

УДК 004.032.26

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТРЕХМЕРНЫХ КАРТ КОХОНЕНА С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ

Шадрин А.В., научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт космических исследований и распространения радиоволн» Дальневосточного отделения Российской академии наук (ИКИР ДВО РАН), e-mail: SugerMas@yandex.ru.

VISUALIZATION OF THREE-DIMENSIONAL KOHONEN SELF-ORGANIZING MAPS WITH HEXAGONAL GRID

Shadrin A.V., scientific officer of laboratory of acoustical research, Institute of Cosmophysical Research and Radio Wave Propagation Far Eastern Branch of Russian Academy of Sciences, e-mail: SugerMas@yandex.ru.

Methods for visualization of Kohonen self-organizing maps, which are widely applied for multidimensional data analysis and visualization, are considered. A technique for visualization of three-dimensional maps with hexagonal grids is suggested. It is based on the estimation of unified distance matrix (U-matrix). In comparison to the present methods for three-dimensional map presentation, the suggested technique for visualization analyses the data applying architectures with rectangular and hexagonal grids.

Key words: visualization, hexagonal grid, two-dimensional Kohonen self-organizing maps, clusterization, multidimensional data, rectangular grid, three-dimensional Kohonen self-organizing maps, unified distance matrix, U-arrays, U-matrix.

Ключевые слова: визуализация, гексагональная решетка, двумерные самоорганизующиеся карты Кохонена, кластеризация, многомерные данные, прямоугольная решетка, трехмерные самоорганизующиеся карты Кохонена, унифицированная матрица расстояний, U-arrays, U-matrix.

Введение

Одним из популярных классов искусственных нейронных сетей, реализующих принцип обучения без учителя, являются самоорганизующиеся карты Кохонена. Сети данного класса с успехом используются при решении разнообразных прикладных задач. Они приняты как одно из важных средств анализа в целом ряде областей науки и техники, в числе которых статистика, обработка сигналов, теория управления, финансовый анализ, экспериментальная физика, химия, медицина. С помощью самоорганизующихся карт эффективно решаются такие традиционно трудные задачи, как визуализация многомерных данных, выделение признаков и классификация для визуальных и акустических образов, адаптивное управление роботами и т.п. [1].

Искусственная сеть этого типа состоит из нейронов, которые находятся в узлах прямоугольной или гексагональной решетки. Нейроны в ходе конкурентного процесса избирательно настраиваются на различные входные данные. Положения настроенных нейронов упорядочиваются по отношению друг к другу так, что на решетке создается значимая система координат. Благодаря этому формируется топографическая карта входных данных, в которой пространственное местоположение нейронов решетки является индикатором встроенных статистических признаков, содержащихся во входных примерах [2]. Полученная карта позволяет отобразить наличие или отсутствие кластерной структуры в данных, количество

Рассмотрены способы визуализации самоорганизующихся карт Кохонена, которые нашли широкое применение в анализе и визуализации многомерных данных. Предложен способ визуализации трехмерных карт с гексагональной решеткой, который основан на вычислении унифицированной матрицы расстояний (U-matrix). В отличие от существующих методик отображения трехмерных карт, предложенный метод визуализации позволяет анализировать данные, используя архитектуры с прямоугольными и гексагональными решетками.

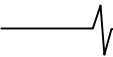
кластеров, законы совместного распределения признаков, зависимости между переменными.

Для задач визуализации многомерных данных широкое распространение получили двумерные сети обоих типов решеток. Трехмерные прямоугольные карты редко применяются из-за сложностей использования. Для трехмерных гексагональных карт методика визуализации не разработана. В данной работе описываются существующие алгоритмы визуализации сетей Кохонена, а так же предлагается алгоритм визуализации трехмерных карт с гексагональной решеткой, позволяющий упростить восприятие и работу с прямоугольными трехмерными картами.

Расчет и визуализация U-matrix

Основным инструментом для визуализации самоорганизующихся карт является унифицированная матрица расстояний. Матрица отображает расстояние между нейронами, где наиболее темная окраска соответствует большему расстоянию. Светлые области позволяют объединить нейроны в кластеры, а темные позволяют провести границы между ними [3, 4].

Согласно работам [3, 5], унифицированная матрица для двумерных карт (U-matrix) имеет размерность $(2n-1) \times (2m-1)$, где n – число нейронов по оси x , m – число



нейронов по оси y . U-matrix включает в себя следующие расстояния между нейронами: $dx(x,y)$, $dy(x,y)$ и $dxy(x,y)$. В зависимости от типа решетки, вычисление расстояния $dxy(x,y)$ различается. На рис. 1 показаны прямоугольная и гексагональная решетки размерностью 2×2 , на сторонах которых указаны расстояния, используемые при вычислении унифицированной матрицы. Исходя из строения решеток, расстояния dx и dy для обоих типов решеток вычисляются следующим образом:

$$dx(x,y) = \|b_{x,y} - b_{x+1,y}\| = \sqrt{\sum_i (w_{i,x,y} - w_{i,x+1,y})^2};$$

$$dy(x,y) = \|b_{x,y} - b_{x,y+1}\| = \sqrt{\sum_i (w_{i,x,y} - w_{i,x,y+1})^2};$$

где, $b_{x,y}$ – позиция нейрона в координате x, y , $w_{i,x,y}$ – i -й элемент весового коэффициента нейрона $b_{x,y}$, $\|\bullet\|$ – Евклидово расстояние.

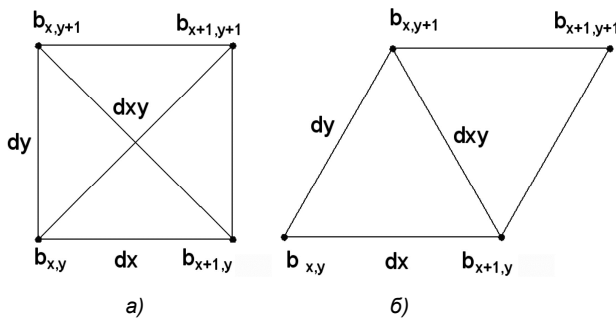


Рис. 1. Особенности вычисления U-matrix двумерных карт:
а) для прямоугольной решетки
б) для гексагональной решетки

Для прямоугольной решетки расстояние $dxy(x,y)$ вычисляется по следующей формуле:

$$dxy(x,y) = \frac{1}{2} \left(\frac{\|b_{x,y} - b_{x+1,y+1}\|}{\sqrt{2}} + \frac{\|b_{x,y+1} - b_{x+1,y}\|}{\sqrt{2}} \right) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[\sqrt{\sum_i (w_{i,x,y} - w_{i,x+1,y+1})^2} + \sqrt{\sum_i (w_{i,x,y+1} - w_{i,x+1,y})^2} \right];$$

для гексагональной:

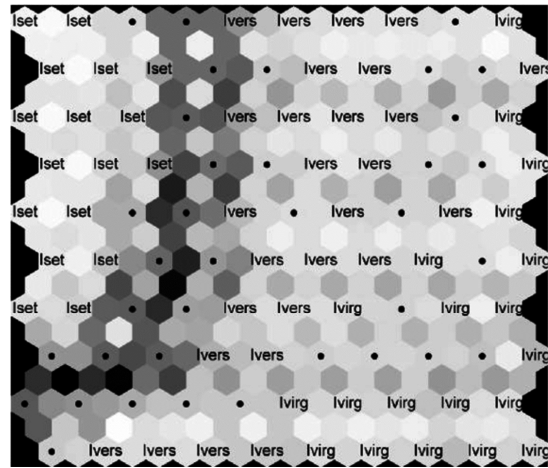
$$dxy(x,y) = \|b_{x,y+1} - b_{x+1,y}\| = \sqrt{\sum_i (w_{i,x,y+1} - w_{i,x+1,y})^2};$$

Элементы унифицированной матрицы в узлах решетки карты вычисляются с помощью усреднения (или вычисления медианы) расстояний, окружающих данный узел.

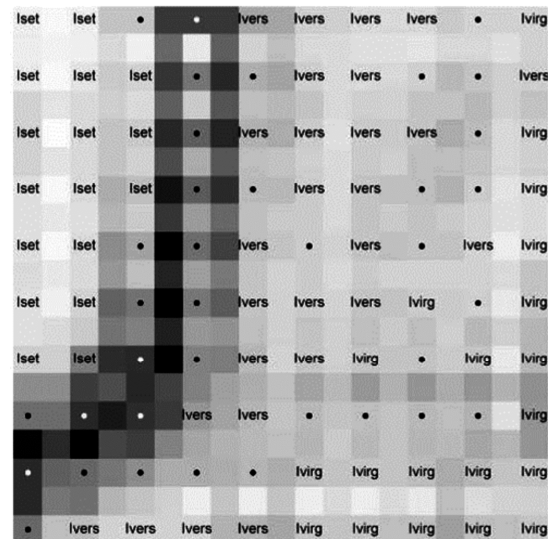
Отображение унифицированной матрицы имеет вид 3-х мерного изображения, на плоскости третья координата представляют цветом. Для гексагональной решетки каждый элемент матрицы принято отображать шестиугольником, в прямоугольной – прямоугольником.

На рис. 2 [6] изображены унифицированные матрицы с двумерной гексагональной и прямоугольной решетками. Точками и метками показаны узлы карты. На карты спроецированы данные, известные под названием «Iris data set», в которых содержится информация о трех классах цветов (Iris setosa, Iris versicolor и Iris virginica). По раскраске карты можно сделать вывод о

том, что класс «Iris setosa» хорошо пространственно отделен от двух других классов.



а)



б)

Рис. 2. U-matrix с маркировкой: а) гексагональная решетка; б) прямоугольная решетка

Расчет и визуализация U-array для карт с прямоугольной решеткой

Рассмотрим самоорганизующиеся карты с трехмерной решеткой. Обычно для визуализации данных используют двумерные карты. Но, как правило, при отображении данных высокой размерности в пространство меньшего размера происходит потеря топологических отношений, и часто эта информация может быть весьма полезной [5], поэтому визуализация трехмерных карт Кохонена заслуживает внимания.

U-аггау является расширением U-matrix для трехмерных карт [5]. Этот массив будет иметь размерность $(2n-1) \times (2m-1) \times (2p-1)$, где p -число нейронов по оси z . U-аггау включает в себя дополнительные дистанции: $dz(x,y,z)$, $dxz(x,y,z)$, $dyz(x,y,z)$ и $dxyz(x,y,z)$. Расстояние $dz(x,y,z)$ рассчитывается аналогично расстояниям $dx(x,y)$ и $dy(x,y)$. Расстояния $dxz(x,y,z)$ и $dyz(x,y,z)$ рассчитываются таким же способом, как и расстояние $dxy(x,y)$. Расстояние $dxyz(x,y,z)$ предлагается рассчитывать по следующей формуле:

$$\begin{aligned}
 dxyz(x, y, z) &= \frac{1}{4} \left(\frac{\|b_{x,y,z} - b_{x+1,y+1,z+1}\|}{\sqrt{3}} + \right. \\
 &+ \frac{\|b_{x+1,y,z} - b_{x,y+1,z+1}\|}{\sqrt{3}} + \frac{\|b_{x+1,y+1,z} - b_{x,y,z+1}\|}{\sqrt{3}} + \\
 &+ \left. \frac{\|b_{x,y+1,z} - b_{x+1,y,z+1}\|}{\sqrt{3}} \right) = \\
 &= \frac{1}{4\sqrt{3}} \left[\sqrt{\sum_i (w_{i_{x,y,z}} - w_{i_{x+1,y+1,z+1}})^2} + \right. \\
 &+ \sqrt{\sum_i (w_{i_{x+1,y,z}} - w_{i_{x,y+1,z+1}})^2} + \\
 &+ \sqrt{\sum_i (w_{i_{x+1,y+1,z}} - w_{i_{x,y,z+1}})^2} + \\
 &+ \left. \sqrt{\sum_i (w_{i_{x,y+1,z}} - w_{i_{x+1,y,z+1}})^2} \right].
 \end{aligned}$$

На рис. 3 показана трехмерная прямоугольная карта размерностью 2x2x2 с указанными расстояниями, которые используются при вычислении U-аггау.

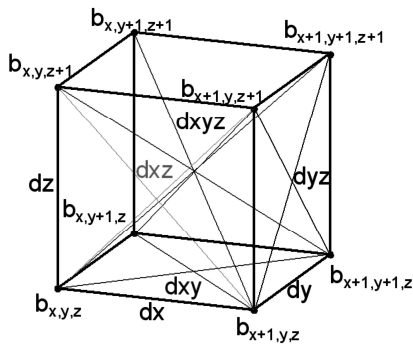


Рис 3. Особенности вычисления U-аггау для прямоугольных решеток

U-аггау самоорганизующейся карты с прямоугольной решеткой состоит из упорядоченного набора данных в виде куба. Благодаря этому массив расстояний можно представить в пространстве в виде набора кубов, которые окрашены соответственно расстоянию. Для примера, спроецируем синтезированные данные, которые имеют форму двух переплетенных трехмерных колец. Одно из колец проходит в направлении *xy*, а другое проходит в направлении *xz*. Данные показаны на рис. 4.

На рис. 5 [5] изображен U-аггау самоорганизующейся карты размерностью 8x8x8, в котором выделено два кластера. На верхней части рисунка изображено объемное трехмерное изображение унифицированной матрицы, где белым цветом изображены кластеры, а черным – граница между ними. В нижней части рисунка показано 15 срезов матрицы вдоль оси Z. На срезах снизу вверх отображено изменение положения кластеров и их границы в пространстве. Как видно из рисунка, имеющиеся кластеры имеют сложную объемную форму, нелегкую к восприятию. В сравнение с двумерными картами, визуальный анализ трудоемок и сложен для выявления внутренних особенностей. По этой причине необходимо прибегать к автоматическим средствам кластеризации карты.

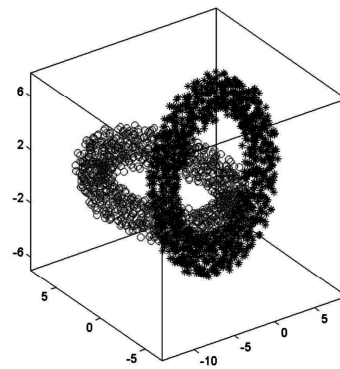


Рис. 4. Синтезированные данные

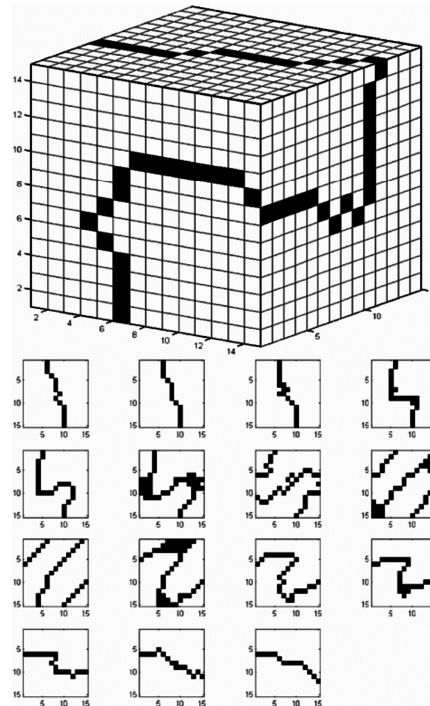


Рис. 5. Пример визуализации трехмерной карты с прямоугольной решеткой

Расчет и визуализация U-аггау для карт с гексагональной решеткой

На сегодняшний день, трехмерные карты с гексагональной решеткой не получили применения. Это связано с более сложной структурой трехмерной гексагональной решетки, у которой вычисление U-аггау будет значительно отличаться. Для визуализации гексагональной решетки в пространстве потребуется сложная объемная геометрическая фигура, которая еще сильнее затруднит визуальное восприятие самоорганизующейся карты. По этим причинам методики визуализации такого типа карт нет. Для решения этих проблем автор предлагает следующую методику визуализации трехмерных гексагональных решеток.

Покажем особенности вычисления U-аггау. Для этого воспользуемся гексагональной решеткой размерностью 2x3x2, изображенной на рис. 6.

Как видно из рисунка, решетка не только нерегулярна в пространстве, но и имеет периодические изменения в строении. Вычисление дистанций для унифицированной матрицы можно представить в виде системы формул.

Для наилучшего понимания разобьем систему на части. Первая часть отвечает за вычисление дистанций между нейронами, которые находятся на одной позиции по оси z . Формулы представленной ниже будет достаточно для вычисления дистанций между нейронами для двумерных гексагональных карт.

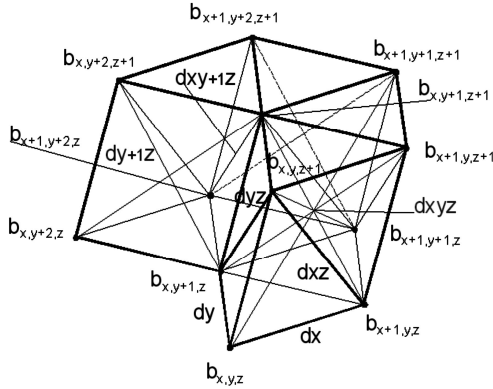


Рис. 6. Особенности вычисления U -array для гексагональных решеток

$$U_{x,y,z} = \begin{cases} U_{2i,2j-1,2k-1} = \|b_{i,j,k} - b_{i+1,j,k}\|; \\ \text{при } i < n \\ U_{2i-1,2j,2k-1} = \|b_{i,j,k} - b_{i,j+1,k}\|; \\ \text{при } j < m \\ U_{2i,2j,2k-1} = \|b_{i,j,k} - b_{i+1,j+1,k}\|; \\ \text{при } i < n, j < m, 2j < 2m-1, j \in 2N \\ U_{2i-2,2j,2k-1} = \|b_{i,j,k} - b_{i-1,j+1,k}\|; \end{cases}$$

где $i \in [1, n], j \in [1, m], k \in [1, p]$.

Эта формула позволяет вычислить такие дистанции $dx, dy, dxz, dyz, dxz+1z, dyz+1z$, показанные на рис. 6. Дистанции между нейронами $dxz, dxz+1z, dyz, dyz+1z$, указанные на рис. 6, позволяет рассчитать следующая формула:

$$U_{x,y,z} = \begin{cases} U_{2i-1,2j-1,2k} = \|b_{i,j,k} - b_{i,j,k+1}\|; \\ \text{при } k < p, 2i-1 \in 2N-1, 2j-1 \in 2N-1 \\ U_{2i-2,2j-1,2k} = \|b_{i,j,k} - b_{i-1,j,k+1}\|; \\ \text{при } k < p, k \in 2N-1 \\ U_{2i,2j-1,2k} = \|b_{i,j,k} - b_{i+1,j,k+1}\|; \\ \text{при } i < n, k < p, k \in 2N, 2j-1 \in 2N-1 \\ U_{2i-1,2j,2k-2} = \|b_{i,j,k} - b_{i,j+1,k-1}\|; \\ \text{при } k > 1, k < p, j < m, k \in 2N, j \in 2N-1 \\ U_{2i-1,2j,2k} = \|b_{i,j,k} - b_{i,j+1,k+1}\|; \\ \text{при } k > 1, k < p, j < m, k \in 2N, j \in 2N-1 \\ U_{2i,2j,2k} = \|b_{i,j,k} - b_{i+1,j+1,k+1}\|; \\ \text{при } j < m, 2k < 2p-1, 2i < 2n-1, j \in 2N, k \in 2N \\ U_{2i,2j,2k-2} = \|b_{i,j,k} - b_{i+1,j+1,k-1}\|; \\ \text{при } j < m, 2k < 2p-1, 2i < 2n-1, j \in 2N, k \in 2N \end{cases}$$

где $i \in [1, n], j \in [1, m], k \in [1, p]$, дистанция dxz вычисляется по следующей формуле:

$$U_{x,y,z} = \begin{cases} U_{2i,2j,2k} = \frac{1}{4} \left(\frac{\|b_{i,j,k} - b_{i+1,j+1,k+1}\|}{\sqrt{3}} + \frac{\|b_{i,j,k+1} - b_{i+1,j+1,k}\|}{\sqrt{3}} + \frac{\|b_{i,j+1,k} - b_{i+1,j,k+1}\|}{\sqrt{3}} + \frac{\|b_{i,j+1,k+1} - b_{i+1,j,k}\|}{\sqrt{3}} \right) \\ \text{при } 2i < 2n-1, j < 2m-1, k < 2p-1, j \in 2N-1 \end{cases}$$

где $i \in [1, n], j \in [1, m], k \in [1, p]$

Расчет дистанции $dy+1z$ производится по ниже приведенной формуле:

$$U_{x,y,z} = \begin{cases} U_{2i-1,2j,2k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\|b_{i,j,k} - b_{i,j+1,k+1}\|}{\sqrt{2}} + \frac{\|b_{i,j+1,k} - b_{i,j,k+1}\|}{\sqrt{2}} \right) \\ \text{при } j < m, 2k < 2p-1, j \in 2N \end{cases}$$

где $i \in [1, n], j \in [1, m], k \in [1, p]$

Вычисление элементов унифицированного массива, совпадающих с узлами решетки, вычисляется методом усреднения или вычисления медианы соседних дистанций.

Визуализировать унифицированный массив для трехмерной гексагональной решетки, используя объемные фигуры, как при отображении прямоугольной решетки, достаточно сложно. Решением этой задачи может быть следующий способ отображения U -array.

1. Создается регулярная сеть в трехмерном пространстве, расположение которой совпадает с пространственным расположением унифицированной матрицы. Размерность регулярной сети должна превышать размерность матрицы. Отметим, что для карт Кохонена с прямоугольной решеткой унифицированная матрица изначально является регулярной, поэтому создание новой сетки необходимо только для более «гладкого» отображения.

2. Используя алгоритм взвешивания обратно расстоянию (inverse distance weighted), интерполировать нерегулярные данные унифицированного массива в созданную регулярную сеть. Интерполяция происходит по следующим формулам [7]:

$$u(x) = \frac{\sum_{k=0}^T \omega_k(x) u_k}{\sum_{k=0}^T \omega_k(x)}; \quad \omega_k(x) = \frac{1}{d(x, x_k)^p}.$$

где $u(x)$ – интерполированные значения для точек x , x – интерполированные точки, x_k – исходные точки данных, $d(x, x_k)$ – функция расстояния между точками x и x_k , T – общее количество точек, p – положительное реальное число, задается опционально (при $0 < p < 1$ – $u(x)$ имеет сглаженные пики над интерполируемыми точками x_k , при $p > 1$ пики становятся острее). Суще-

ствуют и другие методы интерполяции, такие как линейный алгоритм, метод Крайкинга и т.п., которые можно использовать при расчетах.

3. Интерполированная матрица отображается в виде сечений и изоповерхностей трехмерных объемных данных.

Полученное отображение карты позволяет детально изучать унифицированный массив, а проведенные в пространстве границы кластеров с использованием изоповерхностей, наглядно рассматривать их распределение.

На рис. 7 показан пример отображения унифицированного массива карты размерностью $3 \times 3 \times 3$ для данных, имеющих форму двух переплетенных трехмерных колец (рис. 4). Точками показаны ее элементы. Изоповерхности отображают области, в которые попадают нейроны, близкие друг к другу в исходном пространстве. Разрезы по осям X, Y, Z отображают содержимое матрицы.

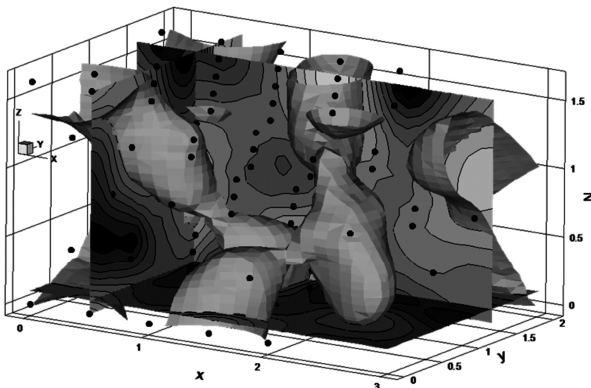


Рис. 7. Пример U-array

На рис. 8 изображены два кластера, образованные изоповерхностями, для гексагональной карты Кохонена размерностью $3 \times 3 \times 3$, в которую спроецированы данные, показанные на рис. 4. Точками отображены нейроны карты, попадающие каждый в свой кластер, изоповерхностями показаны области кластеров в пространстве.

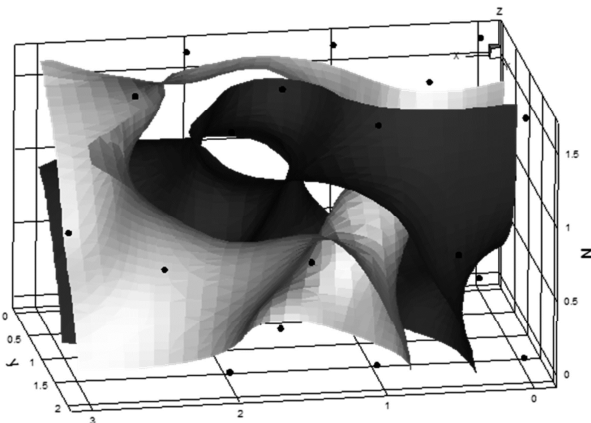


Рис. 8. Пример отображения кластеров трехмерной карты

Для больших размерностей трехмерных карт Кохонена ручная кластеризация – рутинное и сложное дело, поэтому предлагается разбивать карту на кластеры автоматически на основе анализа унифицированной матрицы. При автоматическом анализе необходимо определиться с порогом, значение которого можно экспериментально подобрать в

зависимости от желаемого числа кластеров. Затем анализируются связанные друг с другом нейроны, расстояния между которыми содержатся в унифицированной матрице. Если расстояние между ними превышает определенный порог, то нейроны попадают в разные кластеры, в противном случае – в один.

К сожалению, разбиение по такому алгоритму не всегда дает равномерное распределение на кластеры. Для решения этой проблемы существует два подхода в кластеризации данных: иерархический и разделительный. Первый позволяет построить иерархическое кластерное дерево. Второй дает возможность разделить данные на определенное число кластеров, минимизируя определенные критерии или функции ошибок. Более подробно с алгоритмами этих подходов можно ознакомиться в работе [8].

Стоит отметить, что такой способ визуализации позволяет визуализировать не только U-array, но и компонентные составляющие карты. Часто эти составляющие называют картой входов. Для двумерной карты компонентные составляющие называют component plane [9].

Заключение

Таким образом, автором предложена методика, которая дает возможность использовать трехмерные гексагональные карты Кохонена для визуализации многомерных данных. Этот метод расширяет инструментарий исследователя, позволяя наглядно и просто визуализировать многомерные данные в пространстве трехмерных карт Кохонена с прямоугольной и гексагональной архитектурой.

Литература

1. Kohonen, Teuvo Self-organizing maps 3.ed. - Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Singapore; Tokyo: Springer, 2001.
2. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс, 2-е издание. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006
3. Ultsch A. and Siemon H.P. Kohonen's self organizing feature maps for exploratory data analysis. In Proc. INNC'90, Int. Neural Network Conf., pages 305-308, Dordrecht, Netherlands, 1990. Kluwer.
4. Остроухов И., Панфилов П. Нейросети: карты Кохонена. www.tora-centre.ru/library/ns/spekulant03.htm
5. COSTA, José Alfredo Ferreira e ANDRADE NETTO, Márcio Luiz de. Segmentação de mapas auto-organizáveis com espaço de saída 3-D. Sba Controle & Automação. 2007, vol.18, n.2, pp. 150-162.
6. Зиновьев А.Ю. Визуализация многомерных данных. – Красноярск: Изд-во КГТУ, 2000. – 168 с.
7. www.en.wikipedia.org/wiki/inverse_distance_weighting
8. Vesanto, J. and Alhoniemi, E. (2000). Clustering of the Self-Organizing Map, IEEE Trans. on Neural Networks, v. 11, (3), pp. 586-602.
9. Дебок Г., Кохонен Т., Анализ финансовых данных с помощью самоорганизующихся карт/ пер. с англ. – М.: Издательский дом «Альпина», 2001, 317 стр.