On nearly absorbing state class in self-organizing maps with inner-product iterative learning

内積型反復学習をもつ自己組織化マップにおける準吸収的状態クラスについて

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. 内積型反復学習をもつ自己組織化マップモデルと定式化

本報告は Kohonen 型アルゴリズムとして知られる自己組織化マップを数学的な視点で扱う．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，統計的への応用が可能であり，クラスター分析，音声・テキスト分析など，多岐の応用をもつ．また，組み合わせ最適化への応用も知られ，巡回セールスマン問題の解法等にも用いられている，

自己組織化マップにおいて，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反復学習過程における数理特性について考察する．特に，学習の過程において，モデル関数が一定の状態特性を帯びるようになる吸収特性，準吸収特性に焦点をあてる．自己組織化マップにおける反復学習で用いられる学習写像としては，凸結合型が古くから使用され，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，比較的に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ついて考察する．総じて計算量が多い自己組織化マップ学習にあって，点乗積型学習写像は実計算において比較的に速いなどの特徴をもつ．本報告では，内積型学習写像下における学習の前後におけるモデル関数の状態保存に関する結果を与える．

本報告では，内積型学習写像をもつ自己組織化マップを扱い，[6] で導入されている内積型学習と同様の 1 次元のノード配列構造を仮定する．本モデルはノード，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定式化される．

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

(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 $m : I \to V$ 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:

$$N_1(i) = \left\{ j \in I \;\middle|\; |j - i| \leq 1 \right\} \quad (i \in I). \tag{1}$$

(b) 学習係数: $\alpha > 0$.

(c) 更新後の値: 各 m_k，x_k に対して

$$m_{k+1}(i) = \begin{cases} \dfrac{m_k(i) + \alpha x_k}{\|m_k(i) + \alpha x_k\|} & \left(i \in \displaystyle\bigcup_{i^* \in \operatorname{argmax}_{j \in I} \langle m_k(j), x_k \rangle} N_1(i^*) \text{ のとき} \right) \\ m_k(i) & \left(i \notin \displaystyle\bigcup_{i^* \in \operatorname{argmax}_{j \in I} \langle m_k(j), x_k \rangle} N_1(i^*) \text{ のとき} \right) \end{cases} \tag{2}$$

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ている（[2] 等）．ここでは，モデル関数がこのようなクラスへ推移する性質を吸収性または準吸収性と呼ぶ．

2. 内積型学習によるモデル関数の状態保存性

内積型学習写像を用いた自己組織化マップにおいて，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し，その吸収性に係わる状態保存性ついて考える．次の定理は内積型学習写像下におけるモデル関数の状態保存に関する結果である．

定理 1　$(V, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ を内積空間とし，学習プロセス (iv)-(a)(b)(c) をもつ内積型学習写像をもつ自己組織化マップ

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

を考える．現在のモデル関数 m と入力 x に対して，

$$\|m(i)\| = \|m(i+1)\| = \|m(i+2)\| = 1, \tag{3}$$

$$\langle m(i), m(i+2)\rangle \geq 0, \tag{4}$$

$$\langle x, m(i+2)\rangle \geq 0 \tag{5}$$

を仮定する．

$$\operatorname*{argmax}_{j\in I}\langle m(j), x\rangle = \{i\}, \tag{6}$$

であるとき，x を学習した後の m の更新モデル関数を m' として，次の不等式で与えられる内積条件が保存される．すなわち

$$\langle m(i) - m(i+1), m(i+2) - m(i+1)\rangle \leq 0 \tag{7}$$

ならば

$$\langle m'(i) - m'(i+1), m'(i+2) - m'(i+1)\rangle \leq 0 \tag{8}$$

が成り立つ．

上の定理において，(3) は一定回数の学習の後に高い確率で成り立ち，この意味で自然な仮定であることに注意する．証明のアウトラインを与える．

証明　仮定 (3) と条件 (6)，(7) を用いることにより

$$\begin{aligned}
&\bigl\langle m'(i) - m'(i+1),\ m'(i+2) - m'(i+1)\bigr\rangle \\
&\quad = \left\langle \frac{m(i)+\alpha x}{\|m(i)+\alpha x\|} - \frac{m(i+1)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|},\ m(i+2) - \frac{m(i+1)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right\rangle \\
&\quad \leq \left\langle \frac{m(i)-m(i+1)}{\|m(i)+\alpha x\|},\ m(i+2) - \frac{m(i+2)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right\rangle \\
&\qquad\quad + \left(\frac{1}{\|m(i)+\alpha x\|} - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right) \\
&\qquad\quad \times \left\langle m(i+1)+\alpha x,\ m(i+2) - \frac{m(i+1)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right\rangle \\
&\quad \leq \frac{1}{\|m(i)+\alpha x\|}\left(1 - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right)\langle m(i)+\alpha x, m(i+2)\rangle \\
&\qquad\quad - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\left(1 - \frac{1}{\|m(i)+\alpha x\|}\right)\langle m(i+1)+\alpha x, m(i+2)\rangle
\end{aligned}$$

が成り立つ．ここで，不等式 (7) より

$$\langle m(i), m(i+2)\rangle \leq \langle m(i+1), m(i+2)\rangle$$

が得られ，また，仮定より $\langle m(i+1), x\rangle < \langle m(i), x\rangle$ が成り立つので，

$$\frac{1}{\|m(i)+\alpha x\|}\left(1-\frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right) < \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\left(1-\frac{1}{\|m(i)+\alpha x\|}\right)$$

が成り立つ．以上から，不等式 (8) が成り立つことが示される． □

定理 2 $(V, \langle\cdot,\cdot\rangle)$ を内積空間とし，学習プロセス (iv)-(a)(b)(c) をもつ内積型学習写像をもつ自己組織化マップ

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

を考える．現在のモデル関数 m と入力 x に対して，

$$\|m(i)\| = \|m(i+1)\| = \|m(i+2)\| = 1, \tag{9}$$

$$\langle m(i), m(i+2)\rangle \geq 0, \tag{10}$$

$$\langle x, m(i)\rangle \geq 0 \tag{11}$$

を仮定する．

$$\operatorname*{argmax}_{j\in I}\langle m(j), x\rangle = \{i+2\}, \tag{12}$$

であるとき，x を学習した後の m の更新モデル関数を m' として，内積条件が保存される．すなわち

$$\langle m(i)-m(i+1), m(i+2)-m(i+1)\rangle \leq 0 \tag{13}$$

ならば

$$\langle m'(i)-m'(i+1), m'(i+2)-m'(i+1)\rangle \leq 0 \tag{14}$$

が成り立つ．

証明のアウトラインを与える．

証明　仮定 (9) と条件 (12)，(13) より

$$
\begin{aligned}
&\langle m'(i) - m'(i+1),\ m'(i+2) - m'(i+1)\rangle \\
&\quad = \left\langle m(i) - \frac{m(i+1)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|},\ \frac{m(i+2)+\alpha x}{\|m(i+2)+\alpha x\|} - \frac{m(i+1)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|} \right\rangle \\
&\quad \le \left\langle m(i) - \frac{m(i)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|},\ \frac{m(i+2)-m(i+1)}{\|m(i+2)+\alpha x\|} \right\rangle \\
&\qquad + \left(\frac{1}{\|m(i+2)+\alpha x\|} - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|} \right) \\
&\qquad \times \left\langle m(i) - \frac{m(i+1)+\alpha x}{\|m(i+1)+\alpha x\|},\ m(i+1)+\alpha x \right\rangle \\
&\quad \le \frac{1}{\|m(i+2)+\alpha x\|}\left(1 - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right)\langle m(i), m(i+2)+\alpha x\rangle \\
&\qquad - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\left(1 - \frac{1}{\|m(i+2)+\alpha x\|}\right)\langle m(i), m(i+1)+\alpha x\rangle
\end{aligned}
$$

が成り立つ．ここで，不等式 (13) より

$$\langle m(i), m(i+2)\rangle \le \langle m(i), m(i+1)\rangle$$

が得られ，また，仮定より $\langle m(i+1), x\rangle < \langle m(i+2), x\rangle$ が成り立つので，

$$\frac{1}{\|m(i+2)+\alpha x\|}\left(1 - \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\right) < \frac{1}{\|m(i+1)+\alpha x\|}\left(1 - \frac{1}{\|m(i+2)+\alpha x\|}\right)$$

が成り立つ．以上から，不等式 (14) が成り立つことが示される．　□

学習前後におけるモデル関数の状態保存性に関する性質として，上記の定理 1 および定理 2 に $i+1$ に関する同様の結果を併せることにより，内積型学習写像下において，上述の条件をもつ状態クラスが準吸収性を有することを示すことができる（[5] 参照）．

3.　点乗積型学習写像を用いた数値計算例

点乗積型学習写像による自己組織化マップの数値計算例を与える．

数値計算 1　第 1 節の学習プロセス (iv)-(a)(b)(c) と 30 個のノードを有する 3 次元入力自己組織化マップ

$$\left(\{1, 2, \ldots, 30\}, V \subset \mathbb{R}^3, \{x_k\}_{k=0}^{\infty}, \{m_k(\cdot)\}_{k=0}^{\infty}\right)$$

を考える．各ノードに対する初期値 $m_0(i)$ を $\{(x, y, z) \mid x^2 + y^2 + z^2 = 1, x \ge 0, y \ge 0, z \ge 0\} \subset \mathbb{R}^3$ 上において一様に生成させた．入力 x は $[0, 1.05]^3 \subset \mathbb{R}^3$ 上の一様分布より生成した．また，内積として点乗積を用いる．すなわち $a = {}^t(a_1, a_2, a_3)$，$b = {}^t(b_1, b_2, b_3)$ に対して $\langle a, b\rangle = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i$ とする．図 1 はモデル関数を上段はグレー色の濃淡の組み合わせで，

下段は RGB で色付けして表現し，900 回の更新によるモデル関数の推移を表したものである．第 1 列は更新回数を表し，各行の 2 列目以降は，上段については各ノードの値の 3 個の成分を 3 個のグレースケールに変換して表している（0 を濃淡における白へ，1 を黒へ変換）．同様に下段は，各ノードの値の 3 個の成分を RGB 色空間へ変換している（3 成分を順に R，G，B の濃淡へ変換）．それぞれ，学習による整列化がある程度見て取れる．□

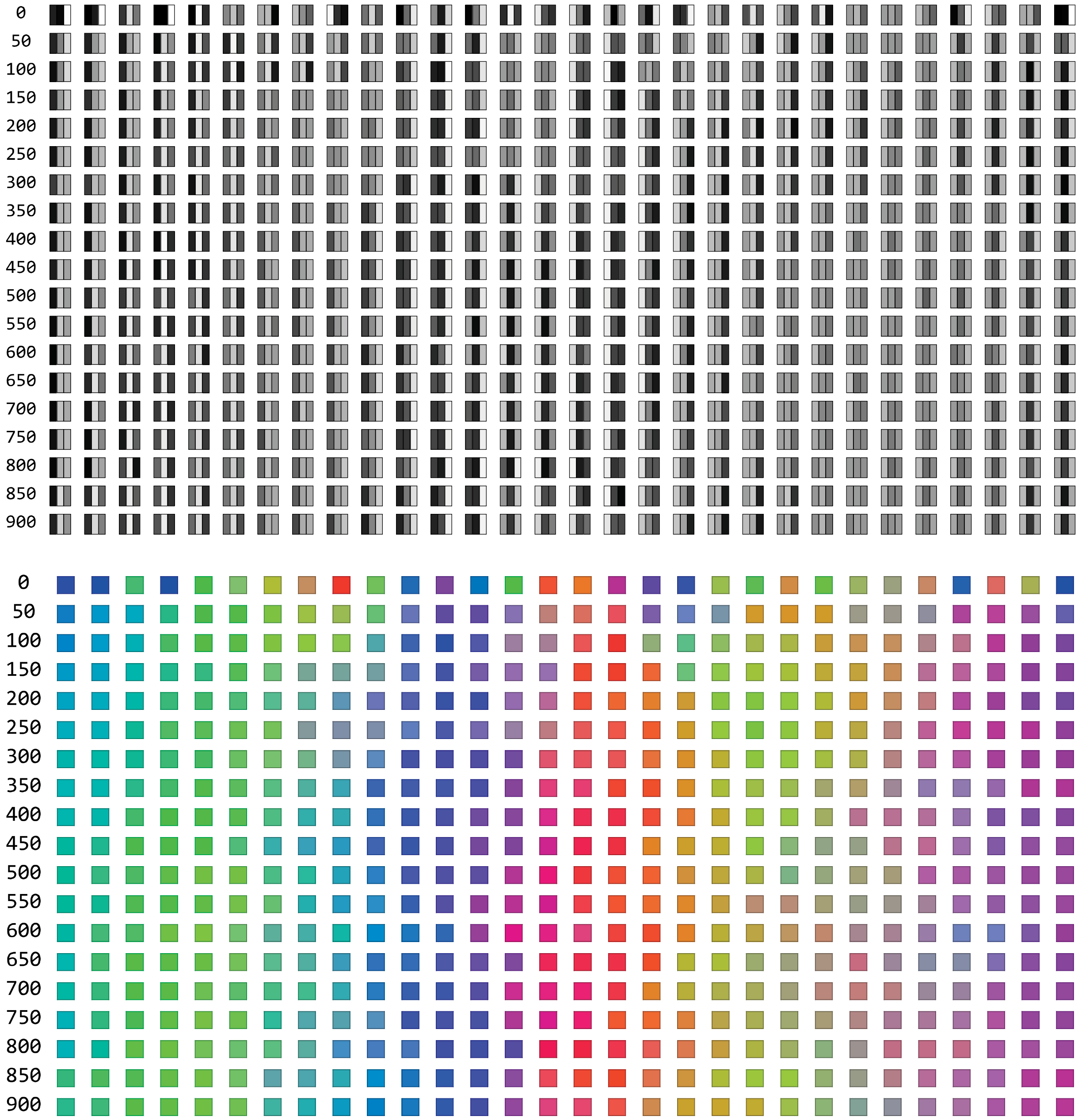

図 1: モデル関数の初期値 (上段，下段の第 1 行) と更新後の値の推移（上段：3 成分をグレースケールで表現，下段：RGB 色空間で表現）．学習係数は $\alpha = 0.8$ である．

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 conference 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.