Самообучение нейронных сетей. Кластеризация данных

2. Теоретическое введение

2.1 Кластеризация данных. Соревновательный слой нейронов

Проблема, рассматриваемая в лабораторной работе, связана с анализом данных некоторой предметной области, в которой каждый объект характеризуется набором признаков (x_1, x_2, ... ,x_M), образующих вектор x. Если предметной областью является медицина, то набор признаков может представлять собой совокупность результатов определенных клинических исследований.

Для анализа данных предполагается заданной выборка $x^{(p)}$, $p=\overline{1,P}$, где p - номер выборочного примера. На рис.1 представлен пример, в котором символом '+' отмечены выборочные примеры в проекции на плоскость X_1X_2. Как видно на рисунке, выборочные данные образуют несколько групп (кластеров), каждая из которых может быть представлена своим прототипом, отмеченным на рисунке 'о'. Знание прототипов и переход с их помощью к кластерам данных существенно сокращает размерность решаемой задачи и облегчает исследование. Этот прием может быть применен и для решения задачи сжатия данных (если допускается загрубление данных и некоторая потеря информации).

Поставим задачу кластеризации данных, то есть их разделения на группы (кластеры), если априорное расположение и точное число кластеров неизвестно. Потребуем, чтобы метод решения задачи предусматривал возможность после завершения процедуры кластеризации выборочных данных относить любой предъявленный объект, не принадлежащий обучающей выборке, к одному из найденных кластеров.

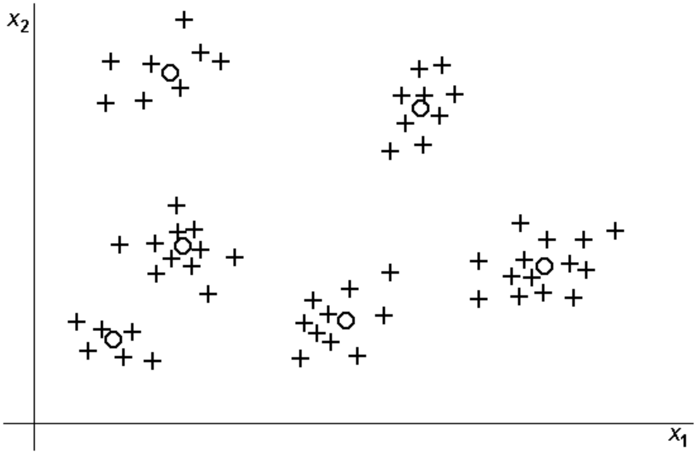

Рис. 1. Примеры обучающей выборки в проекции на плоскость X_1X_2.

Рассмотрим нейросетевую систему обработки данных, схема которой представлена на рис.2. Входной вектор признаков $x=(x_1, x_2, \ldots ,x_M)$ поступает на слой, содержащий N нейронов. Допустим, что смещения нейронов отсутствуют, так что $b_i = 0$, $i = \overline{1,N}$. Тогда потенциал i - го нейрона, $i = \overline{1,N}$, определяется следующим выражением:

$$h_i = \sum_{j=1}^{M} w_{ij}\, x_j \quad , j= \overline{1,N}\ . \tag{2.1}$$

Эту формулу можно записать кратко, если ввести вектор-строку синаптических коэффициентов i - го нейрона $w_i = (w_{i1}, w_{i2}, \ldots , w_{iM})$:

$$h_i = (x, w_i) = x\, w_i^T\ . \tag{2.2}$$

Потребуем, чтобы после настройки векторы синаптических коэффициентов w_i , $i = \overline{1,N}$, представляли собой центры кластеров и служили прототипами для групп данных. Таким образом, число нейронов N должно выбираться на основе априорной информации и соответствует предполагаемому числу кластеров.

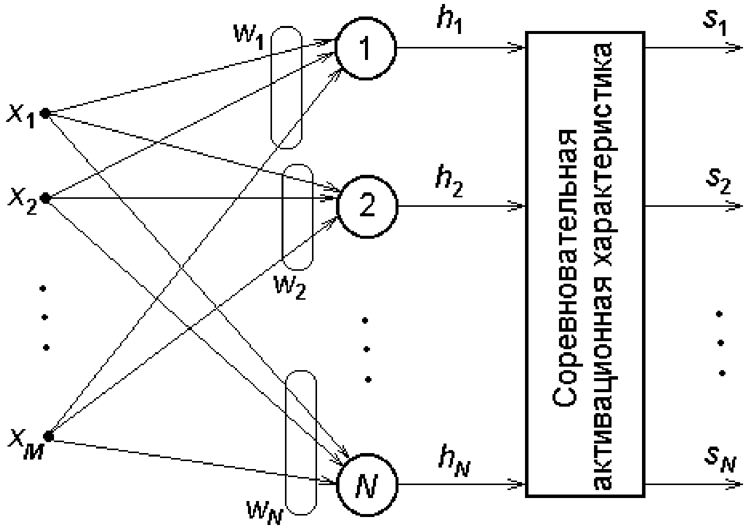

Рис. 2. Соревновательный слой нейронов.

Допустим, что в результате предварительной обработки данных норма векторов признаков приведена к 1: $\left\|x^{(p)}\right\|=1,\ p=\overline{1,P}$. Кроме того, векторы w_i , $i = \overline{1,N}$, синаптических коэффициентов нейронов на каждом шаге обучения также приведены к единичной норме: $\left\|w_i\right\|=1$, $i = \overline{1,N}$. Это позволяет дать иллюстрацию, представленную на рис.3 для двумерного вектора признаков (M=2). Векторы признаков отмечены на рисунке ‘+’ и расположены на окружности единичного радиуса. Символом ‘o’ отмечены векторы синаптических коэффициентов w_i , $i = \overline{1,N}$, которые рассчитаны на такте t дискретного времени обучения, так что

$$w_i = w_i(t),\ i = \overline{1,N}\ .$$

Поскольку выборочные данные не содержат информации о желаемом выходе нейронной сети, она настраивается в режиме самообучения. Процесс самообучения организован так, что на сеть подаются поочередно примеры обучающей выборки и для каждого примера последовательно подстраиваются синаптические коэффициенты нейронов. Один цикл просмотра всех выборочных примеров образует “эпоху”. Полная настройка для пространственных структур данных может завершиться после нескольких сотен эпох самообучения.

Пусть на такте t самообучения, когда векторы синаптических коэффициентов приняли значения w_i , $i = \overline{1,N}$, слою нейронов предъявлен пример $x^{(p)}$ (см. рис.3). Сформулируем принцип настройки нейронов: если пример $x^{(p)}$ принадлежит i - му кластеру, то настройке (самообучению) должен подвергаться только вектор w_i , характеризующий прототип i- го кластера. Этот принцип содержит в себе свойство избирательности нейрона - прототипа по отношению к данным, используемым для его настройки. В соревновательном слое нейронов эта избирательность реализуется с помощью расчета расстояния между векторами $x^{(p)}$ и w_i для всех $i = \overline{1,N}$. Определим расстояние $r(x^{(p)}, w_i)$ формулой :

$$r(x^{(p)}, w_i) = \frac{1}{2}\left\|x^{(p)} - w_i\right\|^2 = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M}(x_j^{(p)} - w_{ij})^2 . \qquad (2.3)$$

Учитывая, что $\left\|x^{(p)}\right\| = \left\|w_i\right\| = 1$, после простейшего алгебраического преобразования получим

$$r(x^{(p)}, w_i) = 1 - \sum_{j=1}^{M}(x_j^{(p)}\ w_{ij}) = 1 - (x^{(p)}, w_i) = 1 - h_i .$$

Таким образом, расстояние между $x^{(p)}$ и w_i тем меньше, чем больше потенциал i - го нейрона. Поскольку скалярное произведение $(x^{(p)}, w_i)$ векторов единичной нормы равно $\cos(\varphi)$, где φ - угол между векторами (см. рис.3), то расстояние можно оценивать углом φ.

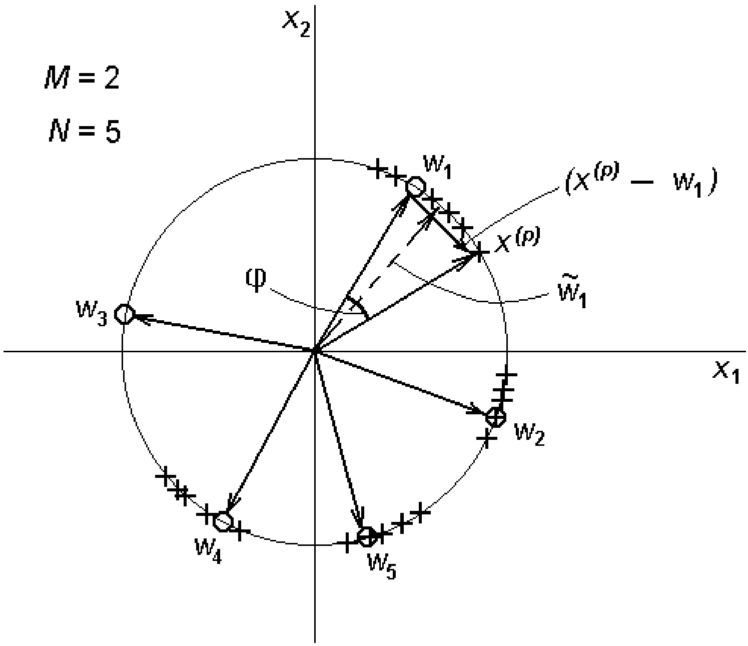

Рис. 3. Иллюстрация к процедуре обучения соревновательного слоя.

В соответствии со сформулированным выше принципом самообучения настройке должен подвергаться только тот нейрон, для которого при воздействии вектора $x^{(p)}$ потенциал максимален. Этот нейрон называют нейроном-победителем. Его номер i^* определяется выражением:

$$i^* = \arg\max_i h_i \ . \qquad (2.4)$$

Логика настройки синаптических коэффициентов состоит в уменьшении расстояния $r(x^{(p)}, w_{i^*}(t))$, которое определяется формулой (2.3):

$$r(x^{(p)}, w_{i^*}(t)) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M}(x_j^{(p)} - w_{i^*j})^2 \ . \qquad (2.5)$$

Воспользуемся градиентным методом минимизации функционала (2.5). Тогда на следующем шаге настройки следует перейти к значениям $\widetilde{w}_{i^*k}(t+1)$, $k=\overline{1,M}$, определяемым выражением

$$\widetilde{w}_{i^*k}(t+1) = w_{i^*k}(t) - \lambda \frac{\partial r(t)}{\partial w_{i^*k}}, \ k = \overline{1,M} \ , \qquad (2.6)$$

где λ - параметр скорости самообучения. Здесь знак ‘~’ применен потому, что используемая настройка синаптических коэффициентов не обеспечивает единичной нормы для вектора $\widetilde{w}_{i^*}(t+1)$, поэтому для определения $w_{i^*}(t+1)$ необходимо “растянуть” этот вектор до единичной нормы.

Поскольку

$$\frac{\partial r(t)}{\partial w_{i^*k}} = -(x_k^{(p)} - w_{i^*k}) \ ,$$

уравнение самообучения представляется в форме:

$$\widetilde{w}_{i^*k}(t+1) = w_{i^*k}(t) + \lambda\,(x_k^{(p)} - w_{i^*k}(t)), \ k = \overline{1,M} \ . \qquad (2.7)$$

Выражение (2.7) удобно записать в краткой векторной форме:

$$\widetilde{w}_{i^*}(t+1) = w_{i^*}(t) + \lambda\,(x^{(p)} - w_{i^*}(t)), \ k = \overline{1,M} \ . \qquad (2.8)$$

На рис.3 дана графическая интерпретация этого выражения. Отметим, что параметр скорости обучения $0 < \lambda < 1$. Выражение (2.8), которое легко преобразуется к следующей форме:

$$\widetilde{w}_{i^*}(t+1) = (1-\lambda)\, w_{i^*}(t) + \lambda\, x^{(p)} \ .$$

Таким образом, $\tilde{w}_{i^*}(t+1)$ является результатом “взвешивания” значений $w_{i^*}(t)$ и $x^{(p)}$. При значениях λ, близких к 1, не происходит активного запоминания и накопления прошлой информации и процесс обучения характеризуется колебательностью и сходится медленно. В противном случае сходимость замедлена за счет слабого обновления информации при поступлении новых выборочных примеров. Обычно рекомендуется параметр λ уменьшать в процессе обучения от значений 0.7 - 0.8 до уровня 0.2 - 0.3 .

После завершения процесса самообучения векторы w_i , $i = \overline{1,N}$, установятся в центрах соответствующих кластеров. Если далее использовать обученный слой нейронов в режиме его нормального функционирования, то при подаче на вход произвольного вектора x активизируется один нейрон. Выход нейрона-победителя устанавливается равным 1, а всех других нейронов - 0. Это определяет активационную характеристику , которая в отличие от стандартного нейрона устанавливается не на нейрон, а на слой:

$$s_i = \begin{cases} 1, & i = i^*, \\ 0, & i \neq i^*. \end{cases} \tag{2.9}$$

Такая активационная характеристика называется соревновательной. Номер активного нейрона указывает на кластер, к которому относится входной вектор. В соответствии с принципом активизации нейронов слой получил название “соревновательного”.

В описанной выше процедуре самообучения могут проявиться некоторые негативные эффекты:

- возникновение “мертвых” нейронов,
- нежелательное укрупнение кластеров за счет их объединения,
- чрезмерная детализация кластеров,

- колебательность настраиваемых параметров за счет скачкообразного перехода периферийных примеров от одного кластера к соседнему.

Эффект возникновения "мертвых" нейронов имеет место, когда неудачная инициализация векторов w_i , $i = \overline{1,N}$, приводит к тому, что некоторые нейроны не "срабатывают" ни на одном выборочном примере. Этот эффект устраняется, например, при инициализации w_i , $i = \overline{1,N}$, примерами обучающей выборки. Могут быть применены и другие способы, в частности, разработаны более сложные алгоритмы самообучения, в которых векторы синаптических коэффициентов не могут удаляться от кластеров данных.

Две другие проблемы, связанные с чрезмерным укрупнением/измельчением кластеров, решаются разумным выбором числа нейронов соревновательного слоя.

Сходимость процесса самообучения и отсутствие колебательных эффектов достигается плавным уменьшением параметра скорости обучения.

Кохоненом показано, что для оптимально обученного соревновательного слоя вероятность активизации любого из нейронов при возбуждении вектором, случайно выбранным из той же генеральной совокупности, что и выборочные примеры, равна 1/N. Это соответствует максимальной энтропии системы. Такой результат обучения дает оптимальное представление данных соответствующими прототипами, то есть минимизирует потерю информации при сжатии данных.

2.2 Самообучающиеся карты Кохонена

В соревновательном слое после завершения процесса самообучения нейроны не упорядочены. Близким по номерам нейронам могут соответствовать выборочные примеры, расстояние между которыми велико. Т. Кохонен предложил ввести определенный порядок расположения нейронов соревновательного слоя, например, разместить их на плоскости в узлах прямоугольной решетки размера N_1*N_2, так что $N_1*N_2 = N$ (рис.4). Тогда каждый нейрон характеризуется координатами $q = (l, k)$, где l и k - номера строки и столбца узла решетки. Расстояние ρ (q_1, q_2) между нейронами с координатами q_1 и q_2 определяется как расстояние между соответствующими узлами решетки. Расстояние может оцениваться разными способами. Например, евклидово расстояние рассчитывается по формуле:

$$\rho_E(q_1,q_2) = \sqrt{(l_1 - l_2)^2 + (k_1 - k_2)^2}\,,$$

расстояние максимального координатного смещения -

$$\rho_K(q_1,q_2) = \max(|l_1 - l_2|, |k_1 - k_2|)\,,$$

расстояние суммарного координатного смещения -

$$\rho_S(q_1,q_2) = |l_1 - l_2| + |k_1 - k_2|\,.$$

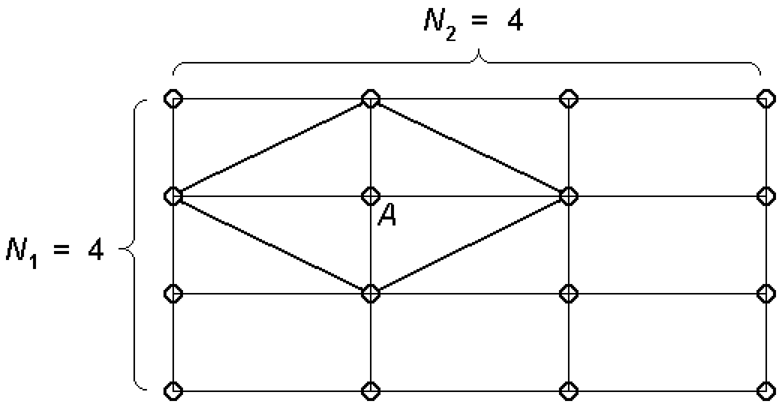

Рис. 4. Прямоугольная сетка размещения нейронов топографической карты

На рис.4 отмечены нейроны, находящиеся от нейрона A на одинаковом расстоянии, если оно рассчитывается по способу суммарного координатного смещения.

Таким образом, между любой парой нейронов с номерами i_1 и i_2, $i_1, i_2 = \overline{1,N}$, определено расстояние $\rho(q_{i_1}, q_{i_2})$.

В отличие от простого соревновательного слоя, в котором каждый нейрон обучается независимо от других в соответствии с формулой (2.8), в упорядоченной сетке обучению подвергается не только "победивший" нейрон, но и его ближайшие "соседи". Введем функцию $\gamma(\rho)$, которая максимальна и равна 1 при $\rho = 0$, например $\gamma(\rho) = \exp(-\frac{\rho^2}{\sigma^2})$, где σ^2 - управляющий параметр процедуры самообучения. Определим приращение синаптических коэффициентов следующим выражением:

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \lambda\gamma(\rho(q_{i^*}, q_i))(x^{(p)} - w_i(t)),\ i = \overline{1,N}. \quad (2.10)$$

В практических приложениях наиболее часто используют следующие функции $\gamma(\rho)$:

$$\gamma(\rho) = \exp\left(-\frac{\rho^2}{\sigma^2}\right)\left(1 - \frac{2}{\sigma^2}\rho^2\right), \quad \text{(“мексиканская шляпа”)},$$

$$\gamma(\rho) = \begin{cases} 1, & |\rho| \le a, \\ -\frac{1}{3}, & a < |\rho| < 3a, \\ 0, & |\rho| \ge 3a, \end{cases} \quad \text{(“французская шляпа”)}.$$

Заметим, что нормирование векторов синаптических коэффициентов w_i не является обязательным.

Таким образом, к вектору $x^{(p)}$ "притягивается" не только вектор w_{i^*} нейрона-победителя, но и его ближайших соседей. Если функция $\gamma(\rho)$ выбрана так, что при некоторых значениях ρ она отрицательна, то происходит "отталкивание" соответствующего вектора синаптических коэффициентов w_i от предъявленного для самообучения примера $x^{(p)}$. В результате применения правила (2.10) происходит упорядочение нейронов на решетке в соответствии со значениями w_i, $i = \overline{1,N}$, таким образом, что близкие нейроны являются прототипами близких кластеров в многомерном пространстве признаков. Можно сказать, что полученная решетка является отображением многомерных данных в плоскость. Она отражает структуру многомерных выборочных данных и потому может быть названа топографической картой.

Самообучающейся карте Кохонена может быть дана и другая геометрическая интерпретация. Построим в M-мерном пространстве признаков векторы синаптических коэффициентов нейронов – прототипов сформированных в результате обучения кластеров. Соединим их линиями в соответствии с тем, как соответствующие нейроны соединены в плоской прямоугольной решетке. Таким образом, в M-мерное пространство признаков погружена двумерная сетка. В процессе обучения она деформируется пока, наконец, не будет "натянута" на прототипы кластеров данных.

В практических задачах часто применяют "раскраску" карты Кохонена некоторыми признаками, которые не были включены в вектор данных, использованных при обучении сети. Пусть, например, по данным социальной статистики население некоторого региона охарактеризовано показателями возраста, образовательного уровня, характера работы и пр. В результате обучения карты Кохонена проявляются группы населения. Далее вводится показатель среднего дохода для всех выборочных примеров. Для тех примеров, которые при возбуждении ими карты Кохонена, активизируют один и тот же нейрон, рассчитывается усредненный по примерам показатель среднего дохода. Таким образом, после просмотра всех примеров обучающей выборки, каждый узел карты Кохонена будет "окрашен" значением среднего дохода. Такая "раскраска" может быть применена для прогноза среднего дохода гражданина по показателям возраста, образовательного уровня, характера работы и пр., которые использовались при обучении нейронной сети. Идея "раскраски" топографической карты может быть применена для прогноза отдельных показателей банковской деятельности, котировок товаров и ценных бумаг на биржах по результатам предшествующих торговых сессий, стоимости квартир по их характеристикам и в других приложениях [5].

Контрольные вопросы

1. В чем состоит проблема кластеризации данных? Какие выборочные данные необходимы для решения этой задачи?
2. Где в соревновательном слое нейронов хранится информация о прототипах кластеров?
3. Дайте описание работы нейронов соревновательного слоя.
4. В чем состоит избирательность нейронов соревновательного слоя по отношению к данным обучающей выборки?
5. Как оценивается расстояние между выборочным примером и вектором синаптических коэффициентов нейрона?
6. Почему именно потенциалы нейронов соревновательного слоя используются для выявления нейрона-победителя?
7. Объясните правило самообучения нейронов соревновательного слоя.
8. Что называется “эпохой” самообучения соревновательного слоя нейронов?
9. Как влияет выбор параметра скорости самообучения на качество процесса настройки синаптических коэффициентов? Какие практические рекомендации можно дать для выбора этого параметра?
10. Что такое “соревновательная” активационная характеристика?
11. Какие негативные особенности можно ожидать при реализации самообучения соревновательного слоя нейронов?
12. Каким способом можно избежать появления “мертвых” нейронов соревновательного слоя?
13. По каким причинам может возникать укрупнение кластеров при обучении соревновательного слоя нейронов?
14. Как практически можно оценить качество обучения соревновательного слоя нейронов? Каким свойством обладает оптимально обученный соревновательный слой?

15. Какое основное качество отличает карту Кохонена от соревновательного слоя нейронов?
16. Приведите примеры оценки расстояния между нейронами в топографической карте. какими в этих примерах являются линии точек, равноудаленных от фиксированного нейрона?
17. В чем состоит правило обучения нейронов карты Кохонена? Каково его отличие от правила обучения нейронов соревновательного слоя?
18. В чем состоит “раскраска” топографической карты отдельными признаками?
19. Что представляет собой одномерная карта Кохонена?
20. Какой Вы можете привести пример практического применения карты Кохонена?