

On dot product type learning and closed class of states in SOM

SOMにおける点乗積型学習写像と状態吸収性について

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. 点乗積型／内積型学習写像をもつ自己組織化マップモデル

本報告は、数学的な視点から Kohonen 型アルゴリズムとして知られる自己組織化マップを扱う。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、統計的な応用や組み合わせ最適化が可能であり、クラスター分析、音声・テキスト分析、巡回セールスマン問題等、広範囲に応用されている。

自己組織化マップにおいて、各ノードからノード値への写像として定義されるモデル関数の SOM 学習過程における数理特性について考察する。自己組織化マップにおける学習写像としては、凸結合型が古くから用いられ、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][4] 等)。本報告では、学習写像の構造がこれらと異なる点乗積型／内積型学習写像を伴う場合を扱い、学習過程におけるノードとこれらの値についての状態保存性にかかわる数理特性について考察する。点乗積型／内積型学習写像の使用は、総じて計算量が多い自己組織化マップ学習の中では実計算は比較的速いなどの特徴をもつ。

本報告で扱う内積型学習写像をもつ自己組織化マップモデルはノード、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できる。

$$(\{1, 2, \dots, N\}, V, \{x_k\}_{k=0}^{\infty}, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^{\infty})$$

- (i) I をすべてのノードから成る集合とする。 I は有限で、各元は距離付けされている。集合 I および距離 d を

$$I = \{1, 2, \dots, N\} \subset \mathbb{N},$$

$$d(i, j) = |i - j|, \quad i, j \in I$$

と仮定する。

- (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 $m : I \rightarrow V$ をモデル関数と呼ぶ.
- (iii) $X \subset V$ を入力集合とし, 入力列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty \subset X$ を考える.
- (iv) 学習プロセスは次のように定義される. 与えられた初期モデル関数 m_0 と入力列 $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ に対して, モデル関数の列 $\{m_k(\cdot)\}_{k=0}^\infty$ は以下のように定義される.
- (a) 学習範囲: 各 m_k, x_k に対して

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

- (b) 学習係数: $\alpha > 0$.
- (c) 更新後の値:

$$m_{k+1}(i) = \begin{cases} \frac{m_k(i) + \alpha x_k}{\|m_k(i) + \alpha x_k\|} & \left(i \in \bigcup_{i^* \in \arg\max_{j \in I} \langle m_k(j), x_k \rangle} N_1(i^*) \text{ のとき} \right) \\ m_k(i) & \left(i \notin \bigcup_{i^* \in \arg\max_{j \in I} \langle m_k(j), x_k \rangle} N_1(i^*) \text{ のとき} \right) \end{cases} \quad (2)$$

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モデル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. 凸結合型学習写像をもつ1次元入力型等の一部の自己組織化マップにおいては, モデル関数の更新の前後で, 単調性が保存される等の幾つかの特性をもつ. このように, モデル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).

2. 数値計算による例

点乗積型学習写像による自己組織化マップの例を与える.

数値計算 1 第1節の学習プロセス (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

$$(\{1, 2, \dots, 150\}, V \subset \mathbb{R}^3, \{x_k\}_{k=0}^\infty, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^\infty)$$

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, 一様に生成させた. 入力 x は $[-1.05, 1.05]^3 \subset \mathbb{R}^3$ 上の一様分布より生成する. また, 内積として点乗積を用いる. すなわち

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$$

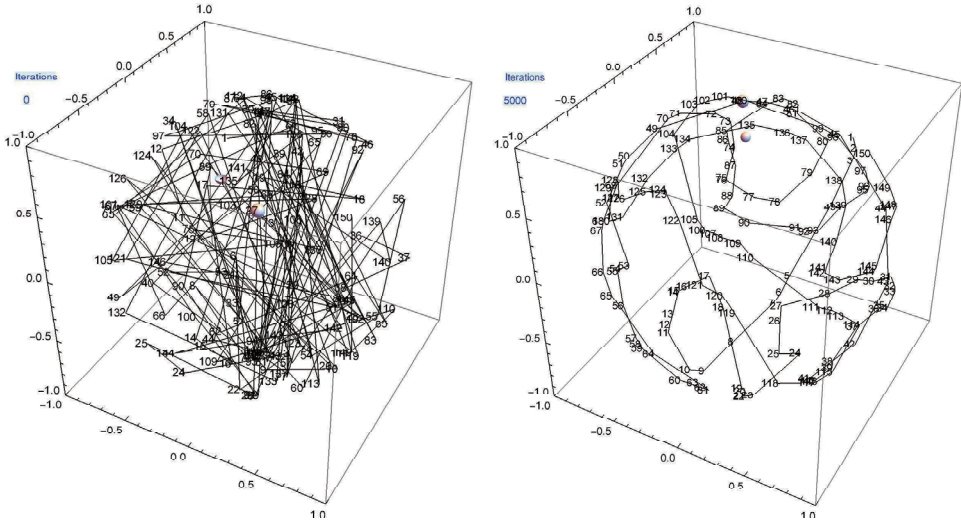


図 1: モデル関数の初期値 (左) と更新後の値 (右) . $\alpha = 0.8$.

に対して $\langle a, b \rangle = \sum_{i=1}^3 a_i b_i$ とする. 図 1 は, 5000 回の更新によるモデル関数の推移である. 図において, 各ノードの位置を示す座標は, ノード値を表している. 学習による整列化が観測される. □

3. 内積型学習によるモデル関数の挙動

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モデル関数の挙動に注目する. 以下に述べる学習プロセス上の一定条件下におけるモデル関数の挙動を考察するにあたって重要となるひとつの結果を挙げる ([5] 参照) .

定理 1 ([5]) 内積型学習写像をもつ自己組織化マップ

$$(\{1, 2, \dots, N\}, V, \{x_k\}_{k=0}^\infty, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^\infty)$$

を考える. ここで, $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ を内積空間と仮定する. 第 1 節の学習プロセス (iv)-(a)(b)(c) を用いる. ある回数 k の更新後のモデル関数 m に対して, 入力 x からの学習による m の更新後のモデル関数を m' とする. このとき, 以下が成り立つ.

m, x, α に対して

$$\|m(i)\| = \|m(i+1)\| = \|m(i+2)\| = 1, \quad (3)$$

$$\langle m(i), x \rangle < \langle m(i+1), x \rangle, \quad (4)$$

$$\langle m(i+2), x \rangle < \langle m(i+1), x \rangle, \quad (5)$$

$$\langle m(i) - m(i+1), m(i+2) - m(i+1) \rangle \leq 0 \quad (6)$$

であるならば

$$\langle m'(i) - m'(i+1), m'(i+2) - m'(i+1) \rangle \leq 0 \quad (7)$$

が成り立つ.

ここで, 学習による値の変化量およびノード間の対比による評価に関する結果を与える.

定理 2 自己組織化マップ

$$(\{1, 2, \dots, N\}, V, \{x_k\}_{k=0}^\infty, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^\infty)$$

を考える. ここで, V は実内積空間 $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ のある部分集合, 学習プロセスとして, 第 1 節の (iv)-(a)(b)(c) を用いる. 現在のモデル関数 m に対して, 入力 x からの学習による m の更新後のモデル関数を m' とする. このとき, 以下が成り立つ.

x に対して, ノード $i, i+1, i+2$ が

$$\|m(i)\| = \|m(i+1)\| = \|m(i+2)\| = 1, \quad (8)$$

$$\operatorname{argmax}_{j \in I} \langle m(j), x \rangle = \{i+1\} \quad (9)$$

を満たすとき, 任意の $\alpha > 0$ に対して, 不等式

$$\|m'(i) - m'(i+1)\| \leq \sqrt{a_0 a_1} \|m(i) - m(i+1)\|, \quad (10)$$

$$\|m'(i+1) - m'(i+2)\| \leq \sqrt{a_1 a_2} \|m(i+1) - m(i+2)\|, \quad (11)$$

$$\|m'(i+2) - m'(i)\| \leq \sqrt{a_2 a_0} \|m(i+2) - m(i)\| \quad (12)$$

が成り立つ. ここで,

$$a_0 = \frac{1}{\|m(i) + \alpha x\|}, \quad (13)$$

$$a_1 = \frac{1}{\|m(i+1) + \alpha x\|}, \quad (14)$$

$$a_2 = \frac{1}{\|m(i+2) + \alpha x\|}. \quad (15)$$

特に,

$$\|m(i) + \alpha x\| \geq \|m(i)\|, \quad (16)$$

$$\|m(i+1) + \alpha x\| \geq \|m(i+1)\|, \quad (17)$$

$$\|m(i+2) + \alpha x\| \geq \|m(i+2)\| \quad (18)$$

のとき, 不等式

$$\sqrt{a_0 a_1} \leq 1, \quad (19)$$

$$\sqrt{a_1 a_2} \leq 1, \quad (20)$$

$$\sqrt{a_2 a_0} \leq 1 \quad (21)$$

が成り立つ.

定理 3 自己組織化マップ

$$(\{1, 2, \dots, N\}, V, \{x_k\}_{k=0}^\infty, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^\infty)$$

を考える. ここで, V は実内積空間 $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ のある部分集合, 学習プロセスとして, 第 1 節の (iv)-(a)(b)(c) を用いる. 現在のモデル関数 m に対して, 入力 x からの学習による m の更新後のモデル関数を m' とする. このとき, 以下が成り立つ.

x と $\alpha > 0$ に対して, ノード $i, i+1, i+2$ が

$$\|m(i)\| = \|m(i+1)\| = \|m(i+2)\| = 1, \quad (22)$$

$$\operatorname{argmax}_{j \in I} \langle m(j), x \rangle = \{i\}, \quad (23)$$

$$2\langle m(i) - m(i+2), x \rangle + \alpha \|x\|^2 \geq 0, \quad (24)$$

$$2\langle m(i+1) - m(i+2), x \rangle + \alpha \|x\|^2 \geq 0 \quad (25)$$

を満たすとき, 不等式

$$\|m'(i+2) - m'(i)\| \leq \sqrt{a_0} \|m(i+2) - m(i)\|, \quad (26)$$

$$\|m'(i+1) - m'(i+2)\| \leq \sqrt{a_1} \|m(i+1) - m(i+2)\| \quad (27)$$

が成り立つ. ここで, a_0, a_1 は (13), (14) によって定める. 特に,

$$2\langle m(i), x \rangle + \alpha \|x\|^2 \geq 0, \quad (28)$$

$$2\langle m(i+1), x \rangle + \alpha \|x\|^2 \geq 0 \quad (29)$$

のとき, 不等式

$$\sqrt{a_0} \leq 1, \quad (30)$$

$$\sqrt{a_1} \leq 1 \quad (31)$$

が成り立つ.

定理 1 における不等式 (6) (または (7)) を満たすノードの出現頻度の推移の様子を示す以下の数値例を与える.

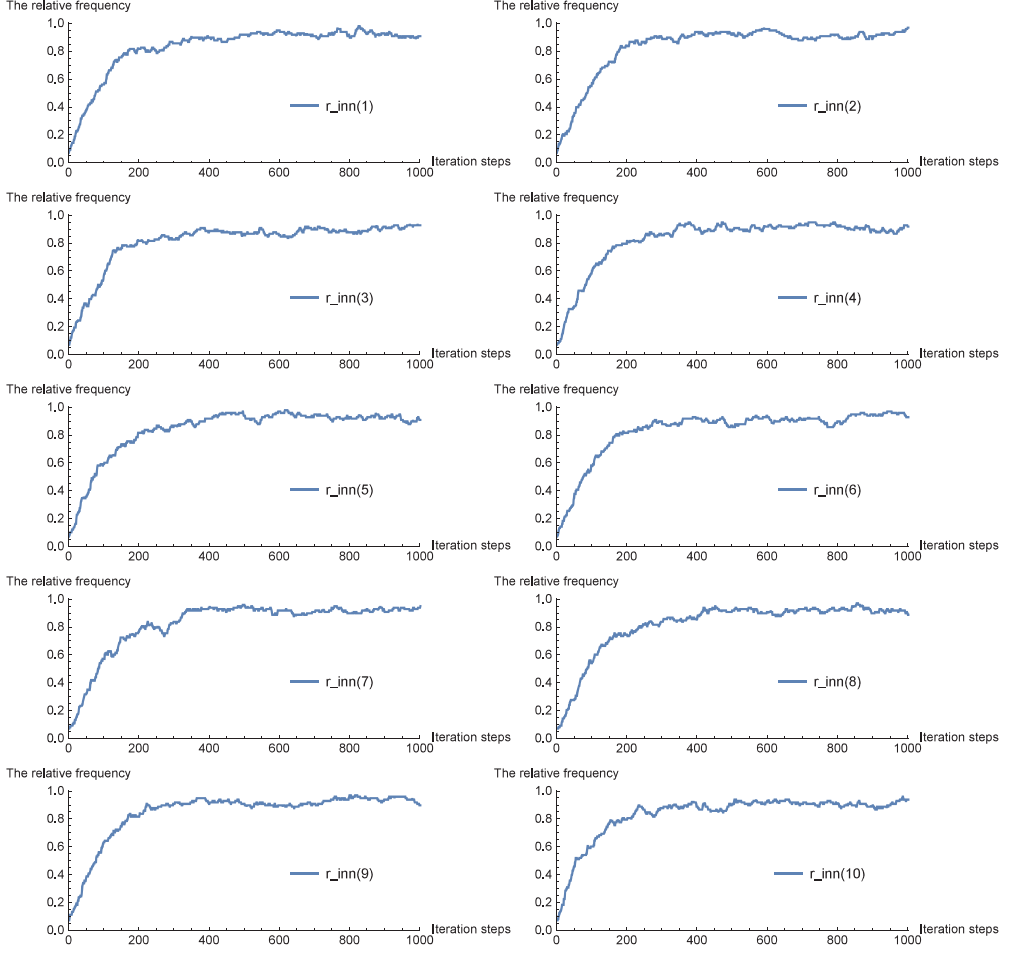


図 2: 条件 $S_{\text{inn}}(i)$ を満たすノードの相対頻度の推移. 横軸は更新回数である. $\alpha = 0.6$, 初期値を $m_0(i) \in \{(x_1, \dots, x_5) \in \mathbb{R}^5 \mid \sum_{i=1}^5 x_i^2 = 1\}$ となるように補正.

数値計算 2 第 1 節の学習プロセス (iv)-(a)(b)(c) を用いた点乗積型学習写像をもつノード総数 100 の 5 次元入力自己組織化マップ $(\{1, 2, \dots, 100\}, V \subset \mathbb{R}^5, \{x_k\}_{k=0}^\infty, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^\infty)$ を考える. 各ノードに対する初期値 $m_0(i)$ および入力 x を $[-1.1, 1.1]^5 \subset \mathbb{R}^5$ 上の一様分布より生成させる. また, 内積として点乗積を用いる.

条件 $S_{\text{inn}}(i)$: ノード $i, i+1, i+2$ に対して $\langle m(i) - m(i+1), m(i+2) - m(i+1) \rangle \leq 0$

条件 $S_{\text{inn}}(i)$ を満たすノードの相対頻度

$$r_{\text{inn}} = \frac{\#\{i \mid i, i+1, i+2 \text{ が } S_{\text{inn}}(i) \text{ を満たす}\}}{n-2}$$

を考える．ここで， n はノードの総数， $\#(S)$ は加算集合 S の要素の総数である．図 2 は， r_{inn} の値の更新による推移を表したものである．10 個のグラフは，それぞれ，同じ初期値に対して，入力値列のみ変化させている．初期においては，更新回数に比例して r_{inn} の値が増加していることが観測できる．□

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 conferece 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, *Local behavior of node with extreme value of model function in learning processes of basic self-organizing maps*, Linear and Nonlinear Anal., Vol. 6, Num. 1 (2020) pp. 65–72.
- [5] 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.
- [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.