コホネンのニューラルネットワークについて†

徳高 平蔵*

1. はじめに

コホネンの自己組織化マップはあまりにも有名である。最初は1984年に「Self-Organization and Associated Memory」¹⁾として出版され中谷和夫先生らによる訳本が「自己組織化と連想記憶」として1993年に出版された²⁾。この時に初めて単行本としてSOM(自己組織化マップ)とLVQ(学習ベクトル量子化)の概念が整理され発表された。以後のSOMとLVQの工学的応用は目を見張るものが有る。それには、そのソフトがSOM_PAK、およびLVQ_PAK(<http://nucleus.hut.fi/nnrc/nnrc-programs.html>)としてコホネンの研究所よりインターネットを通して誰でも自由に最新のバージョンが手に入ると言うことが大いに影響している。

さて、以後のSOMおよびLVQの発展に新たに焦点を当ててコホネンは「Self-Organizing Maps」を1995年に出版した²⁾。その第9章にSOMおよびLVQの応用例が約1300件に渡る膨大な参考文献として紹介されている。私共は以前からSOMおよびLVQに興味を抱いており、SOMおよびLVQの工学的応用に焦点を当てて研究に取り組んでいる。だから、この新しい本が世に出た時、これは、私にとっては研究上のバイブルだと感じ、私共のグループ全員で翻訳にかかった。およそ1年後の昨年の6月に「自己組織化マップ」としてシュプリンガー・東京から出版さ

れている²⁾。その訳者前書きにも書いたが、「動くもの、動かないもの、そして、工学はもちろん、医学、農学、さらには社会科学の領域まであらゆる分野に応用できる脳の機能を模した視覚的情報処理の決定版、関係技術者、研究者、必携の書」と言うのが正直、私のこの本を訳した感想である。我々は主に、データ整理や処理に使っており、その代表例を後で紹介する。

さて、ニューラル・コンピューティングとして使われているニューラルネットワークは、ラメルハートらが導き出した階層型BP(誤差逆伝搬型)とホップフィールドが発展させた相互結合型に分かれる³⁾。コホネンのネットワークは階層型であり、そのネットワークは入力層と出力層の2層のみからなっている。動物の感覚様相の情報処理(位相マップ化)は、主として大脳皮質で行われている。脳での学習は教師なし学習である。つまり、最初(生まれた時)にランダムに配置された脳の処理ユニットは入力(刺激)によって学習し長時間経た後には、外界からの入力信号にうまく追従するように反応する。これをコホネンは学習アルゴリズムに活用している。以下、順を追って見てみよう。

2. SOM 法とは

さて、コホネン^{1,2)}は、生物の神経細胞、主として脳の情報処理の仕方を以下のような簡単な式にまとめて整理した。

$$m_i(t+1) = m_i(t) + h_{ci}(t)[x(t) - m_i(t)] \quad (1)$$

この式の意味は、いま神経細胞(ノード) i が時刻 t

† Kohonen's Neural Network
Heizo TOKUTAKA

* 鳥取大学工学部電気電子工学科

で処理している情報処理能力を $m_i(t)$ とするとき、外部から入力信号 $x(t)$ が入ってきた。このとき、細胞は、この入力信号を学習して次の時刻には入力信号により近い情報処理能力 $m_i(t+1)$ を持つようになる。この時 $x(t)$ は n 次元の入力ベクトルであれば、要素 $x(t) = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n]$ を持つ。また、 $m_i(t)$ は参照ベクトルとも呼ばれ n 次元の要素 $m_i(t) = [\mu_{i1}, \mu_{i2}, \dots, \mu_{in}]$ で表される。そして、 $h_{ci}(t)$ は近傍関数で後で考察する。なお、 $t = 0, 1, 2, \dots$ は離散時間座標である。

さて、式(1)の関係から分かるように SOM は 2 層のネットワークである。この第 1 層は n 次元の入力層 $x(t)$ であり第 2 層は出力を視覚的に見るため普通 2 次元に配列されている。第 2 層の競合層のベクトルは参照ベクトル $m_i(t)$ で表され、入力層の次元に合らし n 個の要素を持っている。この様子を図 1 に表している。

図 1 多次元入力ベクトルから 2 次元競合層内の単一参照ベクトル(ユニット) i との結合の様子

図 2 a, b は勝者 c の近傍の二つの例。この時、学習の始めでは近傍を大きくとり、学習が進むに連れて近傍の数を減らして行く ($t_1 < t_2 < t_3$) (文献(2)図 3.2 より)

学習は次の様になされる。入力ベクトル $x(t)$ は、ある測度、例えばユークリッド距離 $|x - m_i|$ を最小にするノード i を探し、それに添え字 c を付ければこれは以下の式で定義される。

$$c = \operatorname{argmin} |x - m_i|, \text{つまり}$$

$$|x - m_c| = \min |x - m_i| \quad (2)$$

式(2)で決められた参照ベクトルを持つユニットを勝者ユニットと呼ぶ。式(1)で学習が進む時、近傍関数は以下のように定義する。図 2 のように勝者の回りに近傍集合を用意する。

(a)、(b) どちらでも問題に合わせて近傍の形は考える。さて、近傍のサイズは $N_c = N_c(t)$ で時間の関数である。どちらの場合でも学習の初期には近傍を大きく取っておき、学習が進んでくると段々に近傍のサイズを減らして行く。最後には、勝者ユニットのみを学習させるようにする。式(1)による学習中、 N_c 内のノードに関しては、 $h_{ci} = \alpha(t)$ で N_c 外のノードに関しては、 $h_{ci} = 0$ である。この時、 $\alpha(t)$ の値を学習率係数と呼び、 $0 < \alpha(t) < 1$ で値を持つ。 $\alpha(t)$ と N_c の大きさは両方とも学習時間が経つにつれて普通、単調減少させる。 $\alpha(t)$ は例えば次の式で定義しても良い。

$$\alpha(t) = \alpha_0 (1 - t/T) \quad (3)$$

ここで、 α_0 は、 α の初期値であり普通 0.2~0.5 の値を選ぶ。 T は行われるべき学習での予定された全更新回数である。ただし、式(1)中、比例係数の $\alpha(t)$ は、学習の始めでは大きな値を取るようにし、学習が進んでくるとだんだんと小さい値に設定する。結局、以上の議論をまとめて $h_{ci}(t) = N_c(t) \alpha(t)$ と考えた方が分かりやすいかも知れない。

コホネンの SOM アルゴリズムを整理すると以下になる。

1. 入力ベクトルと最も良く一致する競合層での勝者ユニット(参照ベクトル)を探す。
2. この勝者ユニットの近傍のユニットを式(1)に従って更新する。学習(更新回数)が進むにつれて、近傍のサイズを減らし、また学習率係数の値も例えば式(3)のようにして減らして行く。

SOM 法は多次元データを 2 次元にマップ化する時に威力を発揮する。

3. SOM の簡単な応用例

3.1 多次元入力から 2 次元 SOM マップの作成

多次元入力から 2 次元 SOM マップを作成する例として表 1 の例を考えて見よう。これは色々な動物をそれぞれ 13 次元の属性で区別する。各属性は有れば 1、無ければ 0 の値を持つ。つまり、各動物はそれぞれ 13 次元の入力ベクトルを持つ。それを、例えば 10×10 の 2 次元ニューロン・ユニットを持つ SOM マップに射影すると、図 3 のようになる。

図から分かるように 16 の動物は、属性関係の類似なものによりまとまって仕分けされている。例えば、「鳥」は格子の左側に集まっており、「ト

表 1 動物名とそれらの属性(文献(2)表 3.4)

		メ ハ ト	ン ド リ	ア ヒ ル	チ ヨ ウ	ク ロ ウ	ラ タ カ	グ ワ シ	キ ツ ネ	イ ヌ	オ カ ミ	ネ コ	ト ラ	ライ オン	ウ マ	シ マ ウ	ウ シ
小さい		1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
中ぐらい		0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0
大きい		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1
2本足	を持つ	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4本足		0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
毛		0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ひづめ		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
たてがみ		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1	1	0
羽		1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
狩猟	を好む	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	0	0
走ること		0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1	1	1	0
飛ぶこと		1	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
泳ぐこと		0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

図 3 表 1 の行列に示す属性(13 次元)の入力内容をコホネン型ネットワークに学習させた後、2 次元出力マップで表現した。類似度に従ってグループ化されているのが分かる(文献(2)図 3.22 より)

ラ」、「ライオン」、「ネコ」の様な「狩猟者」は右側でまとまり、そして「シマウマ」、「ウマ」、「ウシ」のような「平和的」な動物は格子の上側に配置されている。

さて、図 3 の例を最大限に利用し有効に働く具体例として化学分析データへの応用を考えてみる。図 3 の例では、属性値が 0,1 で表されていたが今回はそれぞれの属性項目で規格化して 0 と 1 の間の値すなわち実数値を用いても良いことにする。ここで図 4 のオージェ電子分光分析(AES)のグラフを考えてみよう。

先程の図 3 の例では、13 次元の要素があったが、この AES の例では、横軸のエネルギーきざみを次元と考える。しかし、あまり次元数は大きくは取れないので、この例では、とりあえず 10 eV ずつ平均して 20~982 eV 迄をほぼ 100 次元にした。縦軸が信号の大きさである。この例では、規格化して 0 と 1 の間の値が信号値になっている。図 3 と同様の自己組織化マップ(SOM)を描き、そのユニット(ニューロン)間の距離をグレー(灰色)レベル(そこでは距離がある所は灰色が濃くなる)で表したものをグレーマップと呼ぶが、結果を図 5 に示す。

図 5 から分かるように Co-Ni 系の合金は、Ni 100%から Co 100%まで非常に系統的に並んでいるのが分かる。そして、グレーレベルではっきりと示されているように距離はかなりあるが、Cu が次に並んでいる。さらに Ag、Au とつづいており、それぞれグループを形成している。

図 4 15 の化学元素物質からの運動エネルギーが 20~1,000 eV 迄の AES スペクトル。図中 STND は標準物質のことである(文献(4)Fig.(2)より)

図5 図4に示した15化学元素物質からのAESスペクトルデータを使っての2次元強化SOM(文献(4)Fig.(3)より)

さて、今まではバックグラウンドを引いたり、ピーク分離をしたりしてAESのグラフを解釈していた。しかし、この方法によればスペクトルの形をすべて同等の価値を持った情報として取り扱っている。実験で得られたAESグラフを用いて図5のようにCo-Ni合金は見事に系統的に分離されている。なお、図5でラベルづけされた各点は正確に元のスペクトルの形を学習していることを付記しておく。

4. 学習ベクトル量子化(LVQ)法について

コホネンはSOMの特徴マップをクラス分け問題に発展させた。今、入力ベクトル $x(t)$ が用意された色々なクラス S_s の中で特にクラス S_r に属するものとする。この時、最も近い勝者ベクトル $m_c(t)$ はクラス S_r によってラベルづけされるものと仮定する。よって学習則は、正しく分類された場合には報酬を与え、誤って分類された場合には罰を加えると言うような教師付きの学習アルゴリズムとし、次のように定義される。

$$m_c(t+1) = m_c(t) + \alpha(t) [x(t) - m_c(t)]$$

もし $S_s = S_r$ ならば

$$m_c(t+1) = m_c(t) - \alpha(t) [x(t) - m_c(t)]$$

もし $S_s \neq S_r$ ならば

$$m_i(t+1) = m_i(t)$$

但し、 $i \neq c$

なお、この場合、学習則からも分かるようにSOMのような近傍と言う概念はなくて選ばれた

勝者ベクトル $m_c(t)$ のみが修正される。修正の方向は、分類が正しい場合は正(+)で、間違っている場合には負(-)である。この方法はより詳細に発展されてLVQ2、LVQ3、OLVQ法などが発表されている^{1,2)}。

5. まとめ

図3は、多次元→2次元への射影マップの代表的な例であるが、これは非常に広範囲で利用されている。ここでは化学分析スペクトルデータの例を取り上げた。人間の脳はなんらかの方法で空間マップ化を行っているが、このように、この自己組織化マップの方法は、式(1)のように非常に簡単なアルゴリズムでありながら脳の空間マップ化の情報処理の仕方に非常によく似ているので、いろいろなデータ解析の分野に応用され成功している。その多くの例は文献[2]で紹介されているので参考にさせていただきたい。また、SOMとファジィを組み合わせたFuzzy-SOMについては、文献[2]に多くの参考文献があるので省略する。

参 考 文 献

- [1] T.Kohonen, "Self-Organization and Associative Memory" (Springer Series in Information Sciences, Volume 8, 1984).
T.コホネン, "自己組織化と連想記憶" 中谷和夫 監訳(シュプリンガー・フェアラーク東京, 1993).
- [2] T.Kohonen, "Self-Organizing Maps" (Springer Series in Information Sciences, Volume 30, 1995).
T.コホネン, "自己組織化マップ" 徳高平蔵, 岸田悟, 藤村喜久郎 訳(シュプリンガー・フェアラーク東京, 1996).
- [3] 上坂吉則, "ニューロコンピューティングの数学的基礎" (近代科学社, 1993).
- [4] 徳高平蔵, 吉原一紘 "化学分析での一つのブレイクスルー—自己組織化マップ(SOM)の応用—" PSA-97 実用表面分析講演会 予稿集 pp.22-23, 1997.

(1997年7月20日 受付)

[問い合わせ先]

〒680 鳥取市湖山町南4丁目101

鳥取大学工学部電気電子工学科

徳高 平蔵

TEL: 0857-31-5242 FAX: 0857-31-0880

E-mail: tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp