

**Kamila Migdał-Najman**

Uniwersytet Gdański

**ANALIZA PORÓWNAWCZA WŁASNOŚCI  
NIENADZOROWANYCH SIECI NEURONOWYCH  
TYPU *SELF ORGANIZING MAP*  
I *GROWING NEURAL GAS* W ANALIZIE SKUPIEŃ**

**1. Wstęp**

Jedną z najbardziej charakterystycznych cech inteligencji jest zdolność do uczenia się. Umiejętność ta jest uważana za podstawową cechę zarówno człowieka, jak i całego społeczeństwa. Dlatego wydaje się rzeczą oczywistą, że systemy sztucznej inteligencji powinny przejawiać zdolność uczenia się (por. [Hołyński 1989]). Sztuczne sieci neuronowe uczą się na dwa sposoby. Jedną z nich jest uczenie bez nadzoru (uczenie nienadzorowane, uczenie bez nauczyciela, samouczenie sieci – *unsupervised learning*). Niekiedy cel uczenia nie jest określony w postaci konkretnych, prawidłowych przykładów. Proces uczenia sieci polega na wykryciu istotnych cech zbioru uczącego i wykorzystaniu ich do grupowania sygnałów wejściowych na klasy, które sieć potrafi rozróżniać. Sieć potrafi wykorzystać obserwacje wejściowe i zbudować na ich podstawie algorytm działania automatycznie wykrywający klasy powtarzających się sygnałów wejściowych i rozpoznawać te typowe wzorce sygnałów. Podczas samouczenia cała wiedza, jaką sieć może zdobyć, zawierać się musi w pokazywanych sieci obiektach wejściowych. Obiekty te tworzą pewne klasy podobieństwa; są wśród nich takie, które są do siebie podobne, i odmienne, należące do innej klasy. Sieć sama wykrywa wzorce, właściwości, regularności, kategorie w danych wejściowych i koduje je w celu otrzymania wyjścia. Samouczenie się sieci neuronowych to bezwzorcowy proces odwzorowania wielowymiarowej przestrzeni wejściowej obiektów w niskowymiarową przestrzeń małej liczby jednostek funkcjonalnych, neuronów, z zachowaniem topograficznego podobieństwa obiektów. Sztuczna sieć doskonali sposób rozwiązywania określonego zadania, nie mając do dyspozycji wzorców zadań wraz z rozwiązaniami. Okazuje pewien poziom samoorganizacji. Dążenie do samoorganizacji jest cechą samouczącej się sieci neuronowej.

Proces samouczenia i samoorganizacji zachodzi tylko wtedy, jeśli w wejściowym ciągu danych uczących istnieje pewna prawidłowość, na której może oprzeć się sieć (por. [Tadeusiewicz 1998; Duch i in. 2000; Masters 1996]).

Coraz częściej w analizie skupień znajdują zastosowanie nienadzorowane sztuczne sieci neuronowe (por. [Migdał-Najman, Najman 2008]). Do tej grupy sieci należą między innymi: *Self Organizing Map* Kohonena (SOM) i *Growing Neural Gas* (GNG) B. Fritzkego. Celem prezentowanych badań jest wskazanie różnic między tymi sieciami i porównanie ich własności, szczególnie z punktu widzenia analizy skupień.

## 2. *Self Organizing Map*

*Self Organizing Map* – SOM – to mapa samoorganizująca się, nazywana również siecią lub mapą Kohonena, samoorganizującym się odwzorowaniem, mapą cech (*Self Organizing Feature Map* – SOFM)<sup>1</sup>, a w okresie powstania znana pod nazwą *topology preserving map* (por. [Berthold, Hand 1999; Kohonen 1997; Fort, Pages 1995; Yin 2002; Fausett 1994; Deboeck, Kohonen 1998]). Zaproponowana i rozwinięta ok. 1982 r. przez fińskiego profesora Teuvo Kohonena jest obecnie jedną z bardziej znanych nienadzorowanych modeli sztucznych sieci neuronowych. Sieć SOM wzorowana jest na zjawisku biologicznym nazywanym *retinotopy*<sup>2</sup> (por. [Flanagan 1996]). SOM jest jedną z bardziej popularnych i efektywnych aplikacji *data mining*, stosowaną głównie do klasyfikacji, grupowania, redukcji wymiarowości, wyszukiwania anomalii i odchyłeń od wartości typowych, wizualizacji wielowymiarowych zbiorów danych i badania dynamiki zjawisk (por. [Papadimitriou i in. 2002; Delgado 2000; Fessant, Midenet 2002; Deventer, Moolman, Aldrich 1996; Migdał-Najman, Najman 2004]).

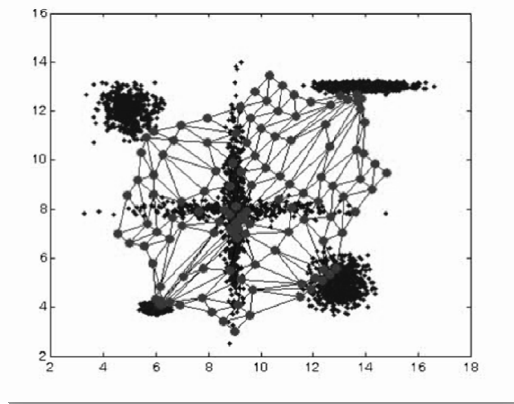
W wyjściowej przestrzeni cech umieszczone zostają neurony, które lokalnie aproksymują analizowane obiekty. Każdy taki „lokalny aproksymator” to jeden neuron. Neurony uporządkowane są w pewną strukturę nazywaną siecią, w której są ze sobą w określonych związkach. Sieć jest wstępnie „rozrzucona” w przestrzeni obiektów (por. rys. 1). Następnie sieci pokazywane są kolejne obiekty. Neuron, który

<sup>1</sup> Sieć Kohonena nazywana jest również mapą samoorganizującą się Kohonena (*Kohonen Self Organizing Map* – KSOM), samoorganizującą się mapą odwzorowań topologicznych Kohonena, mapą topograficzną (*topographic map*), odwzorowaniem (mapą) cech znaczących, procesem samoorganizującym się (*self-organizing process*), a ostatnio pojęcie SOM traktowane jest szerzej i nazywane jest *visualisation-induced SOM* – ViSOM.

<sup>2</sup> W języku angielskim *retina* oznacza siatkówkę. Oko człowieka składa się między innymi z warstwy mózgowej, zwanej częścią wzrokową siatkówki, która jest światłoczuła. W siatkówce występują światłoczułe komórki nerwowe nazywane pręcikami i czopkami. Ich wypustki dochodzą do komórek dwubiegunowych łączących się z komórkami zwojowymi, których aksony skupiają się w tarczy nerwu wzrokowego. Opisane zjawisko przypomina sieć SOM, która przez neurony w warstwie wejściowej (odpowiedniki pręcików i czopków) odbiera sygnały wejściowe (siatkówka odbiera sygnały świetlne) i przekazuje przetworzone sygnały do neuronów w warstwie wyjściowej (komórki nerwowe nerwu wzrokowego w odpowiednim obszarze mózgu).

znajduje się najbliżej danego obiektu, jest neuronem „zwycięzcą” i to on podlega uczeniu (zmianie wag, współrzędnych w przestrzeni). Uczą się także sąsiedzi tego neuronu – proporcjonalnie do odległości, w jakiej znajdują się od neuronu zwycięskiego. Część neuronów nigdy nie jest zwycięzcą i odgrywa rolę „pośredników”, pozwalając sieci na pełniejsze rozciągnięcie się w przestrzeni. Są to tzw. neurony martwe. W dużych sieciach ich udział może być znaczny (por. rys. 1).

Na rysunku 1 przedstawiono wybrany etap uczenia się sieci SOM. Niemal wszystkie neurony (duże punkty na sieci), które nie nakładają się na obiekty, nie biorą udziału w uczeniu się sieci. Są zbędne i przyczyniają się jedynie do wydłużenia czasu uczenia się sieci.



Rys. 1. Sieć neuronowa typu SOM w przestrzeni cech

Źródło: opracowanie własne.

Sieć SOM może mieć strukturę łańcucha, prostokąta lub kwadratu. Każda przyjęta struktura sieci ma inne własności i jej wybór dla danego problemu badawczego ma kluczowe znaczenie. Sieć SOM o strukturze łańcucha przy niewielkiej liczbie wymiarów bardzo szybko się uczy. Przy znanej liczbie skupień (nawet w przybliżeniu) wystarczy jeden neuron na każde skupienie. Wadą tej struktury jest trudność w ustaleniu właściwej liczby neuronów. Przyjęcie zbyt małej liczby neuronów spowoduje, że sieć nie poradzi sobie w podziale zbioru na skupienia, zbyt duża może „wykryć” wiele lokalnych „zagęszczeń” obiektów. Struktura prostokątna sieci SOM pozwala na rozpoznawanie skupień eliptycznych, „rozwlekłych” w dowolnym wymiarze. Znajduje zastosowanie w przypadku zbiorów o niewielkiej liczbie wymiarów i gdy skupienia mają różną konfigurację geometryczną. Najczęściej stosowaną strukturą sieci jest sieć kwadratowa, która pozwala na rozpoznawanie skupień o dowolnej konfiguracji geometrycznej, będąc jednocześnie doskonałym narzędziem wizualizacji danych wielowymiarowych. Jednocześnie struktura kwadratowa jest najmniej oszczędna i najdłużej się uczy.

### 3. *Growing Neural Gas*

Podstawowych wad sieci SOM pozbawiona jest sieć typu GNG zaproponowana w 1994 r. przez B. Fritzkego (por. [Fritzke 1994]). Sieci tego typu z założenia nie mają stałej czy założonej *a priori* struktury. Struktura sieci jest tworzona w procesie uczenia się sieci, począwszy od najprostszej, złożonej jedynie z 2 neuronów, do bardziej złożonej. Struktura takiej sieci zmienia się dynamicznie w procesie samouczenia się w taki sposób, że nowe neurony są wstawiane do sieci jedynie w tym miejscu sieci, w którym występuje największy błąd rozpoznawania wzorców (błąd kwantyzacji). W przypadku sieci GNG ustala się jedynie maksymalną złożoność sieci (maksymalną liczbę neuronów), a także maksymalny wiek neuronów niebiorących udziału w uczeniu (por. [Jirayusakul, Auwatanamongkol 2007]).

### 4. Analiza porównawcza sieci SOM i GNG

Do podstawowych zalet sieci SOM należy zaliczyć: brak założeń probabilistycznych dla zmiennych, dużą odporność na braki danych i występowanie wartości nietypowych, możliwość rozdzielenia skupień nieseparowalnych liniowo, możliwość wizualnej oceny wpływu poszczególnych zmiennych na efekt grupowania, bardzo dobrą wizualizację danych wielowymiarowych w dwóch lub trzech wymiarach. Do podstawowych wad sieci SOM zaliczymy: konieczność założenia *a priori* jej struktury (łańcuch pojedynczy, łańcuch wielokrotny, sieć prostokątna, kwadratowa itp.) przy braku obiektywnych przesłanek dotyczących tego, jak to należy zrobić w praktyce. W analizie dużych zbiorów danych może się okazać, że konieczna będzie sieć o tysiącach neuronów – a jednocześnie duża ich liczba może być „martwa”. Spowoduje to znaczne spowolnienie procesu uczenia i efektywność samej sieci. Występuje także wrażliwość sieci SOM na zastosowaną funkcję sąsiedztwa. Istnieje wiele możliwych do zastosowania funkcji przy jednoczesnym braku obiektywnych kryteriów ich wyboru.

Kolejną wadą sieci SOM jest występujący czasami efekt skręcania się sieci w przestrzeni. Skręcenie się sieci oznacza wzajemne przecinanie, krzyżowanie się powiązań neuronów (por. rys. 3a). Może się zdarzyć, że położone blisko siebie obiekty w przestrzeni sygnałów wejściowych nie będą reprezentowane w sieci przez sąsiadujące ze sobą neurony. Prowadzić to będzie w konsekwencji do błędnego rozpoznawania skupień.

Do podstawowych zalet sieci GNG należy: brak „martwych” neuronów, dynamiczna struktura sieci powstająca w procesie uczenia, to, że sieci tego typu uczą się bardzo szybko i pozwalają na łatwą identyfikację skupień. Nie ma także efektu skręcania się sieci GNG. Do podstawowych wad zaliczymy zaś trudności w ustaleniu *a priori* parametrów sieci (maksymalna liczba neuronów, maksymalny wiek neuronów nieuczących się, maksymalna liczba iteracji, częstotliwość wstawiania

nowych neuronów), a także brak możliwości wizualizacji analizowanego problemu na podstawie powstałej sieci, a także samej sieci.

Jeżeli dla danego problemu zostanie założona właściwa struktura sieci SOM, to proces uczenia jest relatywnie szybki, sieć charakteryzuje się niewielką liczbą martwych neuronów, a na jedno skupienie obiektów przypada mała liczba neuronów (czasami wystarczy jeden neuron, por. rys. 2a). Jeżeli struktura sieci zostanie założona błędnie, to w najlepszym przypadku sieć będzie po prostu niepotrzebnie duża, a w najgorszym zaś nie uda się rozpoznać skupień (por. rys. 2b). Sieć GNG sama poszukuje optymalnej struktury (por. rys. 2c). Przy optymalnej liczbie neuronów każde (sferyczne) skupienie będzie reprezentowane przez 2 neurony lub co najwyżej kilka neuronów (ich dokładna liczba zależy od konfiguracji skupień w przestrzeni). Jeżeli zostanie ustalona zbyt duża liczba neuronów i liczba iteracji uczących, to każde skupienie będzie reprezentowane przez większą (zwykle niepotrzebnie) liczbę neuronów. Rozpoznawanie skupień obiektów przez sieć GNG jest znacznie łatwiejsze niż w sieci SOM (o ile skupienia są separowalne). Każdy zbiór neuronów niepołączonych z innym zbiorem stanowi jedno skupienie. Sieć GNG ma zdolność rozpoznania skupień o dowolnej konfiguracji w przestrzeni, nawet przy relatywnie niskiej liczbie neuronów. Sieć SOM trudniej rozpoznaje skupienia niesferyczne (choć potrafi to zrobić) i wymaga w tym celu znacznie większej liczby neuronów. Przykład analizy zaprezentowany jest na rys. 3. Obie sieci mają podobną liczbę neuronów. Sieć GNG bezbłędnie (indeks Randa = 1) rozpoznaje wszystkie skupienia (warto zauważyć, że prezentowany problem dyskwalifikuje niemal wszystkie algorytmy analizy skupień), a sieć SOM wyraźnie ma za małą liczbę neuronów, aby rozwiązać problem. Cztery sferyczne skupienia są rozpoznane bezbłędnie, jednak dwa pozostałe są podzielone dość przypadkowo.

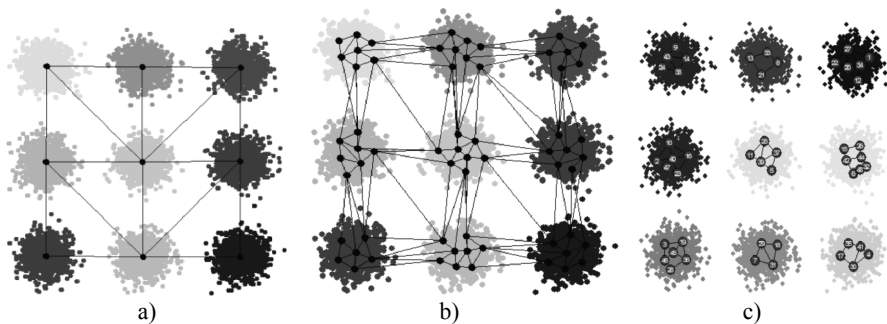
Porównanie zdolności obu sieci do prawidłowego ustalenia skupień w wielowymiarowym zbiorze danych wypada na korzyść sieci GNG. Mimo obiektywnych trudności w ustaleniu optymalnych parametrów pracy sieci GNG uzyskuje ona zwykle lepsze wyniki.

Na rysunku 4 przedstawiono typowe zachowanie obu sieci w analizie skupień<sup>3</sup>. Sieć SOM prawidłowo wskazała na 5 skupień i bezbłędnie rozpoznała 4 sferyczne skupienia. Popęłnia jednak błędy w końcach środkowego skupienia. Jest to związane z tym, że neurony, które odpowiadają za obiekty tam się znajdujące, leżą w strukturze sieci obok siebie, a obiekty w przestrzeni są od siebie odległe i należą do 3 różnych skupień. Sieć GNG równie łatwo rozpoznaje skupienia sferyczne. Potrafi w znacznym stopniu prawidłowo rozpoznać skupienie środkowe. Popęłnia błąd w jego górnej części. Zbyt duża liczba neuronów powoduje, że małe i lokalne zmniejsz-

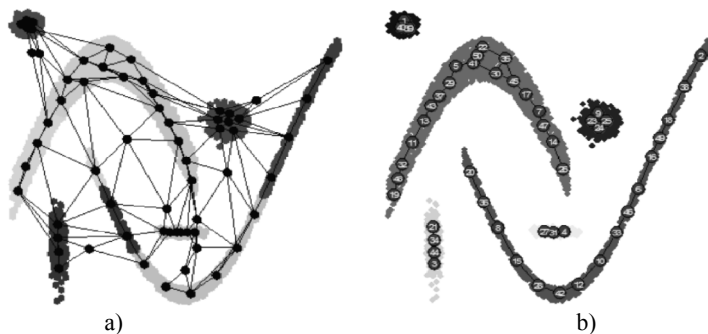
---

<sup>3</sup> Prezentowane sieci służą ilustracji ich ogólnych własności omawianych w tekście. Analizowane zbiory nie mają charakteru benchmarku. Sieć SOM o heksagonalnej strukturze połączeń, 8×8 neuronów, gaussowska funkcja sąsiedztwa, 2000 iteracji uczących, sieć GNG o maksymalnej liczbie neuronów równej 50, nowy neuron wstawiany co 400 iteracji, maksymalny wiek połączenia to 390 iteracji, maksymalna liczba iteracji wynosi 20 000.

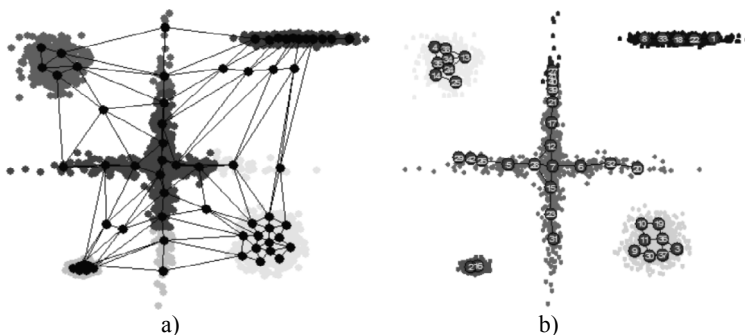
szenie gęstości obiektów w tym skupieniu zostało zinterpretowane jako punkt dzielący skupienie na 2 części. Formalna ocena obu grupowań znajduje się w tab. 1.



Rys. 2. Sieci samouczące się: a) SOM o optymalnej liczbie neuronów, b) SOM o nadmiarowej liczbie neuronów, c) GNG o właściwej liczbie neuronów  
Źródło: opracowanie własne.



Rys. 3. Sieci samouczące się: a) SOM, b) GNG  
Źródło: opracowanie własne.



Rys. 4. Sieci samouczące się: a) SOM, b) GNG  
Źródło: opracowanie własne.

Tabela 1. Wskaźniki oceny podobieństwa wyników grupowań dla sieci GNG i SOM

Sieć /wskaźnik	Jaccard	Rand	Rand korygowany	Fowkles Mallows
GNG	0,9081	0,9807	0,9398	0,9526
SOM	0,8543	0,9682	0,9015	0,9225

Źródło: opracowanie własne.

Można uznać, że obie sieci poradziły sobie dość dobrze z tym trudnym problemem, niemniej jednak sieć GNG uzyskuje lepsze wyniki.

## 5. Wnioski

Ogólne wnioski dotyczące porównania obu algorytmów można zapisać w postaci tab. 2. Zakładając, że potrafimy ustalić przynajmniej suboptymalne wartości parametrów samoczenia się obu sieci, okazuje się, że sieć GNG jest zawsze szybsza, nigdy nie powstają martwe neurony, nigdy się nie skręca i łatwo identyfikuje skupienia o dowolnej konfiguracji w przestrzeni, o ile są one separowalne. Sieć GNG będzie popełniać niewielkie błędy na krawędziach skupień, gdy obiekty trudno jednoznacznie zaliczyć do skupień (efekt rozmycia).

Tabela 2. Porównanie własności sieci SOM i GNG

Własności	Sieć SOM	Sieć GNG
Struktura sieci	stała	zmienna
Liczba krytycznych parametrów sterujących	4	4
Jakość grupowania przy optymalnych parametrach	wysoka	znakomita
Szybkość uczenia	przeciętna	szybka
Skalowalność algorytmu	kwadratowa	liniowa
Wymagania pojemności pamięci	duża	mała
Dowolna konfiguracja skupień	tak	tak
Martwe neurony	tak	nie
Skreślenie się sieci	tak	nie
Rozmycie skupień	dopuszczalne (małe błędy)	dopuszczalne (możliwe połączenie sąsiednich skupień)
Skupienia nieseparowalne	dopuszczalne (małe błędy)	niedopuszczalne (połączenie wszystkich nieseparowalnych skupień)
Wizualizacja danych wielowymiarowych	tak	nie
Wizualizacja sieci	tak	nie
Narzędzie eksploracji danych	tak	nie

Źródło: opracowanie własne.

Liczba subiektywnie ustalanych parametrów kontrolujących pracę obu algorytmów jest jednakowa. Sieć SOM okaże się skuteczniejsza w wyróżnianiu skupień, gdy będą one silnie rozmyte lub nieseparowalne. Sieć SOM pozwoli także na pogłębioną eksplorację i wizualizację danych i samej sieci, co przy zastosowaniu

sieci GNG nie jest możliwe. Wraz ze wzrostem rozmiarów sieci czas obliczeń i pojemność pamięci komputerów rośnie w przypadku sieci SOM w kwadracie liczby neuronów, a w przypadku sieci GNG – liniowo. W analizie dużych zbiorów danych może to mieć decydujące znaczenie.

Sieć SOM ma szersze zastosowanie w analizie danych niż sieć GNG i jest narzędziem eksploracji danych, w tym jest narzędziem analizy skupień. Sieć GNG jest wyspecjalizowanym narzędziem analizy skupień i w tym zakresie w większości przypadków jest skuteczniejsza niż sieć SOM.

## Literatura

- Berthold M., Hand D.J. (1999), *Intelligent data analysis*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Deboeck G., Kohonen T. (1998), *Visual explorations in finance with self-organizing maps*, Springer-Verlag, London.
- Delgado A. (2000), *Control of nonlinear systems using a self-organizing neural network*, „Neural Computing&Applications”, Springer-Verlag, 9, s. 113.
- Deventer J.S.J., Moolman D.W., Aldrich C. (1996), *Visualisation of plant disturbances using self-organizing maps*, „Computers Chemical Engineering”, Pergamon, Elsevier Science, 20, s. 1097-1100.
- Duch W., Korbicz J., Rutkowski L., Tadeusiewicz R. (2000), *Sieci neuronowe*, PAN, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa.
- Fausett L. (1994), *Fundamentals of neural networks, architectures, algorithms, and applications*, Florida Institute of Technology, Prentice Hall International, Inc.
- Fessant F., Midenet S. (2002), *Self-organizing map for data imputation and correction in surveys*, „Neural Computing&Applications”, Springer-Verlag, 10, s. 304.
- Flanagan J.A. (1996), *Self-organization in Kohonen's SOM*, „Neural Networks”, Pergamon, Elsevier Science, 9, 7, s. 1185.
- Fort J.C., Pagès G. (1996), *About the Kohonen algorithm: strong or weak self-organization?*, „Neural Networks”, Pergamon, Elsevier Science, 9, 5, s. 773.
- Fritzke B. (1994), *Growing cell structures – a self-organizing network for unsupervised and supervised learning*, „Neural Networks”, vol. 7, no 9, s. 1441-1460.
- Holyński M. (1989), *Sztuczna inteligencja*, Wiedza Powszechna, Warszawa.
- Jirayusakul A., Auwatanamongkol S. (2007), *A supervised growing neural gas algorithm for cluster analysis*, „International Journal of Hybrid Intelligent Systems”, 4, s.129-141.
- Kohonen T. (1997), *Self-organizing maps*, Springer Series in Information Sciences, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Masters T. (1996), *Sieci neuronowe w praktyce*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa.
- Migdał-Najman K., Najman K. (2008), *Applying the Kohonen self-organizing map networks to selecting variables*, Data Analysis, Machine Learning and Applications, Studies in Classification, Data Analysis and Knowledge Organization, C. Presisach, H. Burkhardt, L. Schmidt-Thieme, R. Decker, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, s. 45-54.
- Migdał-Najman K., Najman K. (2004), *Diagnozowanie kondycji finansowej spółek notowanych na GPW w Warszawie w oparciu o sieć SOM*, Zeszyty Naukowe nr 389, Rynek kapitałowy. Skuteczne inwestowanie, cz. I, Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Szczecińskiego, Szczecin, s. 507-519.
- Papadimitriou S., Mavroudi S., Vladutu L., Pavlides G., Bezerianos A. (2002), *The supervised network self-organizing map for classification of large data sets*, „Applied Intelligence”, Kluwer Academic Publishers, 16, s. 187.



- Tadeusiewicz R. (1998), *Elementarne wprowadzenie do techniki sieci neuronowych z przykładowymi programami*, Akademicka Oficyna Wydawnicza PLJ, Warszawa.
- Yin H. (2002), *Data visualization and manifold mapping using the ViSOM*, „Neural Network”, Pergamon, 15, s. 1005.

## **A COMPARISON OF QUALITY UNSUPERVISED NEURAL NETWORKS SELF ORGANIZING MAP AND GROWING NEURAL GAS IN CLUSTER ANALYSIS**

### **Summary**

The article discusses two methods of cluster analysis which were based on the unsupervised learning like Self Organizing Map (SOM) and Growing Neural Gas (GNG). The author presents basic features of both algorithms, in particular their advantages and disadvantages from the perspective of cluster analysis. The neural network SOM has possessed more applications in data analysis than GNG, it is a technique exploration data and the tool of cluster analysis. The GNG is a specialized tool of cluster analysis and is more effective than SOM in most cases.