

ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΚΑΙ ΕΥΦΥΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗ ΑΣΚΗΣΗ 2: Αυτο-οργανούμενοι χάρτες

Σε αυτή την εργαστηριακή άσκηση εξετάζεται μια κλάση νευρωνικών δικτύων μη επιβλεπόμενης μάθησης, οι αυτο-οργανούμενοι χάρτες (Self Organizing Maps – SOMs) του Kohonen. Στην προσπάθεια διερεύνησης των δυνατοτήτων του αυτο-οργανούμενου χάρτη (SOM), κατ' αρχάς υλοποιείται ένα σχετικά απλό δίκτυο, που επιτρέπει την ενδοσκοπήση στην αρχιτεκτονική, τους αλγόριθμους και τις λειτουργίες που συνιστούν το σύνολο ενός αυτο-οργανούμενου χάρτη. Εν συνεχεία, μέσω καθοδηγούμενων πειραμάτων διερευνώνται, μελετώνται και τέλος αναλύονται οι δυνατότητες καθώς και οι επιδόσεις του SOM.

Υλοποίηση ενός SOM

Σε πρώτη φάση, η εργαστηριακή άσκηση επικεντρώνεται κυρίως στην υλοποίηση ενός - απλού μεν αρκετά γενικού δε- αυτο-οργανούμενου χάρτη. Εφαρμόζοντας τις ακόλουθες διεξοδικές προδιαγραφές μπορεί κανείς να υλοποιήσει ένα SOM με μονοδιάστατο ή δισδιάστατο πλέγμα νευρώνων. Επιπρόσθετα, παρέχεται η δυνατότητα χρήσης διαφόρων τύπων πλέγματος (π.χ. κανονικό ή εξαγωνικό), καθώς και διαφόρων τύπων τοπολογικής γειτονιάς (για παράδειγμα Ευκλείδεια ή Manhattan). Επιπλέον, κάνοντας χρήση (μιας αρχικής διατύπωσης) του κανόνα μάθησης του Kohonen δύναται να κατασκευαστεί ο αλγόριθμος μη επιβλεπόμενης εκπαίδευσης του SOM. Αξίζει να σημειωθεί ότι ο προκύπτων αλγόριθμος -αν και περιορισμένης πολυπλοκότητας- περιλαμβάνει τόσο το στάδιο *διάταξης* (*ordering*) όσο και το στάδιο *ρύθμισης* (*tuning*), κάθε ένα εκ των οποίων υποδιαιρείται στις τρεις φάσεις *ανταγωνισμού*, *συνεργασίας* και *ανταμοιβής*.

Ως ενδεικτικά παραδείγματα σας δίνονται ολοκληρωμένες οι δύο πρώτες συναρτήσεις (**somCreate.m** και **somTrainParameters.m**). Κατά αντιστοιχία με αυτές, σας ζητείται να υλοποιήσετε τις υπόλοιπες.

D διαστάσεις προτύπων, αριθμός χαρακτηριστικών εισόδου
N συνολικό πλήθος των νευρώνων

function somCreate(minMax, gridSize)

% συνάρτηση που κατασκευάζει ένα SOM

minMax πίνακας Dx2 που στην πρώτη στήλη του περιέχει τις ελάχιστες τιμές όλων των χαρακτηριστικών εισόδου, ενώ στην δεύτερη στήλη του τις μέγιστες τιμές.

gridSize πίνακας γραμμή του οποίου το πρώτο στοιχείο περιέχει το πλήθος των νευρώνων ανά γραμμή και το δεύτερο είναι το πλήθος των νευρώνων ανά στήλη.

Η εν λόγω συνάρτηση πρέπει να κατασκευάζει τις ακόλουθες **global** μεταβλητές ώστε να μπορούν να προσπελαστούν από τις υπόλοιπες συναρτήσεις που καθορίζονται στην συνέχεια.

neuronsPerRow το πλήθος των νευρώνων ανά γραμμή (οριζόντια διεύθυνση)

που περιέχονται στο πλέγμα του αυτο-οργανούμενου χάρτη.
neuronsPerColumn το πλήθος των νευρώνων ανά στήλη (κατακόρυφη διεύθυνση) που περιέχονται στο πλέγμα του αυτο-οργανούμενου χάρτη.
N το συνολικό πλήθος των νευρώνων.
IW οι παράμετροι/βάρη του SOM είναι ένας πίνακας μεγέθους $N \times D$, κάθε στοιχείο της γραμμής του οποίου αρχικοποιείται σε μία τυχαία τιμή μεταξύ της μέγιστης και ελάχιστης τιμής του αντίστοιχου χαρακτηριστικού εισόδου.
Χρήσιμες Συναρτήσεις: **size**
rand
distances πίνακας $N \times N$ που περιέχει την απόσταση κάθε νευρώνα από όλους του υπόλοιπους νευρώνες, η κύρια διαγώνιος του αποτελείται από μηδενικά, ενώ ο πίνακας είναι συμμετρικός.
Χρήσιμες Συναρτήσεις: **gridtop**, **hextop**, **randtop** (τύπος πλέγματος)
boxdist, **dist**, **linkdist**, **mandist** (μέτρο απόστασης)

function somTrainParameters(setOrderLR,setOrderSteps,setTuneLR)
% συνάρτηση που αρχικοποιεί ή καθορίζει συγκεκριμένες παραμέτρους
% που σχετίζονται με την διαδικασία εκπαίδευσης ενός SOM
setOrderLR η τιμή που τίθεται για τον αρχικό ρυθμό μάθησης κατά το ordering στάδιο της εκπαίδευσης.
setOrderSteps η τιμή που τίθεται για το πλήθος των εποχών κατά το ordering στάδιο της διαδικασίας μη επιβλεπόμενης εκπαίδευσης.
setTuneLR η τιμή που τίθεται για τον ρυθμό μάθησης κατά το tuning στάδιο της εκπαίδευσης.
Η εν λόγω συνάρτηση πρέπει να κατασκευάζει τις ακόλουθες **global** μεταβλητές ώστε να μπορούν να προσπελαστούν από τις υπόλοιπες συναρτήσεις που καθορίζονται στην συνέχεια.
maxNeighborDist μέγιστη απόσταση που εμφανίζεται μεταξύ δύο οποιωνδήποτε νευρώνων.
Χρήσιμες Συναρτήσεις: **max**
ceil
tuneND η απόσταση νευρώνων που χρησιμοποιείται κατά το tuning στάδιο της εκπαίδευσης, συνήθως τιμή είναι το 1.
orderLR ο αρχικός ρυθμός μάθησης κατά το ordering στάδιο της εκπαίδευσης, ενδεικτική τιμή είναι το 0.9.
orderSteps το πλήθος των εποχών κατά το ordering στάδιο της διαδικασίας μη επιβλεπόμενης εκπαίδευσης, ενδεικτική τιμή είναι το 1000.
tuneLR ο ρυθμός μάθησης κατά το tuning στάδιο της εκπαίδευσης, ενδεικτική τιμή είναι το 0.01.

function [output] = somOutput(pattern)
% υπολογισμός της εξόδου ενός SOM
pattern πίνακας $D \times 1$ που περιέχει διατεταγμένα τα χαρακτηριστικά ενός προτύπου εισόδου, δηλαδή ουσιαστικά είναι ένα διάνυσμα στήλη διάστασης D .
output πίνακας $N \times 1$ που περιέχει το σύνολο των εξόδων του SOM, οι τιμές των εξόδων ενός SOM είναι όλες 0 εκτός της τιμής του κόμβου νικητή που είναι 1.
Η εν λόγω συνάρτηση σε πρώτη φάση υπολογίζει την αρνητική Ευκλείδεια απόσταση μεταξύ του προτύπου εισόδου και του διανύσματος παραμέτρων κάθε νευρώνα του SOM, ενώ σε δεύτερη φάση βρίσκει τον νευρώνα με τη μεγαλύτερη τιμή και θέτει την έξοδο του στο 1.

Χρήσιμες Συναρτήσεις:	negdist compet
-----------------------	---------------------------------

function [a] = somActivation(pattern,neighborDist)

% υπολογισμός της ενεργοποίησης ενός SOM

pattern πίνακας Dx1 που περιέχει διατεταγμένα τα χαρακτηριστικά ενός προτύπου εισόδου, δηλαδή ουσιαστικά είναι ένα διάνυσμα στήλη διάστασης D.

neighborDist η απόσταση (στο πλέγμα του SOM) εντός της οποίας εάν βρίσκεται ένας νευρώνας θεωρείται γειτονικός του νευρώνα νικητή.

a πίνακας Nx1 που συνίσταται από τις τιμές των ενεργοποιήσεων όλων των νευρώνων ενός SOM.

Η παραπάνω συνάρτηση υπολογίζει τις ενεργοποιήσεις όλων των νευρώνων του SOM ως εξής: Ο νευρώνας νικητής λαμβάνει τιμή ενεργοποίησης 1, οι νευρώνες που θεωρούνται γειτονικοί σε αυτόν (δηλαδή αυτοί που βρίσκονται σε απόσταση \leq neighborDist) λαμβάνουν τιμές μικρότερες του 1 (συνήθης τιμή είναι η 0.5) και όλοι οι υπόλοιποι νευρώνες έχουν τιμή ενεργοποίησης 0.

Χρήσιμες Συναρτήσεις: **somOutput**
find

function somUpdate(pattern,learningRate,neighborDist)

% ενημέρωση/ανανέωση του συνόλου των παραμέτρων ενός SOM

pattern πίνακας Dx1 που περιέχει διατεταγμένα τα χαρακτηριστικά ενός προτύπου εισόδου, δηλαδή ουσιαστικά είναι ένα διάνυσμα στήλη διάστασης D.

learningRate ο ρυθμός μάθησης κατά το παρόν βήμα της τροποποίησης των βαρών του SOM.

neighborDist η απόσταση (στο πλέγμα του SOM) εντός της οποίας εάν βρίσκεται ένας νευρώνας θεωρείται γειτονικός του νευρώνα νικητή.

Αυτή η συνάρτηση τροποποιεί/ενημερώνει τα βάρη (ή αλλιώς τις παραμέτρους) ενός SOM βάσει του αλγορίθμου μάθησης του Kohonen. Επιγραμματικά ο κανόνας μάθησης του Kohonen είναι ο εξής:

$$\Delta w_i = \eta a_i (x - w_i)$$

όπου ο δείκτης i υποδεικνύει κάθε νευρώνα του SOM, w_i το διάνυσμα παραμέτρων του νευρώνα i , x το πρότυπο εισόδου, a_i η ενεργοποίηση του νευρώνα i και η ο ρυθμός μάθησης.

Χρήσιμες Συναρτήσεις: **somActivation**

P συνολικό πλήθος των προτύπων εκπαίδευσης

function somTrain(patterns)

% συνάρτηση που εκπαιδεύει ένα SOM

patterns πίνακας DxP που περιέχει το σύνολο των προτύπων εκπαίδευσης για το SOM (training set).

Η εν λόγω συνάρτηση εκπαιδεύει ένα SOM παρουσιάζοντας κάθε πρότυπο, προσδιορίζοντας τον νευρώνα νικητή (ανταγωνισμός), υπολογίζοντας τις ενεργοποιήσεις (συνεργασία) και τροποποιώντας/ανανεώνοντας τις παραμέτρους του SOM βάσει του αλγορίθμου μάθησης του Kohonen (ανταμοιβή). Αυτή η διαδικασία γίνεται ακολουθιακά και ξεχωριστά για τα πρότυπα κάθε εποχής εκπαίδευσης. Γενικότερα, η εκπαίδευση περιλαμβάνει αμφότερα τα στάδια ordering και tuning, κάθε ένα εκ των οποίων διαρκεί έναν ορισμένο αριθμό εποχών.

Το στάδιο ordering διαρκεί orderSteps εποχές. Η απόσταση εντός της οποίας ο νευρώνας νικητής και κάθε άλλος νευρώνας θεωρούνται γειτονικοί, ξεκινάει ως η μέγιστη απόσταση μεταξύ δυο οποιωνδήποτε νευρώνων (μεταβλητή maxNeighborDist) και μειώνεται (γραμμικά ή εκθετικά) μέχρι την τιμή tuneND. Αντίστοιχα, η αρχική τιμή του ρυθμού μάθησης είναι orderLR και μειώνεται ομοίως (γραμμικά ή εκθετικά) μέχρι την τιμή tuneLR.

Το στάδιο tuning διαρκεί σαφώς περισσότερες εποχές από ό,τι το στάδιο ordering (συνήθως κατά ένα συντελεστή από 2 έως 5). Η απόσταση εντός της οποίας ο νευρώνας νικητής και κάθε άλλος νευρώνας θεωρούνται γειτονικοί είναι σταθερή και ίση με tuneND. Ο ρυθμός μάθησης είτε διατηρείται αμετάβλητος και ίσος με tuneLR, είτε με αρχική τιμή την tuneLR μειώνεται με ιδιαίτερα αργό τρόπο.

Χρήσιμες Συναρτήσεις: **size**
 somUpdate

Μελέτη και Ανάλυση ενός SOM

Μετά την υλοποίηση του SOM, θα επιχειρήσουμε τη μελέτη και την ανάλυση των ιδιοτήτων, των δυνατοτήτων και των επιδόσεων του αυτο-οργανούμενου χάρτη. Η χρησιμοποιούμενη μεθοδολογία, όπως θα φανεί και στη συνέχεια, είναι η πειραματική διερεύνηση/αντιμετώπιση χαρακτηριστικών προβλημάτων με στόχο να διαφωτιστούν σημεία που χρήζουν κάποιας εξέτασης και σχολιασμού.

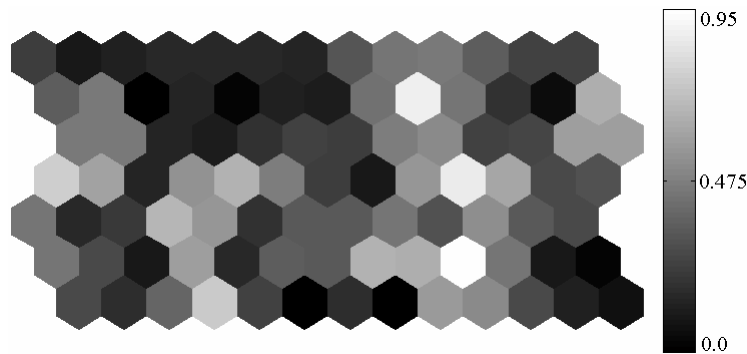
Μέσω του m-file **RingData.m** σας παρέχεται ένα δισδιάστατο σύνολο δεδομένων. Γενικότερα, κάνοντας χρήση της συνάρτησης **plot2DSomData.m** (ή κάποιας άλλης που θα κατασκευάσετε εσείς) είναι δυνατόν να οπτικοποιήσετε σύνολα δεδομένων και SOM (σχετιζόμενα με τα υπό εξέταση σύνολα δεδομένων). Για να ελέγξετε και να παρατηρήσετε την λειτουργία του SOM που υλοποιήσατε, γράψτε και εκτελέστε scripts που κατασκευάζουν μονοδιάστατα ή δισδιάστατα πλέγματα και εκπαιδεύονται βάσει του προηγούμενου συνόλου προτύπων. Μπορείτε να πειραματιστείτε με παραμέτρους του SOM και παράλληλα είναι δυνατό να απεικονίζετε την διαδικασία της εκπαίδευσης. Είναι ενδιαφέρον να παρατηρήσετε ότι το SOM επιτυγχάνει (μετά το πέρας της διαδικασίας της μη επιβλεπόμενης μάθησης) να ανακαλύψει καθώς και να περιγράψει τόσο τη χωρική κατανομή όσο και την κατανομή πυκνότητας των προτύπων του εκάστοτε συνόλου δεδομένων.

Μία από τις βασικές λειτουργίες που καλείται να επιτελέσει το SOM (ως ένα κλασικό δίκτυο μη επιβλεπόμενης μάθησης) είναι η **ομαδοποίηση προτύπων (clustering)** ή αλλιώς η **μη επιβλεπόμενη ταξινόμηση (unsupervised classification)**. Στόχος του clustering είναι η αντιστοίχιση προτύπων προερχόμενων από σύνολα δεδομένων σε ομάδες (σωρούς) σύμφωνα με ορισμένα κριτήρια ομοιότητας. Ο διαχωρισμός των αρχικών συνόλων σε ομάδες γίνεται στην βάση της μεγιστοποίησης της ομοιότητας μεταξύ των προτύπων του ίδιου σωρού και στην ελαχιστοποίησης της ομοιότητας μεταξύ προτύπων που ανήκουν σε διαφορετικούς σωρούς.

Το SOM εκτός των δυνατοτήτων που προσφέρει για ομαδοποίηση προτύπων, είναι ένα αποδοτικό εργαλείο για **οπτικοποίηση δεδομένων μεγάλων διαστάσεων**. Στη βασική του μορφή ουσιαστικά μετατρέπει τις μη γραμμικές στατιστικές συσχετίσεις προτύπων μεγάλης διάστασης σε απλές γεωμετρικές συσχετίσεις σημείων ενός επιπέδου μικρής διάστασης (το οποίο συνήθως είναι ένα δισδιάστατο πλέγμα νευρώνων/κόμβων). Κατά συνέπεια, καθώς το SOM συμπιέζει την πληροφορία διατηρώντας στις απεικονίσεις τις σημαντικότερες τοπολογικές και μετρικές συσχετίσεις των δεδομένων, μπορεί να υποστηριχθεί ότι παράγει ένα είδος **αφαίρεσης**. Αυτά τα δύο χαρακτηριστικά, η

οπτικοποίηση και η αφαίρεση σε συνδυασμό με την ομαδοποίηση προτύπων είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν σε μία σειρά πολύπλοκων και σύνθετων εργασιών.

Μία μεθοδολογία που ενοποιεί τις τρεις αυτές ιδιότητες/δυνατότητες του SOM είναι η γραφική απεικόνιση που καλείται **πίνακας ενοποιημένων αποστάσεων (unified distance matrix ή αλλιώς U-matrix)**. Βάσει αυτής της μεθοδολογίας υπολογίζονται οι αποστάσεις μεταξύ των διανυσμάτων παραμέτρων (βαρών) των γειτονικών νευρώνων και στην συνέχεια αναπαριστώνται ως αποχρώσεις επί ενός επιπέδου. Παράλληλα η απόχρωση καθενός νευρώνα καθορίζεται από τη μέση τιμή των αποστάσεων του νευρώνα αυτού από όλους τους γειτονικούς σε αυτόν νευρώνες.



Σχήμα: Ο U-matrix ενός SOM με εξαγωνικό πλέγμα διάστασης 7x4.

Μέσω του m-file **ClusterData.m** σας δίδεται ένα σύνολο δεδομένων που περιέχει πρότυπα έξι διαστάσεων. Τα πρότυπα εξαιτίας της μεγάλης τους διάστασης αλλά και της πολυπλοκότητας τους καθιστούν μη αποδοτική/αδύνατη την οπτική παρατήρηση και ανάλυση τους.

Αφού έχετε καταλήξει προσεγγιστικά σε ένα σύνολο παραμέτρων, στην συνέχεια θα εκπαιδεύσετε έναν αυτο-οργανούμενο χάρτη. Θεωρώντας πλέον ότι έχει υλοποιηθεί ένα SOM σας ζητείται να απεικονίσετε τον αντίστοιχο πίνακα U-matrix με την χρήση της συνάρτησης **somShow.m**. Ακολουθώντας, μελετώντας και αναλύοντας τον πίνακα U-matrix σας ζητείται να διερευνήσετε και να εξετάσετε ορισμένα ζητήματα:

- Ποιο είναι το πιθανό πλήθος των ομάδων (clusters) στις οποίες μπορούν να διαχωριστούν τα πρότυπα.
- Ποια ενδέχεται να είναι η σχέση μεταξύ μεγέθους μιας ομάδας (όπως αυτή εμφανίζεται στον πίνακα U-matrix) και πλήθους προτύπων που περιέχει.
- Που μπορεί να οφείλονται οι διαφοροποιήσεις στα σύνορα διαχωρισμού των επιμέρους ομάδων.

Είναι γενικά αποδεκτό ότι το SOM υλοποιείται ακολουθώντας μία μη επιβλεπόμενη προσέγγιση. Ωστόσο, στην περίπτωση που παρέχεται η επιπρόσθετη πληροφορία των κατηγοριών στις οποίες ανήκουν τα πρότυπα ενός συνόλου δεδομένων, οι δυνατότητες του SOM δύναται να διευρυνθούν πράγμα που έχει άμεσο αντίκτυπο στην περαιτέρω βελτίωση των επιδόσεων του. Η εν λόγω προσέγγιση καλείται **supervised SOM** καθώς κινείται στα σύνορα μεταξύ επιβλεπόμενης και μη επιβλεπόμενης μάθησης.

Η μεθοδολογία για να μετασχηματιστεί ο αλγόριθμος μη επιβλεπόμενης μάθησης του SOM σε επιβλεπόμενης είναι η εξής: Το διάνυσμα κάθε προτύπου εισόδου αποτελείται από δύο τμήματα x_u και x_s , όπου x_u είναι το διάνυσμα χαρακτηριστικών του προτύπου και x_s είναι η κατηγορία στην οποία ανήκει το πρότυπο (βάσει μίας ορθογώνιας κωδικοποίησης των κατηγοριών). Εν συνεχεία τα συνενωμένα διανύσματα προτύπων εισόδου $x = [x_u, x_s]$ χρησιμοποιούνται στην διαδικασία εκπαίδευσης του SOM, γεγονός

που αιτιολογεί τον όρο supervised αφού η πληροφορία των κατηγοριών στις οποίες ανήκουν τα πρότυπα αξιοποιείται αναλόγως.

Αντίθετα, κατά την αναγνώριση/κατηγοριοποίηση ενός αγνώστου κατηγορίας προτύπου μόνο το x_u τμήμα του διανύσματος αυτού, συγκρίνεται με το αντίστοιχο τμήμα των διανυσμάτων βαρών του SOM. Η δε κατηγορία του αγνώστου προτύπου καθορίζεται από το w_s τμήμα του διανύσματος βαρών του νευρώνα νικητή.

Μέσω του m-file **ClassData.m** σας δίδεται ένα σύνολο δεδομένων δύο κατηγοριών A και B που ακολουθώντας την λογική της ορθογώνιας κωδικοποίησης αναπαριστώνται ως $[1, 0]$ και $[0, 1]$ αντίστοιχα. Αυτό το σύνολο δεδομένων είναι ουσιαστικά το σύνολο δεδομένων ClusterData.m εμπλουτισμένο με την πληροφορία των κατηγοριών στις οποίες ανήκουν τα περιεχόμενα πρότυπα, κατά συνέπεια περιέχει πρότυπα οκτώ διαστάσεων.

Διατηρώντας αναλλοίωτες την αρχιτεκτονική, τις σχεδιαστικές προσεγγίσεις και τις παραμέτρους που χρησιμοποιήσατε προηγουμένως, σας ζητείται να εκπαιδεύσετε έναν αυτο-οργανούμενο χάρτη και στην συνέχεια να απεικονίσετε τον αντίστοιχο πίνακα U-matrix. Συγκρίνοντας πλέον τον παρόντα και τον προηγούμενο U-matrix σας ζητείται να εντοπίσετε διαφορές και να εξηγήσετε που ενδεχόμενα οφείλονται.

Τέλος, το m-file **UnknownClassData.m** περιέχει πρότυπα αγνώστου κατηγορίας που προέρχονται από τον ίδιο χώρο προβλήματος που περιγράφεται από το σύνολο δεδομένων ClassData.m. Σας ζητείται ακολουθώντας την μεθοδολογία που περιγράφηκε παραπάνω να καθορίσετε την κατηγορία στην οποία αυτά πιθανώς ανήκουν.