

# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες (SOM)

*Ιωάννης Μαδεμλής*

# Ανταγωνιστική μάθηση

- Μία ιδιαίτερη οικογένεια αλγορίθμων διαμεριστικής ομαδοποίησης είναι τα **νευρωνικά δίκτυα**.
- Ο παλαιότερος τύπος νευρωνικού δικτύου για ομαδοποίηση είναι οι λεγόμενοι **Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες** (Self-Organizing Maps, SOM).
  - Είναι ειδικά νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης (feed-forward), με μόνο ένα επίπεδο εισόδου και ένα επίπεδο εξόδου.
    - Δεν έχουν κρυμμένα επίπεδα.
  - Δεν εκπαιδεύονται με οπισθοδιάδοση και κάθοδο κλίσης, αλλά με **ανταγωνιστική μάθηση** (competitive learning).

Ανταγωνιστική μάθηση



# Ανταγωνιστική μάθηση

- Έστω ένα **ανταγωνιστικό επίπεδο** από διατεταγμένους νευρώνες.
  - Αυτό είναι το πλήρως συνδεδεμένο επίπεδο εξόδου.
- Κατά την εκπαίδευση, το επίπεδο εκτίθεται διαδοχικά σε όλα τα πρότυπα εκπαίδευσης (ένα προς ένα).
- Σε κάθε τέτοια έκθεση, συμβαίνει «ανταγωνισμός» μεταξύ των νευρώνων με βάση κάποιο κριτήριο.
- Το τρέχον πρότυπο «αποδίδεται» στον **νικητή νευρώνα** και αυτός αλλάζει τα συναπτικά του βάρη περισσότερο απ' ό τι οι υπόλοιποι.

Ανταγωνιστική μάθηση

# Ανταγωνιστική μάθηση

- Το συνηθέστερο κριτήριο είναι η ευκλείδεια απόσταση μεταξύ του εκάστοτε τρέχοντος προτύπου εκπαίδευσης  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$  και του διανύσματος συναπτικών βαρών/παραμέτρων του  $j$ -οστού νευρώνα  $\mathbf{w}_j \in \mathbb{R}^n$ .
- Νικητής νευρώνας για το  $\mathbf{x}_i$  είναι ο  $j$ -οστός με τη μικρότερη απόσταση  $\|\mathbf{w}_j - \mathbf{x}_i\|_2$ .
- Το διάνυσμα παραμέτρων του νικητή  $\mathbf{w}_j$  μετακινείται προς το διάνυσμα  $\mathbf{x}_i$ .
- Η διαδικασία επαναλαμβάνεται ανεξάρτητα για κάθε πρότυπο εκπαίδευσης.



# Ανταγωνιστική μάθηση

- Η εκπαίδευση με ανταγωνιστική μάθηση οδηγεί σε *αυτο-οργάνωση* του δικτύου υπό μία συγκεκριμένη έννοια.
- Συγκεκριμένοι νευρώνες εξειδικεύονται ώστε να ανταποκρίνονται σε συγκεκριμένα πρότυπα εισόδου.
- Τα δίκτυα SOM είναι ένα παράδειγμα αρχιτεκτονικής η οποία εκπαιδεύεται με ανταγωνιστική μάθηση.

Ανταγωνιστική μάθηση

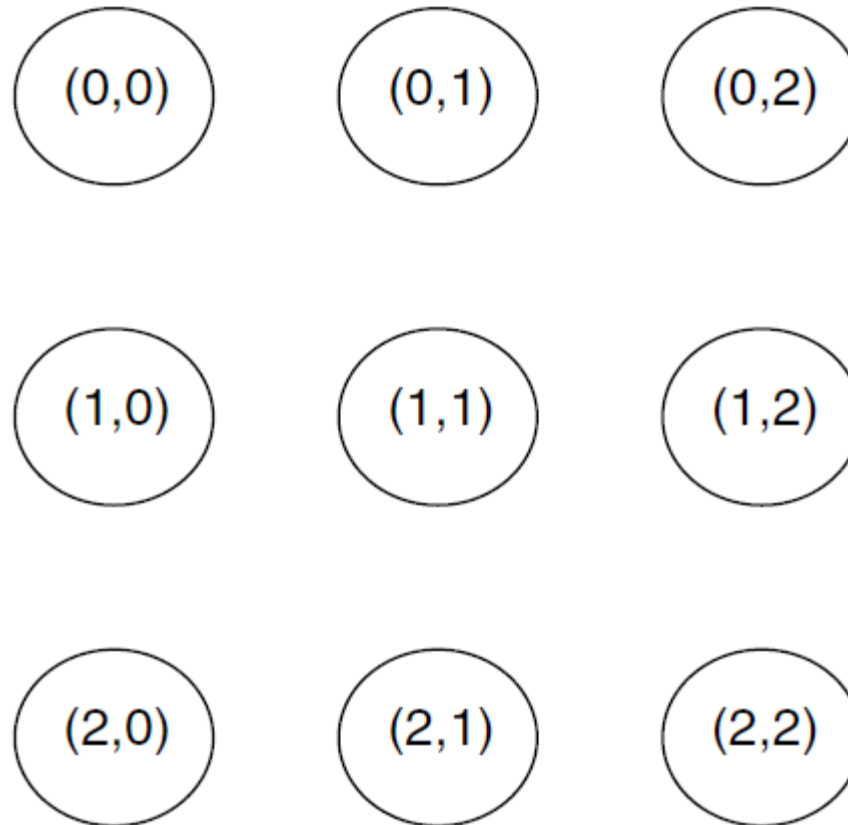
# Τοπογραφικοί χάρτες

- Το ανταγωνιστικό επίπεδο του SOM έχει τη μορφή ενός κανονικού πλέγματος (συνήθως διδιάστατου/τετραγωνικού).
  - Είναι δυνατά και πλέγματα μεγαλύτερης διάστασης, αλλά δεν συνηθίζονται.
- Κάθε κόμβος του πλέγματος είναι νευρώνας.
  - Κάθε νευρώνας συνδέεται συναπτικά με κάθε κόμβο εισόδου.
- Οι κόμβοι νευρώνες είναι δεικτοδοτημένοι με διδιάστατες ακέραιες συντεταγμένες.
  - Π.χ., ο 1<sup>ος</sup> νευρώνας έχει συντεταγμένες (0,0), ο 2<sup>ος</sup> έχει συντεταγμένες (0,1), κλπ.
  - Άρα, σε πλέγμα διάστασης 3 x 3, ο τελευταίος νευρώνας είναι ο 9<sup>ος</sup> και έχει συντεταγμένες (2,2).

Τοπογραφικοί χάρτες



# Τοπογραφικοί χάρτες



Ανταγωνιστικό  
επίπεδο ενός  
διδιάστατου  
SOM με πλέγμα  
3 x 3.

Τοπογραφικοί χάρτες

Πηγή: Tan et al., *Introduction to Data Mining*, 2006.

# Τοπογραφικοί χάρτες

- Κατά την εκπαίδευση, κάθε νευρώνας του πλέγματος μαθαίνει να ανταποκρίνεται σε συγκεκριμένου τύπου πρότυπα εισόδου.
- Άρα, η θέση στο πλέγμα (*τοπογραφική θέση*) συσχετίζεται με συγκεκριμένα χαρακτηριστικά των διανυσμάτων εισόδου.
- Επομένως, το πλέγμα αυτο-οργανώνεται σε έναν **τοπογραφικό χάρτη**.
  - Υλοποιεί μία χωρική απεικόνιση από ένα διάνυσμα  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$  σε μία τοπογραφική θέση  $\mathbf{n}_j \in \mathbb{N}^2$ .

Τοπογραφικοί χάρτες



# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Αλγόριθμος εκπαίδευσης:
  - 1: Αρχικοποίηση βαρών.
  - 2: Επανάλαβε για το  $i$ -οστό πρότυπο εκπαίδευσης:
    - 3: { Ανταγωνισμός.
    - 4: Συνεργασία.
    - 5: Προσαρμογή.
    - 6: }
  - 7: Όσπου να μην παρατηρούνται πλέον σημαντικές αλλαγές στα βάρη των νευρώνων.
- Άρα ο αλγόριθμος εξαρτάται από την αρχικοποίηση και από ένα ευρετικό κριτήριο τερματισμού.

# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Η αρχικοποίηση των βαρών/παραμέτρων συνήθως είναι τυχαία.
  - Π.χ., μπορεί να αρχικοποιηθούν σε τιμές μικρές κατ' απόλυτη τιμή, αλλά όχι μηδενικές, μέσω ομοιόμορφης δειγματοληψίας στο πραγματικό διάστημα  $(-1, 1)$ .
- Ο ανταγωνισμός καθορίζει τον νικητή  $j$ -οστό νευρώνα για το τρέχον πρότυπο εκπαίδευσης  $\mathbf{x}_i$ .
  - Αναζητούμε το  $j$  το οποίο ελαχιστοποιεί την απόσταση  $\|\mathbf{w}_j - \mathbf{x}_i\|_2$ .
  - Το  $j$  λαμβάνει ακέραιες τιμές στο διάστημα  $[1, k]$ , όπου  $k$  το ολικό πλήθος των ανταγωνιστικών νευρώνων.



# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Η συνεργασία συμβαίνει μεταξύ του νικητή νευρώνα και των γειτονικών του επί του πλέγματος.
  - Ο νικητής νευρώνας ορίζει μία γειτονιά επί του πλέγματος, φθίνουσα με την *τοπογραφική απόσταση* από αυτόν.
    - Η τοπογραφική απόσταση είναι απόσταση επί του πλέγματος.
    - Υπολογίζεται συνήθως ως ευκλείδεια απόσταση των διδιάστατων διανυσμάτων συντεταγμένων των δύο νευρώνων.
  - Οι αλλαγές στα βάρη του νικητή νευρώνα επηρεάζουν αντιστοίχως και τα βάρη των λοιπών νευρώνων της γειτονιάς.
    - Όσο εγγύτερα στον νικητή είναι ένας γειτονικός του νευρώνας, τόσο περισσότερο επηρεάζεται.
    - Συμβολίζουμε την τοπογραφική απόσταση μεταξύ του  $j$ -οστού νευρώνα (νικητή) και του  $m$ -οστού νευρώνα ως  $d_{mj}$ .
    - Συμβολίζουμε ως  $h_{mj}$  την τιμή γειτνίασης του  $m$ -οστού νευρώνα στον νικητή  $j$ -οστό νευρώνα.

Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Πρέπει το  $h_{mj}$  να φθίνει μονότονα όσο αυξάνεται το  $d_{mj}$ .
  - Για κάθε νευρώνα  $l$  για τον οποίον ισχύει  $h_{lj} = 0$ , η αλλαγή των βαρών του θα είναι μηδενική κατά την τρέχουσα επανάληψη της εκπαίδευσης.
  - Για τον ίδιο τον νικητή νευρώνα, για τον οποίον ισχύει  $d_{jj} = 0$ , η αλλαγή των βαρών του θα είναι μέγιστη.
- Συνήθως θεωρούμε γκαουσιανή γειτονιά:
  - $h_{mj} = e^{-\frac{d_{mj}^2}{2\sigma^2}}$ , όπου το  $\sigma$  υπερπαραμέτρος η οποία καθορίζει την ακτίνα της γειτονιάς.
    - Η κορυφή της γκαουσιανής είναι στον νικητή νευρώνα (όταν  $m = j$ ).
    - Όσο μεγαλύτερο το  $\sigma$ , τόσο περισσότεροι νευρώνες επηρεάζονται από τον εκάστοτε νικητή και τόσο μεγαλύτερη είναι αυτή η επιρροή κατά την ενημέρωση των βαρών τους.



# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Συνήθως το  $\sigma$  δεν είναι σταθερό αλλά φθίνει με τον χρόνο.
  - Αρχικοποιείται με βάση μία υπερπαράμετρο.
  - Μειώνεται εκθετικά σε κάθε επανάληψη, με ρυθμό τον οποίον καθορίζουμε εμείς μέσω μιας δεύτερης υπερπαραμέτρου.
- Η προσαρμογή του διανύσματος βαρών  $\mathbf{w}_m$  του  $m$ -οστού νευρώνα, μετά την έκθεση στο πρότυπο  $\mathbf{x}_i$ , συμβαίνει με την εξίσωση ενημέρωσης του Kohonen:
  - $\Delta \mathbf{w}_m = \eta h_{mj}(\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_m)$ .
  - Για τον νικητή  $j$ -οστό νευρώνα, το  $h_{jj}$  είναι μέγιστο.
- Το  $\eta$  είναι ο **ρυθμός μάθησης**.
  - Επίσης εκθετικά φθίνουσα με τον χρόνο τιμή.
  - Επίσης καθορίζεται πλήρως από δύο υπερπαραμέτρους.
    - Αρχική τιμή.
    - Ρυθμός μείωσης.

Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Άρα, με το πέρασμα του χρόνου/επαναλήψεων, τα συναπτικά βάρη τείνουν να ακολουθήσουν την κατανομή των προτύπων εισόδου.
- Εξαιτίας της συντονισμένης προσαρμογής βαρών στο εσωτερικό κάθε γκαουσιανής γειτονιάς, οι τοπογραφικά γειτονικοί νευρώνες τείνουν εν τέλει να έχουν μεταξύ τους παρόμοια διανύσματα συναπτικών βαρών/παραμέτρων.
  - Άρα να ανταποκρίνονται σε παρόμοια πρότυπα εισόδου.
- Εξαιτίας της εκθετικής μείωσης με τον χρόνο του ρυθμού μάθησης και του πλάτους των γειτονιών, κάθε νευρώνας σταδιακά τείνει να εξειδικευτεί σε συγκεκριμένο υποσύνολο των δυνατών προτύπων εισόδου.
  - Διαφορετικό από των γειτόνων του επί του πλέγματος, αλλά...
  - ...γειτονικό, στον χώρο των προτύπων, με τα αντίστοιχα υποσύνολα των τοπογραφικών γειτόνων του.

Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες



# Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

- Η εκπαίδευση μπορεί να διακριθεί σε δύο διαδοχικές φάσεις.
  - Η **φάση αυτο-οργάνωσης**, όπου ο τοπογραφικός χάρτης αλλάζει σημαντικά από επανάληψη σε επανάληψη και οι γειτονιές ξεκινούν από μεγάλες (καλύπτουν σχεδόν όλο τον χάρτη) και καταλήγουν σε μικρές.
    - Καταλήγει σε μία χωρική/τοπογραφική απεικόνιση προτύπων εισόδου σε νευρώνες επί του πλέγματος.
  - Η **φάση σύγκλισης**, όπου ο τοπογραφικός χάρτης τελειοποιείται και οι γειτονιές παραμένουν μικρές καθ' όλη τη διάρκειά του, ώσπου καταλήγουν να έχουν σχεδόν μηδενικό πλάτος.
    - Το SOM έχει ήδη μάθει την τοπογραφική απεικόνιση και σταδιακά τη βελτιστοποιεί.

Αυτο-Οργανούμενοι Χάρτες

# Ομαδοποίηση

- Ο SOM μπορεί να θεωρηθεί ένας διαμεριστικός αλγόριθμος ομαδοποίησης σε  $k$  ομάδες.
  - Καθένας από τους  $k$  νευρώνες του πλέγματος κωδικοποιεί μία ομάδα.
  - Το διάνυσμα βαρών του  $m$ -οστού νευρώνα είναι οι συντεταγμένες του  $m$ -οστού κεντροειδούς στον χώρο των προτύπων.
- Επομένως, αντί για απλώς τυχαία αρχικοποίηση των συναπτικών βαρών, μπορούμε να εφαρμόσουμε οποιαδήποτε μέθοδο αρχικοποίησης έχει αναπτυχθεί για τους  $k$ -μέσους.
  - Μόνη προϋπόθεση: κάθε νευρώνας να αρχικοποιείται σε διαφορετικό διάνυσμα βαρών.

Ομαδοποίηση



# Ομαδοποίηση

- Η τελική έξοδος του αλγορίθμου εκπαίδευσης είναι οι συντεταγμένες των  $k$  κεντροειδών.
- Για να αναθέσουμε πρότυπο σε ομάδα, απλώς το δίνουμε ως είσοδο στο εκπαιδευμένο SOM και ελέγχουμε ποιος είναι ο νικητής νευρώνας.
- Εγγύτητα επί του πλέγματος μεταξύ νευρώνων ισοδυναμεί με εγγύτητα μεταξύ των αντίστοιχων ομάδων στον χώρο των προτύπων.
  - Άρα το εκπαιδευμένο SOM εκτελεί ταυτόχρονα **κβαντισμό** και **μη γραμμική μείωση διάστασης** από τις  $n$  στις 2 διαστάσεις, διατηρώντας τις βασικές τοπολογικές ιδιότητες των αρχικών  $n$ -διάστατων δεδομένων.

Ομαδοποίηση

# Ομαδοποίηση

- Η διατήρηση της τοπολογίας των δεδομένων κατά την τοπογραφική απεικόνιση συνεπάγεται πως μπορούμε να απορρίψουμε τα  $k$   $n$ -διάστατα κεντροειδή μετά την ομαδοποίηση, χωρίς να χάσουμε σημαντική πληροφορία.
  - Εξοικονόμηση αποθηκευτικού χώρου (αν  $n \gg 2$ ), διατηρώντας μόνο τις 2-διάστατες τοπογραφικές συντεταγμένες των νευρώνων/ομάδων.
- Υπάρχουν όμως και μειονεκτήματα:
  - Το SOM δεν μπορεί να εντοπίσει πάντα τη φυσική διαμέριση των δεδομένων σε ομάδες, ιδίως αν πρόκειται για ομάδες ποικίλων σχημάτων και πυκνοτήτων στον χώρο των προτύπων.
  - Η εκπαίδευσή του δεν λύνει κάποιο πρόβλημα βελτιστοποίησης, επομένως δεν υπάρχει τυπική εγγύηση ότι θα συγκλίνει.
  - Πολλές τιμές υπερπαραμέτρων οι οποίες πρέπει να βελτιστοποιηθούν χειροκίνητα/εμπειρικά.
  - Η τοπογραφική ιδιότητα είναι αναδυόμενο χαρακτηριστικό της εκπαίδευσης και όχι μαθηματικά εγγυημένη ιδιότητα.



Thank you for your attention!

Q & A

*Contact:* [imademlis@aueb.gr](mailto:imademlis@aueb.gr)