

SOM 集合をマップする SOM: 自己組織化マップから自己組織化ホモトピーへ SOM of SOMs: From “Self-Organizing Map” to “Self-Organizing Homotopy”

古川 徹生

Tetsuo FURUKAWA

九州工業大学 大学院生命体工学研究科

Kyushu Institute of Technology

Abstract: Kohonen's self-organizing map (SOM) is an architecture that generates a map of a given dataset. In this paper, a novel extension of SOM called SOM^2 is proposed. The mapping objects of SOM^2 are SOMs themselves, each of which represents a set of data vectors. Thus, the entire SOM^2 represents a set of data distributions. In terms of topology, SOM^2 organizes a homotopy rather than a map in self-organizing manner. SOM^2 is expected to be a powerful tool for the classification, estimation and recognition tasks relevant to nonlinear manifolds.

1 はじめに

Kohonen の自己組織化写像 (Self-Organizing Map: SOM) は、与えられたデータ集合に対して、その分布をもっともよく表現する写像を自己組織的に獲得する教師なし学習アルゴリズムである。すなわち SOM は 2 次元程度の低次元空間から、高次元のデータ空間への写像を実現する学習機械である。また SOM は、高次元空間におけるデータ分布を非線形多様体を用いて近似表現する装置と見ることもできる。このような特徴を持つ SOM の有用性は、その応用例の多さから見ても議論の余地はない。ここで重要な点は、SOM の働きを次のように要約できるということである。

「一連のデータベクトル群が与えられたとき、それらが何か未知の隠れ変数を引数とする連続写像によって生成されたものとみなし、与えられたデータ群をもっとも自然に表現する写像を自己組織的に発見する装置である」。

さて、写像がパラメータによって連続的に変化する場合、それをホモトピーと呼ぶ。すなわちホモトピーは連続変形する写像群を表現する言葉である。このホモトピーという概念を用いると、次のような新しい学習機械の枠組みを提案することができる。

「一連の写像群が与えられたとき、それらが何か未知の隠れパラメータによって生じたホモトピックな写像群であるとみなし、与えられた写像群を

もっとも自然に表現するホモトピーを自己組織的に発見する装置」。

これが本稿で述べる「自己組織化ホモトピー」すなわち SOM^2 である。

SOM には「写像」と「多様体」という二つの側面があるように、 SOM^2 にも二つの側面がある。「写像」に対する拡張概念が「ホモトピー」であるならば、「多様体」に対する拡張概念が「ファイバー束」である。SOM がデータ集合の分布を多様体で近似する装置であるのに対して、 SOM^2 はデータ集合族の分布をファイバー束で近似する装置である。

非線形多様体は、多くのパターン識別問題で本質的な役割を果たす。すなわちひとつのクラスに所属するデータ集合は、ひとつの多様体上に分布する。異なるクラスはそれぞれ異なる多様体を形成する。したがって多様体の集合をうまく扱えるアルゴリズムを開発することは、非線形多様体が関係する多くのパターン識別問題において重要な課題なのである。SOM においてもこの課題は早くから認識されており、Adaptive Subspace SOM (ASSOM) [1] や Self-Organizing Operator Map (SOOM) [2] などはそうした試みの例である。ただし ASSOM も SOOM も線形問題に限られており、非線形なケースをどう扱うかは未解決な問題であった。この問題を解決するのが今回提案する SOM^2 である。

非線形多様体集合が関わるもっとも典型的な課題は、2 次元画像からの 3 次元物体の形状識別とポーズ識別の同時識別問題である。1 個の 3 次元物体の 2 次元投影像

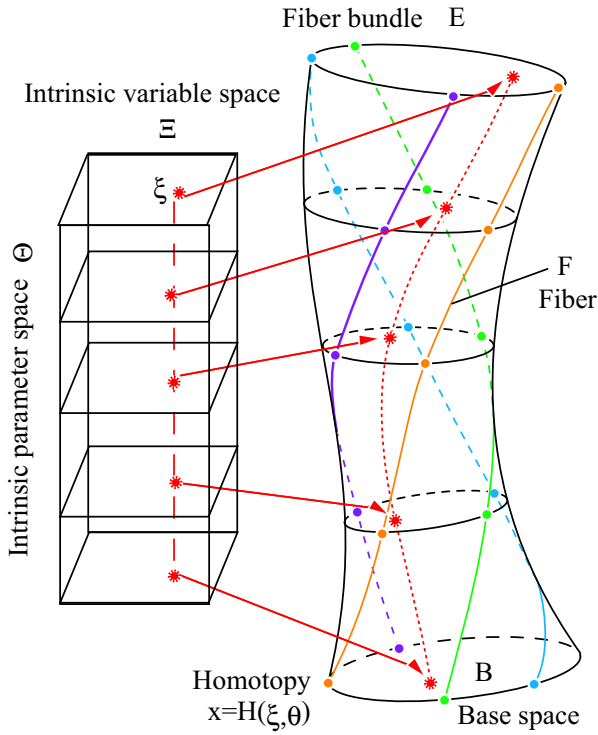


図1 SOM² の扱う課題の枠組み

(すなわち写真などの画像)は、物体を見る向き(カメラアングル)を変えると連続的に変化する。したがって画像データの集合は、画像データと言う高次元ベクトル空間におけるカメラアングル次元と等しい非線形多様体上に分布する。今度はカメラアングルを固定して物体の形状を連続的に変化させると、今度は異なる多様体を得ることができる。したがってカメラアングルと物体形状の双方を変化させると積多様体、すなわちファイバー束が得られる。このような状況は、顔画像識別や風景画像認識などでも生じる。このようなデータ集合族を扱うアルゴリズムがSOM²である。

SOM² のアーキテクチャとアルゴリズムは、過去に発表してきた [3, 4]。本稿ではホモトピーやファイバー束の観点から SOM² のアルゴリズムを見直し、より理論的に明確な位置づけを与える試みをするものである。

2 課題の枠組み

まず本提案アルゴリズムで取り扱いたい問題を明確にする(図1)。SOM² が学習する対象のデータは、「エピソード」と呼ばれるデータ集合の集合、すなわち集合族である。 i -th エピソードを $D_i = \{\mathbf{x}_{i,1}, \dots, \mathbf{x}_{i,J}\}$ とすると、このデータは次のように生成される。まず intrinsic

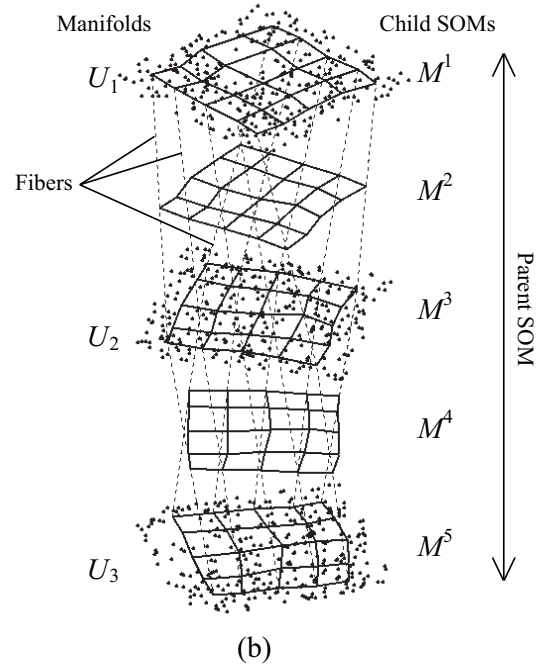
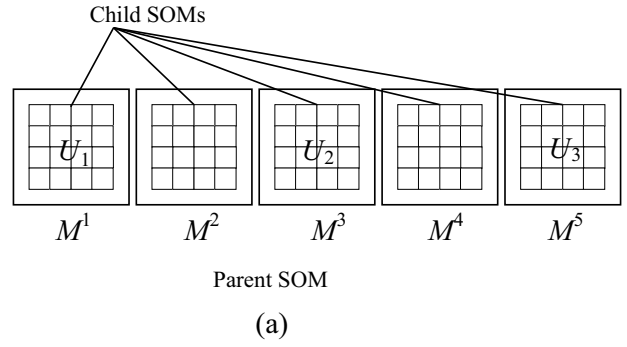


図2 (a) SOM² のアーキテクチャ (b) データと参照ベクトル集合の関係

parameter である θ がランダムに生成される。 θ は確率密度関数 $p(\theta)$ に従うものとする。先の3次元物体の例で言えば、 θ は物体の形状を決めるパラメータである。次に θ を固定したまま、intrinsic variable ξ をランダムに J 個生成する。 ξ は θ と独立な確率変数であり、確率密度 $p(\xi)$ に従うとする。これは同一の物体をさまざまな角度から眺めることに相当する。対応するデータ点 \mathbf{x} は、ホモトピー $\mathbf{x} = H(\xi, \theta)$ によって生成される。この写像は、ある物体をある角度から見たときの画像ベクトルに対応する。こうして J 個のデータベクトル、すなわちエピソード $D_i = \{\mathbf{x}_{i,1}, \dots, \mathbf{x}_{i,J}\}$ が得られる。このようにして異なる intrinsic parameter を I 個生成すれば、 I 個のエピソード $D = \{D_1, \dots, D_I\}$ を得ることができる。このとき、 D はファイバー束 E を構成し、各エピソードは

E の異なる section に対応する．また同一の ξ によって生成されたデータ（すなわちカメラアングルが同一で異なる物体形状から撮影された画像集合）は 1 本のファイバーに相当する．

このようなデータベクトルに対して SOM² に求められるタスクは，与えられたエピソード集合から，それらエピソードを生成したホモトピーを自己組織的に発見することである．このときに使って良い情報は，「同一のエピソードに所属するデータベクトルは，同一の intrinsic parameter θ によって生成されたものである」という情報のみである．

3 SOM² のアーキテクチャとアルゴリズム

SOM² のアーキテクチャを図 2(a) に示す．SOM² は従来型の SOM (Basic SOM) が多数並んだ構造を持つ．すなわち $M \times \Theta$ の直積空間を考え， Θ に垂直な各 section から高次元のデータベクトル空間への写像を 1 個の Basic SOM が受け持つ．これを本稿では child SOM と呼ぶことにする．すなわち多様体 E の各 section を各 child SOM が表現する．また child SOM の並びを parent map と呼び，ファイバー方向を表現する．この様子を図示したのが図 2(b) である．

今，1 個の SOM² が K 個の child map を持ち，各 child map には各々 L 個の参照ベクトルがあるとする． $\mathbf{w}^{k,l}$ を k -th child map の l -th 参照ベクトルとすると，参照ベクトルを連結して得られる連結参照ベクトル $\mathbf{W}^k = (\mathbf{w}^{k,1}, \dots, \mathbf{w}^{k,L})$ は k -th child map 全体を表現する．SOM² の目的はエピソード集合 $\{D_1, \dots, D_I\}$ を与え，連結参照ベクトル集合 $\{\mathbf{W}^1, \dots, \mathbf{W}^K\}$ を自己組織的に（教師なしで）学習することである．またこれらの他に，episode map と呼ばれる SOM を用意する．これは各 episode ごとのデータ分布を表現するための SOM である．episode map の参照ベクトルおよび連結参照ベクトルを $\mathbf{V}_i = (\mathbf{v}_i^1, \dots, \mathbf{v}_i^L)$ とする．episode map はエピソード数 I だけあると考えれば良い．後述するように，episode map はアルゴリズムを導出するために必要な概念であり，実際の学習に際しては計算しなくて良い．

SOM² のアルゴリズムは次のように記述される．

勝者の決定 k -th child map における i -th エピソードの j -th データ $\mathbf{x}_{i,j}$ に対する勝者は次式で定義される．

$$l^*(\mathbf{x}_{i,j}, k) = \arg \min_l \|\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{w}^{k,l}\|^2 \quad (1)$$

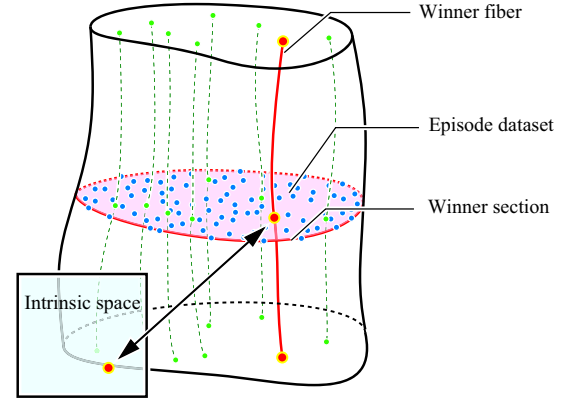


図 3 SOM² における勝者の決定

これにより量子化誤差は次のように定義される．

$$e^k(\mathbf{x}_{i,j}) = \|\mathbf{x}_{i,j} - \mathbf{w}^{k,l^*(\mathbf{x}_{i,j},k)}\|^2 \quad (2)$$

エピソードと child map 間の距離は，平均量子化誤差をもって推定値とする．すなわち

$$\hat{E}^k(D_i) = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J e^k(\mathbf{x}_{i,j}) \quad (3)$$

である．そして平均量子化誤差を最小にする child map が「勝者マップ」になる．

$$k^*(D_i) = \arg \min_k \hat{E}^k(D_i) \quad (4)$$

また真の勝者ユニットは，勝者マップ中の勝者ユニット，すなわち

$$l^{**}(\mathbf{x}_{i,j}) = l^*(\mathbf{x}_{i,j}, k^*(D_i)) \quad (5)$$

として定義する．データ分布が図 3 のようなファイバー束として表されるとするなら，勝者マップは winner section に対応し，真の勝者ユニットは winner fiber に相当する．すなわち上記の勝者定義は，SOM² が表現するファイバー束に対して，与えられたエピソードをもっとも良く近似する section を見つけ，かつそのエピソードの各データをもっとも良く近似するファイバーを見つけることに相当する．

episode map の推定 次に，勝者マップを元に episode map を推定する．すなわち勝者マップの参照ベクトルを初期値とする basic SOM を用意し，エピソードのデータを学習させることでそのエピソードのデータ分布を近似する．SOM の学習回数を多く取ればそれだけ episode map を正確に表現することになる．もっとも簡単な方法

は，SOM のバッチ学習アルゴリズムを 1 回だけ実行することであり，実はこれでも十分な性能が得られる．すなわち

$$\mathbf{v}_i^l = \sum_{j=1}^J \beta_{i,j}^l \mathbf{x}_{i,j} \quad (6)$$

とする．ここで $\beta_{i,j}^l$ は規格化された近傍関数によって計算される学習配分率であり，

$$\beta_{i,j}^l = \frac{h_c(d_c(l, l^{**}(\mathbf{x}_{i,j})); \sigma_c(T))}{\sum_{j'=1}^J h_c(d_c(l, l^{**}(\mathbf{x}_{i,j'})); \sigma_c(T))} \quad (7)$$

で与えられる．ここで $h_c(\cdot)$ は child map レベルでの近傍関数で通常はガウス関数を用い，また $\sigma_c(T)$ は近傍半径である．近傍半径は学習時間 T に従って狭くする．また $d_c(\cdot)$ は child map 上でのユニット間の距離を与える関数である．episode map の参照ベクトルが求まるので，その連結参照ベクトル V_i も得られる． V_i はエピソード D_i のデータ分布をベクトル化したものと見ることができ．

参照ベクトルの更新 続いて parent map レベルでの学習配分率 α_i^k を近傍関数から求める．これは次式で与えられる．

$$\alpha_i^k = \frac{h_p(d_p(l, k^*(D_i)); \sigma_p(T))}{\sum_{j=1}^J h_p(d_p(l, l^{**}(\mathbf{x}_{i,j})); \sigma_p(T))} \quad (8)$$

これを用いて SOM^2 の参照ベクトルは次のように更新される．

$$\mathbf{W}^k = \sum_{i=1}^I \alpha_i^k V_i \quad (9)$$

$$\mathbf{w}^{k,l} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \alpha_i^k \beta_{i,j}^l \mathbf{x}_{i,j} \quad (10)$$

(10) にはもはや episode map V_i が含まれていない．したがって $\alpha_i^k, \beta_{i,j}^l$ を求めれば SOM^2 の参照ベクトルを更新することが可能になる．

上記の 3 つのステップを，近傍半径を狭めながら繰り返し，定常状態になったところで学習を停止する．

4 SOM^2 の理論的背景

上に記述した SOM^2 のアルゴリズムは 3 つのステップから成ると言い換えられる．すなわち (i) winner section および winner fiber の推定 (ii) episode map の推定 (iii) homotopy の推定．(i) は自己組織的に生成された homotopy (すなわち SOM^2 の参照ベクトル群) が正しいと仮定して，エピソードとそのデータが所属するファイバー束中の section と fiber を推定する作業であり，(ii) は推定した winner section と winner fiber が正しいと仮定して episode map を推定する作業である．最後の (iii) では，winner section と episode map が正しいと仮定して homotopy を推定する．このように，3 つの同時推定問題を交互に推定することで解くのが SOM^2 のアルゴリズムである．すなわち SOM^2 のアルゴリズムは EM アルゴリズムで記述されている．

SOM^2 のアルゴリズムでは，多様体と多様体の距離が次のように定義される．

$$L^2(M_1, M_2) = \int \|H(\xi, \theta_1) - H(\xi, \theta_2)\|^2 p(\xi) d\xi \quad (11)$$

この距離を測るには θ, ξ が既知である必要がある．しかし現実には与えられるエピソードにおいてこれらは未知情報であり，したがって距離を直接評価できない．そこで EM アルゴリズムで θ, ξ (すなわち winner section と winner fiber) を推定しながら同時にホモトピー全体を推定するわけである．

5 おわりに

以上，ホモトピーとファイバー束の立場から EM アルゴリズムを用いて SOM^2 のアルゴリズムの再記述することを試みた． SOM^2 は非線形多様体に関するパターン識別課題においてその性能を発揮するが，それについては他の発表 [3, 4, 5] を参照されたい．

謝辞 本研究の一部は九州工業大学 21 世紀 COE プログラムおよび科研費基盤 (C) (課題番号 17500193) の支援を受けて行われた．

参考文献

- [1] T. Kohonen, S. Kaski & H. Lappalainen, “Self-organized formation of various invariant-feature in the adaptive-subspace SOM,” *Neural Computation*, **9**, 1321-1344, 1997
- [2] T. Kohonen, “Generalization of the Self-organizing map,” *Proc. of IJCNN93*, 457-462, 1993
- [3] T. Furukawa, “SOM of SOMs : Self-Organizing map which maps a group of self-organizing maps,” *Lecture Notes in Computer Science*, **3696**, 391-396, 2005
- [4] T. Furukawa, “SOM2 as ‘SOM of SOMs,’” *Proc. of WSOM05*, 41-48, 2005
- [5] T. Furukawa, “SOM of SOMs: An Extension of SOM from ‘Map’ to ‘Homotopy,’” *Proc. of ICONIP2006*, 2006 (*to be appeared*)

連絡先

古川 徹生 (E-mail: furukawa@brain.kyutech.ac.jp)