クラスタリングとボロノイ分割を利用した ニューラルネットワークの構築法*

天谷 賢治^{*1}, 遠藤 雅和^{*2}, 青木 繁^{*1}

Construction of Neural Network using Cluster Analysis and Voronoi Diagram

Kenji AMAYA^{*3}, Masakazu ENDO and Shigeru AOKI

^{*3} Tokyo Institute of Technology, 2-12-1, O-okayama, Meguro-ku, Tokyo, 152-8552 Japan

An effective method for designing neural network to classify patterns in the multidimensional feature space is introduced. Voronoi diagram is constructed over points in feature space which represents input teachers in order to realize the desired classification. In order to reduce the size of neural network and to make the learning process efficiently, clustering procedure which enables to manage a number of teachers in a lump is implemented. Two examples demonstrate that the present method gives stable result and a calculation time is smaller than that of back propagation method.

Key Words: Neural Network, Learning, Stability, Artificial Intelligence, Voronoi Diagram, Cluster Analysis

1. 緒 言

脳神経系をモデル化したニューラルネットワーク⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾は、人間に近い情報処理を行うことが可能であり、様々な分類・判定問題に適用される。

しかし、複雑な分類問題に適用した場合、従来のバックプロパゲーション則(以下BPと略記)を用いた学習法では、そのアルゴリズムが繰り返し計算であるため、学習に長時間を要し、中間層数やそのユニット数によっては学習が終了しない場合がある。また、学習に使用しない未知の入力に対しては誤判定が多いなどの問題点があった。

一方、都市・地域問題などでよく用いられるボロノイ分割⁽⁵⁾は与えられた点の近傍をその点の勢力圏と定義しているため、上記の問題を改善するのに、効果的な手段の一つであると考えられる。

そこで本研究では、ニューラルネットワークの重み決定にボロノイ分割を利用し、分類問題に対して効果的なニューラルネットワークを構築する手法を開発した。

さらに、入力教師を、クラスタリングの手法を用いていくつかのクラスに融合し、学習を効率化することにより、ニューラルネットワークの学習時間を短縮させた。

本手法を、2次元入力の分類問題および、近年自動

的なシステムの開発が求められている米粒の品質判定システムに対して、実際に適用し、結果を従来法との比較することにより、本手法の有効性を示した。

2. ボロノイ分割を利用した重みの決定

2.1 ニューラルネットワーク

本研究で用いる階層型ニューラルネットワークは、3層のニューラルネットワークを論理和によって複数連結した、総階層数4の図1に示すような構造とする。

個々のユニットの入出力関係は、第 k 層第 i 番ユニットの入力および出力をそれぞれ I_i^k および O_i^k とすると

$$I_i^{k+1} = \sum_{j=1}^{m_k} O_j^k W_{ji}^k - \theta_i^{k+1} \dots\dots\dots (1)$$

$$O_i^{k+1} = f(I_i^{k+1}) \dots\dots\dots (2)$$

Fig. 1 Layered neural network model

* 原稿受付 1999年1月18日。

^{*1} 正員, 東京工業大学情報理工 (〒152-8552 東京都目黒区大岡山2-12-1)。

^{*2} 東京工業大学大学院。

E-mail: kamaya@mei.titech.ac.jp

Fig. 2 Teacher points divided with super plane

で表される。ここで、 m_k は第 k 層のユニット数、 W_{ji}^k は第 k 層 第 j 番ユニットから第 $k+1$ 層 第 i 番ユニットへの結合の重み、 θ_i^k はしきい値、 f はユニットの入出力関数である。

ニューラルネットワークにおいて、第 k 層の全ユニットおよび、第 $k+1$ 層の一つのユニットの間の重みと、しきい値を決定する場合を考える。第 k 層の全ユニットからの出力 $O_j^k (j=1, \dots, m_k)$ が作る m_k 次元の空間を考えると、第 t 番目 ($t=1, \dots, n_T$) の教師に対する第 k 層の出力 (${}^tO_1^k, {}^tO_2^k, \dots, {}^tO_{m_k}^k$) は、空間内の一点に対応する (以下、この点を ${}^tO^k$ と表記する)。一方、第 $k+1$ 層第 i 番目 ($i=1, \dots, m_{k+1}$) のユニットの入力は式 (1) で表される。

ここで $\sum_{j=1}^{m_k} O_j^k W_{ji}^k - \theta_i^{k+1} = 0$ は空間内の一つの超平面对応する。したがって、第 k 層から第 $k+1$ 層のすべてのユニットへの重み W および、しきい値 θ を決める操作は、 m_{k+1} 個の超平面を用いて、 n_T 個の点 ${}^tO_j^k$ を含む空間を分割するという事に相当する。すなわち、ニューラルネットワークの重みは、標本空間内の分割超平面を表す一次式の係数となる。(6)(7)

以上を模式的に表したのが Fig.2 である。すなわち、同図上のように $m_k = 2, m_{k+1} = 3, n_T = 5$ な

るニューラルネットワーク (の一部) は、同図下に示されるように、5 点を含む 2 次元空間を 3 本の平面 (ここでは 2 次元なので直線) が分割していることに対応する。

2.2 計算手法

本研究では、分割超平面の決定に、点配置に対し、“縄張” の概念を合理的に与えるボロノイ分割を適用した。(8) すなわち、入力教師を母点としボロノイ図を作成し、ボロノイ分割面を表す一次式を求め、その係数をニューラルネットワークの第 1 層および第 2 層間の重みとして用いた。

まず、例として図 3 下図に示すような 5 つの分割面から成るボロノイ領域 V^t を考える。ボロノイ分割面 (ここでは 2 次元なので直線) ① ~ ⑤ を表す 1 次式の係数を第 1 層および第 2 層間の重みとして用いる。したがって、第 2 層のユニット数は $m_2 = 5$ となる。第 2 層のユニットの入出力関数として $[0,1]$ のステップ関数を用いると、第 2 層の 5 つのユニットは、入力した点が、分割面 ① ~ ⑤ に対してどちら側にあるかを 0 か 1 で出力する。第 2 層のユニットの 0, 1 の出力は、第 1 層および第 2 層間の重みの正負を逆にすることで、操作することができる。

V^t 内部の入力に対して、第 2 層の全ユニットが 1

Fig. 3 3-layered neural network and region defined by 3rd layer output

Fig. 4 4-layered neural network and region defined by 4th layer output

を出力するように第 1 層および第 2 層間の重みを操作し, この 5 つのユニットを論理積によって結合する. 1 つのボロノイ領域は, 凸多面体であるので, 第 3 層のユニットへの入力 I_1^3 は, V^t 内部の入力に対しては 5, V^t 外部の入力に対しては 4 以下の値となる.

ここで, 第 3 層のユニットの入出力関数として, $(m_2 - 1)$ をしきい値とするステップ関数とすれば, V^t 内部の入力に対して 1, V^t 外部の入力に対して 0 が出力される. すなわち一つのボロノイ領域の内部を指定する 図 3 上図のような 3 層ニューラルネットワークが構成できる.

入力教師を母点としてできたボロノイ領域全てについて, 上述の方法を用いて, その内部を指定する 3 層ニューラルネットワークを構築する. 同じカテゴリーに属する 3 層ニューラルネットワークを論理和によって連結することによって, カテゴリーを指定するニューラルネットワークが構築できる. (図 4) 全カテゴリーに対して, 4 層ニューラルネットワークを作成することにより, 分類問題を完全に解くことができる全 4 層のニューラルネットワークが構築

できる.

3. クラスタリングの導入

前節までに示したニューラルネットワークの構成では, 教師数 n_T 個の 3 層ニューラルネットワークの構築が必要である. 第 2 層のユニット数は入力教師をボロノイ分割した際のボロノイ分割面の数となる. 教師数が多い場合や, 入力教師の分布が複雑で, ボロノイ分割面が多数できる場合, ニューラルネットワークの構造が大きくなってしまい, 学習や, 学習後の計算に長時間を要するといった問題がある.

そこで本研究では, クラスタリングの手法を用いて, 予め性質の似た教師同士を一つのクラスタに融合し, 各クラスタを一括して処理することにより, ニューラルネットワークの学習を効率化した.

入力教師に対し階層型クラスタリングの完全連結法⁽⁹⁾を適用する. クラスタリングは, 異なるカテゴリーに属する入力教師が同じクラスタに入るか, 二つのクラスタが重なるまで行う (図 5 中図参照).

階層型クラスタリングの完全連結法とは, 2 つのクラスタの構成要素の中で最も離れた構成要素間のユークリッドノルムをクラスタ間の類似性と定義しており, 全てのクラスタ間の類似性の中から最も類似したクラスタの対を順に融合していく手法であ

Fig. 5 Clusters of input teachers using cluster analysis and voronoi diagrams of super spheres

る。この手法によって生成するクラスタは、全ての構成要素を含む最小の超球となる。

クラスタリングによって得られた超球を基に、球のボロノイ分割⁽¹⁰⁾を行い、分割超平面を決定する(図 5 下図参照)。

球のボロノイ分割は、Laguerre 幾学に基づいた方法で行う。これは、 m 次元空間内に n 個の球 $S_i (i = 1, \dots, n)$ が与えられた時、 S_i の中心を $(x_{i1}, \dots, x_{im})$ 、半径を r_i として、空間上の点 $P(x_1, \dots, x_m)$ と S_i との距離 $d_i(P)$ を、 P から S_i への接線の長さ(の平方)と定義したボロノイ分割である。すなわち、

$$d_i(P) = \sum_{j=1}^m (x_j - x_{ij})^2 - r_i^2 \dots\dots\dots (3)$$

である。

この距離を用いて、与えられた球の中心を母点としてボロノイ分割を行うと、図 6 のような、母点に円の半径分の重みを持たせた形のボロノイ図ができる。

4. 応用例

4.1 2 次元入力分類問題

本手法の有効性を示すために、第一の例題として、

Fig. 6 Voronoi diagram for super spheres

Fig. 7 Employed teachers

Fig. 8 Employed teachers after clustering

Fig. 9 Evaluation of neural network using voronoi diagram and cluster analysis

Fig. 10 Evaluation of neural network using backpropagation

2 次元の入力を 4 種類ののカテゴリに分類する問題を考える。用いるニューラルネットワークは、入力層 2 ユニット、出力層 4 ユニットとする。

図 7 に入力教師となる 2 次元データを示す。教師信号は各カテゴリ 7 点ずつ、合計 28 点与えた。各教師は A, B, C, D のいずれかのカテゴリに属する。

図 8 に、入力教師をクラスタリングした結果を同時に示す。本例題では、入力教師が 10 個のクラスタに融合した。このクラスタを効率化された教師として、ニューラルネットワークを構築すると、第 3 層の

ユニット数が 34 個となった。本例題に対して、クラスタリングを用いずにニューラルネットワークを構築した場合、第 3 層のユニット数は 138 個であった。入力教師をクラスタリングすることにより、ユニット数は大幅に減少し、学習時間も約半分に短縮した。

学習終了後、このニューラルネットワークに適当な入力を与えた際の出力結果を図 9 に示す。図 10 は、本例題に対して、BP を用いてニューラルネットワークを学習した場合の出力結果である。本手法と BP の学習時間を表 1 に示す。

BP を用いた学習では、教師信号の近傍にも、判定不能領域（図 10 中空白部）が存在しており、判定結果が安定していない。それに対して、本手法を用いた場合は短時間の学習で、分類が安定して行われていることがわかる。

Table 1 Execution time of each leaning algorism

Learning algorism	Number of unit	Execution time (sec)
Backpropagation	100	49.78
Without clustering	138	0.18
With clustering	31	0.11

4.2 米粒分類問題

第二の例題として、近年専門家の減少に伴い、自動化の求められている米粒判定システムに本手法を適用する。⁽¹¹⁾

図 11 に米粒判別器の構成図を示す（Kett 科学研究所製 RN-500）。⁽¹²⁾ 同装置はハロゲン光源、RGB+R₂ 測色センサ、粒搬送円盤およびマイクロコンピュータなどにより構成されている搬送円盤によって送られてきた米粒に光源から導いた光を照射する。反射光と透過光の R(赤)G(緑)B(青)R₂(近赤)の各色調を識別するセンサの計 8 つの信号が A/D 変換器を経てマイクロコンピュータに入力される。このデータを用いて、粒質を 5 区分（整粒・未熟粒・着色粒・死粒・もみ）に分離・選別する。⁽¹³⁾

1 つの米粒の色調特性は“8 次元空間”の点として表現される。本判別問題はこの空間を 5 つの領域（5 種の粒質区分）に分割する問題に帰着される。

図 12 に用いたニューラルネットワークの構造を示す。8 つの入力ユニットには反射光透過光の RGB+R₂ の信号を与える。第 4 層の各ユニットには 5 種類の粒質区分が与えられる。

実験は前述の測定器により測定した米粒の光学特

性から、米粒を 5 つの品質区分に分類・判定するものである。あらかじめ専門家の目視判定によって 5 区分に分類された米粒の光学特性値を一粒ずつ測定した。すなわち、一つ一つの米粒に対して、その光学特性値と、それがどのカテゴリーに属する米粒であるかが与えられている。ニューラルネットワークの 8 つの入力ユニットにはそれぞれ透過光および反射光の各 R, G, B, R₂ を与え、5 つの出力ユニットは 5 つの品質区分を対応させた。教師数は 5 種類の米粒をそれぞれ 10 粒ずつ、合計 50 粒を用いた。

比較のために BP を用いた場合についても学習および判別実験をおこなった。この場合については、入力層のユニット数を 8 ユニット（米 1 粒に対する色調信号数）、出力層のユニット数を 5 ユニット（区分数）とした。中間層の数は 1 層または 2 層、中間層のユニット数は 10 ~ 1000 の範囲で種々に変えて学習を行った。教師数は 5 種類の米粒をそれぞれ 10 粒ずつ、合計 50 粒を用いた。入出力関数は、入力層が線形 1 次関数、その他の層は全てシグモイド関数を用いた。図 13 に学習回数に伴うネットワークの全体誤差の変化を示す。⁽¹⁴⁾ 全体誤差は、中間層数、中間層のユニット数に関わらず、学習回数が 1000 回

Fig. 11 Grain sorter

Fig. 12 Structure of neural network

Fig. 13 Transition of residual during backpropagation process

を越えたあたりから一定になり、100000回を越えても変化が無く極小値に収束した。この時点における荷重およびしきい値で、米粒の判別を行ったが、教師として与えた50粒の米に対しても、正しい判定結果は得られなかった。荷重の初期値が適当に与えられた場合や、中間層のユニット数を非常に大きくした場合、学習が完了することがあると思われるが、学習には非常に長時間を要すると思われる。

クラスタリングおよびボロノイ分割を利用した学習法を用いた場合では、入力層のユニット数を8ユニット(米1粒に対する色調信号数)、出力層のユニット数を5ユニット(区分数)とした。中間層の数は2層として学習を行った。教師数は5種類の米粒をそれぞれ10粒ずつ、合計50粒を用いた。この学習法では必要とする中間層のユニット数も合理的に決定される。本例題においては第1および第2の中間層にそれぞれ1330個および39個のユニット数を要した。学習に用いない別の650個のデータを入力して、本学習の効果を確認した。正解率は98.0%であり、BPを用いた場合と比較して、高い正解率を得た。

5. 結論

本研究では、ボロノイ分割を用いた重みの決定により、分類問題に対して効果的なニューラルネットワークの構築法を提案した。さらに、学習に用いる入力教師を、予めいくつかのクラスに融合し、学習を効率化することにより、ニューラルネットワークの学習時間を短縮した。本手法により、学習が完了する中間層数・ユニット数が合理的に決定でき、従来の学習法であるBP則に対して、学習時間は非常に短縮された。

また、本手法を2次元入力の分類問題および、米

粒判別システムに適用し、従来の手法と比較し、本手法の有効性を示した。

なお、本研究を遂行するにあたり、貴重な御助言およびデータを頂いたケット科学研究所の沓掛氏および結城氏に感謝致します。

文 献

- (1) 菊池豊彦, 入門ニューロコンピュータ, オーム社 (1990)
- (2) 中野馨, ニューロコンピュータの基礎, コロナ社 (1990)
- (3) James A Anderson, Andras Pellionisz, and Edward Rosenfield, Neurocomputing2, MIT Press, 1998
- (4) 市川紘, 階層型ニューラルネットワーク 非線形問題解析への応用, 共立出版株式会社 (1993)
- (5) 高木, 形の数理, 朝倉書店 (1992)
- (6) 森谷, 天谷, 青木, ニューラルネットにおける重みの新しい決定法, 日本機械学会論文誌, 1994, 60, 57A, 284-289
- (7) 森谷, 天谷, 青木, ウェーブレット変換とニューラルネットワークを用いた予き裂長さの推定, 日本機械学会論文誌, 1996, 62, 598A, 70-77
- (8) N.K.Bose, Amulya K.Garga, Neural Network Design Using Voronoi Diagrams, IEEE TRANSACTION ON NEURAL NETWORKS, 1993, 4, 778-787
- (9) M.R.Anderberg, 西田英郎 監訳, クラスタ分析とその応用, 内田老鶴圃 (1988)
- (10) 腰塚武志 [ほか], bit 別冊 計算幾何学と地理情報処理, 共立出版 (1986)
- (11) 佐竹, 古谷, 下原, 農業機械学会学会誌, 54, 5, 67-75 (1992)
- (12) ケット製品全集, 株式会社ケット科学研究所 (1995)
- (13) RN-500 米判別器マニュアル, 株式会社ケット科学研究所, (1995)
- (14) The MathWorks Inc., Neural Network TOOLBOX For Use with MATLAB, サイバネットシステム株式会社 (1994)