

TR-H-221

# Kohonen マップの シミュレーション

岩本俊弘（東京大），野村竜也

1997.6.12

## ATR人間情報通信研究所

〒619-02 京都府相楽郡精華町光台2-2 TEL: 0774-95-1011

**ATR Human Information Processing Research Laboratories**

2-2, Hikaridai, Seika-cho, Soraku-gun, Kyoto 619-02, Japan

Telephone: +81-774-95-1011

Fax : +81-774-95-1008

# Kohonen マップのシミュレーション

岩本 俊弘\*

野村 竜也†

## 1 SOM

### 1.1 SOM とは?

SOM とは、ニューロン間に幾何学的構造のあるニューラルネットワークであり、各ニューロンに入力信号ベクトルと同じ次元の荷重ベクトルが割り振られている。

ある入力信号を与えたとき、各ニューロンの荷重ベクトルとの距離を計算し、その距離のもっとも小さいニューロンが勝者となる。つまり、入力信号を SOM に与えたときの出力は、勝者ニューロンの位置である。

ある入力信号で学習を行うには、勝者ニューロンとその近く (この「近い」はニューロン間にあらかじめ与えられた幾何学的構造によって定義する) のニューロンの荷重ベクトルを、入力信号に近づくように修正する。つまり、入力信号が  $\vec{I}$  で、荷重ベクトル  $\vec{w}$  を持ったニューロンを係数  $k$  で修正するときは、 $\vec{w}$  を  $k\vec{I} + (1-k)\vec{w}$  と更新する。

SOM の各荷重ベクトルを収束させるには、学習において入力信号に近づくように修正するニューロンの範囲を時と共に狭くして、係数  $k$  を小さくしていく。

### 1.2 入力信号

以下の 2 次元の入力信号に対し、Kohonen の自己組織化マップ (SOM) のシミュレーションを行った。

\* 東京大学工学部計数工学科

東京都文京区本郷 7-3-1

E-mail: t60653@hongo.ecc.u-tokyo.ac.jp

† ATR 人間情報通信研究所 第 6 研究室

〒 619-02 京都府相楽郡精華町光台 2-2

E-mail: nomura@hip.atr.co.jp

- 範囲が矩形 ( $\frac{1}{3} \leq x \leq \frac{2}{3}, \frac{1}{3} \leq y \leq \frac{2}{3}$ ) の一様分布
- 範囲が 2 つの矩形 ( $\frac{1}{4} \leq x \leq \frac{5}{12}, \frac{5}{12} \leq x \leq \frac{3}{4}, \frac{1}{4} \leq y \leq \frac{3}{4}$ ) の一様分布
- 範囲が円形 ( $(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 < (1/4)^2$ ) の一様分布
- 範囲が 2 つの円形 ( $(x-0.5)^2 + (y-1/3)^2 < (1/9)^2, (x-0.5)^2 + (y-2/3)^2 < (1/9)^2$ ) の一様分布
- 正規分布 (分散 1/120)

$$f(x, y) \propto \exp\left(-60\left((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2\right)\right)$$

- 2 つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $\sqrt{2}/2$ )

$$f(x, y) \propto \exp\left(-60\left((x-0.25)^2 + (y-0.25)^2\right)\right) + \exp\left(-60\left((x-0.75)^2 + (y-0.75)^2\right)\right)$$

ただし、 $f(x, y)$  は確率密度分布関数。

また、以下の 3 次元入力信号に対しても、シミュレーションを行った。

- 範囲が 2 つの直方体 ( $\frac{1}{4} \leq x \leq \frac{5}{12}, \frac{5}{12} \leq x \leq \frac{3}{4}, \frac{1}{4} \leq y \leq \frac{3}{4}, \frac{1}{4} \leq z \leq \frac{3}{4}$ ) の一様分布
- 範囲が円柱 ( $(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 < (1/4)^2, 1/4 \leq z \leq 3/4$ ) の一様分布
- トーラスの表面上 ( $|x^2 + y^2 - 0.3^2| + z^2 = 0.06^2$ ) の一様分布

### 1.3 シミュレーションの手順

近傍の縮小速度と、修正係数を色々試して、入力分布を良く反映した結果が出るものを探した。近傍の形は矩形で、 $n$  世代ごとに上下左右を 1 ずつ狭めるようにした。修正係数は、 $kT/(T+t)$  ( $k, T$  は定数、 $t$  は世代数) という式で定義した。

SOM のニューロン数は、2 次元、1 次元ともに 100 である。

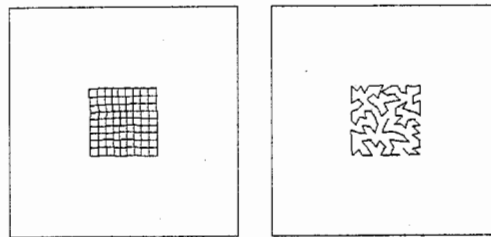
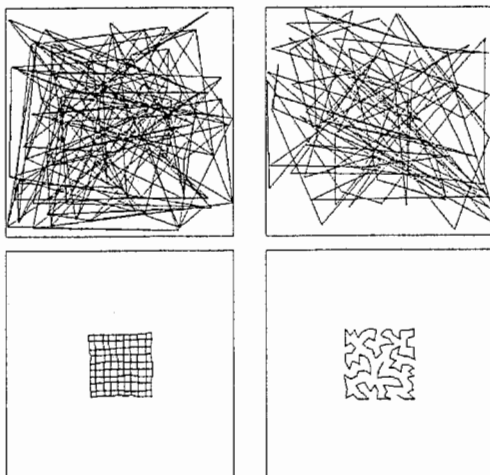
### 1.4 結果 (入力信号が 2 次元の場合)

以下、断わりがない限り 2 次元の SOM では、近傍の最初の大きさは前後に 5 ずつ、 $(n, k, T) = (2500, 0.1, 2000)$  で 200000 世代目、1 次元の SOM では、近傍の最初の大きさは前後に 10 ずつ、 $(n, k, T) = (400, 0.4, 1750)$  で 100000 世代目の荷重ベクトルである。

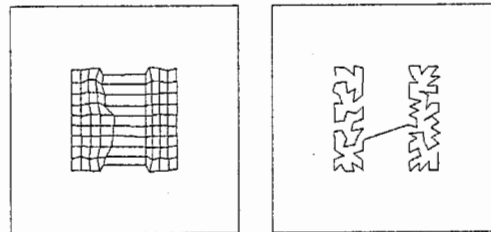
左側が 2 次元の SOM、右側が 1 次元の SOM である。

- 範囲が矩形の一様分布

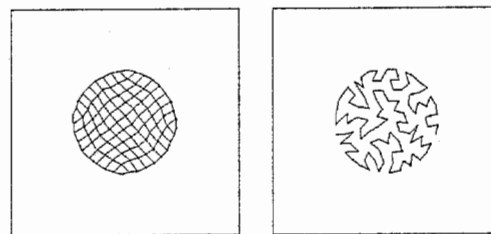
$(n, k, T) = (1500, 0.15, 1200)$  で、0, 10000, 100000 世代目の荷重ベクトル (左) と、0, 10000, 100000 世代目の 1 次元の SOM の荷重ベクトル (右) である。



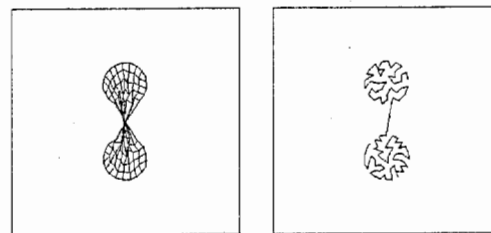
- 範囲が 2 つの矩形の一様分布



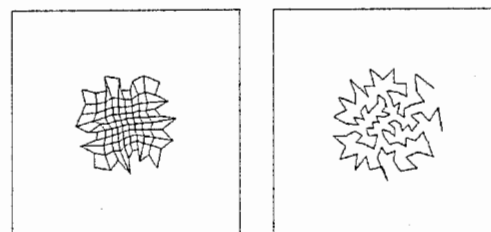
- 範囲が円形の一様分布



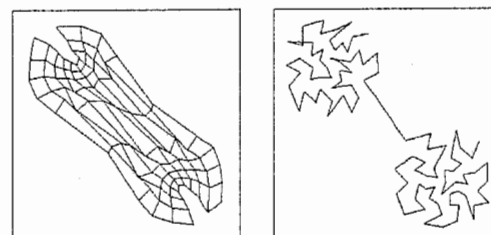
- 範囲が 2 つの円形の一様分布



- 正規分布 (分散 1/120)

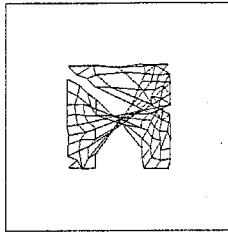


- 2 つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $\sqrt{2}/2$ )



#### 1.4.1 パラメータの影響

近傍の最初の大きさを上下左右に 3 ずつ、 $(n, k, T) = (500, 0.2, 1750)$  で 100000 世代目のものである。入力信号は、範囲が 2 つの矩形の一様分布である。

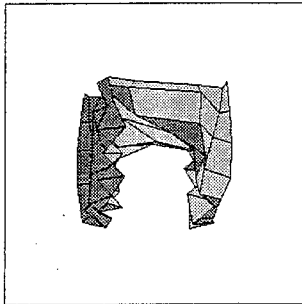


この場合は、近傍の縮小が速すぎるので、ねじれが生じた。ただし、近傍の縮小を遅くすると、マップの収束が遅くなるので、適当な値を選ぶ必要がある。

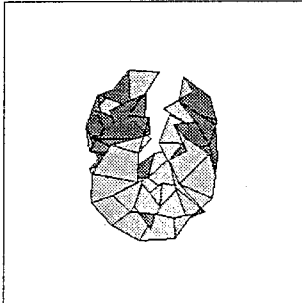
#### 1.5 結果 (入力信号が 3 次元の場合)

断わりがない限り、近傍の最初の大きさは前後に 5 ずつ、 $(n, k, T) = (2500, 0.1, 2000)$  で 100000 世代目のものである。

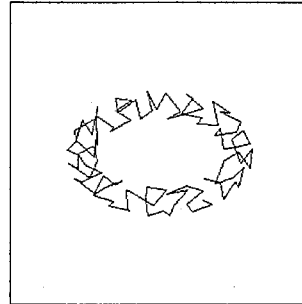
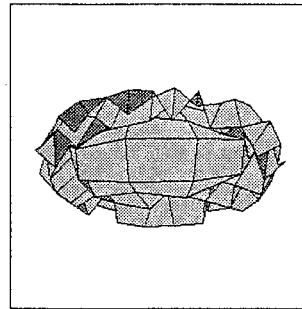
- 範囲が 2 つの直方体の一様分布



- 範囲が円柱の一様分布



- トーラスの表面上の一様分布上が 2 次元の SOM、下が 1 次元の SOM で、下の SOM のパラメータは 1.4 章のものと同じである。



#### 1.6 シミュレーションに用いたプログラム

後の拡張を容易にすることを主眼において設計・実装した。そのため、FSOM(Fuzzy SOM)、LVQ (学習ベクトル量子化) のシミュレータを簡単な変更で実現できた。

またほとんどのパラメータを設定ファイルで指定できるようになっているので、様々なパラメータでシミュレーションを行ったり、結果をまとめる際にパラメータを確認するのに便利である。

結果の表示には、入力信号が 2 次元の場合には、2 次元平面上にニューロンの荷重ベクトルをプロットしたものを、SOM の幾何構造を表現するために SOM 上で上下左右にとなりあうニューロンの荷重ベクトルを線分で結んだものを (ラスタイメージで) 出力する。

3 次元の場合は、各荷重ベクトルの数値を出力し、別のプログラムで 2 次元の時と同様の図形を回転させて見ることが出来る。

正規分布を持つ入力信号を発生させるのは難しいので、 $[0, 1]$  の一様分布に従う確率変数 10 個の平均で近似した。この方法で発生させた 100000 個の数の分布を正規分布と比べたところ、誤差は 5% ほどであった。

## 2 FSOM(Fuzzy SOM)

### 2.1 SOMとの違い

FSOM の SOM との違いは荷重ベクトルに分散成分があつて

$$\exp\left(\sum_j \frac{(\mu_{ij} - x_j)^2}{\sigma_{ij}^2}\right)$$

という関数で勝者を決定することである。この場合  $\mu_{ij}$  の更新則は SOM のものと同じであり、 $\sigma_{ij}$  の更新則は、

$$\Delta\sigma_{ij} = 2\gamma\sigma_{ij}((\mu_{ij} - I_j)^2 - \sigma_{ij}^2)$$

である。

また、SOM の近傍の概念のない FSOM もあり(ここでは FSOM2 と呼ぶ)、

$$f_i = \frac{\exp\left(-\alpha \sum_j (\mu_{ij} - I_j)^2 / \sigma_{ij}^2\right)}{\sum_d \exp\left(-\alpha \sum_j (\mu_{dj} - I_j)^2 / \sigma_{dj}^2\right)}$$

$$\Delta\mu_{ij} = \gamma f_i (I_j - \mu_{ij})$$

$$\Delta\sigma_{ij} = 2\gamma f_i \sigma_{ij} ((\mu_{ij} - I_j)^2 - \sigma_{ij}^2)$$

という学習則で全ニューロンを更新するものである。 $\alpha$  を時と共に増加させて、SOM の近傍縮小と同様の効果を出す。

### 2.2 入力信号

以下の分布を持った2次元の入力信号を用いた。分布を詳しく書いていない物については1章と同じである。

- 範囲が矩形の一様分布
- 範囲が2つの矩形の一様分布
- 範囲が円形の一様分布
- 範囲が2つの円形の一様分布
- 正規分布 (分散 1/120)
- 2つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $\sqrt{2}/2$ )

- 2つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $0.3\sqrt{2}$ )

$$f(x, y) \propto \exp\left(-60\left((x - 0.35)^2 + (y - 0.35)^2\right)\right) + \exp\left(-60\left((x - 0.65)^2 + (y - 0.65)^2\right)\right)$$

- 正方形領域内に台形の確率密度分布を持つもの2つの和

$$f(x, y) = \frac{1}{2}f_0\left(x + \frac{1}{6}, y + \frac{1}{6}\right) + \frac{1}{2}f_0\left(x - \frac{1}{6}, y - \frac{1}{6}\right)$$

ただし、

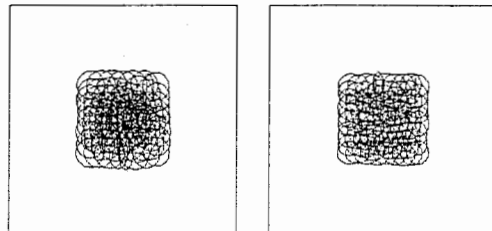
$$f_0(x) = \begin{cases} 18(x - \frac{1}{4}) & (1/4 \leq x \leq 5/12) \\ 3 & (5/12 \leq x \leq 7/12) \\ -18(x - \frac{3}{4}) & (7/12 \leq x \leq 3/4) \end{cases}$$

### 2.3 FSOM の結果

以下、断わりがない限り 2 次元の SOM では、近傍の最初の大きさは前後に 5 ずつ、 $(n, k, T) = (1500, 0.15, 1200)$  で 100000 世代目のもの(左側)、1 次元の SOM では、近傍の最初の大きさは前後に 10 ずつ、 $(n, k, T) = (400, 0.4, 1750)$  で 100000 世代目の荷重ベクトル(右側)である。

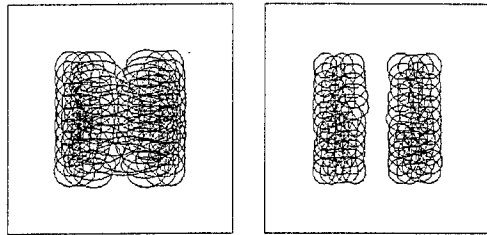
ここで表示したものは、 $(\mu_{i1}, \mu_{i2})$  を中心とし、半径  $(\sigma_{i1}, \sigma_{i2})$  の楕円である。

- 範囲が矩形の一様分布

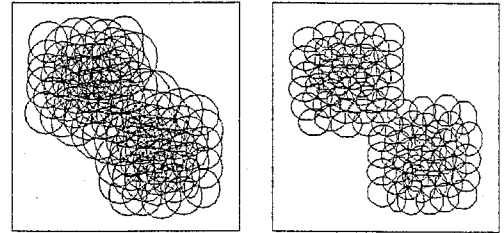


- 範囲が2つの矩形の一様分布

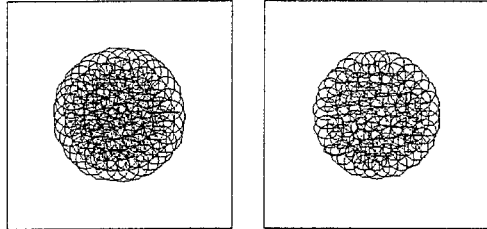
200000 世代目の荷重ベクトル(左)と、1次元の SOM の荷重ベクトル(右)である。



- 正方形領域内に台形の確率密度分布を持つもの2つの和



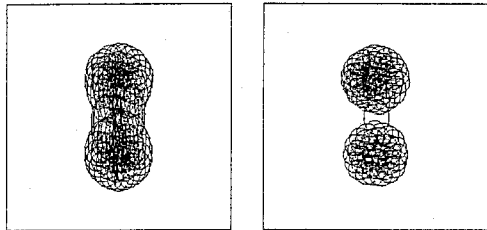
- 範囲が円形の一様分布



もともとの

$$\Delta\sigma_{ij} = 2\gamma\sigma_{ij}((\mu_{ij} - I_j)^2 - \sigma_{ij}^2)$$

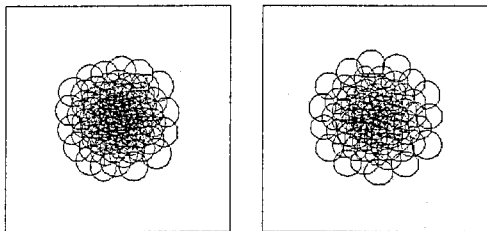
- 範囲が2つの円形の一様分布



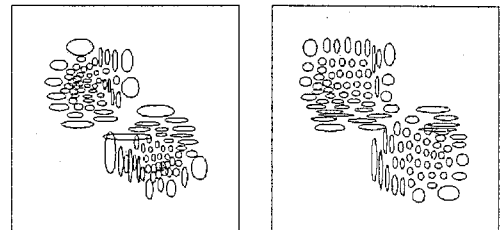
という更新則は、 $\sigma$  が 0 に近づくにつれて収束が遅くなるので、

$$\Delta\sigma_{ij}^2 = 2\gamma((\mu_{ij} - I_j)^2 - \sigma_{ij}^2)$$

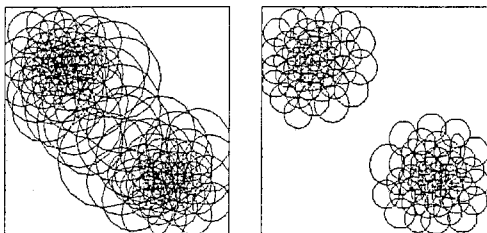
- 正規分布 (分散 1/120)



と変更してシミュレーションを行ったのが以下である。

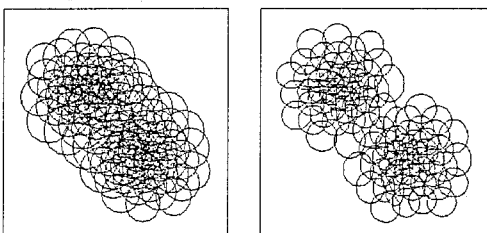


- 2つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $\sqrt{2}/2$ )



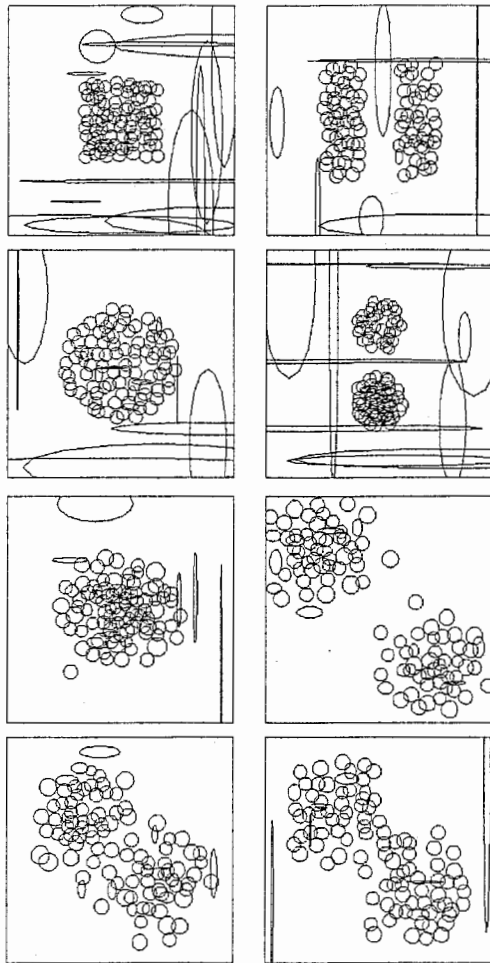
入力信号は左が2つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $0.3\sqrt{2}$ ) で、右が正方形領域内に台形の確率密度分布を持つもの2つの和であり、パラメータ、世代数は上と同じである。

- 2つの正規分布の和 (分散 1/120、中心間の距離  $0.3\sqrt{2}$ )



#### 2.4 FSOM2 の結果

以下に 2.3 章と同じ順番で並べた。全て修正係数  $\gamma = 0.8 \cdot 3000 / (t + 3000)$ 、 $\alpha = 0.3 + 0.002t$  ( $t$  は世代数) で、40000 世代目の荷重ベクトルである。



入力信号が出現しない部分にいくつかのニューロンがあるが、これは、SOMの近傍の概念のないFSOM2にとってはある程度仕方ないことである。つまり、SOMでは、勝者となれないような荷重ベクトルを持ったニューロンも、近傍の効果によって入力信号のある方へ引き込まれるが、FSOM2では、入力信号とかけ離れた荷重ベクトルを持ったニューロンに対する $f_i$ が非常に小さくなるために、入力信号のある方へ動く速度が遅く、このように入力信号が出現しない部分にニューロンが残ってしまう。

### 3 LVQ

#### 3.1 LVQとは?

ここでのLVQは2種類の信号源(信号源1、2)を区別するもので、信号源1用と、2用の2つのSOMを用意し、信号源1用のSOMは信号源1からの信号のみ、信号源2用

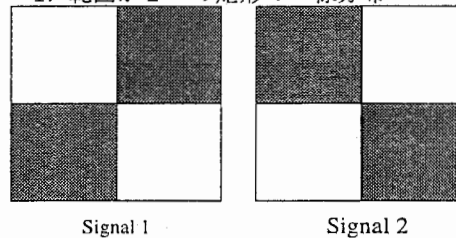
のSOMは信号源2からの信号のみを用いて、SOMと同様に学習させた。ただし、訓練信号は一定の個数のものを繰り返して与えた。

ある入力信号がどちらの種類の信号であるかを判定するには、学習させた2つのSOMに信号を与え、どのSOMが入力信号により近い荷重ベクトルを持つかで判定する。

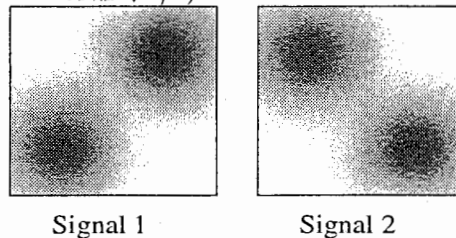
#### 3.2 入力信号

以下の分布を持った2次元の入力信号を用いた。範囲は、 $[0, 1] \times [0, 1]$ である。

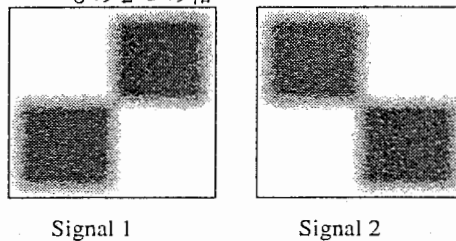
##### 1. 範囲が2つの矩形の一様分布



##### 2. 2つの正規分布の和(分散 $1/36$ 、中心間の距離 $\sqrt{2}/2$ )



##### 3. 正方形領域内に台形の確率密度分布を持つもの2つの和



#### 3.3 シミュレーションの手順

信号源1、2ともに1000個ずつの信号ベクトルを用意して、それらを繰り返し用いて学習させた。正答率の算出には、毎回各2000個の信号ベクトルを作って行った。

また、FSOM の成績が芳しくなかったの  
で、FSOM の勝者決定に用いられる関数

$$\exp \left( \sum_j \frac{(\mu_{ij} - x_j)^2}{\sigma_{ij}^2} \right)$$

を

$$\frac{1}{\prod_j \sigma_{ij}} \exp \left( \sum_j \frac{(\mu_{ij} - x_j)^2}{\sigma_{ij}^2} \right)$$

と変更したもの (FSOM3 と呼ぶ) を考案しシ  
ミュレーションを行った。

FSOM は、基本的に 2 章と同じであるが、  
 $\sigma_{ij}$  の更新則は

$$\Delta \sigma_{ij}^2 = 2\gamma((\mu_{ij} - I_j)^2 - \sigma_{ij}^2)$$

を使っている。

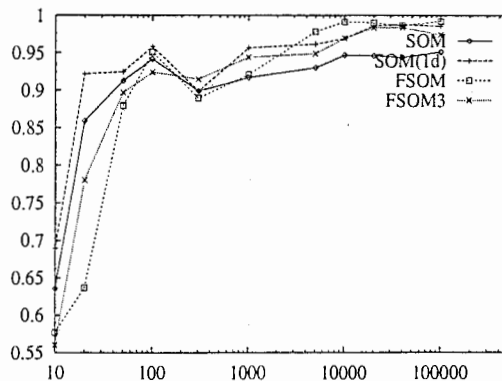
### 3.4 結果

各入力に対し、SOM、FSOM、FSOM3  
でシミュレーションを行った結果の正答率 (信  
号源を正しく推測したものの数を全体の試行数  
で割ったもの) は下のようになった。ここでは  
それぞれのマップでもっとも成績の良かったも  
のを挙げた。

1 次元の SOM のパラメータはいずれも  
 $(n, k, T) = (1500, 0.15, 1200)$  である。2 次  
元の SOM のパラメータは断わりがない限り  
 $(n, k, T) = (1500, 0.15, 1200)$  である。FSOM  
と FSOM3 のパラメータは断わりがない限り  
 $(n, k, T) = (2500, 0.1, 2000)$  である。

#### 3.4.1 信号パターン 1

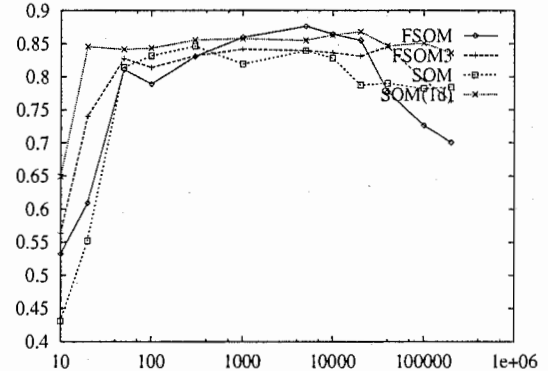
いずれにおいても 100% に近い正答率が得ら  
れた。



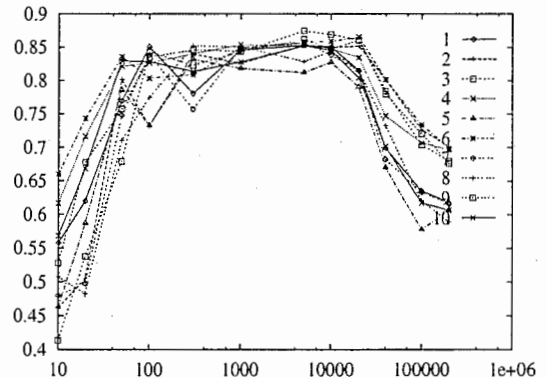
#### 3.4.2 信号パターン 2

2 種類の信号に重なりがあるので、正答率は  
最良で 87% である。この場合は他の場合と異  
なりマップの種類による差が大きく、正答率も  
良くない。これは、荷重ベクトルが信号分布の  
疎な部分にも広がっていることによると考えら  
れる。特に FSOM の場合の成績が悪いが、  
これは、信号分布の疎な部分にあるニューロン  
は、荷重ベクトルの分散成分が大きく、ニュー  
ロンの数は少なくとも広い範囲の入力信号に対  
して勝者となるためである。FSOM3 では、分  
散の大きなニューロンにペナルティを課すこと  
で、この問題を改善した。

2 次元の SOM と、FSOM と FSOM3 の  
パラメータは  $(n, k, T) = (5000, 0.1, 2000)$  であ  
る。



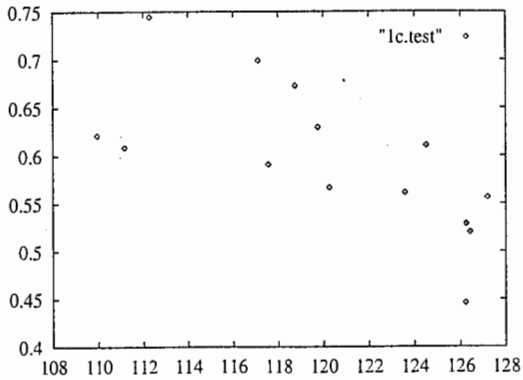
また、FSOM に対し、パラメータ  $(n, k, T) =$   
 $(5000, 0.1, 2000)$  で 10 回行ったところ下のよう  
にばらつきが見られた。200000 世代目で正答  
率約 0.7 のグループと 0.6 のグループに分けら  
れる。



これらの荷重ベクトルの分布を見たところ、  
信号の密な部分での差はあまり見られなかつ



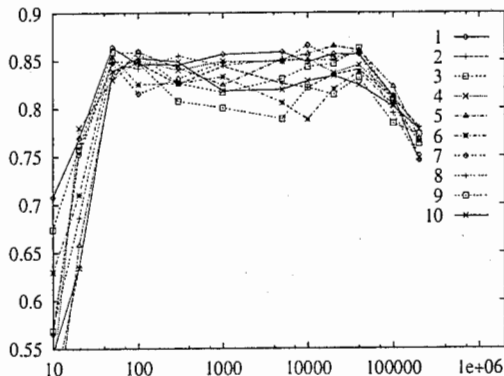
たので、正答率は競合するマップの荷重ベクトル分布に依存すると考えた。荷重ベクトル分布は、マップの訓練用の入力信号ベクトルの分布に影響されるので、正答率と競合するマップの訓練用の入力信号ベクトルの分布の関連を見るため以下の実験を行った。



縦軸は正答率を、横軸は競合するマップの訓練ベクトルが、(正答率を求める方の)信号の分布とどの程度重なっているかを表す数値である。

つまり、 $c_{i1}, c_{i2}, \vec{v}_{i1j}, \vec{v}_{i2j}$  をそれぞれ  $i$  番目のシミュレーションにおけるマップ 1, 2 の正答率、マップ 1, 2 に与えた  $j$  番目の訓練ベクトルとし、 $f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x})$  をそれぞれ信号源 1, 2 の確率密度分布関数として、 $(c_{i1}, k \sum_j f_1(\vec{v}_{i2j}))$ ,  $(c_{i2}, k \sum_j f_2(\vec{v}_{i1j}))$  (ただし、 $k$  は定数) をプロットしたのが上図である。正答率が訓練用の入力信号ベクトルの分布に依存しているならば、右下がりのグラフになるはずである。

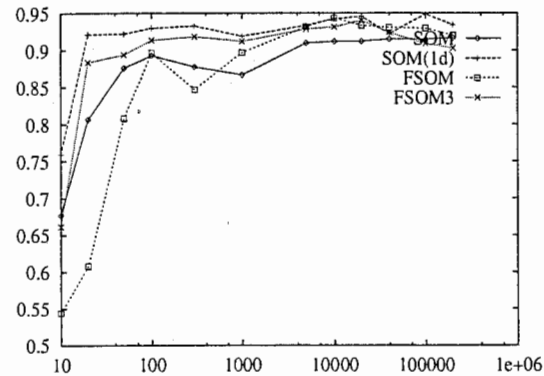
また、FSOM2 に対しても、 $(n, k, T) = (5000, 0.1, 2000)$  で 10 回シミュレーションを繰り返したが、FSOM の時のようなばらつきは見られなかった。



この信号に対しては、他と異なり、10000 世代あたりを境に正答率が減少した。荷重ベクトルが外側に (信号の密度の疎な方へ) ゆっくり広がっていくのが、原因であろう。また、FSOM では、信号の密な部分では分散成分が減少するのに対し、疎な部分にあるニューロンの分散成分はほとんど変化しないことが、特に正答率が低い原因と考えられる。

### 3.4.3 信号パターン 3

2 種類の信号に重なりがあるので、正答率は最良で 95% である。重なりが少ないので信号パターン 1 同様高い正答率が得られた。



### 3.4.4 まとめ

いずれにおいても良い成績を収めたのは、1 次元の SOM である。ここで用いた信号は全て、市松模様分布している。このような場合、1.4 章を見れば分かるように、2 次元の SOM では、市松模様が交差する中央部を面で横切るので横の広がりを持ち、誤答の原因となるが、1 次元の SOM では線で横切るので、誤答が起りにくいことに依ると考えた。