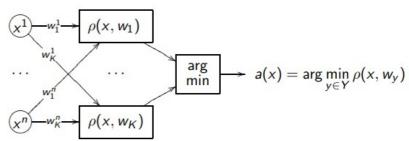
#### Алгоритм обучения (SGD)

Вход: выборка  $X^{\ell}$ ; темп обучения  $\eta$ ; параметр  $\lambda$ ; Выход: центры кластеров  $w_1, \ldots, w_K \in \mathbb{R}^n$ ; инициализировать центры  $w_y, y \in Y$ ; инициализировать текущую оценку функционала:  $Q := \sum_{i=1}^{\ell} \rho^2(x_i, w_{a(x_i)})$ ;

#### повторять

выбрать объект  $x_i$  из  $X^\ell$  (например, случайно); вычислить кластеризацию:  $y:=\arg\min_{y\in Y}\rho(x_i,w_y);$  градиентный шаг:  $w_y:=w_y+\eta(x_i-w_y);$  оценить значение функционала:  $Q:=(1-\lambda)Q+\lambda\rho^2(x_i,w_y);$  пока значение Q и/или веса w не стабилизируются;

Структура алгоритма — двухслойная нейронная сеть:



Градиентный шаг в методе SG: для выбранного  $x_i \in X^\ell$ 

$$w_{v} := w_{v} + \eta(x_{i} - w_{v}) \lceil a(x_{i}) = y \rceil$$

Если  $x_i$  относится к кластеру y, то  $w_y$  сдвигается в сторону  $x_i$ 

### Модель Кохонена. Конкурентное обучение.

T.Kohonen. Self-organized formation of topologially orret feature maps. 1982.

#### Правило жёсткой конкуренции WTA (winner takes all):

$$w_y := w_y + \eta(x_i - w_y)[a(x_i) = y], \quad y \in Y$$

#### Недостатки правила WTM:

- медленная скорость сходимости
- некоторые w<sub>y</sub> могут никогда не выбираться



#### Правило мягкой конкуренции WTM (winner takes most):

$$w_y := w_y + \eta(x_i - w_y) K(\rho(x_i, w_y)), \quad y \in Y$$

где ядро  $K(\rho)$  — неотрицательная невозрастающая функция

Теперь центры всех кластеров смещаются в сторону  $x_i$ , но чем дальше от  $x_i$ , тем меньше величина смещения

### Карты Кохонена. Self-Organizing Maps.

Teuvo Kohonen. Self-Organizing Maps. 2001.

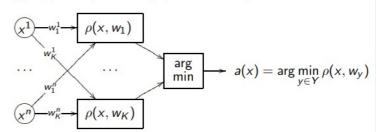
#### Правило мягкой конкуренции WTM (winner takes most):

$$w_y := w_y + \eta(x_i - w_y) K(\rho(x_i, w_y)), \quad y \in Y$$

где ядро K(
ho) — неотрицательная невозрастающая функция

Теперь центры всех кластеров смещаются в сторону  $x_i$ , но чем дальше от  $x_i$ , тем меньше величина смещения

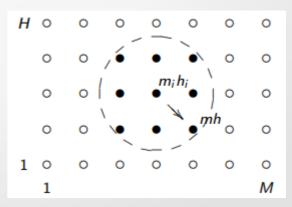
Структура алгоритма — двухслойная нейронная сеть:



 $Y=\{1,\ldots,M\} imes\{1,\ldots,H\}$  — прямоугольная сетка кластеров Каждому узлу (m,h) приписан нейрон Кохонена  $w_{mh}\in\mathbb{R}^n$  Наряду с метрикой  $\rho(x_i,x)$  на X вводится метрика на сетке Y:

$$r((m_i, h_i), (m, h)) = \sqrt{(m - m_i)^2 + (h - h_i)^2}$$

#### Окрестность $(m_i, h_i)$ :



### Карты Кохонена. Self-Organizing Maps.

Teuvo Kohonen. Self-Organizing Maps. 2001.

#### Правило мягкой конкуренции WTM (winner takes most):

$$w_y := w_y + \eta(x_i - w_y) K(\rho(x_i, w_y)), \quad y \in Y$$

где ядро  $K(\rho)$  — неотрицательная невозрастающая функция

Теперь центры всех кластеров смещаются в сторону  $x_i$ ,

но чем дальше от  $x_i$ , тем меньше величина смещения Обучение Карты Кохонена.

Вход:  $X^{\ell}$  — обучающая выборка;  $\eta$  — темп обучения; Выход:  $w_{mh} \in \mathbb{R}^n$  — векторы весов, m = 1..M, h = 1..H;  $w_{mh}:=\mathsf{random}\left(-\frac{1}{2MH},\frac{1}{2MH}\right)$  — инициализация весов; повторять

выбрать объект  $x_i$  из  $X^\ell$  случайным образом; WTA: вычислить координаты кластера:

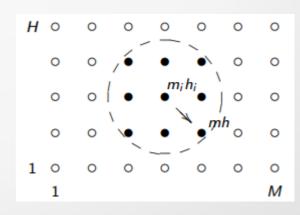
$$(m_i, h_i) := a(x_i) \equiv \arg\min_{(m,h)\in Y} \rho(x_i, w_{mh});$$

для всех  $(m,h) \in \mathsf{O}$ крестность $(m_i,h_i)$ 

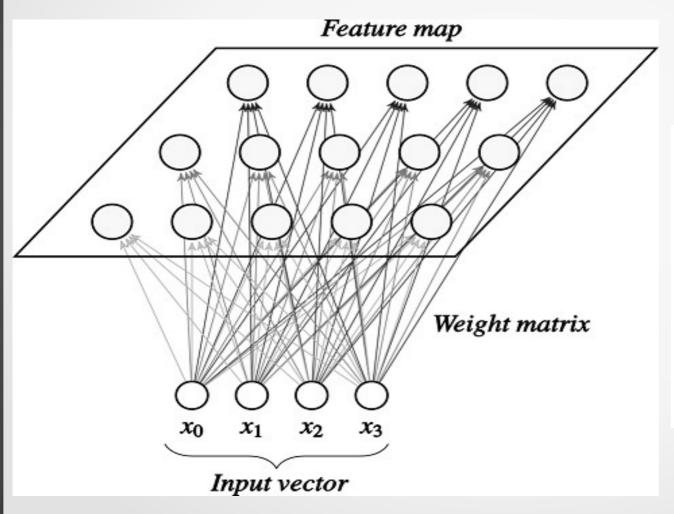
WTM: сделать шаг градиентного спуска:

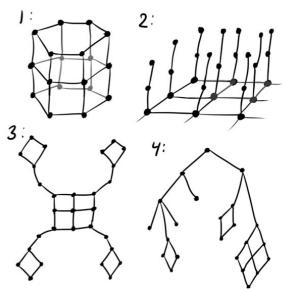
$$w_{mh} := w_{mh} + \eta(x_i - w_{mh}) K(r((m_i, h_i), (m, h)));$$

пока кластеризация не стабилизируется;

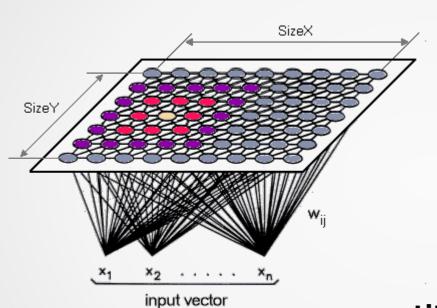


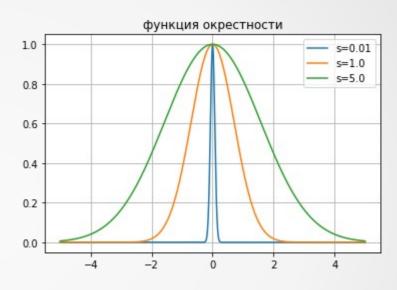
### Различные топологии выходного слоя **SOM**





### Обучение модели и функция окрестности





### competitive hebbian learning

изменение весов

$$\Delta w = \eta \cdot \theta(k) \cdot (x - w)$$

 $\eta \in (0,1)$  - шаг обучения

k - номер нейрона-победителя

 $\theta(k)_j \in [0,1]$  - значение ф-ции окрестности нейрона-победителя k для нейрона j;

### Карты Кохонена. Self-Organizing Maps.

Teuvo Kohonen. Self-Organizing Maps. 2001.

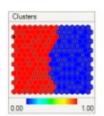
#### Интерпретация результатов

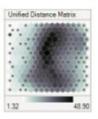
Два типа графиков — цветных карт  $M \times H$ :

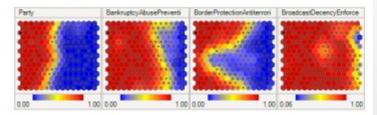
- Цвет узла (m,h) локальная плотность в точке (m,h) среднее расстояние до k ближайших точек выборки
- По одной карте на каждый признак: цвет узла (m,h) — значение j-й компоненты вектора  $w_{m,h}$

Пример: задача UCI house-votes (US Congress voting patterns) Объекты — конгрессмены

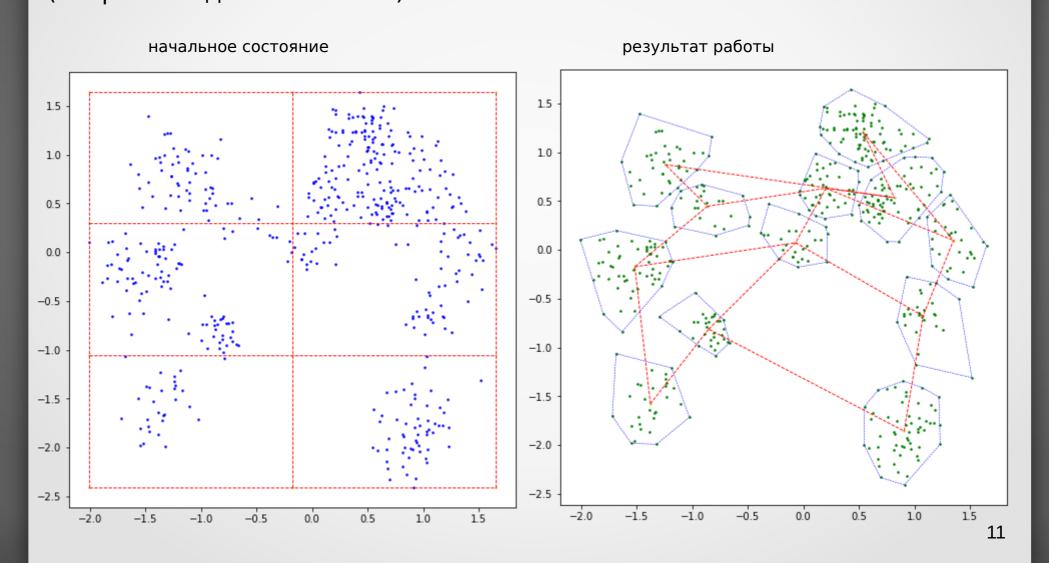
Признаки — результаты голосования по различным вопросам Есть целевой признак «партия» ∈ {демократ, республиканец}







# **Топология выходного слоя SOM - двумерная решетка** (накрываем данные сеткой)



# SOM: литература

git clone https://github.com/mechanoid5/ml\_lectorium.git

Kohonen, T. Learning Vector Quantization, Neural Networks, 1988, 1 (suppl 1), 303.

T.Kohonen. Self-organized formation of topologially orret feature maps. 1982.

Teuvo Kohonen. Self-Organizing Maps. 2001.

Воронцов К. В.

Прикладные модели машинного обучения. 2021.

Лекция 2: Обучение без учителя.

https://www.youtube.com/watch?v=wfbe2yaXAkI

Борисов E.C. Кластеризатор на основе нейронной сети Кохонена. http://mechanoid.su/neural-net-kohonen-clusterization.html