

研究種目：若手研究（B）  
 研究期間：2007～2008  
 課題番号：19700220  
 研究課題名（和文）  
 非線形マニフォールドを学習する自己組織化マップの開発および実問題への適用  
 研究課題名（英文）  
 Self-Organizing Map with Nonlinear Distance Measure and Its Applications  
 研究代表者  
 堀尾 恵一（HORIO KEIICHI）  
 九州工業大学・大学院生命体工学研究科・准教授  
 研究者番号：70363413

研究成果の概要：データ集合の分布に基づいた非線形距離測度を定義するために、データ集合をグラフで表現し、それを自己組織化マップの学習アルゴリズムに組み込んだ。さらに、各データ点周りにエネルギー関数を考え、データ集合全体のエネルギー関数に基づくグラフ生成手法を開発した。これにより、計算コストの削減のみならず、上記手法のグラフ作成時に問題となる不完全グラフ（複数のグラフが構築される場合がある）が解消された。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,500,000	0	1,500,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,300,000	240,000	2,540,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・感性情報学・ソフトコンピューティング

キーワード：ニューラルネットワーク、自己組織化システム、非線形マニフォールド、距離速度、グラフ距離、エネルギー場

## 1. 研究開始当初の背景

クラスタリング、パターン分類・認識問題において、多次元ベクトルで表現されたデータを低次元空間に写像して、処理の簡略化やデータ間の類似性を視覚的に確認することは非常に重要であり、様々な次元削減手法が研究されている。古典的な手法として、線形変換に基づいた主成分分析（PCA）や多重判別分析（MDA）が良く知られており、様々な問題へ適用されてきた。次元削減で最も重要なことは、高次元データ間の類似度を出来る限り忠実に保存して、低次元へ写像すること

であるが、実問題で取り扱うデータ集合は、多くの場合、高次元空間内で非線形マニフォールドを形成することが知られており、従来の線形理論に基づく手法の限界が指摘されている。例として、ある人物を異なる角度から撮影した  $N$  枚の画像を考える。一般に、各画像は画素の輝度値からなる特徴ベクトルとして表現される。つまり、 $100 \times 100$  画素の画像の場合、 $10,000$  次元の特徴ベクトルとなり、その各要素は対応する画素の輝度値である。これら特徴ベクトルに対し、PCAを施す。実画像では画像1から画像  $N$  まで類似

度に応じて順序付けされている（画像1と画像の距離が最も大きい）が、PCAの低次元空間では、その序列が正確に保存されていない。この原因は、PCAでは、特徴ベクトル間の距離としてユークリッド距離に基づいているからであり、前処理としてPCAを採用した場合、クラスタリングやパターン分類の性能劣化を招く。

この問題を解決する手法が近年提案されている。主なものは、カーネル法を利用した手法やマンフォールド学習である。カーネル法は、特徴ベクトル間の距離を定義する際に、カーネル関数と呼ばれる非線形関数を利用することで、実空間での距離（上の例では、実写真における距離）を近似しようとするものであるが、カーネル関数の設計が困難であるなどの問題点を残す。マンフォールド学習は、データ分布からマンフォールドの形状を推定し、マンフォールド内での距離測度を定義するものであるが、マンフォールド形状の推定法や距離測度の定義などが確立されておらず、現在も盛んに研究が行われている。

申請者らはこれまでに、自己組織化マップ（SOM）と呼ばれるニューラルネットワークをクラスタリングやパターン分類・認識問題へ適用してきた。SOMは、PCAの拡張であると捉えることが可能であり、学習と呼ばれる繰り返し計算により、データ集合の分布に応じた非線形な主成分を獲得する手法と考えることができる。しかしながら、データ間の距離測度はユークリッド距離に基づいており、本質的にはPCAと同様の問題を残す。この問題を解決するために、申請者らは、SOMの拡張である適応部分空間SOM（ASSOM）にカーネル法を適用した非線形ASSOMを提案した。非線形ASSOMでは、カーネル関数を適切に設計することができれば、上の例に示すような実問題でも有用であったが、カーネル関数の設計法が確立されておらず、理論の一般化は困難であった。

また、申請者らは、マンフォールド学習に基づくSOMも提案した。提案手法では、データ集合の分布をグラフで近似し、グラフ上の距離に基づいて低次元空間へ写像を行う。上の例で考えると、データの分布している非線形マンフォールド上に距離が定義されるので、実写真の類似度を反映した適切な写像が実現される。しかしながら、グラフの作成やグラフ内の距離算出に膨大な計算コストを必要とし、データ数が多い場合やデータの次元が高い場合は適用が困難である。また、前頁で紹介したマンフォールド学習でも起こる問題であるが、データ数が極端に少ない場合、つまり、スパースなデータの場合、マンフォールドを高精度で推定できないので、適切な写像が実現されないという問題点がある。

## 2. 研究の目的

本申請研究では、以上の背景を踏まえ、カーネル法を適用した非線形ASSOMとマンフォールド学習に基づくSOMに対して、以下の3点を確立する。

(1) データが分布するマンフォールド形状の推定（近似）法の確立、

(2) マンフォールドに基づいたデータ間距離尺度の確立、

(3) それらに基づいたSOMの学習法の確立。

更に、これらを有機的に統合することで、非線形かつスパースに分布するデータに対して、データ間の類似度を保持した写像の実現を試みる。この際、カーネルの設計やマンフォールドの推定に際して、設計パラメータを極力少なくし、設計性の高い手法を目指す。また、確立した手法の理論的裏づけ、数多くの実問題へ適用してその有用性の検証も目的とする。

## 3. 研究の方法

(1) データが分布するマンフォールド形状の推定（近似）アルゴリズムの確立

マンフォールド形状の近似を行う最も単純な手法は、データを利用してグラフを構築することであるが、データ数が少ない場合、正確なグラフが構築できない。また、データ数が多い場合、膨大なメモリを必要とし、現実的ではない。本研究では、カーネル関数を利用したサポートベクターマシンにより、マンフォールド形状の近似を試みる。サポートベクターマシンは、関数近似などに多く適用され、高精度の近似が報告されている。本研究では、カーネル関数としてガウシアンカーネル関数を採用し、その広がりやデータの分散に基づいて決定する手法を試みる。具体的には、カーネルベース最大エントロピー学習（kMER）を改良することを考えている。図1左は、2次元データ分布とガウシアンカーネルの概念を示している。データが疎な箇所は分散の大きなカーネルで、密な箇所は分散の小さなカーネルで近似している。これが実現できれば、データがスパースに存在し、従来の手法で行っていたグラフによる近似が不可能な場合にも対応できると考えられる。

評価・検証として、まず、人工的に生成した2次元データを用いる。2次元空間で視覚的に性能を観測し、アルゴリズムの改良を行う。次いで、高次元データを用いた検証を行う。

(2) マンフォールドに基づいたデータ間距離尺度の確立

マンフォールドがガウシアンカーネル関数の集合で表現された場合、各カーネルにエ

エネルギーを定義して、その和をマンフォールド内のエネルギーと考えることが可能である。マンフォールド内の2点間の距離は、エネルギーの勾配に沿って2点間を結ぶ距離で定義可能であると考えられる。図1右は、エネルギーと距離の概念を示している。エネルギー勾配は、解析的に求めることは困難であると考えられるので、パラメトリックな方法でエネルギーを定義する必要があり、本研究の大きな課題の一つである。

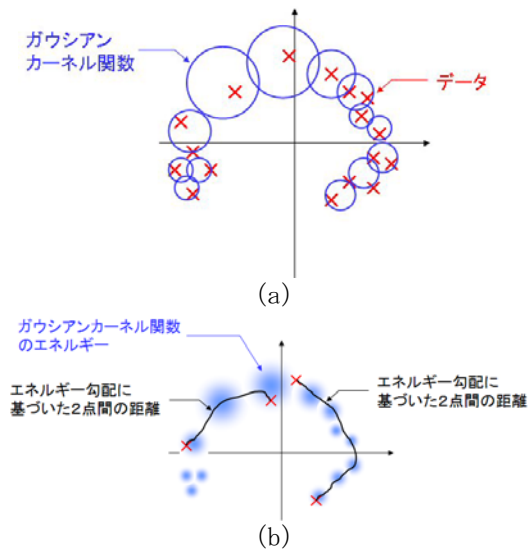


図1 (a) ガウシアンカーネルによるマンフォールドの近似, および (b) エネルギー勾配に基づく2点間の距離

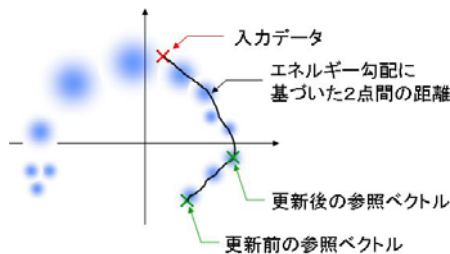


図2 SOM学習における参照ベクトルの更新概念図

(3) 近似したマンフォールドに基づく距離尺度を採用したSOM学習アルゴリズムの確立  
 確立した距離尺度に基づくSOM学習アルゴリズムを開発する。SOMの学習手順は、最整合ユニットの決定、参照ベクトルの更新の繰り返しである。最整合ユニットの決定は、マンフォールド内の距離尺度に基づいて容易に決定可能であるが、参照ベクトルの更新は、2点間を結ぶ曲線の内分点を求める必要がある(図2参照)。距離の定義としてエネルギー勾配を利用しているため、単純には内分点を算出できたいと考えられる。パラメトリ

ックな距離尺度の定義と同様に、本研究の大きな課題の一つである。

#### 4. 研究成果

データ集合の分布に基づいた非線形距離測度を定義するために、データ集合をグラフで表現し、それを自己組織化マップの学習アルゴリズムに組み込んだ。さらに、各データ点周りにエネルギー関数を考え、データ集合全体のエネルギー関数に基づくグラフ生成手法を開発した。これにより、計算コストの削減のみならず、上記手法のグラフ作成時に問題となる不完全グラフ(複数のグラフが構築される場合がある)が解消された。この結果を2008年9月に開催された国際会議WAC2008で報告した。データ分布からグラフを作成する方法は様々提案されているが、データ分布によっては、不完全グラフになったり、不必要なリンクを数多く生成したりすることが問題点として挙げられる。本手法は、それらの問題点を解決可能なものである。また、MNISTの顔画像データベースに提案手法を適用し、古典的な自己組織化マップと比較し、良好な分類結果が得られた。これらの成果から、データ集合の高次元空間内に内在する非線形なパラメータ推定が可能であることが示された。また一方で、学習安定性のためのバッチ処理アルゴリズムも考案した。現在、人工データでの検証はほぼ終了し、MNIST顔画像データベースでの検証を行っている。本バッチアルゴリズムでは、データ集合の重み付き平均を算出する必要があるが、上記エネルギー関数を利用してそれを実現した。本バッチアルゴリズムは、他の非線形マンフォールド学習手法にも適用が可能であると考えられ、応用範囲は非常に広いものであると考える。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

- ① 古賀崇了、堀尾恵二、升井一朗、山川烈、良否を含む顎矯正手術事例の自己組織化学習による集約とその手術計画立案への援用、知能と情報(日本知能情報フェジイ学会誌)、Vol. 20, No. 1, pp. 41-52、2008. 査読有
- ② Keiichi Horio and Takeshi Yamakawa, Handwritten Character Recognition Based on Relative Position of Local Features Extracted by Self-Organizing Maps, Int. J. of Innovative Computing and Control, Vol. 3, No. 4, pp. 789-798,

2007. 査読有

[学会発表] (計2件)

- ① Keiichi Horio, Takanori Koga, Takeshi Yamakawa, Self-Organizing Map with Distance Measure Defined by Data Distribution, Proc. of World Automation Congress (WAC2008), Hawaii, U.S.A., 28 Sep-2 Oct., 2008
- ② Keiichi Horio, Takanori Koga, Takeshi Yamakawa, SOM Based on Nonlinear Distance Measure Defined by Graph, Proc. of Int. Conf. on Soft Computing and Intelligent Systems (SCIS2008), pp.1705-1708, Nagoya, Japan, 17-21 Sep. 2008.

[その他]

ホームページ等

<http://www.brain.kyutech.ac.jp/~horio/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

堀尾 恵一 (HORIO KEIICHI)

九州工業大学・大学院生命体工学研究科・  
准教授

研究者番号：70363413