

Local behavior of updated node value functions in self-organizing maps with inner product learning

内積型学習自己組織化マップにおける 更新ノード値関数の局所的ふるまいについて

星野満博

秋田県立大学システム科学技術学部

Mitsuhiro Hoshino

Faculty of Systems Science and Technology,

Akita Prefectural University

1. 内積型反復学習をもつ自己組織化マップモデルと定式化

本報告は Kohonen 型アルゴリズムとして知られる自己組織化マップとそこで用いられる反復学習過程を数学的な視点で扱う。自己組織化マップ・アルゴリズムは、主にクラスタリング機能と次元削減機能を備え、統計手法としての応用が可能であり、音声・テキスト分析など、多岐にわたる適用例をもつ。また、組み合わせ最適化への応用も知られ、巡回セールスマン問題の解法等にも用いることが可能である。

自己組織化マップにおいて、ノードからノード値への写像として定義されるノード値関数の反復学習過程における数理解特性について考察する。特に、学習の過程において、ノード値関数が一定の状態特性を帯びようになる現象として、吸収特性に焦点をあてる。自己組織化マップにおける反復学習で用いられる学習写像としては、凸結合型が古くから使用され、多くの応用においても採用されている。凸結合型学習写像を用いる学習プロセスについては、比較的に単純な構造をもつ場合において数学的フレームワーク下での議論がなされている ([1][3] 等)。本報告では、点乗積型／内積型学習写像を用いた場合を扱い、学習過程におけるノードとノード値との間における状態の局所的ふるまいとその保存性にかかわる数理解特性について言及する。また、そこで仮定される条件の利用可能性を探るべく、幾つかの数値実験を実施し、これらの条件の学習更新を通じての推移を観察する。

本報告では、内積型学習写像をもつ自己組織化マップを扱い、[6] で導入されているモデルと同様の 1 次元のノード配列構造を仮定する。本モデルはノード、ノードの値、入力、学習プロセスの 4 つの対象により以下の様に特徴付けする。

$$(\{1, 2, \dots, N\}, V, \{x_t\}_{t=0}^{\infty}, \{m_t(\cdot)\}_{t=0}^{\infty})$$

- (i) I をノード全体の集合とする． I は有限集合で，各元は距離付けされている．集合 I および順序，距離 d を

$$\begin{aligned} I &= \{1, 2, \dots, N\} \subset \mathbb{N}, \\ 1 &< 2 < \dots < N, \\ d(i, j) &= |i - j|, \quad i, j \in I \end{aligned}$$

とする．

- (ii) V を実内積空間 $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ の部分集合とする．各ノードは，それぞれ1つの値をもち，これらは V の元であると仮定する．ノードとノード値との対応として定義される写像 $m : I \rightarrow V$ をノード値関数と呼ぶ．また， $x \in V$ のノルムを $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$ により定義する．
- (iii) $X \subset V$ を入力集合とし，入力列 $\{x_t\}_{t=0}^\infty \subset X$ を考える．
- (iv) 学習プロセスは次のように定義される．与えられた初期ノード値関数 m_0 と入力列 $\{x_t\}_{t=0}^\infty$ に対して，ノード値関数の列 $\{m_t(\cdot)\}_{t=0}^\infty$ は以下のように定義される．

- (a) 学習範囲: 各 $i \in I$ に対して

$$N_1(i) = \{j \in I \mid |j - i| \leq 1\}. \quad (1)$$

- (b) 学習係数: $\alpha > 0$.

- (c) 更新後の値: 各 m_t, x_t に対して， $M_t = \operatorname{argmax}_{j \in I} \langle m_t(j), x_t \rangle$ とし，ノード値関数 m_t の更新後のノード値関数 m_{t+1} を次のように定義する．

$$m_{t+1}(i) = \begin{cases} \frac{m_t(i) + \alpha x_t}{\|m_t(i) + \alpha x_t\|} & \left(i \in \bigcup_{i^* \in M_t} N_1(i^*) \text{ かつ } m_t(i) + \alpha x_t \neq 0 \text{ のとき} \right) \\ m_t(i) & \left(\text{その他のとき} \right) \end{cases} \quad (2)$$

ノード値関数の更新方法については，各 $i \in \bigcup_{i^* \in M_t} N_1(i^*)$ に対して

$$m_t(i) + \alpha x_t \neq 0 \quad (3)$$

を仮定することにより，学習写像を次のように定義してもよい．

$$m_{t+1}(i) = \begin{cases} \frac{m_t(i) + \alpha x_t}{\|m_t(i) + \alpha x_t\|} & \left(i \in \bigcup_{i^* \in M_t} N_1(i^*) \text{ のとき} \right) \\ m_t(i) & \left(i \notin \bigcup_{i^* \in M_t} N_1(i^*) \text{ のとき} \right) \end{cases} \quad (4)$$

ノード数が比較的に多い場合において，学習が進むと，条件 (3) は高い可能性で成り立つ．また，学習範囲として $\{i \in N_1(\min M_t) \mid m_t(i) + \alpha x_t \neq 0\}$ を用いること，すなわち，更新

さてたノード値関数を

$$m_{t+1}(i) = \begin{cases} \frac{m_t(i) + \alpha x_t}{\|m_t(i) + \alpha x_t\|} & (i \in N_1(\min M_t) \text{ かつ } m_t(i) + \alpha x_t \neq 0 \text{ のとき}) \\ m_t(i) & (\text{その他のとき}) \end{cases} \quad (5)$$

と定義する学習プロセスモデルも考えられる．多くの場合，学習が進むと $\operatorname{argmax}_{j \in I} \langle m_t(j), x_t \rangle$ が高い可能性で単一元集合となるので，どちらで考えても，この先の議論において本質的な差異はない．

凸結合型学習写像をもつ自己組織化マップでは，学習プロセス下におけるノード値関数の状態保存性に関して，幾つかの特性が知られている．例えば，凸結合型学習写像をもつ 1 次元入力型の自己組織化マップでは，ノード値関数の更新の前後で単調性等が保存される．このように，ノード値関数が一度その状態になると，その状態が保存されるという場合，このような状態のクラスを自己組織化マップの学習プロセスにおける閉じた状態クラスと呼ぶ．閉状態クラスやそれに準ずるクラスの存在についても知られている ([2] 等)．ここでは，更新されたノード値関数がこのようなクラスへ推移する性質を吸収性または準吸収性と呼ぶ．

2. 内積型学習によるノード値関数の状態保存性

この節では，内積型学習写像をもつ場合において，学習による更新の前後におけるノード値関数の挙動に注目し，その吸収性に係わる状態保存性について考える．次の定理は内積型学習写像下におけるノード値関数の状態保存性に関する結果である．

定理 1 内積型学習写像をもつ自己組織化マップ

$$(\{1, 2, \dots, N\}, V, \{x_t\}_{t=0}^\infty, \{m_t(\cdot)\}_{t=0}^\infty)$$

を考える．ここで， $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ を内積空間と仮定し，第 1 節の内積型学習 (iv)-(a)(b)(c) を用いる．ある回数の更新後のノード値関数 m に対して，入力 x からの学習による m の更新後のノード値関数を m' とする．このとき，以下が成り立つ．

学習係数 α と入力 x に対して，現在のノード値関数 m に対して

$$\|m(i)\| = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

$$\langle m(i), m(i+2) \rangle \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, N-2 \quad (7)$$

であり，更に入力 $x \in X$ に対して， $\operatorname{argmax}_{k \in I} \langle m(k), x \rangle$ が単一元集合で，この元 j^* に対して

$$\langle m(i), x \rangle \geq 0, \quad i = j^* \pm 1, j^* \pm 2 \quad (8)$$

を満たすものとする．このとき， $|i - j^*| \neq 2$ であるすべての i に対して，内積条件が保存される．すなわち

$$\langle m(i-1) - m(i), m(i+1) - m(i) \rangle < 0 \quad (9)$$

ならば

$$\langle m'(i-1) - m'(i), m'(i+1) - m'(i) \rangle < 0 \quad (10)$$

が成り立つ．ここで，(9) および (10) において不等式をそれぞれ “ $\leq$ ” および “ $\leq$ ” としても，定理の主張は成り立つ．

定理1の証明については，[5]を参照されたい．上の定理では，内積型学習写像を用いる場合において，一定の条件下でノード値関数が内積条件を満たすクラスへ推移する性質が準吸収性を有することを示している．

3. 点乗積型学習写像を用いた自己組織化マップの数値例とその考察

ここでは，点乗積型学習写像による自己組織化マップの数値計算例を与え，定理1における条件(6)，(7)，(8)及び内積条件の成立頻度を時系列推移として考察する．

数値計算1 第1節の内積型学習(iv)-(a)(b)(c)と150個のノードを有する3次元入力自己組織化マップ $(\{1, 2, \dots, 150\}, V \subset \mathbb{R}^3, \{x_t\}_{t=0}^\infty, \{m_t(\cdot)\}_{t=0}^\infty)$ を考える．各ノードに対する初期値 $m_0(i)$ を $\{(x, y, z) \mid x^2 + y^2 + z^2 = 1\} \subset \mathbb{R}^3$ 上において一様に生成させ，入力 x の列は $[-1.1, 1.1]^3 \subset \mathbb{R}^3$ 上の一様分布より生成した．また，内積として点乗積を用いる．すなわち $a = {}^t(a_1, a_2, a_3)$, $b = {}^t(b_1, b_2, b_3) \in \mathbb{R}^3$ に対して $\langle a, b \rangle = \sum_{i=1}^3 a_i b_i$ とする．図1は各ノードの初期値と更新後の各ノードの値を表している．各ノードの位置に対応する座標はノード値を示している．学習により多くのノードが順序付けされていることが観測できる． $\square$

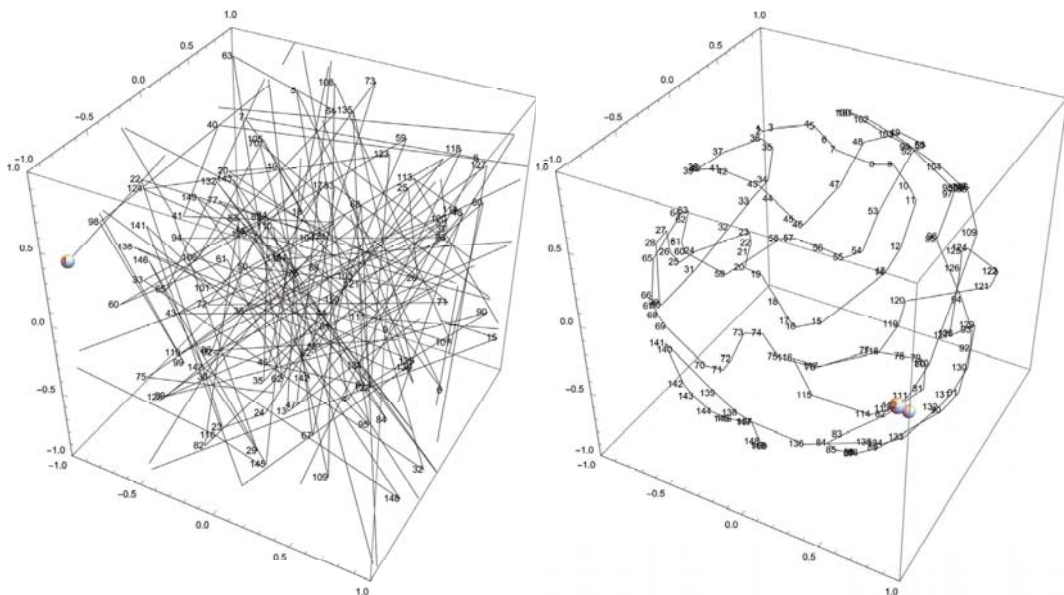


図1: ノードの初期値(左)と8000回学習後のノード値(右)．学習係数 $\alpha = 0.6$ ．

定理1におけるノード値に対する3条件(6), (7), (8)の内, (7), (8)については, 多くの応用で用いられる実数値入力及び内積としての点乗積を用いる場合, 非負値の入力及び非負値の初期値を仮定するならば, これらの条件は満たされることがわかる. 以下では, 負値を含む実数値入力のケースについての数値実験を実施し, 上の3条件を満たすか否かについて, 学習更新による推移を通じて考察したい. 同時に, これらの条件の成立頻度とノード値域及びノード値次元との関係についても観察したい.

数値計算2 ($\mathbb{R}^3$ 値入力・ノード数150) 図2は, 数値計算1の数値例において, 各ノードの値が3条件(6), (7), (8)及び内積条件(9)を満たす割合の推移を示したものである. 学習が進むにつれて, (6), (7), (8)及び内積条件(9)が徐々に満たされてゆく様子が見て取れる.

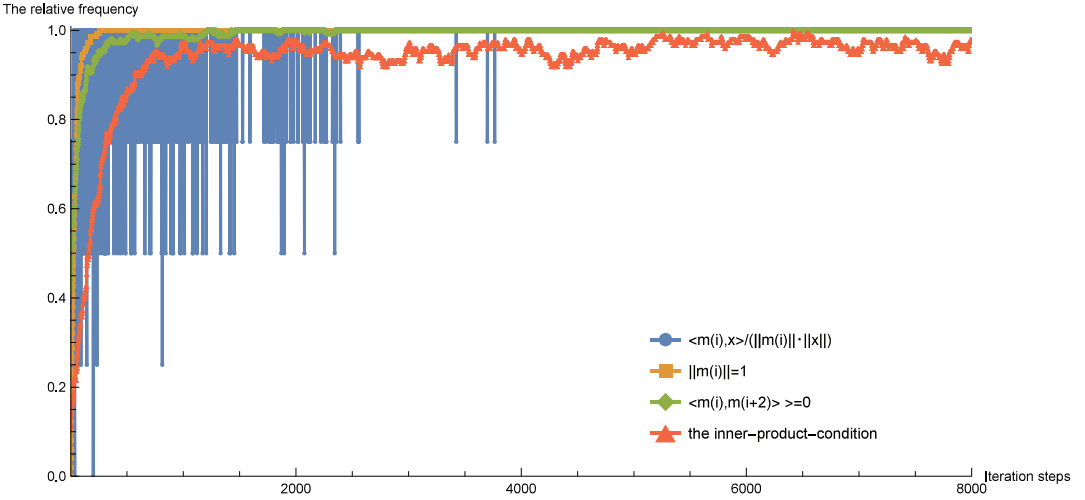


図2: ($\mathbb{R}^3$ 値入力・ノード数150) ノード全体に対する条件(6), (7), (8)及び内積条件(9)を満たすノードの割合の推移. 凡例の1番上は, $\#\{i \mid \langle m(i), x \rangle \geq 0, i = j^* \pm 1, j^* \pm 2\}/4$, 2番目以降は順に集合 $\{i \mid \|m(i)\| = 1\}$, $\{i \mid \langle m(i), m(i+2) \rangle \geq 0\}$, $\{i \mid \langle m(i-1) - m(i), m(i+1) - m(i) \rangle < 0\}$ の元の個数の対象となるノード全体に対する相対頻度を表す. 横軸は更新回数を表す.

□

数値計算3 ($\mathbb{R}^3$ 値入力・ノード数150) 条件(8)に関連して, 図3は数値計算2において, 4つのノード $i = j^* - 2, j^* - 1, j^* + 1, j^* + 2$ に対する値 $\frac{\langle m(i), x \rangle}{\|m(i)\| \|x\|}$ の学習の経過を通しての推移を表したものである. 各ノードにおける値は徐々に非負となっていることが見て取れる.

□

数値計算4 ($\mathbb{R}^{20}$ 値入力・ノード数150) ここでは, ノード値次元及び入力次元以外は数値計算1と同様の点乗積型学習自己組織化マップ ($\{1, 2, \dots, 150\}, V \subset \mathbb{R}^{20}, \{x_t\}_{t=0}^\infty, \{m_t(\cdot)\}_{t=0}^\infty$) を考える. ここでは, ノード値及び入力列を数値計算1と同様の方法で $\mathbb{R}^{20}$ 値として発生させた値を用いる. 更新が進むにつれて, 条件 $\|m(i)\| = 1$ 及び $\langle m(i), m(i+2) \rangle \geq 0$ は, 徐々に満たされるようになっていくが, 一方で更新が進んでも, 集合 $\{i \mid \langle m(i), x \rangle \geq 0, i =$

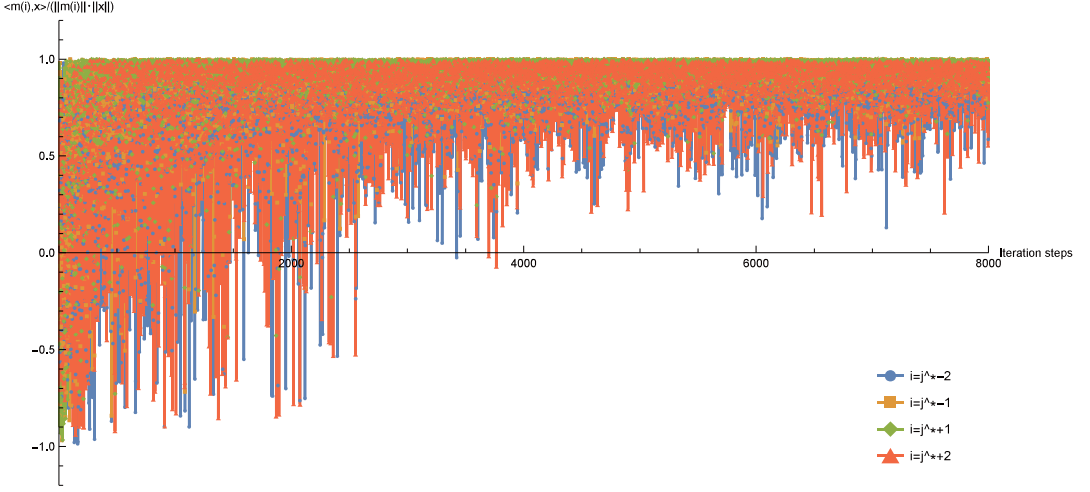


図 3: ($\mathbb{R}^3$ 値入力・ノード数 150) 凡例は、上から順にノード $i = j^* - 2, j^* - 1, j^* + 1, j^* + 2$ に対する $\frac{\langle m(i), x \rangle}{\|m(i)\| \|x\|}$ の値の更新推移。横軸は更新回数を表す。

$j^* \pm 1, j^* \pm 2$ 及び $\{i \mid \langle m(i-1) - m(i), m(i+1) - m(i) \rangle < 0\}$ については、どちらの元の相対頻度も 1 に達していないことが見て取れる（図 4 参照）。 □

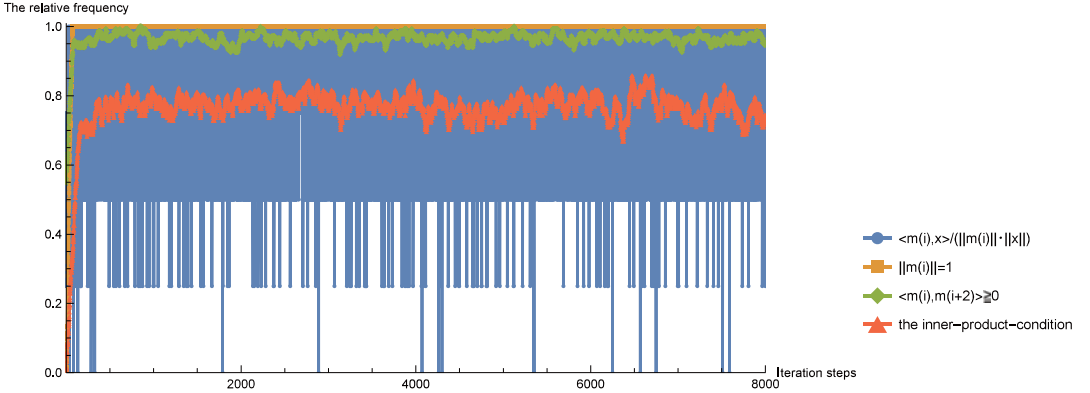


図 4: ($\mathbb{R}^{20}$ 値入力・ノード数 150) ノード全体に対する条件 (6), (7), (8) 及び内積条件 (9) を満たすノードの割合の推移。凡例の 1 番上は、 $\#\{i \mid \langle m(i), x \rangle \geq 0, i = j^* \pm 1, j^* \pm 2\}/4$, 2 番目以降は順に集合 $\{i \mid \|m(i)\| = 1\}$, $\{i \mid \langle m(i), m(i+2) \rangle \geq 0\}$, $\{i \mid \langle m(i-1) - m(i), m(i+1) - m(i) \rangle < 0\}$ の元の個数の対象となるノード全体に対する相対頻度を表す。横軸は更新回数を表す。

数値計算 5 ($\mathbb{R}^{20}$ 値入力・ノード数 150) 条件 (8) に関連して、図 5 は数値計算 4 において、4 つのノード $i = j^* - 2, j^* - 1, j^* + 1, j^* + 2$ に対する値 $\frac{\langle m(i), x \rangle}{\|m(i)\| \|x\|}$ の学習を通しての推移である。数値計算 3 と異なり、学習が進んでも、 $\frac{\langle m(i), x \rangle}{\|m(i)\| \|x\|}$, $i = j^* - 2, j^* - 1, j^* + 1, j^* + 2$ が負の値をとる状態が多く存在することが見て取れる。 □

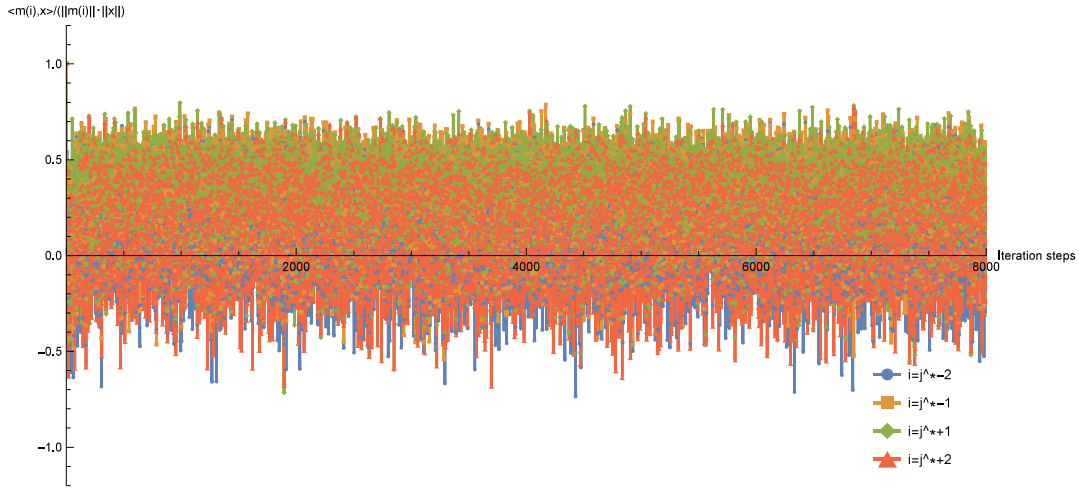


図 5: ($\mathbb{R}^{20}$ 値入力・ノード数 150) 凡例は、上から順にノード $i = j^* - 2, j^* - 1, j^* + 1, j^* + 2$ に対する $\frac{\langle m(i), x \rangle}{\|m(i)\| \|x\|}$ の値の更新推移。横軸は更新回数を表す。

参考文献

- [1] M. Cottrell, M. Olteanu, F. Rossi and N. Villa-Vialaneix, *Theoretical and applied aspects of the self-organizing maps*, Proceedings of the 11th international workshop WSOM 2016, pp. 3–26.
- [2] M. Hoshino and Y. Kimura, *Ordered states and probabilistic behavior of self-organizing maps*, proceedings of Asian conference on nonlinear analysis and optimization 2008, pp. 31–44.
- [3] M. Hoshino, *On state preserving property and nonexpansivity in self-organizing maps*, J. Nonlinear Convex Anal. Vol. 16 Num. 11 (2015) pp. 2255–2261.
- [4] M. Hoshino and H. Takahashi, *Ordering of reference vectors in self-organizing maps with dot product type learning equation*, RIMS kokyuroku, 2194 (2021) pp. 50–55.
- [5] M. Hoshino, *On class of nearly absorbing states in self-organizing maps with inner product learning mapping*, Linear and Nonlinear Anal., Vol. 10, Num. 2 (2024) pp. 111–121.
- [6] T. Kohonen, *Self-Organizing Maps, Third Edition*, Springer, 2001.
- [7] T. Kohonen, *Essentials of the self-organizing map*, Neural Networks, 37 (2013) pp. 52–65.