

개선된 군집화 단계의 NofM 알고리즘을 이용한 훈련된 신경망으로부터의 규칙추출

이한울*, 나종희**, 김문현***

*성균관대학교 인지과학협동과정

**광주대학교 e-비즈니스학부

***성균관대학교 전기전자컴퓨터공학부

e-mail : {hanyul, jhra, mhkim}@ece.skku.ac.kr

Rule extraction from trained neural network using NofM algorithm with improved clustering step

Han-Yul Lee*, Jong-Hei Ra**, Moon-Hyun Kim***

*Interdisciplinary Program of Cognitive Science,
Sungkyunkwan University

**Division of E-Business, Kwangju University

***School of Electrical & Computer Engineering,
Sungkyunkwan University

요약

신경망이 만들어내는 출력에 대한 정보는 수치적으로 분산되어 신경망에 저장되므로, 인간이 직접 해석하기가 힘들다. 본 논문에서는 LRE(link rule extraction)기법인 NofM 알고리즘의 6단계 중에서 초기 단계인 가중치 군집화 단계를 개선하여 추출되는 규칙들의 전제부에 들어가는 규칙 조건들의 수를 조절함으로써, 추출된 규칙이 입력 특성에 대한 정보를 과잉 일반화하거나, 과잉 구체화하는 것을 피할 수 있음을 실험을 통해 보였다. 일반적으로 NofM 알고리즘에서 가중치들을 군집화할 때는 Join 알고리즘을 사용하는데, 본 논문에서는 Join 알고리즘의 Join condition을 0.05부터 0.25까지 0.05씩 점진적으로 확대하여 클러스터링을 하여줌으로써 신경망의 출력에 중요한 역할을 하는 가중치들을 효과적으로 군집화함을 보였다.

1. 서론

주어진 데이터로부터 마이닝 작업을 통해 얻을 수 있는 지식에는 연관규칙(association rules), 분류규칙(classification rules), 일반화 및 요약규칙(generalization & summarization rules), 클러스터링(clustering), 유사성탐색(similarity search), 순서패턴(sequential patterns) 등이 있다. 이런 지식 추출 작업에서 주로 사용되는 기법에는 신경망(artificial neural networks), 결정트리(decision tree) 등과 같은 기법들이 많이 사용되는데, 이중에서 도 사람의 신경세포에서 영감을 얻어 만들어진 신경망은 패턴

인식 및 기계학습 등의 분야에서 폭넓게 사용되면서, 많은 효과를 나타내고 있다[1][4].

신경망은 병렬적으로 상호작용하는 여러 개의 계산 유닛으로 구성되어 있으며, 각 계산 유닛은 가중치합(weighted sum)과 같은 단순한 계산만을 수행한다. 신경망의 계산능력은 다량의 계산 유닛들이 병렬적으로 계산을 수행함으로써 얻어진다[2].

신경망의 장점이면서 동시에 취약점 중의 한가지는 입력과 출력간의 사상하는 방식이 분산된 사상(distributed mapping)이라는 것이다. 문제영역으로부터 학습한 데이터로부터 생성된 지식은 수백 개의 가중치 파라미터, 활성화 함수 그리고 바이어스에

분산되어 저장된다. 이 모든 정보는 실수(real number)로 저장되는데, 이는 사람이 직접해석하기에는 거의 불가능하다. 이런 이유로 인해서 신경망으로부터의 규칙 추출에 대한 연구가 1980년대 후반부터 시작되었다. 이러한 연구는 신경망이 어떻게 왜 특정한 분류 결정(classification decision)을 만들어 내는지를 설명해주는 능력을 제공하는 것이 그 목적이다[2]. 본 연구에서는 대표적인 규칙추출 알고리즘인 NofM 알고리즘의 6단계 중에서 초기 단계인 가중치 균집화 단계를 개선하여 추출되는 규칙들의 전체부에 들어가는 규칙 조건들의 수를 조절함으로써, 입력 특성에 대한 정보를 과잉 일반화하거나, 과잉 구체화하는 것을 피할 수 있음을 보이는 것이 그 목적이다. 일반적으로 NofM 알고리즘에서 가중치들을 클러스터링할 때는 Join 알고리즘을 사용하는데, Join 알고리즘의 Join condition을 0.05부터 0.25까지 0.05씩 점진적으로 확대하여 클러스터링을 하여줌으로써 신경망의 출력에 중요한 역할을 하는 가중치들을 효과적으로 균집화할 수 있게 된다.

2. 규칙추출 알고리즘의 종류

I. Taha와 J. Ghosh는 훈련된 신경망으로부터 기초적인 지식을 추출해 내는 기존의 기법을 다음과 같이 분류하였다[1].

2.1 Link Rule Extraction Techniques(LRE)

신경망의 은닉 노드 또는 출력 노드를 활성화시키는 가중치 링크를 먼저 탐색하고, 그리고 나서 이들 가중치 링크의 조합들을 심볼릭한 규칙을 생성하는데 사용하는 기법이다. LRE기법은 다른 말로 “분해식 방법(decompositional methods)”이라고도 불린다. Feedforward 신경망에서 규칙을 추출하는 대표적인 알고리즘으로는 KT, Subset 그리고 Subset을 보완한 MofN 알고리즘 등이 있다. CEBP(Constrained Error Back-propagation) MLP, RBF(radial basis function) 네트워크 같은 특수한 신경망에서는 RuleNet 알고리즘이나 RULEX 알고리즘이 사용되는데, 이 알고리즘도 LRE 기법에 포함된다.

2.2 Black-Box Rule Extraction Techniques(BRE)

이 규칙 추출 방식은 입력과 출력간의 사상

(mapping)을 검사함으로써 전방향 신경망에서 규칙을 추출하는 방법이다. 이 기법은 신경망의 구조 투입에 상관없이 규칙을 추출해 낸다. 이 기법은 다른 말로 “교사식 방법(pedagogical methods)”이라고도 불린다. 대표적인 알고리즘으로는 DEDEC, BRAINNE, Rule-extraction-as-learning, 등이 있다.

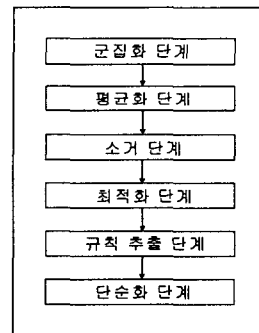
2.3 그 외의 방법들

LRE 방식과 BRE 방식 외에도 퍼지 논리 신경망(FLNN, fuzzy logic neural networks)에서 퍼지 집합 멤버십 함수(fuzzy sets membership function)를 정련하기 위해 퍼지 규칙 추출을 하는 방법과 또한 유한 상태 언어(finite state languages)나 결정 유한 상태 오토마타(deterministic finite state automata)를 표현하는데 효과적인 재귀 네트워크(recurrent networks)에서 문법 규칙들(grammar rules)을 추출하는 방법 등이 있다.

3. NofM 알고리즘

3.1 NofM 알고리즘의 구성

NofM 알고리즘[Towell & Shavlik 92]은 신경망의 가중치 링크를 탐색하여 그 링크들 중에서 노드에 중요한 역할 즉, 큰 가중치 값을 가지는 링크를 찾아 규칙을 생성하는 알고리즘이다. NofM 알고리즘은 [그림 1]과 같은 흐름을 갖는다[3].



[그림 1] NofM 알고리즘의 흐름도

NofM 알고리즘의 각 단계를 살펴보면 다음과 같다. NofM 알고리즘은 각 가중치 링크들의 등가그룹

을 필요로 하는데, 첫 번째 단계인 군집화 단계에서는 각 가중치 링크들을 클러스터링 작업을 통하여 등가그룹(equivalence class)로 만들어 주는 단계이다. 두 번째 단계인 평균화 단계에서는 앞선 단계에서 만들어진 각 그룹의 연결 가중치들을 평균값으로 만들어 주는 단계이다. 이 두 가지 단계를 거치게 되면, 네트워크의 가중치 링크들은 이후의 단계에서 필요로 하는 등가그룹으로 완성된다. 그 다음 세 번째 단계인 소거 단계는 규칙을 추출 생성해낼 때 필요 없는 그룹들을 소거하는 단계이다. 등가그룹을 형성한 뒤 소거할 그룹들은 일반적으로 연결가중치 값이 작고, 그 크기도 또한 작다. 네 번째 단계인 최적화 단계에서는 필요 없는 그룹을 제거하는 소거 작업이 끝난 후에, 뉴런마다 가지고 있는 바이어스 값을 최적화시키는 일을 한다. 바이어스 최적화를 실행하는 이유는 두 번째 단계인 평균화 작업과 세 번째 단계인 소거 작업을 통하면서 뉴런이 활성화되어야 하는 조건이 변동할 수도 있기 때문이다. 대개 바이어스 최적화 작업은 연결가중치들을 모두 고정시킨 상태에서 뉴런의 바이어스 값을 오류역전파(error backpropagation) 알고리즘을 이용하여 수행한다. 다섯 번째 단계인 규칙추출 단계는 앞의 단계를 통해서 완성된 네트워크를 명제적인 규칙으로 변환시키는 단계로서, 각 뉴런에 연결된 가중치 링크와 바이어스를 번역하여, 선행자들의 가중치 합이 바이어스보다 크면 그 규칙은 참이라는 명제 형태로 변환해 주는 작업이다. 이 단계의 작업에서 만들어지는 규칙들은 이미 가중치링크들이 등가그룹으로 만들어져 있고 또한 중요하지 않은 그룹들은 이미 제거되어 있기 때문에, 네트워크 학습이 끝난 직후의 네트워크에서 생성되는 규칙들보다 더욱 간략한 형태이다. 마지막으로, 여섯 번째 단순화 단계에서는 규칙들에서 가중치링크와 바이어스를 생략할 수 있는 것들이 존재하는지를 조사하는 단계이다. NofM 알고리즘은 이렇게 여섯 가지 단계를 통하여 명제적 규칙을 만들어 낸다[1][3].

3.2. Join 알고리즘의 개선

일반적으로 NofM 알고리즘에서 가중치 군집화를 위해 사용하는 Join 알고리즘이란, 각각의 노드에 대한 가중치 튜플을 가지고 이중 for문으로 구성된 nested loop를 이용하여, 가중치 쌍이 서로 한 클러스터에 속할 조건(join condition)에 부합될 때, 이를

하나의 클러스터로 만들어 주는 알고리즘이다. 이 알고리즘의 개괄적인 형식은 다음의[표 3.1]과 같다.

[표 3.1] 일반적인 Join 알고리즘 _____

```

for each Weight_i in Unit_k do begin
  for each Weight_j in Unit_k do begin
    test pair(Weight_i, Weight_k) to see if they satisfy
    the join condition
    if they do, add (Weight_i, Weight_k) to the result.
  end
end

```

Usually The join condition value is fixed value as 0.25

본 논문에서는 Join 알고리즘의 Join Condition을 0.05부터 0.25까지 0.05씩 점진적으로 확대하여 클러스터링을 하였다. 이렇게 하는 이유는 신경망의 출력에 중요한 역할을 하는 가중치들을 효과적으로 군집화할 수 있기 때문이다. [표 3.2]는 본 논문에서 사용된 개선된 Join 알고리즘의 의사 코드(pseudo code)를 나타낸다.

[표 3.2] 개선된 Join 알고리즘 _____

```

About Increasing Scope [0.05 0.10 0.15 0.20 0.25 0.25 0.25] :
for i = 1 to NUMBER_OF_WEIGHT
  for j = i to NUMBER_OF_WEIGHT
    if ( |ith_Weight - jth_Weight| < scope ) then {
      meanValue = mean of ith_weight and jth_Weight
      ith_Weight = meanValue
      jth_Weight = meanValue
    }
  }
  if ( |ith_Weight - 0| < scope ) then
    ith_Weight = 0
}

```

4. 실험 및 결과

본 실험은 펜티엄III-800 PC 상에서 Matlab 5.3 프로그램 언어를 사용하였다. 실험은 분류 신경망을 구현하여 훈련된 신경망으로부터 가중치 링크의 값

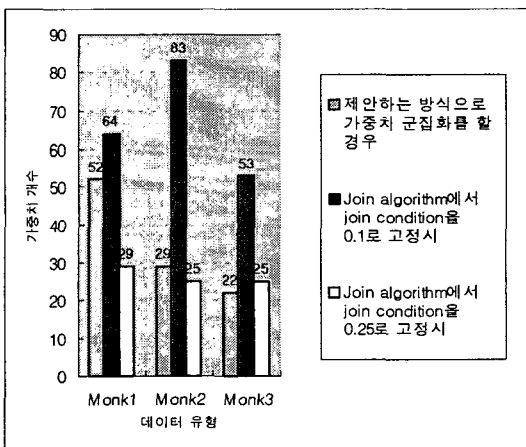
들을 찾아낸 후, 규칙추출 알고리즘을 적용하여 규칙을 생성하는 과정으로 구성된다.

실험에서 사용한 신경망의 토폴로지는 입력 유닛 17개, 은닉 유닛 8개, 출력 유닛 1개로 구성되어 오차역전파 방식으로 학습하는 전방향 MLP이다. 그리고, 실험에서 사용한 데이터는 S. Thrun이 제공한 승려 문제 데이터집합(monks problem dataset)으로서 이 데이터는 [표 4.1]과 같이 여섯 가지의 입력 속성을 가진 분류 과제 데이터이다.

[표 4.1] 승려문제 데이터의 특성과 특성 값

| 특성 | 특성 값 |
|--------------|-----------------------------|
| Head-shape | Round, Square, or Octagon |
| Body-shape | Round, Square, or Octagon |
| Is-smiling | Yes or No |
| Holding | Sword, Balloon, or Flag |
| Jacket-color | Red, Yellow, Green, or Blue |
| Has-tie | Yes or No |

제안한 알고리즘과 일반적으로 사용하는 Join Condition 값을 쓴 알고리즘을 비교한 결과를 [그림 4.1]로 표현하였다.



[그림4.1] Join Condition에 따른 최종 가중치 개수

제안한 군집화 알고리즘을 통해 얻어진 최종 가중치를 이용해 찾아진 규칙들은 모든 디폴트 규칙을 발

견하였을 뿐만 아니라, 본 논문에서 제안한 방식으로 NofM 알고리즘의 군집화 및 평준화 작업을 수행할 경우 신경망이 분류 작업을 할 때 중요한 역할을 하는 입력 특성에 관계된 가중치들을 최대한 찾아내면서도, 불필요한 가중치들을 제거하여 효과적인 NofM 규칙을 추출해 낼 수 있음을 실험을 통해 보였다.

5. 결론

본 논문에서는 훈련된 MLP 신경망으로부터 LRE 기법의 한 가지인 NofM 알고리즘을 이용한 규칙추출 성능을 향상시키기 위하여 NofM 알고리즘의 군집화 단계 및 평준화 단계에서 사용하는 Join 알고리즘에서 가중치 쌍이 서로 한 클러스터에 속할 조건(join condition)을 작은 값에서 큰 값으로 점진적으로 확대하였다. 이렇게 함으로써 NofM 알고리즘을 통해 생성되는 규칙의 전체부에 포함되는 전체들의 개수를 사용자가 표현되기를 원하는 만큼 선택할 수 있게 되고, 신경망이 분류 작업을 할 때 중요한 역할을 하는 입력 특성에 관계된 가중치들을 최대한 찾아내면서도, 불필요한 가중치들을 효과적으로 제거하여 생성되는 규칙들의 과잉 일반화나 과잉 구체화를 범하지 않도록 만들 수 있음을 실험을 통해 보였다. 향후 연구과제로는 데이터의 유형을 달리하여 실제 세계에서 얻어지는 대용량의 자료를 바탕으로 한 규칙추출 작업을 통하여 신경망을 이용한 데이터 마이닝과 관련된 연구가 필요하다.

참고문헌

[1] I. Taha and J. Ghosh, "Symbolic Interpretation of Artificial Neural Networks", Proceeding of ANNIE'96, pp. 448 - 463, 1999.
 [2] L. Fu "Neural Networks in Computer Intelligence, Chapter 14. Rule Generation from Neural Networks ", McGraw-Hill, INC., pp. 351 - 375, 1994.
 [3] R. Setiono, "Extracting M-of-N rules from trained neural networks", IEEE Transactions on Neural Networks, 2000, pp. 512 - 519, 2000.
 [4] A. A. Freitas and S. H. Lavington, "Mining very large databases with parallel processing", Kluwer Academic Publishers, pp. 19 - 28, 1999.