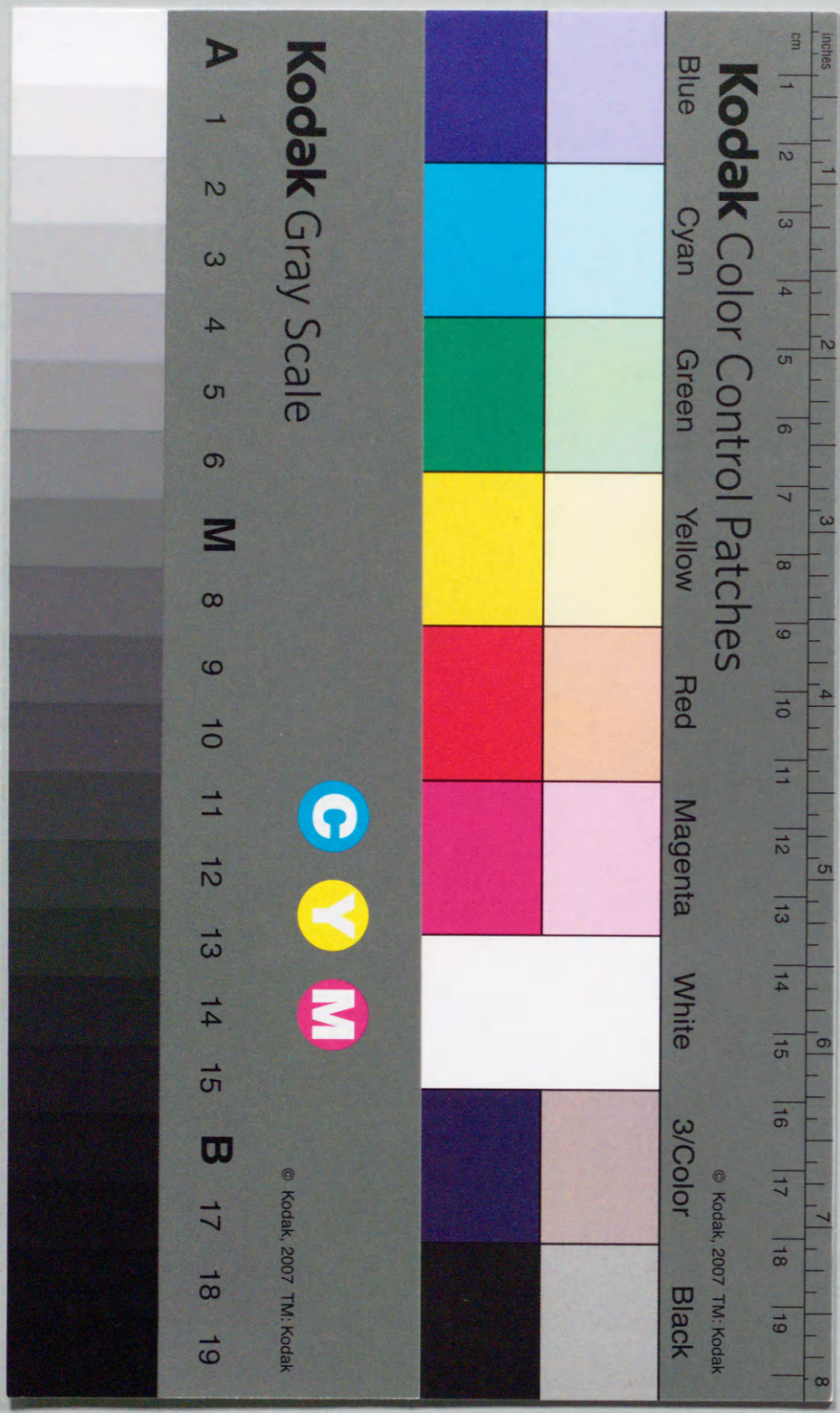


自己組織化特徴画像における位相保持測度の研究

鹿嶋 雅之



目次

自己組織化特徴写像における位相保持測度の研究  
(Study on Topology Preservation of Self-Organized Feature Maps)

1999年3月

1 序論 1

1.1 はじめに 1

1.2 自己組織化特徴写像 2

1.3 自己組織化特徴写像における位相保持 3

1.4 本研究の目的 3

1.5 本文の内容 4

2 自己組織化特徴写像 15

2.1 はじめに 15

2.2 コーヒーカップとワイングラスによる古典的例 16

2.3 コーヒーカップによる自己組織化特徴写像 18

2.4 コーヒーカップによる位相保持特徴写像 23

2.4.1 位相保持特徴写像の定義 23

2.4.2 位相保持特徴写像の構成 25

3 位相保持測度の定義 28

3.1 はじめに 28

3.2 コーヒーカップによる位相保持測度 29

3.2.1 コーヒーカップの場合 29

3.2.2 コーヒーカップによる多次元空間における位相保持測度の定義 30

3.3 ベンチ (Bench) の場合 31

3.4 ワイングラスの完全位相保持特徴写像 34

3.5 ビルマ (Village) を用いた位相保持測度 36

4 自己組織化特徴写像の位相保持測度 48

4.1 はじめに 48

4.2 位相保持測度の使用 49

4.2.1 入力データの準備 49

4.2.2 自己組織化特徴写像の構成 50

4.2.3 位相保持測度 51

4.3 コーヒーカップの自己組織化特徴写像に対する位相保持測度 53

鹿嶋 雅之

# 目次

1 序論	5
1.1 はじめに	5
1.2 神経回路網	7
1.3 神経回路網における位相保持	11
1.4 本研究の目的	13
1.5 本論文の構成	14
2 自己組織化神経回路網	15
2.1 はじめに	15
2.2 ウィルショウとマルスブルグによる古典的モデル	16
2.3 コホーネンによる自己組織化特徴写像	19
2.4 マルチネスによる位相表現回路網	23
2.4.1 被覆ポロノイ図と被覆ドロネ三角形	23
2.4.2 位相表現回路網	25
3 位相保持測度の変遷	28
3.1 はじめに	28
3.2 コホーネンによる無秩序指数	29
3.2.1 1次元の場合	29
3.2.2 淵田らによる多次元位相保持写像の無秩序指数	30
3.3 バウアー (Bauer) らの位相積	32
3.4 マルチネスの完全位相保持写像	34
3.5 ビルマン (Villman) らによる位相関数	36
4 自己組織化特徴写像の位相保持測度	38
4.1 はじめに	38
4.2 位相保持測度の提案	40
4.2.1 入出力の位相構造の一致による位相保持	40
4.2.2 出力回路網の節点間の近傍関係	40
4.2.3 位相保持率	41
4.3 コホーネンネットの自己組織化に関する数値実験	43

4.3.1	被覆ドロネ3三角形の計算	43
4.3.2	1次元格子	43
4.3.3	正方格子	48
4.3.4	六方格子	50
4.4	まとめ	54
5	位相表現回路網の位相保持率	55
5.1	はじめに	55
5.2	位相表現回路網での入出力の位相構造の一致	56
5.3	位相表現回路網における数値実験	57
5.3.1	被覆ドロネ3三角形の計算とパラメータ	57
5.3.2	シミュレーション結果	60
5.4	まとめ	61
6	結論	62

## 図一覧

1.1	ニューロンの概念図	8
1.2	形式ニューロン	9
1.3	相互結合型神経回路網	10
1.4	層状結合型神経回路網	10
1.5	位相保持写像	11
2.1	ウィルショウとマルスブルグの古典的モデル	16
2.2	シナプス後層内のニューロンの結合関係	17
2.3	メキシコ帽子型結合	17
2.4	コホーネン回路網	19
2.5	コホーネン回路網の位相的近傍	20
2.6	1次元結合コホーネン回路網の学習結果	21
2.7	平方格子状の結合を持つコホーネン回路網	21
2.8	ボロノイ図とドロネ3三角形	23
2.9	被覆ボロノイ図と被覆ドロネ3三角形	24
2.10	位相表現回路網の学習結果	26
2.11	非一様入力に対するコホーネン回路網と位相表現回路網	27
3.1	無秩序指数	29
3.2	2次元平方格子状のコホーネン回路網の無秩序指数	30
3.3	完全位相保持写像	34
3.4	正方形の入力空間の神経素子の正方格子への写像	37
4.1	入出力の位相構造の一致による位相保持	40
4.2	位相保持率	41
4.3	2次元データ入力に対する1次元結合のコホーネンネットの学習結果	44
4.4	50個の1次元コホーネンネットの学習結果	45
4.5	20個の1次元コホーネンネットの学習結果	46
4.6	10個の1次元コホーネンネットの学習結果	47
4.7	位相保持が実現する最大ニューロン数	48
4.8	平方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習経過	49
4.9	平方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習結果	50

4.10 非線形データ入力に対する正方格子状の結合のコホーネンネットの学習結果 . . .	51
4.11 六方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習経過 (a) 出力回路網 (b) 局所位相保持率 . . . . .	52
4.12 平方格子及び六方格子を持つコホーネンネットの平均位相保持率の変化の例 . . .	53
4.13 六方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習結果 . . . . .	53
5.1 参照ベクトルの受容場 (ポロノイ領域) と位相表現回路網 . . . . .	56
5.2 平面状の一様な入力に対する300素子の位相表現回路網の学習結果 . . . . .	57
5.3 非線形入力データに対する200素子の位相表現回路網の学習結果 . . . . .	57
5.4 非一様な入力データ空間での位相保持率 . . . . .	58
5.5 U字型形状の一様な入力に対する位相表現回路網 . . . . .	59

## 第1章

### 序論

#### 1.1 はじめに

現在, 神経回路網の研究は様々な分野で注目を集めている [1][4][5][6]. 人間の脳への関心は古くからあり, さまざまな研究がされてきた. 脳が記憶や推論などの知的活動を行ない, 身体を制御する機能を持つことは知られていたが, それがどのようにして行なわれているかは長い間謎であった. これは, 脳が他の器官と異り, 脳の機能がその形状から容易に推測出来ないことに起因する.

人間の身体はよく機械に例えられる. 目はカメラであり, 心臓はポンプ, 耳と口はマイクとスピーカーに例えられる. そしてそれらを模して, 発明された機械もある. また逆に, そこから人間の身体の構造や機能を理解することもできる [7].

例えば心臓について考えてみよう. 心臓は血液を身体中に送り出すポンプの働きをする. 人間の場合では4つの部分に分かれ, それが筋肉の働きにより交互に拡大・縮小を繰り返し血液を移動させる. この場合, 機能と形状に明らかな関係性が存在する. また, 胃や腸なども機能とその形状の間にはっきりとした関係が見える.

しかし, 脳に関してはそれが当てはまらない. 脳に一番近い機械は電子計算機であると言われるが, 電子計算機から脳を理解することは不可能である.

最近になり, 脳の構造や仕組みはおぼろげながらも解明され始めてきた. その動作のメカニズムに関する研究も盛んになっている. また, それを工学的に応用しようとする研究も数多くされている.

これらは医学や生物学の進歩, 高性能の電子顕微鏡の発明など, 様々な理由もあるが, 電子計算機の発達によるところも大きい. なかでも, 電子計算機の発達により, モデル化された脳のシミュレーションが可能となった. モデル化された脳, 神経回路網 (neural network) の研究には幾つかの側面がある. 一つには, 神経回路網を研究することにより, 実際の脳についての理解を深めるための研究である. 解剖学などの進歩により, 脳の構造は大部解ってきた. また, 脳の機能地図も既に得られている. しかし, それだけでは脳による複雑な情報処理のメカニズムを解明することは困難である. 単純化された神経回路網を用いることで, シミュレーションが容易になり, 情報処理のメカニズムの解明につながる.

もう一つは, 神経回路網を工学的に応用し, 情報処理などに応用しようとする研究である. 現

在主流のノイマン型の電子計算機は一般に人間の行なう曖昧な情報処理には不向きだと言われている。また、処理すべき問題が多様化し複雑になるにつれて、情報の量の膨大さや計算速度、情報処理のアルゴリズム上の問題などから、様々な困難が生じる。これらの問題を解決するための1つとして神経回路網が期待されている。また最近では、脳を複雑系の一つとして捉えた新しい研究も模索され始めている。

## 1.2 神経回路網

脳の構造は、ゴルジ (Camillo Golgi) の神経細胞の発見に始まり、高性能の電子顕微鏡によるシナプス連結や細胞間隙の発見などを通して、次第に明らかになってきた。それによると、脳は膨大な数のニューロン (neuron・神経素子) による巨大な回路網を構成している。また、巨大ヤリイカによる実験から、その神経素子の動作のメカニズムも解明された。それによると、神経素子の挙動は複雑な非線形の微分方程式で記述出来る [33]。更に、解剖学などの発達により、脳のどの部位がどのような情報処理を行なっているのかも明らかになってきた。

しかし、脳を情報処理装置として考え、その機能を数理的に解析し、応用しようとしたとき、上記のような直接的なアプローチは様々な理由により困難である。そこで、ニューロンを簡単なモデルで置き換え、それを元に解析を行なう手法が考えられる。

この手法によるアプローチは、マカロック (W.S.McCulloch) とピッツ (W.Pitts) による形式ニューロンモデルが始まりであると言われている。彼らはこのモデルで構成された回路網で論理演算子などを表現出来ることを証明した。現在用いられているほとんどのニューロンの基礎となるモデルである。

神経回路網の最大の特徴の一つに可塑性がある。ヘップ (O.D.Hebb) によると、ニューロンが興奮し、シナプス結合を通し刺激が伝わると、その結合は強化され次回以降はさらに刺激が伝わりやすくなる。これは、ヘップの学習則と呼ばれ、以降の神経回路網の学習モデルへ用いられる。

これらの理論を基にローゼンブラッド (Rosenblatt) により、パターンを学習・識別するパーセプトロンが提案される。

パーセプトロンに関する研究は、その後のミンスキー (M.L.Minsky)、パーパート (S.A.Papert) の研究により決着する [9]。彼らはその著書の「パーセプトロン」の中で、数学的な解析を行ない、その限界について述べている。その後、しばらくは神経回路網の研究は下火になる。

しかし1970年代以降、中野のアソシアトロン (連想素子) や福島のコグニトロン (認識素子) などが次々と提案される。そして、1980年代に入り物理学者のホップフィールド (Hopfield) の提案した、ホップフィールド回路網の登場で、再び神経回路網の研究が注目されるようになる [2][3]。

以下に神経回路網の研究の基礎となる、神経素子について簡単に解説する。ニューロンの大まかな形はイタリアの解剖学者ゴルジにより明らかにされた。彼は組織に色付けし、顕微鏡のイメージにコントラストを与えることによって、神経組織のスケッチを得た。それにより、神経組織はニューロンと呼ばれる個々の神経細胞から成り立っていることが明らかになった。

ニューロンは細胞体 (soma)・樹状突起 (dendrite)・軸索 (axon) から構成される (図 1.1)。ニューロンを情報処理素子として考えた場合、樹状突起は入力装置にあたる。樹状突起から得た他のニューロンからの信号を、細胞体で処理し、軸索を通して他のニューロンへ出力する。軸索は枝分かれしており、各枝の末端部分の小さな太い足の部分はシナプス (synapse) と呼ばれ、他のニューロンの樹状突起と結合している。シナプスはニューロンからの情報を他のニューロンへ伝達するだけではなく、結合しているニューロン間との関係性を学習する能力を持つ。

ニューロンの細胞膜の内外には電位差が存在し、内部の電位は外部よりも低い。外部の電位を0としたときの内部の電位を膜電位と呼ぶ。ニューロンが静止状態にある時の膜電位は通常は

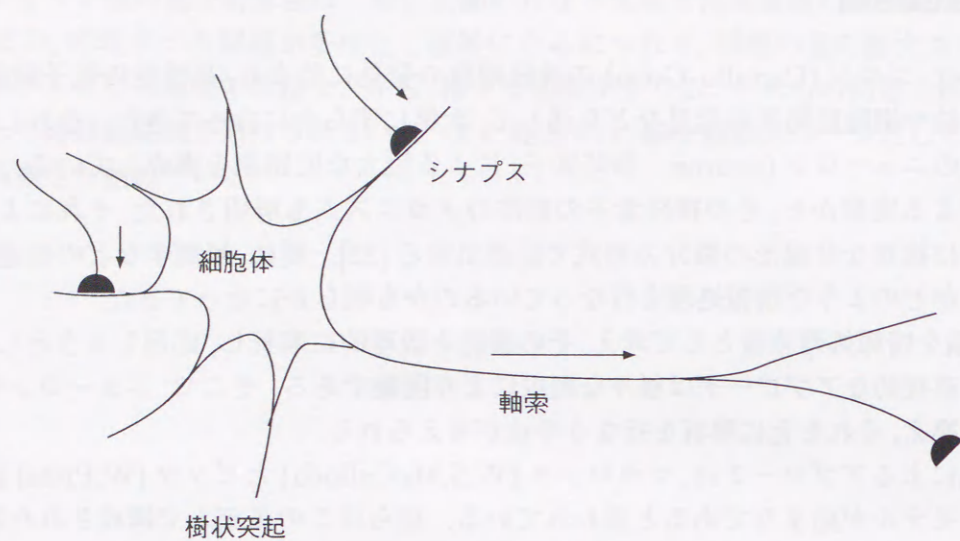


図 1.1: ニューロンの概念図

-70 ミリボルト程度である。外部からの入力が入り、膜電位が 15 ~ 20 ミリボルトほど高くなると、ニューロンは興奮し、内部の電位が突然高くなる。しかし、外部からの入力信号が小さく、膜電位の上昇がしきい値を超えないと、ニューロンは静止した状態を維持する。

このように、個々のニューロンの動作は極めて単純である。しかし生体の脳内では、これらのニューロンが多数結合し、相互に影響を与えながら、極めて複雑な情報処理を行っている。前述したように、ニューロンは非線型の微分方程式で記述される。つまり、この方程式を解くことにより、その挙動は明らかになる。しかし、情報処理の観点からいえば、得られた解はほとんど意味はなさない。

情報処理の分野における神経回路網の研究はマカロックとピッツの提案したモデルに端を発する (図 1.2)。

先に述べたように、ニューロンはその状態として興奮状態と静止状態の 2 つの状態を持つ。そして、それは結合している他のニューロンからの入力によって決定される。ニューロンにはしきい値があり、他のニューロンからの入力の総和がそのしきい値を超えた場合にのみ、ニューロンは発火を許される。形式ニューロンはこの性質をモデル化したものである。発火状態に 1 を、静止状態には 0 を対応させる。ニューロン  $i$  への他のニューロンからの入力  $u_j$  は

$$d_i = \sum_j w_{ij} u_j - \theta \quad (1.1)$$

で与えられる。ここで、 $w_{ij}$  はニューロン間の結合の強度を表す量で、シナプス荷重あるいは結合荷重と呼ばれる。シナプス荷重が正の値のとき、この結合は興奮性結合、負の値のときには抑制性結合と呼ばれる。また、出力は

$$u_i = \begin{cases} 1 & \text{if } d_i > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2)$$

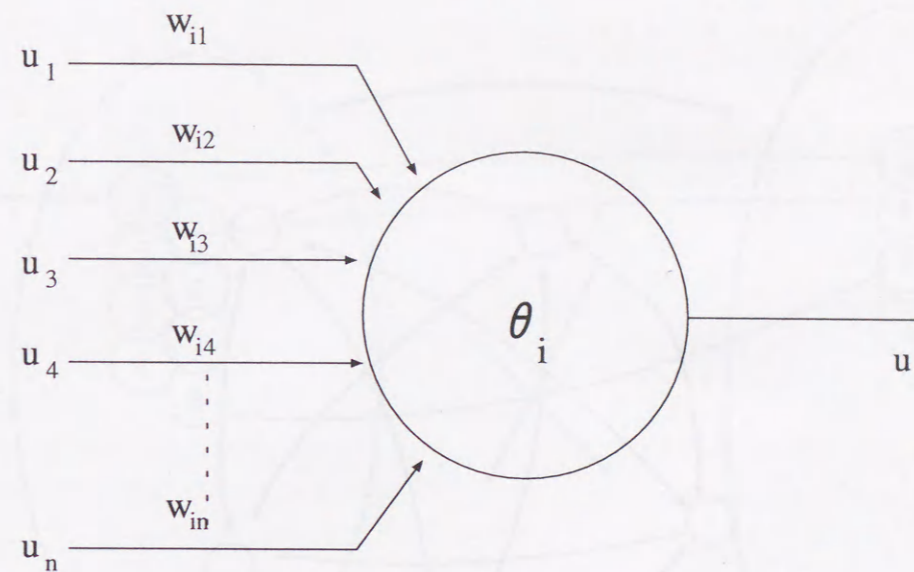


図 1.2: 形式ニューロン

と表せられる。

上記のモデルは 2 値モデルとも呼ばれる。また、連続値をとるモデルもしばしば用いられる。

このようなニューロンを複数結合することで、神経回路網は構成される。神経回路網は、その結合方法によって能力が変わってくる。結合方法は 2 種類に大別出来る。そのうち最も一般的なものは相互結合型の回路網である (図 1.3)。相互結合型の回路網において、回路網を構成する全ての素子は互いに結合している。

この回路網は連想記憶や最適解探索などに良く用いられる。特に、ホップフィールドはこの相互結合型の回路網とスピングラスとの類似性から、回路網に対しエネルギーの概念を導入した。回路網のエネルギー関数は、量子化されたスピンをもとに考えられた強磁性体のモデル (Ising Model) のハミルトニアンとほぼ同じ形で与えられる。そして、そのようなエネルギー関数を持つ神経回路網は結合の対称性を仮定すれば、スピングラスと同じようにエネルギーの減少する方向へ動作することを証明し、巡回セールスマン問題などの最適解探索に使えることをしめた。

相互結合型の回路網において、素子は互いに結合し、1 つの回路網を構成する。しかし、これとは別にニューロン間の結合が 1 方向の結合で構成された回路網がある。このような回路網は層状結合型の回路網と呼ばれる通常、層状結合型の神経回路網は入力層・中間層・出力層から構成される (図 1.4)。

この回路網は複数の階層状の回路網で構成され、ニューロン間の結合は前層から後層への 1 方向に限られる。

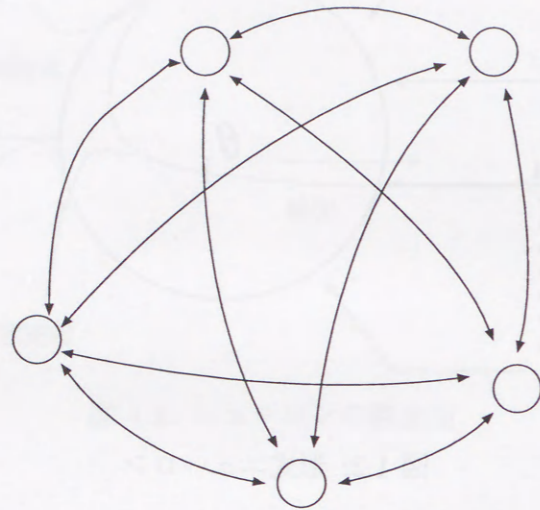


図 1.3: 相互結合型神経回路網: 各ニューロンは他のニューロンと相互に結合している。

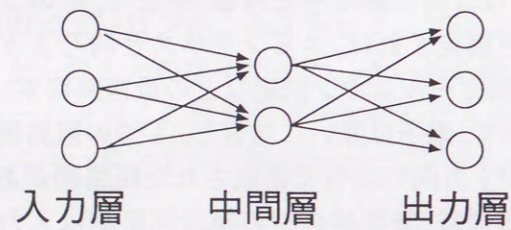


図 1.4: 層状結合型神経回路網 (3層): 各層のニューロンは他の層のニューロンに結合している。

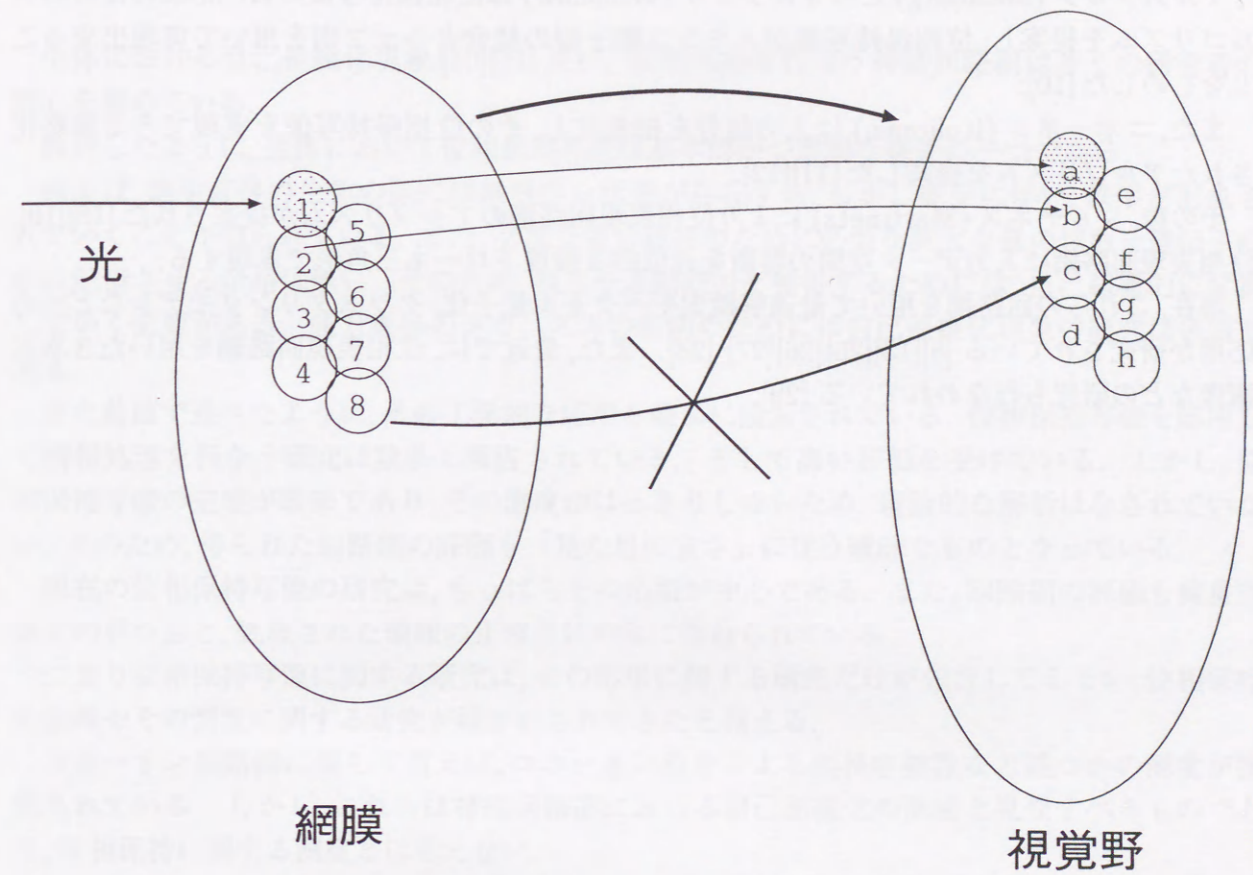


図 1.5: 位相保持写像: 網膜と視覚野の関係. 網膜上の受光細胞とそれに対応する視覚野上のニューロンの位置関係は保存されている。

### 1.3 神経回路網における位相保持

1960年代のヒューベル (Hubel) とウィーゼル (Wiesel) の研究により, 視覚野には特定の傾きを持つ直線に反応する細胞が存在することが明らかになった. また, それらは大脳皮質の表面上にコラム構造を形成し配列している. そして, その構造の少なくともある部分は学習によって形成される. さらに, その後の研究により, その配列と入力された情報と位置関係が保存されていることも発見された. この入力信号と神経回路網の出力の位置関係を保存する構造は, 位相保持写像と呼ばれる. 例としては, 網膜の受光細胞と, その受光細胞によって発火させられる視覚野のニューロンの位置関係が一致している構造があげられる (図 1.5). 図に示すように, 網膜上の受光細胞とその受光細胞によって発火させられる視覚野上のニューロンの位置関係は一致している.

さて, このような位相保持写像がいかなる機構で自己組織化されるかは, 多くの研究者にとって関心を集める問題であった.



マルスブルグ (Malsburg) とウィルショウ (Willshaw) は位相保持写像の自己形成のためのアルゴリズムを提案し, 位相保持写像がメキシコ帽子型の結合とヘップ則を用いて実現出来ることをしめした [10].

また, コホーネン (Kohonen) は入力信号を抽象化し, その位相保持写像を実現できる簡略化されたアルゴリズムを提案した [11][12].

その後, マルチネス (Martinetz) により位相表現回路網のアルゴリズムが提案された [18][19]. 位相表現回路網は入力データ空間の特徴を近似的な被覆ドロネ三角形で表現する.

現在, これらの回路網を用いて最適解探索やベクトル量子化, クラスタリングモデルなどへの応用が研究されている [8][13][25][26][27] [28]. また, 最近では, 位相表現回路網を用いた3次元画像などの研究も行なわれている [29].

#### 1.4 本研究の目的

生体における自己組織化現象 [10][11] 及び, 位相保持を行なう神経回路網は多くの研究者の関心を集めている.

前述したように, 生体において位相保持写像は基本的かつ重要な機能の一つである.

例えば, 誕生直後の生体の脳には無秩序な状態が存在する. しかし成長に伴い, 秩序が形成されていくことが知られている. また, 必要な能力獲得のために必要な莫大な量の情報を遺伝子の中に記憶させる余裕は無い. そのため, 視力や運動能力を獲得するためには, 自己組織的に学習していく必要がある. 能力獲得のメカニズムの解明のためには自己組織化現象の研究は必須である.

また前節で述べたように, その工学的な応用も盛んに模索されている. 位相保持写像を応用して情報処理を行なう研究は数多く報告されている. そして高い評価を受けている. しかし, 位相保持写像の定義が曖昧であり, その測度がはっきりしないため, 理論的な解析はなされていない. そのため, 得られた回路網の評価も「見た目の良さ」に従う曖昧なものとなっている.

現在の位相保持写像の研究は, もっぱらその応用が中心である. また, 回路網の評価も荷重空間での見た目と, 処理された情報の正確さにのみに委ねられている.

つまり位相保持写像に関する研究は, その応用に関する研究だけが先行してしまい, 位相保持の定義やその測度に関する研究が疎かにされてきたと言える.

コホーネン回路網に関して言えば, コホーネン自身による無秩序指数など幾つかの測度が提案されている. しかし, これらは神経回路網における自己組織化の測度と見なすべきものであり, 位相保持に関する測度とは言えない.

マルチネスは自らの論文の中で, 位相保持の考え方に対して一つの方向性を示し, それを自己組織的に実現する神経回路網を提案している. しかし, その測度については述べていない.

本論文では, 神経回路網における位相保持の考え方に対し, 一つの指針を示し, その妥当性について論じる.

## 1.5 本論文の構成

前述したように、本論文は自己組織化特徴写像に関して、位相保持の新しい考えを提案し、その妥当性を様々なシミュレーションにより裏付けたものである。

まず、第1章で神経回路網の研究の概要について解説し、その基礎となる形式ニューロンとそれから派生した回路網について簡単に解説する。次に自己組織化回路網の研究の概要とその問題点を明らかにする。

第2章では位相保持写像を実現するアルゴリズムとして提案された、自己組織化特徴写像について解説し、それぞれの利点と欠点をシミュレーション結果を交えて指摘する。

第3章では現在までに提案されている位相保持の考え方について紹介し、その問題点を指摘する。

第4章では位相保持の新しい考え方を提案した。入力データ空間において節点  $i$  と隣接している節点のうち出力回路網上でも節点  $i$  と隣り合っている節点の割合として局所位相保持率を定義した。そして、種々のコホーネンネットの位相保持の程度を測定し、以下のことを示す実験例を示した、

1. 入力データ空間の近傍関係を表す被覆ドロネ三角形と神経回路網の近傍関係を表す回路網の形が一致した時に位相保持が完成したことになる、
2. 我々の局所位相保持率の定義によると正方格子では一様入力に対して位相保持は実現できないが、六方格子状の結合を持っていれば位相保持が実現できる。

第5章では第4章で定義した位相保持率を、マルチネスの位相表現回路網に拡張して用い、位相表現回路網の性質の解析を行い、次のようなことを明らかにした。位相表現回路網は入力データの特徴を近似的な被覆ドロネ三角形で表現するが、完全ではなく10%弱の欠損結合が存在する。

第6章では結果の考察及び結論について述べる。

## 第2章

### 自己組織化神経回路網

#### 2.1 はじめに

誕生直後のヒトはものを見ることはできない。網膜に入った光は網膜上に配置された受光細胞によって感知され、大脳にある視覚野にその信号は送られる。そして各受光細胞に対応したニューロンが興奮することによって光を感知する。しかし、誕生直後の視覚野のニューロンと受光細胞の関係はランダムな状態である。そのため、受光細胞からの信号に全てのニューロンが等しい確率で反応してしまう。

しかし時間と共に学習によって、特定の受光細胞に対応するニューロンが反応するようになり、視力を獲得していく。また、そのときの受光細胞とニューロンの位相関係は一致した構造を持つ。このような関係は位相保持写像と呼ばれ、自己組織化神経回路網の特徴の一つである。

特徴抽出写像で用いるニューロンは、一般的な神経回路網で用いられるニューロンと異なる。コホーネン回路網や位相表現回路網に至っては、ニューロンの存在そのものが希薄化している。これらの回路網において、ニューロン間の結合はイメージ的なものでしかなく、相互間の入出力は存在しない。しかし、側抑制の結合などを考慮し、ニューロン間の信号の入出力が存在するように動作することを考えると、形式ニューロンで置き換えることも可能である。この場合、入力データは外部入力として処理される。

本章ではまず、ウィルショウとマルスブルグが提案した古典的モデルを紹介する。そして、その特徴を抽象化したコホーネンの自己組織化写像について解説し、最後にマルチネスによる位相表現回路網について述べる。

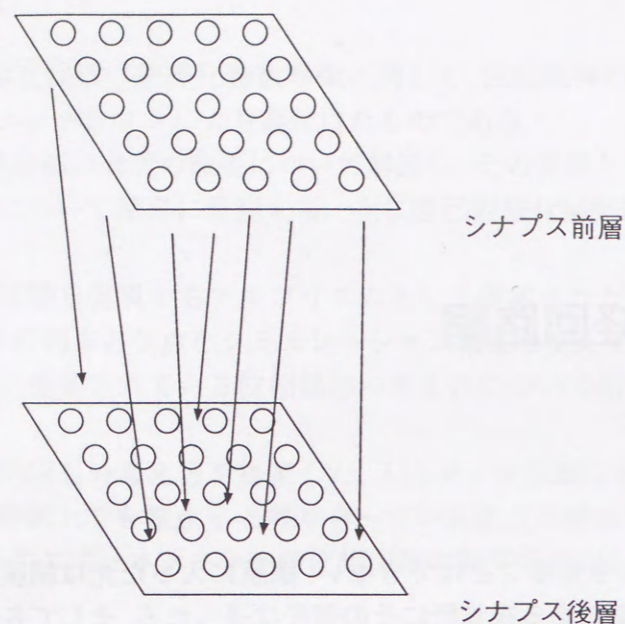


図 2.1: ウィルショウとマルスブルグの古典的モデル: シナプス前層, シナプス後層の2層から成り, 前層と後層はシナプス荷重で結合している.

## 2.2 ウィルショウとマルスブルグによる古典的モデル

ウィルショウ (Willshaw) とマルスブルグ (Malsburg) は網膜上の受光細胞と視覚野の関係をモデル化した神経回路網を提案した.

彼らのモデルは入力層であるシナプス前層と, 出力層にあたるシナプス後層の2枚の回路網で構成される (図 2.1). シナプス前層は受光細胞から, シナプス後層は前層の各々の受光細胞に対応するニューロンから構成されている.

入力層 (前層) の各受光細胞は, 出力層 (後層) の全てのニューロンとシナプス強度  $W_i$  で結合している.

シナプス後層の各ニューロンはシナプス前層の全ての受光細胞からのシナプス結合を受ける. また, シナプス後層の自らの近傍のニューロンからは興奮性の結合を, その周囲にあるニューロンとは抑制性の結合している (図 2.2). 興奮性の結合と抑制性の結合が合わさった結合をメキシコ帽子型結合とも呼ぶ.

このモデルは, シナプス前層の受光細胞が発火すると, 前層と後層のシナプス結合の強度に従って, シナプス後層のニューロンが動作する.

初期状態において, 前層から後層へのシナプス結合は位相保持の関係は無く, ランダムな状態である. これは前層からの入力に関係無く, 後層の素子は等確率で発火することを意味する.

しかし, 回路網は最終的にはシナプス前層のある受光細胞が発火した場合, シナプス後層においても, 前層に対応したニューロンとその近傍にあるニューロンが発火するように学習しなけ

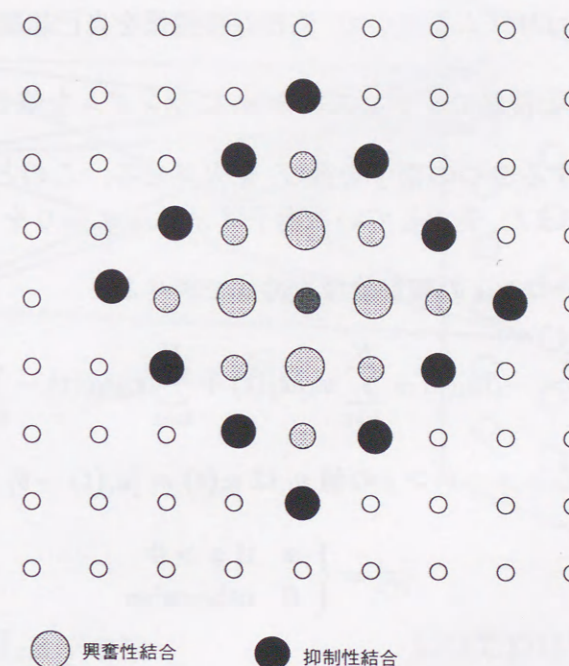


図 2.2: シナプス後層内のニューロンの結合関係: 後層のニューロンは位相的に近傍にある他のニューロンと興奮性の結合を持ち, その外側にあるニューロンとは抑制性の結合を持つ.

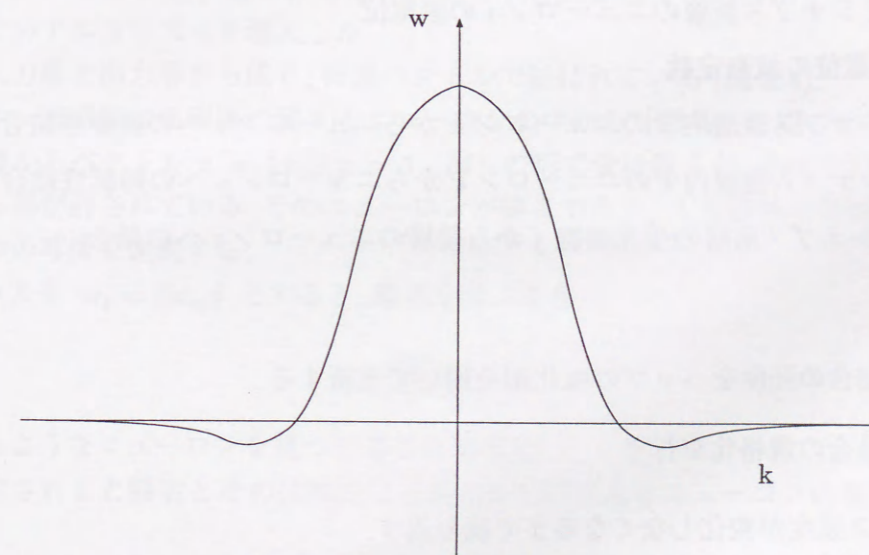


図 2.3: メキシコ帽子型結合

ればいけない。

このモデルは以下のアルゴリズムを用いて、位相保持関係を自己組織的に決定する。

1. 初期状態として、前層と後層のシナプス結合  $w_i$  にランダムな値を与える。
2. シナプス前層の隣接する2つの素子を選び、発火させる。このとき、前層の他の素子は静止状態にあるとする。また、発火している素子は  $y_i = 1, y_i = 0$  とする。
3. シナプス後層のニューロン  $i$  の膜電位は次の式で表せる。

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\beta u_i(t) + \sum_{j=1}^N w_{ij} x_j(t) + \sum_{k=1}^M \epsilon_{ik} y_k(t) - \sum_{k=1}^M i_{ik} y_k(t) \quad (2.1)$$

シナプス後層におけるニューロン  $i$  の値  $y_i$  は  $y_i(t) = [u_i(t) - \theta]$  とする。但し、

$$[x] = \begin{cases} x & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.2)$$

である。また、ここで

- $N$ : シナプス前層の受光細胞数
- $M$ : シナプス後層のニューロン数
- $x_j(t)$ : シナプス前層の受光細胞  $j$  の活動度
- $y_i(t)$ : シナプス後層のニューロン  $i$  の活動度
- $u_i(t)$ : シナプス後層のニューロン  $i$  の膜電位
- $\beta$ : 膜電位の減衰定数
- $\epsilon_{ik}$ : シナプス後層内でのニューロン  $k$  からニューロン  $i$  への興奮性結合
- $i_{ik}$ : シナプス後層内でのニューロン  $k$  からニューロン  $i$  への抑制性結合
- $w_{ij}$ : シナプス前層の受光細胞  $j$  から後層のニューロン  $i$  への結合

である。

4. シナプス結合の強度をヘップの強化則を用いて更新する。
5. シナプス結合の規格化を行う

以上をシナプス強度が変化しなくなるまで繰り返す。

シナプス前層の特定の領域に含まれる受光細胞の集団の発火は、シナプス後層の特定の領域のニューロンの集団の発火を誘発する。その結果、シナプス結合が強化され、最終的に位相保持写像が完成する。

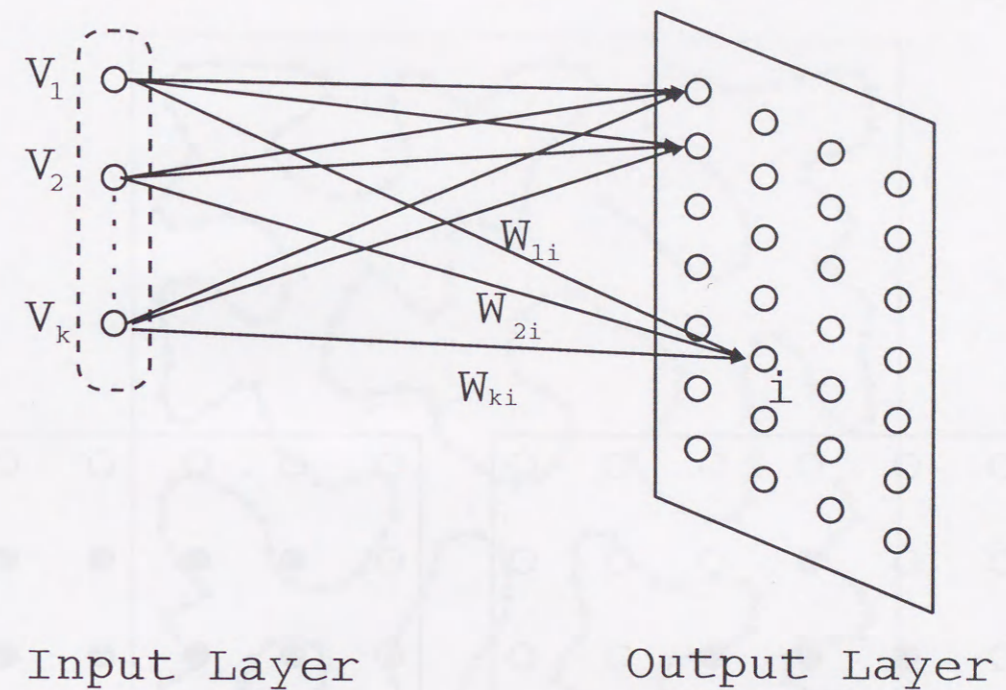


図 2.4: コホーネン回路網の概念図

### 2.3 コホーネンによる自己組織化特徴写像

コホーネンはメキシコ帽子型の結合とヘップの学習則を融合し簡略化することで、簡単でも効率のよいアルゴリズムを導入した。

回路網は入力層と出力層から成り、荷重ベクトルで結ばれている (図 2.4)。

コホーネン・回路網は処理層に属するニューロンの中から「勝者」を選び出す。処理層のニューロンは入力層からベクトル  $\mathbf{v} = \{x_i\} (x = 1 \dots M)$  の形で受け取るが、その中の一つのニューロンが発火する事が許されている。そのニューロンが勝者であり、入力情報の特徴と勝者の出力との対比は一つの写像を定義する。

荷重ベクトルを  $\mathbf{w}_i = \{w_{ij}\}$  とすると、勝者を選ぶ条件は

$$\sum w_{ij} v_j \quad (2.3)$$

が最大であるようなニューロンを見つけることである。

勝者が決定されると勝者とその位相的に近傍 (図 2.5) にあるニューロンの荷重ベクトルが更新される。

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \alpha(t)(v - w_i(t)) \quad (2.4)$$

また、勝者のニューロンと位相的近傍でないニューロンの荷重は更新されない。

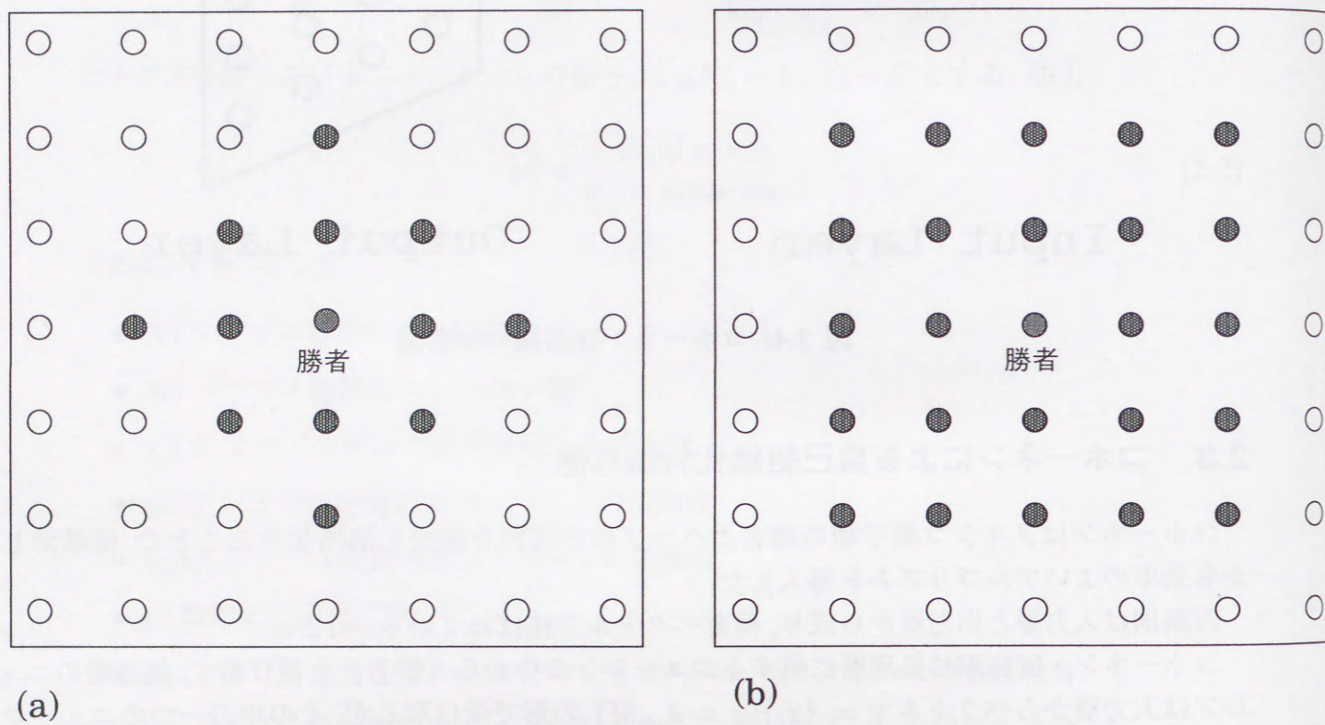


図 2.5: コホーネン回路網の位相的近傍: (a) マンハッタン距離.(b) 将棋板距離.

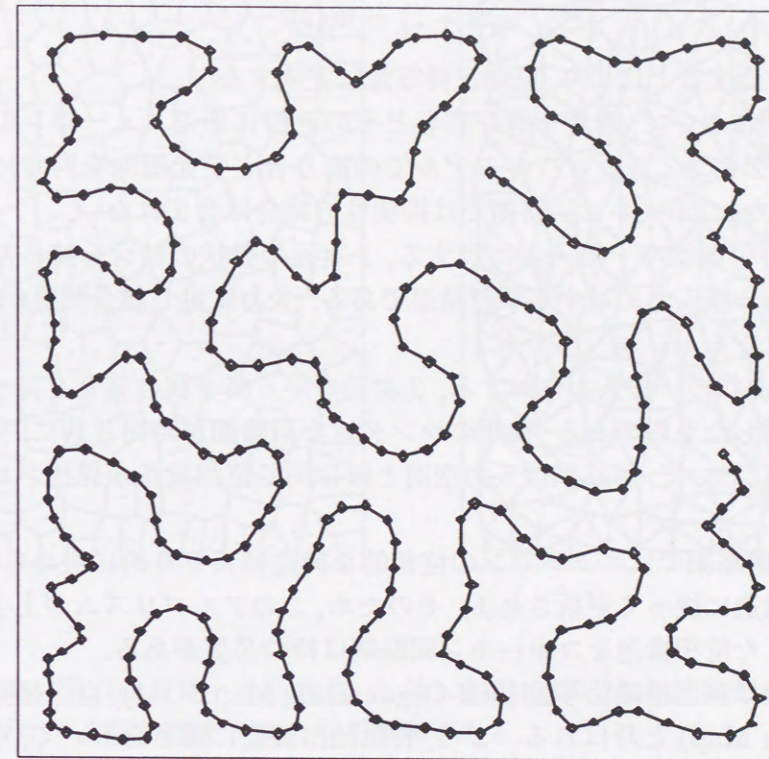


図 2.6: 平面状の一様入力に対する 300 素子の 1次元結合のコホーネン回路網の学習結果

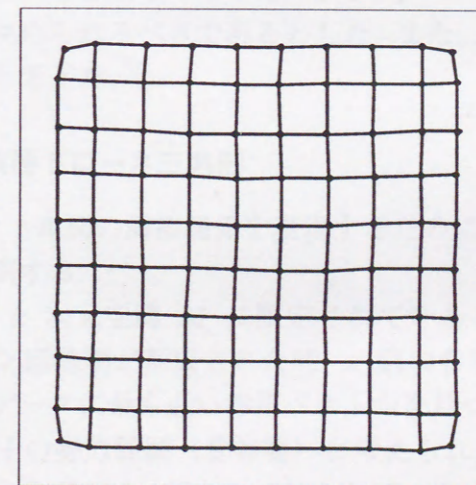


図 2.7: 平面状の一様入力に対する 100 素子の平方格子状の結合を持つコホーネン回路網の学習結果

$$w_i(t+1) = w_i(t) \quad (2.5)$$

上記の操作を繰り返すことにより、位相保持写像は完成する。

コホーネン回路網において、勝者を選び勝者とその近傍にあるニューロンの荷重を更新することは、マルスブルグとウィルショウのモデルでの隣り合う受光細胞を同時に2つ発火させることに対応する。また、コホーネン回路網では抑制性の結合は含まれない。

図2.6は2次元の平面状の一様入力に対する、1次元の紐状の結合を持ったコホーネン回路網の2次元平面上の一様入力に対する学習結果である。入力に対し結合関係が不適切なため、回路網はねじれた形になる。

図2.7は2次元平面状の一様入力に対する、2次元の平方格子状の結合を持ったコホーネン回路網の学習結果を示したものである。初期のランダムな回路網が時間と共に、平面状に整然と並んでいく。最終状態において、回路網は入力空間とほぼ同じ位相構造が保持されていると考えられた。

さて、コホーネン回路網ではニューロンの位相的な構造は天下りの決められている。荷重ベクトルはその位相構造に従って更新される。そのため、このアルゴリズムが上手く働くためには入力ベクトルに適した位相構造をコホーネン回路網は持つ必要がある。

コホーネン回路網は自己組織化写像 (Self-Organizing Map:SOM), 自己組織化特徴写像 (Self-Organizing Feature Map) と呼ばれる。また、特徴抽出機能に重きをおいて、特徴抽出写像と呼ばれることもある。本論文ではコホーネン回路網という名称を主として使用するが、他の名称を用いる場合もある。ここであげた名称が出てきた場合には同じものと理解されたい。

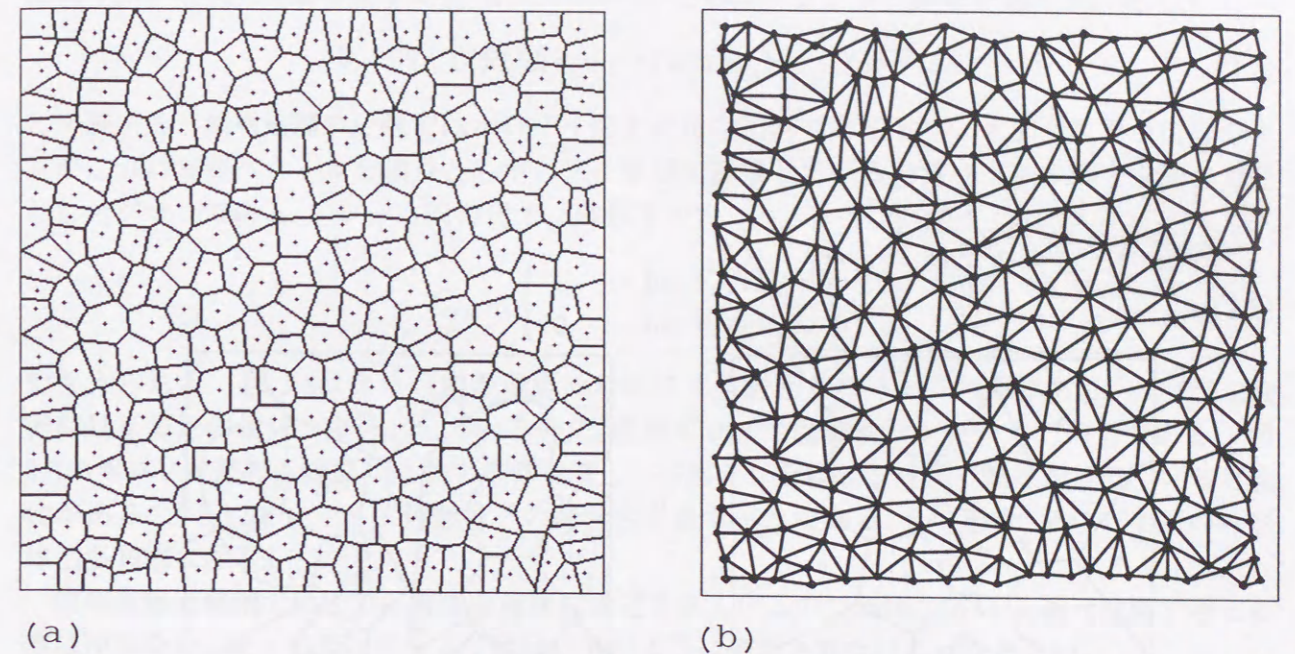


図 2.8: (a) ボロノイ図,(b) ドローネ三角形. ただし厳密にはこれらは矩形の領域でマスクされているので被覆ボロノイ図と被覆ドローネ三角形である。

## 2.4 マルチネスによる位相表現回路網

コホーネン回路網においてニューロン間の結合関係は予め決定されており、入力データによっては特徴をうまく表現出来ないことが多々あった。そこで、マルチネスは出力回路網の位相的構造は入力に応じて適応的に決められるべきであるとした。また、入力データの位相関係は被覆ドローネ三角形で表現されたと考えた。

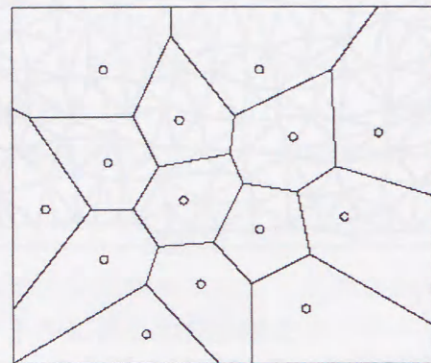
### 2.4.1 被覆ボロノイ図と被覆ドローネ三角形

まず準備として、荷重ベクトル間の隣接関係を表現するために必要な、被覆ボロノイ図と被覆ドローネ三角形について説明する。

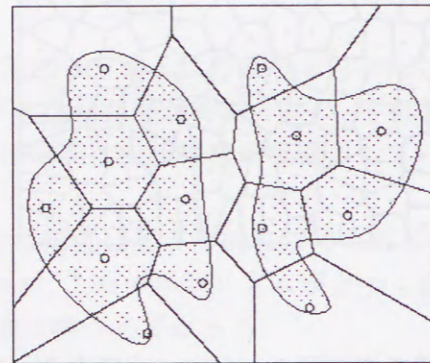
入力データはある有限の  $k$  次元空間  $M$  に限定されているとする。自己組織的に  $n$  個のニューロンを持つコホーネン回路網が形成された時、 $n$  個の参照ベクトル  $w_i$  が得られる。コホーネンの回路網では入力データに最も近い参照ベクトルを持つニューロンが応答する。各ニューロンの応答する範囲は各素子の勢力範囲 (受容場) と考えられ、勢力範囲図は情報処理の分野では参照ベクトルを母点とするボロノイ図として知られている。 $n$  個の参照ベクトルの集合

$$W = (w_i | i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.6)$$

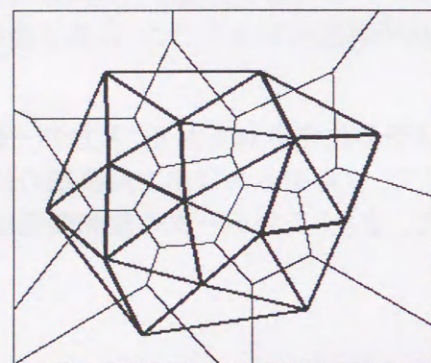
が与えられたとする。参照ベクトルの集合  $W$  に対し、どの参照ベクトルが一番近いかによって  $k$  次元の全空間を分割することをボロノイ分割という。 $i$  番目の参照ベクトルに対するボロノイ



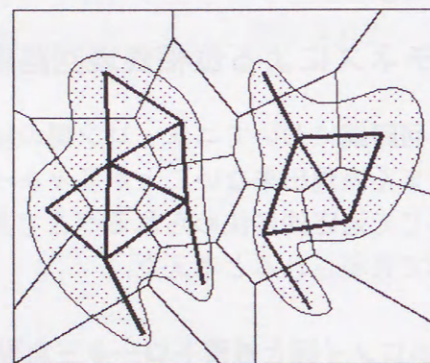
(a) Voronoi Partition



(b) masked Voronoi Partition



(c) Delaunay triangulation



(d) masked Delaunay triangulation

図 2.9: 被覆ボロノイ図と被覆ドロネ三角形.

領域  $V_i$  は  $k$  次元空間の点  $v$  と参照ベクトル  $w_i$  とのユークリッド距離を  $d(v, w_i)$  として

$$V_i = \{v \in \mathbb{R}^k | d(v, w_i) \leq d(v, w_j)\}, \quad \text{for } j \neq i \quad (2.7)$$

と定義する. 情報処理の分野ではボロノイ図と双対な図形であるドロネ図が重要な役割をするがこれは参照ベクトルを頂点としボロノイ領域が隣接している参照ベクトル同士を結んで辺としたグラフである. ドロネ図の辺  $C_{ij}$  は以下の式

$$C_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{for } V_i \cap V_j \neq \Phi \\ 0, & \text{for } V_i \cap V_j = \Phi \end{cases} \quad (2.8)$$

で与えられる. 図 2.8 は 300 個の母点でのボロノイ図とドロネ三角形である. ただし, 厳密には正方形の領域でマスクしているため, 被覆ボロノイ図と被覆ドロネ三角形である. 図 2.8 のボロノイ図の外縁部に位置する母点同士は描画された領域の外部で領域が接している可能性がある. さらにドロネ三角形はその部分も考慮すべきである. その場合, ドロネ図の外形は凸多角形になる.

位相表現回路網では入力空間に限定されているので無限に広い  $k$  次元空間で考える事は出来ない. 従って上のボロノイ図は以下のように変更されなければならない,

$$V_i^{(M)} = \{v \in M | d(v, w_i) \leq d(v, w_j)\}, \quad \text{for } j \neq i. \quad (2.9)$$

無限空間  $\mathbb{R}^k$  ではなく有限空間  $M$  で考えたボロノイ図のことを被覆ボロノイ図と言う. 被覆ボロノイ図 ( $V_M$  とする) ではボロノイ分割線或いは面が入力データ空間  $M$  で覆われて無効化されるので隣接していた領域が隣接していないという場合がでてくる. 各被覆ボロノイ領域は閉集合で, 入力データ空間  $M$  の完全な分割を構成する,

$$M = \bigcup_{i=1}^n V_i^{(M)} \in \mathbb{R}^k. \quad (2.10)$$

被覆ボロノイ図で隣接している領域の参照ベクトルを結んで辺としたグラフを被覆ドロネ図  $D_M$  という. 節点  $i$  と  $j$  の結合関係は

$$C_{ij}^{(D_M)} = \begin{cases} 1, & \text{for } V_i^{(M)} \cap V_j^{(M)} \neq \Phi \\ 0, & \text{for } V_i^{(M)} \cap V_j^{(M)} = \Phi \end{cases} \quad (2.11)$$

で与えられる. 各参照ベクトルを母点とする被覆ボロノイ領域 (受容場) の隣接関係を表している. 参照ベクトル  $w_i$  と  $w_j$  が隣接しているとは被覆ドロネ図  $D_M$  上でつながっていることを指す. つまり  $C_{ij}^{(D_M)} = 1$  ならば隣接していて,  $C_{ij}^{(D_M)} = 0$  ならば隣接していない.  $k=2$  の時, 被覆ドロネ図のことを被覆ドロネ三角形と言う (図 2.9).

#### 2.4.2 位相表現回路網

マルチネスはニューロン間の結合を自己組織的に決定し, 入力データ空間の形状や次元数に関係なく, 入力データの特徴 (つまり位相構造) を表現できる位相表現回路網 (Topology Representing Network: TRN) を提案した. 位相表現回路網は学習の最終状態において, 近似的な入力データの被覆ドロネ三角形を得る.

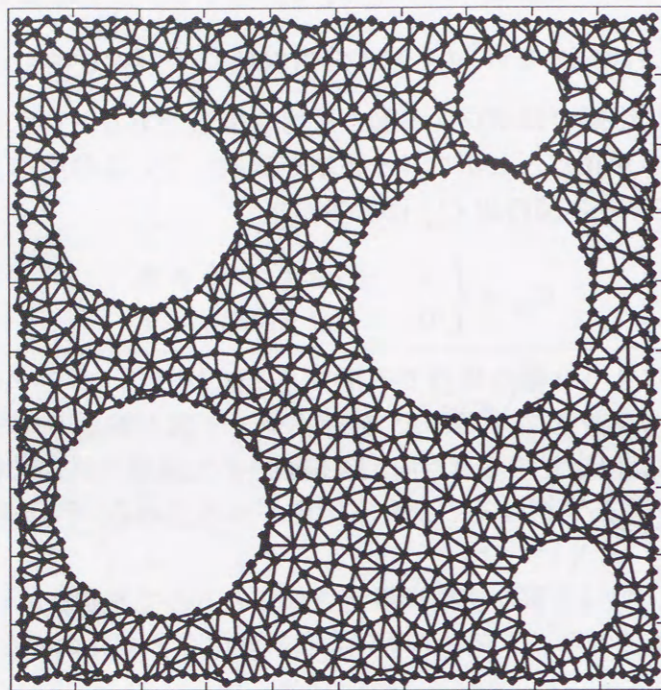


図 2.10: 位相表現回路網の学習結果. 素子数 1000.

$k$  次元空間  $\mathcal{R}^k$  から選ばれた入力データ  $v$  の特徴を同じ空間に取られた  $N$  個の参照ベクトルで適応的に表現することを考える.

まず, 初期状態として荷重ベクトル  $w_i$  にランダムな値を与え, 各々の結合  $C_{ij}$  を 0 (未結合状態) にする.

次に入力データ  $v$  に対し, ユークリッド距離で最も近い順に参照ベクトルをソートし順位  $k_i \in \{0, \dots, N-1\}$  をつける. 荷重ベクトルの更新は以下の式に従い行なわれる.

$$w_i^{\text{new}} = w_i^{\text{old}} + \epsilon \cdot e^{-k_i/\lambda} (v - w_i^{\text{old}}), i = 1, \dots, N; \quad (2.12)$$

ここで,  $\epsilon, \lambda$  は更新量を決定するためのパラメータで, 時間と共に減衰する関数を用いる.

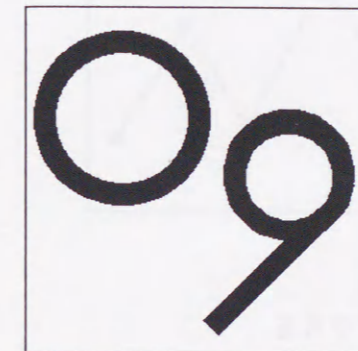
次にニューロン間の結合を適応的に決定する. 入力ベクトル  $v$  との距離が 1 番目, 2 番目のニューロンをそれぞれ  $i_0, i_1$  とする

$C_{i_0 i_1} = 0$  ならば,  $C_{i_0 i_1} = 1$  とし結合の年齢  $t_{i_0 i_1} = 0$  とする, すなわち,  $i_0$  と  $i_1$  を結合する.  
 $C_{i_0 i_1} = 1$  ならば,  $t_{i_0 i_1} = 0$  とする, すなわち, 結合  $i_0 - i_1$  を若返らせる;

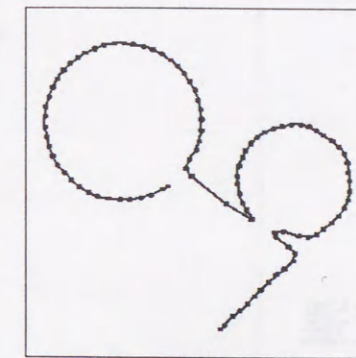
$C_{i_0 j} = 1$  を満たす全ての  $j$  について,  $I_0$  の全ての結合の年齢を次式にしたがって増加させる

$$t_{i_0 j} = t_{i_0 j} + 1; \quad (2.13)$$

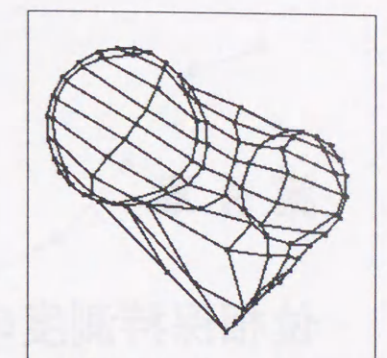
$C_{i_0 j} > 0$  と  $t_{i_0 j} > T$  を満たす全ての  $j$  について  $C_{i_0 j} = 0$  とすることにより, 年齢が  $T$  を超えた素子  $i_0$  の結合を削除する.



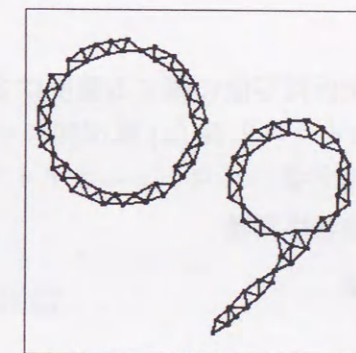
Input Data



(a)Kohonen Network



(b)Kohonen Network



(c)Topology Representing Network

図 2.11: (a)1次元結合のコホーネン回路網 (素子数 1000). (b) 平方格子状の結合を持つコホーネン回路網 (素子数 1000). (c) 位相表現回路網 (素子数 1000)

そして再び入ってきた入力データに従い, 荷重ベクトル及び結合の更新加齢・削除を行なう. 以上を繰り返すことで位相表現回路網が完成する.

上記のアルゴリズムを用いて得られた回路網は入力データ空間の特徴を近似的な被覆ドロネ三角形で表現している.

図 2.10 は 1000 個のニューロンで構成される位相表現回路網の 2 次元の入力データにおける学習結果である. 入力データの特徴を十分に表していることが分かる.

図 2.11 は非一様入力に対するコホーネン回路網と位相表現回路網の学習結果である. 入力データの特徴がこのように文字に類似した図形で表される場合, 1次元結合のコホーネン回路網はそこそこの特徴抽出が可能である. しかし, この例のように分離した領域や領域の形状が 1 次元的でない場合にはやはり矛盾が生じる. さらに, 平方格子状の結合を持つコホーネン回路網では, 入力の次元数が 2 次元の場合でも特徴抽出がなされていないことが分る. それに対し, 位相表現回路網は先に述べたように結合関係を適応的に求めるため, このような入力に対しても高い特徴抽出の能力を示す.



## 第3章

### 位相保持測度の変遷

#### 3.1 はじめに

コホーネン回路網などの位相保持写像に関する測度は2種類に大別できる.

- 自己組織化を表す測度
  - コホーネンによる無秩序指数
  - バウアーらの位相積
- 位相保持測度
  - マルチネスの完全位相保持写像
  - ビルマンらの位相関数
  - 位相保持率 (提案方法)

まず, コホーネンの導入した無秩序指数 [12] などのように入力データ空間に一様分布を仮定した測度がある. このような定義では回路網のみを問題とし, その順序関係により測度が求まる. しかし, 自己組織化特徴写像は入力データの特徴を抽出するための回路網である. そのため, 入力データとの比較は不可欠であると思われる. そこでマルチネスは入力データ空間の特徴も考慮した完全位相保持写像を定義した. それを元に位相関数などが定義されている.

本章では以下にこれまでに提案された自己組織化特徴写像に関する, 無秩序指数と位相保持測度について考察する.

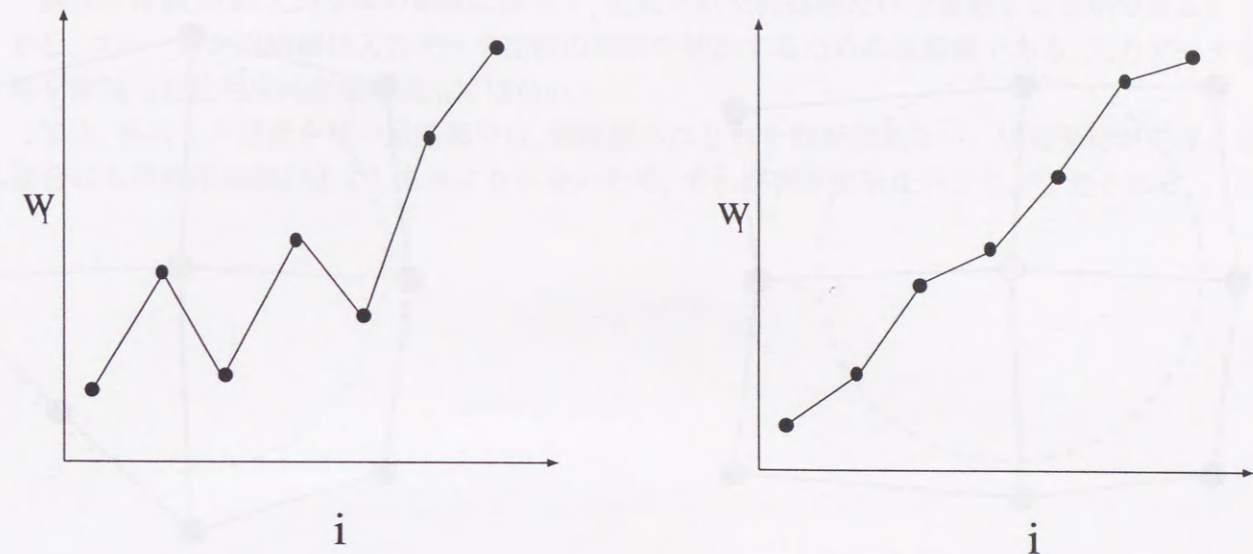


図 3.1: 無秩序指数: 1次元のコホーネン回路網.(a) 荷重ベクトルの順序とニューロンの番号が一致していない ( $D > 0$ ). (b) 荷重ベクトルとニューロンの番号が一致している ( $D = 0$ ).

#### 3.2 コホーネンによる無秩序指数

##### 3.2.1 1次元の場合

1次元結合を持つコホーネン回路網は1次元の入力ベクトルに従って回路網中のニューロンを整然と並べようとする性質がある.

コホーネンは1次元結合のコホーネン回路網の順序付けの程度を測る量として, 無秩序指数  $D$  を導入した [12].

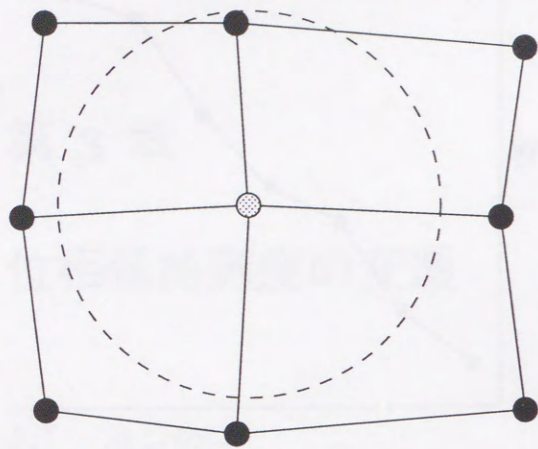
各ニューロンの荷重ベクトルを  $w_i$  とすると, 無秩序指数は次のように表される.

$$D = \sum_{i=2}^l |w_i - w_{i-1}| - |w_l - w_1| \quad (3.1)$$

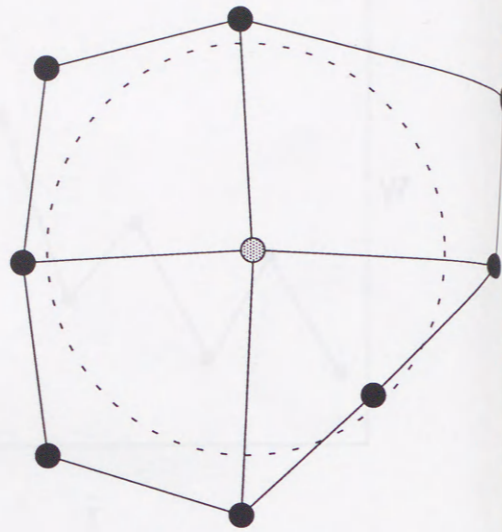
完全に  $w_i$  が昇順もしくは降順に順序付けられたとき,  $D = 0$  が成立し位相保持写像は完成するとみなされていた (図 3.1). しかし,  $D$  には無秩序指数という名称が与えられており,  $D = 0$  は自己組織化の終了を意味すると考えるのが妥当と思われる.

もし,  $w_i$  の順序付けが正確に成されていないなら無秩序指数  $D$  は正の値を持つ.

コホーネンの提案した無秩序指数は1次元結合の回路網においてのみ有効である. また, 回路網の荷重ベクトルも1次元のスカラー量である必要がある. それ以外の回路網, 例えば多次元格子状の結合, ニューロンの順序関係が曖昧になり, 無秩序指数を求めることはできない. また, 無秩序指数は自己組織化の程度を示す指数であり, 位相保持を示す指数ではない.



$D=0$



$D>0$

図 3.2: 2次元平方格子状のコホーネン回路網の無秩序指数: ユークリッド距離で測って最近傍にある素子が回路網上においても最隣接の素子である場合に無秩序指数は0となる.

### 3.2.2 淵田らによる多次元位相保持写像の無秩序指数

コホーネンの導入した無秩序指数を基に, 淵田・村島・宮島・豊平 [16] によって提案された. 多次元空間において, 荷重ベクトルの順序関係を検出することは困難である. そこで, 位相的近傍にある荷重ベクトル同士は, そうでないものよりも近くにあるべきであると考え. 多次元結合のコホーネン回路網での無秩序指数は以下のように定義される.

$$D = \sum_{k=1}^n d_k d_k = \begin{cases} l(\text{dist}(w_k, w_i) - \text{dist}(w_k, w_j)) & w_j \in N_k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.2)$$

ここで,  $\text{dist}(w_i, w_j)$  は荷重ベクトル  $w_i, w_j$  間のユークリッド距離である. また,

$$l(u) = \begin{cases} u & \text{if } u > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.3)$$

である.

2次元の平方格子状の回路網を例に考えてみよう (図 3.2). ある素子に着目して考えた場合, その素子とユークリッド距離で最隣接にある素子が回路網上でも第一近傍にある場合に秩序が形成されている. その他の場合には秩序は形成されていないと考える. 全ての素子においてこのような関係を満たすとき, 無秩序指数は0となる.

無秩序指数  $D$  は入力空間の形状に依らず, 完成された回路網だけで求めることができる. しかし, コホーネン回路網は入力データ空間の特徴を抽出するための回路網である. 入力データ空間を無視した位相保持測度は適当ではない.

また, 多次元の結合を持つ回路網では, 回路網のねじれを判断出来ない. 位相保持が完成した場合にも無秩序指数が必ずしも0にならないため, それが判断出来ないことが予測される.

### 3.3 バウアー (Bauer) らの位相積

バウアー [17] らは入力データ空間の形状に関係なく、位相保持写像の近傍関係を測る測度として、位相積を提案した。

位相積は以下の手順で求められる。

まず、回路網  $A$  上において、節点  $j$  と  $k$  番目に近い節点  $n_k^A(j)$  を次のように定義する。

$$n_1^A(j) : d^A(j, n_1^A(j)) = \min_{j' \in \{j\}} d^A(j, j'') \quad (3.4)$$

$$n_2^A(j) : d^A(j, n_2^A(j)) = \min_{j' \in \{j, n_1^A(j)\}} d^A(j, j'') \quad (3.5)$$

ここで、 $d^A(i, j)$  は節点  $i$  から節点  $j$  に到着するための最短ステップ数である。

同様に、入力空間  $V$  上において、節点  $j$  と  $k$  番目に近い節点  $n_k^V(j)$  を次のように定義する。

$$n_1^V(j) : d^V(w_j, w_{n_1^V(j)}) = \min_{j' \in \{j\}} d^V(w_j, w_{j'}) \quad (3.6)$$

$$n_2^V(j) : d^V(w_j, w_{n_2^V(j)}) = \min_{j' \in \{j, n_1^V(j)\}} d^V(w_j, w_{j'}) \quad (3.7)$$

上記の隣接節点から、節点  $i, j$  の隣接率を次のように定義する。

$$Q_1(j, k) = \frac{d^V(w_j, w_{n_k^A(j)})}{d^V(w_j, w_{n_k^V(j)})} \quad (3.8)$$

$$Q_2(j, k) = \frac{d^A(j, n_k^A(j))}{d^A(j, n_k^V(j))} \quad (3.9)$$

ここで、 $d^V(i, j)$  は入力空間での  $i$  と  $j$  との距離である。但し、この定義では入力空間は  $N$  次元上で一様であることを前提としている。

この定義から、 $Q_1(i, j), Q_2(i, j)$  は、共に  $k$  番目の隣接点が入力空間と出力空間で一致したときに 1 をとる。

さて、節点  $j, k$  が回路網上で最隣接でないかぎり、節点  $j$  から節点  $k$  に至るまでは複数の節点が存在する。このとき、節点  $j$  からその内部にある節点との隣接率は様々な値を持つ。  $Q_1(j, k), Q_2(j, k)$  を用いて、2つの節点  $j, k$  での位相積は次のように規格化される。

$$P_1(j, k) = \left( \prod_{l=1}^k Q_1(j, l) \right)^{1/k} \quad (3.10)$$

$$P_2(j, k) = \left( \prod_{l=1}^k Q_2(j, l) \right)^{1/k} \quad (3.11)$$

また、その値の範囲は

$$P_1(j, k) \geq 1 \quad (3.12)$$

$$P_2(j, k) \leq 1 \quad (3.13)$$

となる。

次に、 $P_1(j, k)$  と  $P_2(j, k)$  から  $P_3(j, k)$  を次のように定義する。

$$P_3(j, k) = \left( \prod_{l=1}^k Q_1(j, l) Q_2(j, l) \right)^{1/2k} \quad (3.14)$$

また、回路網全体の位相積は以下のように定義される。

$$P = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{N-1} \log(P_3(j, k)) \quad (3.15)$$

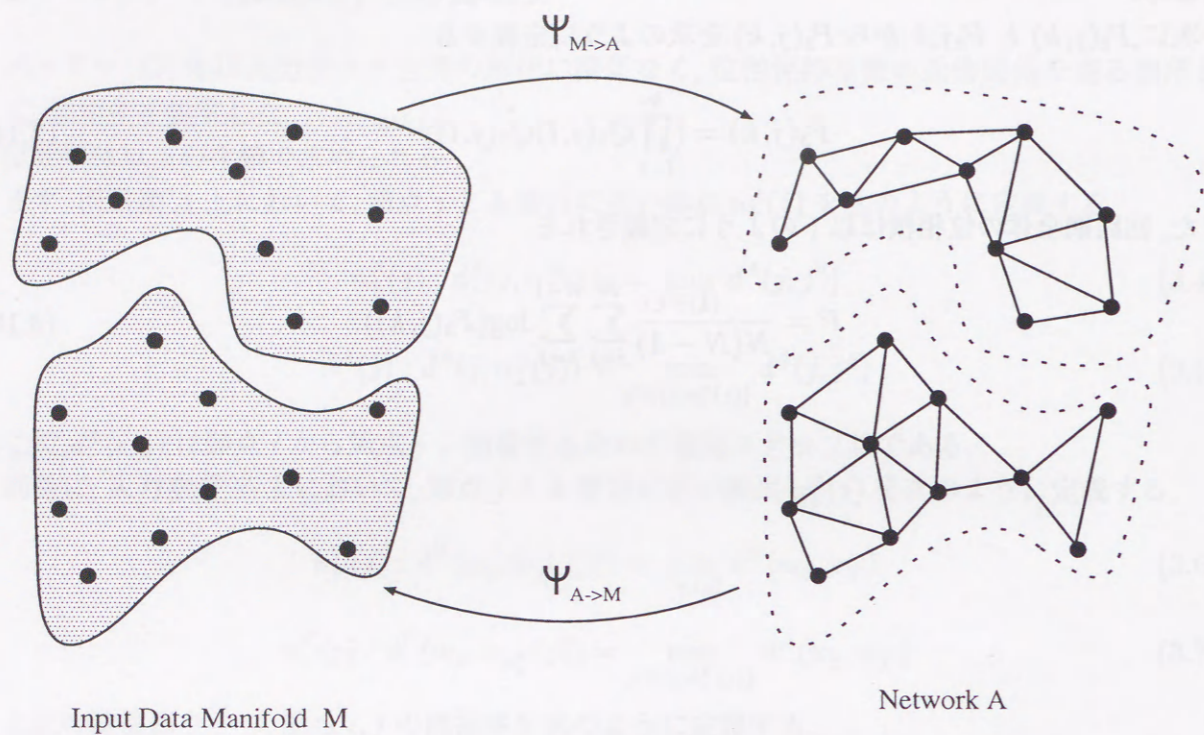


図 3.3: 完全位相保持写像: 順方向の写像  $\Phi_{M \rightarrow A}$  と逆方向の写像  $\Phi_{A \rightarrow M}$  が同時に近傍関係を満たす。

### 3.4 マルチネスの完全位相保持写像

これまでの定義は全て、入力データの分布に関係無く、回路網の隣接関係だけに着目したものである。

しかし、それだけで位相保持を考えると、入力データの特徴抽出という当初の目的から離れた神経回路網が得られる恐れがある。そこで、ビルマンはマルチネスの位相保持写像の定義に基づき、入力データ空間  $M$  から回路網  $A$  への写像と回路網から入力データ空間への写像の双方を考慮に入れた測度を提案した [20]。

被覆ドロネ三角形を用いて、位相保持写像は次のように定義できる。

$A$  をニューロン  $i, i = 1, \dots, N$  の結合関係を表す回路網とする。  $M \in \mathbb{R}^D$  は与えられた  $D$  次元の多様体とする。また、ニューロン  $i$  の荷重ベクトル  $w_i$  は多様体  $M$  上に分布している。  $M$  から  $A$  への写像  $\Phi_{M \rightarrow A}$  を考えたとき、次の条件を満たすなら写像  $\Phi_{M \rightarrow A}$  において近傍保持されている。多様体  $M$  上で隣接している (被覆ボロノイ領域が互いに接している) 荷重ベクトル  $w_i, w_j$  に対応するニューロン  $i, j$  が回路網  $A$  上でも隣接している。

また、 $A$  から  $M$  への写像  $\Phi_{A \rightarrow M}$  においても隣接している、即ち回路網  $A$  上で隣接するニューロン  $i, j$  の荷重ベクトル  $w_i, w_j$  が多様体  $M$  上で被覆ボロノイ領域が隣接しているなら、近傍保持されている。

$M$  から  $A$  への写像  $\Phi_{M \rightarrow A}$  と  $A$  から  $M$  への写像  $\Phi_{A \rightarrow M}$  が共に近傍保持される回路網は位相保持写像を形成する (図 3.3)。

### 3.5 ビルマン (Villman) らによる位相関数

マルチネスの完全位相保持写像は入力データの特徴も考慮に入った極めて厳密な定義になっている。しかし完全位相保持写像が実現している具体的な例は示していない。ビルマンらはコホーネン回路網に対し位相関数を定義し、完全位相保持写像が実現している具体例を示そうと試みた。

位相関数は次のように定義される。まず、神経回路網は  $k$  次元の格子状の結合を持つものとする。  $k : (k = 1, 2, 3, \dots, N)$  隣接までを各格子点での最隣接と仮定する。入力データ多様体  $M$  から回路網  $A$ ,  $A$  から  $M$  への写像について  $f_i(k), f_i(-k)$  を  $k$  近傍における位相保持のされていない領域の個数とする。

$$f_i(k) \equiv \#\{j \mid \|i - j\|_{\max} > k, d_{D_M}(i, j) = 1\} \quad (3.16)$$

$$f_i(-k) \equiv \#\{j \mid \|i - j\|_E = 1, d_{D_M}(i, j) > k\} \quad (3.17)$$

但し、 $\#\{j\}$  は集合  $j$  の個数である。

位相関数  $\Phi_A^M(k)$  は次の式で与えられる。

$$\Phi_A^M(k) \equiv \begin{cases} \frac{1}{N} \sum_{j \in A} f_j(k) & (k > 0) \\ \Phi_A^M(1) + \Phi_A^M(-1) & (k = 0) \\ \frac{1}{N} \sum_{j \in A} f_j(k) & (k < 0) \end{cases} \quad (3.18)$$

位相が完全に保持されている場合に値 0 をとり、位相保持がされなくなるにつれて大きな値をとる。

図 3.4 に正方格子を持つ場合の学習結果とその被覆ポロノイ分割 (受容場) の典型例を示す。出力回路網  $A$  を各節点が参照ベクトルの位置に来るように配置し、各参照ベクトルを母点としてポロノイ分割をしたものである。  $M \rightarrow A$  の写像を考える場合、対角の位置にある節点  $i$  と  $j$  の参照ベクトル  $w_i$  と  $w_j$  の受容場が隣接していることは明らかであるが出力回路網  $A$  上では  $i$  と  $j$  は隣り合っていない、つまり最隣接近傍ではない。これでは前述の位相保持の定義に反する。このため最大値距離

$$d^{(A)}(i, j) = \max_{r=1}^k |i_r - j_r| \quad (3.19)$$

を採用し、直接結合していない節点  $i$  と  $j$  を無理に最隣接近傍にしてしまう。この際、受容場が隣接していない  $w_j$  と  $w_k$  が写像される節点  $j$  と  $k$  が最隣接近傍になってしまうのは問題にしない。逆に  $A \rightarrow M$  の写像を考える時は  $w_j$  と  $w_k$  は明らかに受容場は隣接していない。従って  $j$  と  $k$  を最隣接近傍とするわけにはいかない。そのためには最大値距離ではなく、ユークリッド距離又はマンハッタン距離

$$d^{(A)}(i, j) = \sum_{r=1}^k |i_r - j_r| \quad (3.20)$$

を採用しなければならない。マンハッタン距離では  $A$  上で隣り合っていない節点  $i$  と  $j$  が  $D_M$  上で隣接している受容場  $i$  と  $j$  に写像されることも問題にしない。この様に順方向と逆方向で距離の測度を変えるのは不自然である。このような矛盾した定義の原因は正方格子を持つ 2 次元コホーネンネットは一様入力に対し、位相保持を実現できるという前提である。

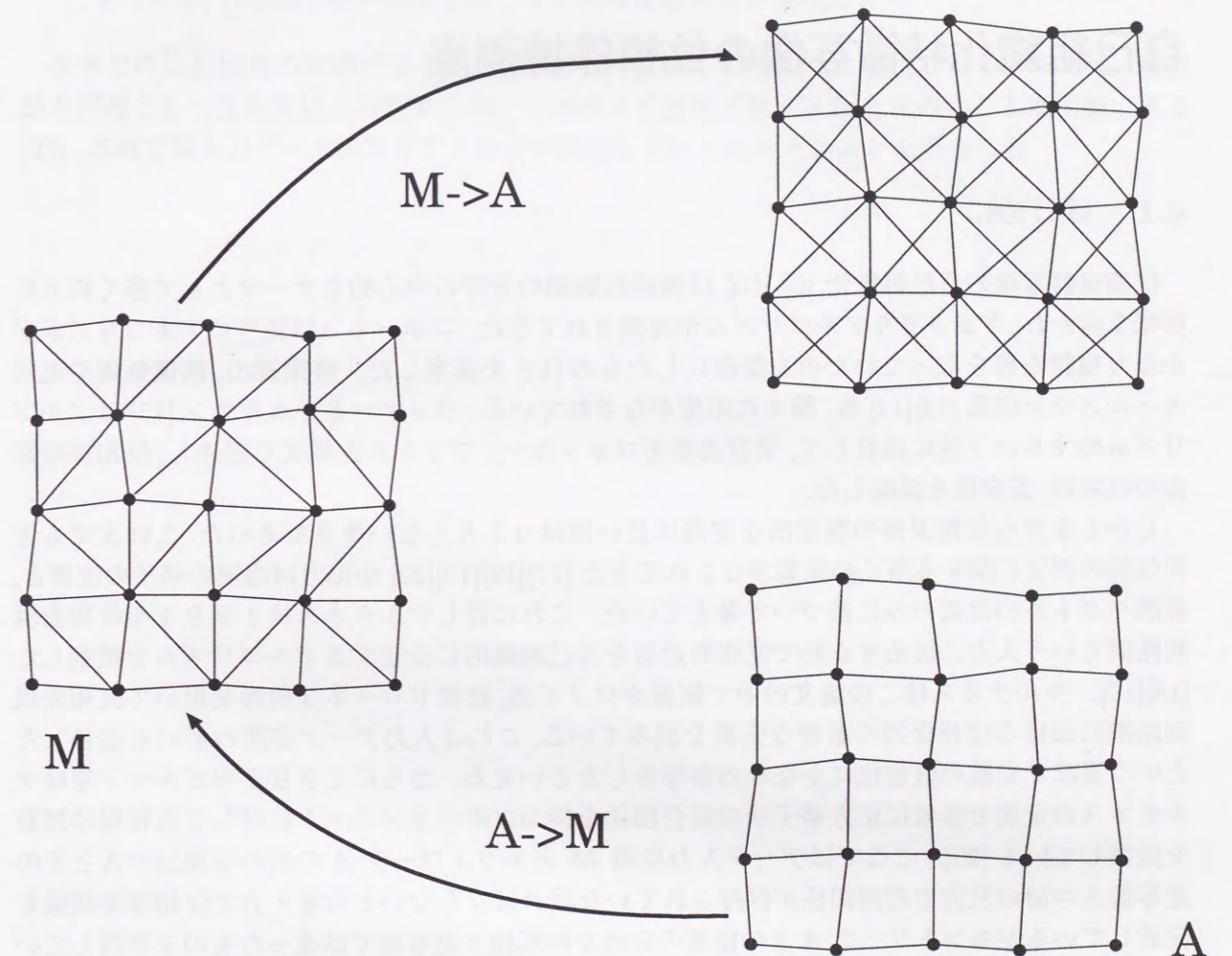


図 3.4: 正方形の入力空間の神経素子の正方格子への写像

## 第 4 章

### 自己組織化特徴写像の位相保持測度

#### 4.1 はじめに

位相保持写像の自己組織化 [6] [10] は神経回路網の分野の中心的なテーマとして多くの人に興味を持たれ、さまざまなアルゴリズムが提案されてきた。コホーネン従来のアルゴリズムがかなり複雑な形を取っていたのを簡潔にしたもの [11] を提案した。特徴抽出、画像処理や巡回セールスマン問題 [13][14] 等、種々の応用がなされている。リッターとシュルテン [15] はアルゴリズムのマルコフ性に注目して、学習過程をフォッカー-プランク方程式で記述し、位相保持写像の収束性、安定性を議論した。

しかしながら位相保持の数学的な定義は長い間はっきりしないままであった。これまでも位相保持の測度に関する多くの提案がなされてきた [17][18][19][20] が出力回路網の格子の位置と、参照ベクトルの位置のみに基づいて考えていた。これに対しマルチネスは 1994 年位相表現回路網という入力に反応する形で位相的近傍を自己組織的に決定するアルゴリズムを提案した [18][19]。マルチネスはこの論文の中で被覆ポロノイ図、被覆ドロネ 3 角形を用いて位相表現回路網における位相保持の厳密な定義を試みている。これは入力データ空間の形にも注目したという意味で定義の厳密化にかなりの寄与をしたといえる。さらに 1997 年ビルマン等はマルチネスの定義を参考に正方格子状の結合関係を持つコホーネンネットに対して位相保持関数を提案している [20]。ここではデータ入力空間  $M$  とネットワーク  $A$  の間の写像  $M \Rightarrow A$  とその逆写像  $A \Rightarrow M$  の双方で近傍関係が保持されていなければならないとの考え方で位相保持関数を定義しているがネットワーク  $A$  上の距離の定義が順写像と逆写像では違ったものを採用している。つまり順写像では最大値距離（将棋板距離）を採用し、逆写像においてはユークリッド距離或いはマンハッタン距離を採用するという不思議な定義になっている。ネットワーク上での神経素子（節点） $i$  と  $j$  が隣り合っているかどうかの判定のものさしが順方向と逆方向の写像で違うのはいかにも無理な定義であると言わざるをえない。

この原因には正方格子状の位相的近傍をもつコホーネンネットの方形の一様分布入力に対するよく知られている応答は位相保持が出来ているという前提がある。本章の目的はこの前提をはずして位相保持測度の無理のない定義が可能かどうか考察した結果を報告することである。

第 2 節では位相保持の新しい測度を提案した。入力データ空間において節点  $i$  と隣接している節点のうち出力回路網上でも節点  $i$  と隣り合っている節点の割合として局所位相保持率を定

義した。第 3 節では種々のコホーネンネットの位相保持の程度を測定し、以下のことを示す実験例を示した、

1. 入力データ空間の近傍関係を表す被覆ドロネ三角形と神経回路網の近傍関係を表すネットワークの形が一致した時に位相保持が完成したことになる、
2. 我々の局所位相保持率の定義によると正方格子では一様入力に対して位相保持は実現できないが、六方格子状の結合を持っていれば位相保持が実現できる。

本章での位相保持の定義は 2 次元と限らず、一般的に  $k$  次元でも適用される。しかし、現実的な問題として 3 次元以上の空間においてポロノイ図やドロネ網を求めることは困難である [23]。本章では入力データの次元を 2 次元に限定してシミュレーションを行なった。

## 4.2 位相保持測度の提案

### 4.2.1 入出力の位相構造の一致による位相保持

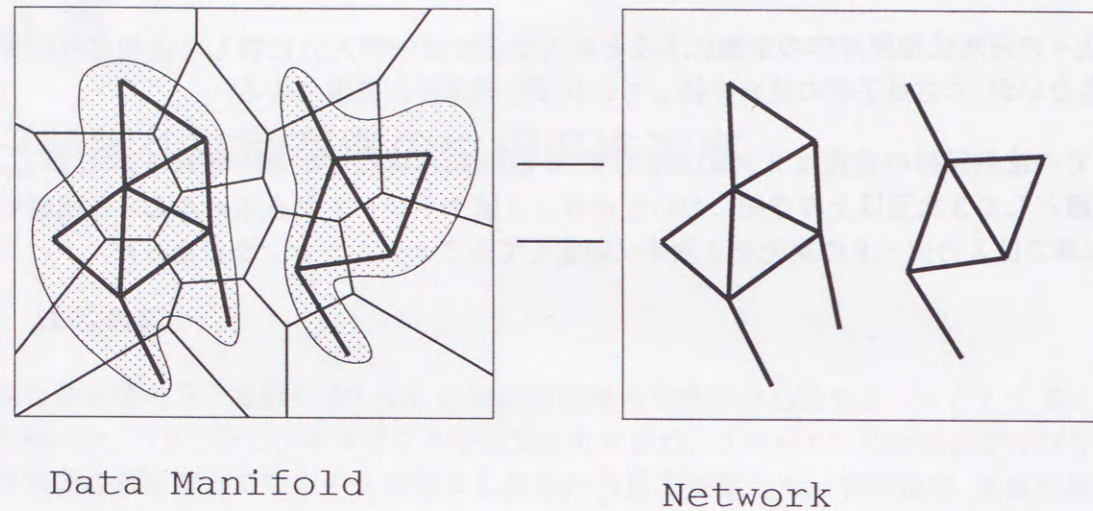


図 4.1: 入出力の位相構造の一致による位相保持: 入力データの特徴を表す被覆ドロネ三角形と得られた神経回路網を比較することで位相保持を定義する。

本章では無理のない自然な位相保持の測度と考えるものを提案する。最隣接近傍は最初に近傍と定義されたものだけを指し (つまり  $A$  でつながっているものだけが最隣接近傍とする), 距離の定義を順方向と逆方向で変えるようなことはしない。

入力側では各神経素子が持つ参照ベクトルの受容場の隣接状態で近傍関係は決まる。出力側ではコホーネンの回路網の結合状態で近傍関係は与えられている。両者が一致した時に位相保持は実現したとすることができるというのが我々の考え方である。

この考えに従えば「もし  $M$  上で隣接している二つの参照ベクトル  $w_i, w_j$  が  $A$  上で隣り合っている二つの節点  $i$  と  $j$  に写像され,  $A$  上で隣り合っている二つの節点  $i$  と  $j$  は  $M$  上で隣接している二つの参照ベクトル  $w_i, w_j$  に写像される」ことになる。

ここで受容場が隣接していない二つの参照ベクトルがグラフ  $A$  上で隣り合う二つの節点に写像されることやグラフ  $A$  上で隣り合わない二つの節点の参照ベクトルの受容場が隣接することは起こらない。

$k=2$  の時, 被覆ドロネ図のことを被覆ドロネ3角形と言う。

### 4.2.2 出力回路網の節点間の近傍関係

出力側の回路網  $A$  の結合行列の要素  $C_{ij}^{(A)}$  は

$$C_{ij}^{(A)} = \begin{cases} 1, & \text{for } i \text{ と } j \text{ は結合している} \\ 0, & \text{for } i \text{ と } j \text{ は結合していない.} \end{cases} \quad (4.1)$$

となる。出力回路網の節点  $i$  と  $j$  が隣り合っているとは回路網  $A$  でつながっていることを指す。つまり  $C_{ij}^{(A)} = 1$  ならば隣りあっていて,  $C_{ij}^{(A)} = 0$  なら隣りあっていない。

出力側の回路網  $A$  の節点  $i$  と  $j$  の間の離散的距離  $d^{(A)}(i, j)$  は節点  $i$  から節点  $j$  へ到達するのに最低何本の辺を経由するかで距離を測る。これは被覆ドロネ図の節点間の距離  $d^{(D_M)}(i, j)$  を測る場合も同じである。

位相保持とは  $w_i$  と  $w_j$  の受容場が隣接している場合, グラフ  $A$  上で節点  $i$  と  $j$  が隣りあっていて,  $w_i$  と  $w_j$  の受容場が隣接していない場合, 節点  $i$  と  $j$  はグラフ上で隣り合っていないと同時に逆方向も同様のことが言えるとする。このようなことが成立するには出力回路網の形  $A$  と被覆ドロネ図  $D_M$  が位相的に一致することが必要である。我々の局所位相保持率の計算では入力側も出力側も同じ”位相的距離”を使っている。

### 4.2.3 位相保持率

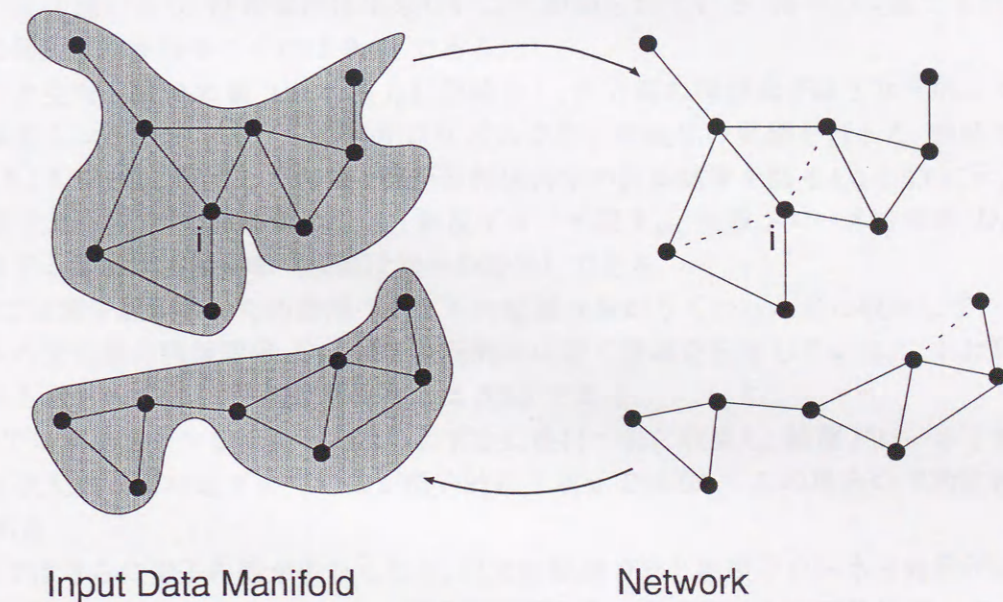


図 4.2: 位相保持率: 被覆ドロネ三角形において直接継っている節点 (最隣接にある) と回路網上で結合している節点との比で求められる。

先の定義に応じて,  $i$  番目の神経素子の局所的位相保持率  $\psi(i)$  は

$$\psi(i) = \frac{\#\{j | d^{(D_M)}(i, j) = 1; d^{(A)}(i, j) = 1\}}{\#\{j | d^{(D_M)}(i, j) = 1\}} \quad (4.2)$$

とする, ここで  $\#\{j|d^{(A)}(i,j)=1\}$  は  $d^{(A)}(i,j)=1$  を満たす  $j$  の個数である.  
 つまり節点  $i$  を固定した時, 被覆ドロネ図において  $d^{(D_M)}(i,j)=1$  を満たす節点のうち出力回路網上で  $d^{(A)}(i,j)=1$  を満たす節点の割合として定義される. 定義より

$$0 \leq \psi(i) \leq 1.0 \quad (4.3)$$

であることがわかる. 全ての神経素子で  $\psi(i)$  が 1.0 になれば被覆ドロネ図と回路網の形が一致したことになり, 位相保持が出来あがる. 部分的にしか  $\psi(i)$  が 1.0 にならない場合がある. この場合は平均位相保持率  $\Psi_{mean}$

$$\Psi_{mean} = \sum_{i=1}^n \psi(i)/n \quad (4.4)$$

を使う.

### 4.3 コホーネンネットの自己組織化に関する数値実験

#### 4.3.1 被覆ドロネ 3 角形の計算

いくつかのコホーネンの自己組織化特徴写像 [11] のシミュレーションを行い, 局所位相保持率及び平均位相保持率を求めた. 受容場の計算は渡邊と村島が提案したポロノイ分割法 [21] を用いた. この方法は母点からの距離の順に整列した距離表を見ながら母点に近いところから順次どの母点の勢力範囲かを示す色を置いていく方法である. 母点数に関りなく一定の計算時間でポロノイ図を描くことが出来る.

2次元離散画面をポロノイ分割し, 入力データ空間  $M$  に含まれない部分でポロノイ分割線を覆い, 隠れた部分を消去した. その上で各被覆ポロノイ領域の隣接関係を調べ, 被覆ドロネ 3 角形を得た.

#### 4.3.2 1次元格子

入力データ空間  $M$  を縦横の正方形領域とし, 出力側は 100 個の神経素子が 1次元で結合したコホーネンネットに一様分布のデータ入力に対する学習結果を図 4.3 に示す. 図 4.3 (a) は被覆ポロノイ分割と 1次元の鎖 (出力回路網) を重ねて示してある.

次的に矛盾があり, 位相保持は出来ないことが知られている. 我々の定義でも同様である. (b) の局所位相保持率の平均は 0.43 である.

入力データ空間を縦 0.2 横 1.0 の長方形領域とし, 出力側の神経素子は 1次元的につながった格子を仮定しコホーネンネットのアルゴリズムで自己組織化の実験を行った. 神経素子の数は 50, 20, 10 とし, 収束した結果と局所位相保持率の計算結果を図 4.4, 4.5, 4.6 に示した. それぞれの図で上から, 出力回路網の形  $A$ , 被覆ポロノイ図  $V_M$ , 被覆ドロネ 3 角形  $D_M$ ,  $n$  個の素子に対する局所位相保持率 (横軸は素子の番号) である.

図 4.4 では素子数が多いため参照ベクトルの位置は曲がりくねった形に収束している. 各参照ベクトルの受容場の隣接関係  $D_M$  は 1次元的ではなく複雑な形をしている. これは局所位相保持率からも示されている. 平均位相保持率は 0.50 である.

図 4.5 では素子数が少なくなったためわずかに波打つ形に収束し, 被覆ドロネ 3 角形の隣接関係も 1次元的な形に近づいているが部分的に 1次元ではない. この場合の平均位相保持率は 0.76 である.

図 4.6 ではさらに素子の数が少なくなり, 出力回路網の形と被覆ドロネ 3 角形が完全に一致し, 位相保持が出来上がっている. この場合各神経素子の受容場は 1次元的に並んでいることを意味する. どの神経素子についても局所位相保持率は 1.0 になっている.

この実験で入力データの次元数は 2 で出力回路網では 1次元のつながりを仮定している場合でも神経素子数を減らせば位相保持が実現することを示している.

図 4.7 には入力データ空間が長方形領域の時, 1次元格子で位相保持写像が実現する最大の神経素子数を示す. これより少ない神経素子数では必ず位相保持が実現する. 図 4.7 はニューロン数や領域の形を変えて, 膨大な回数の数値シミュレーションを実行して得た結果である. ニューロン数を  $n$  とすると, 一回のシミュレーションのステップ数は  $200n$  である. 図 4.7 のデータは



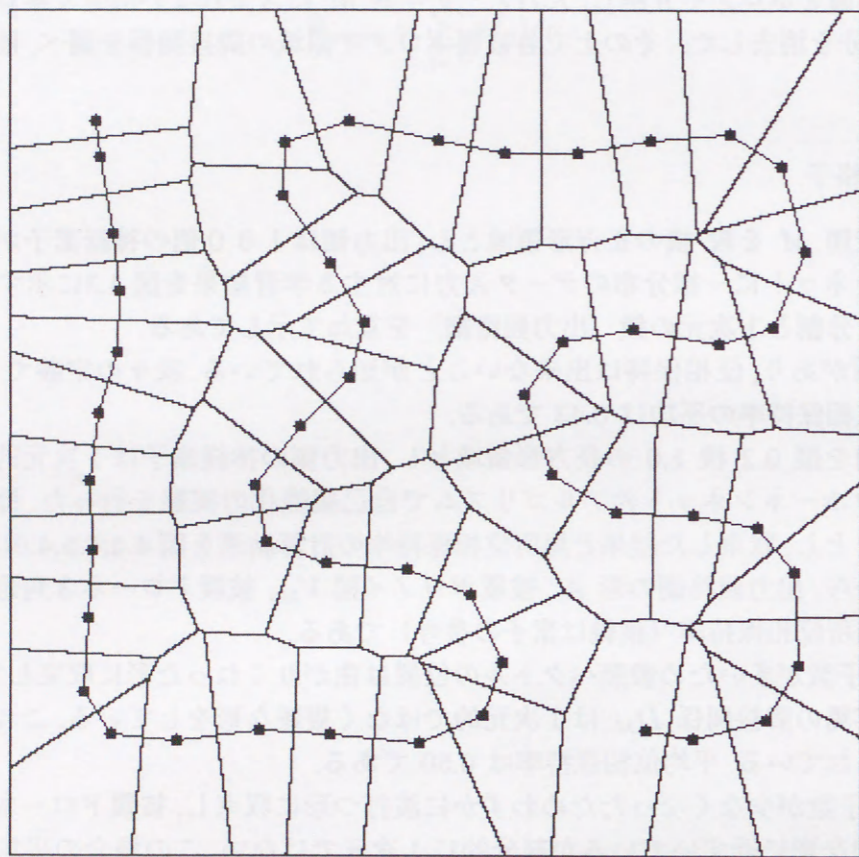
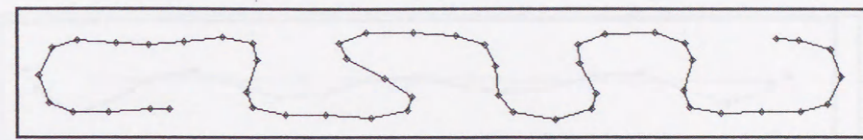


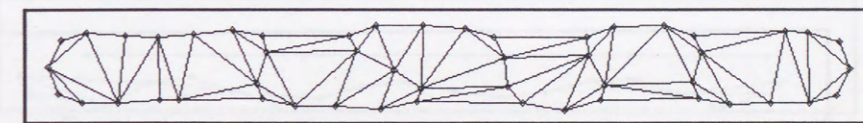
図 4.3: 2次元データ入力に対する1次元結合のコホーネンネットの学習結果:  $\Psi_{mean} = 0.43$



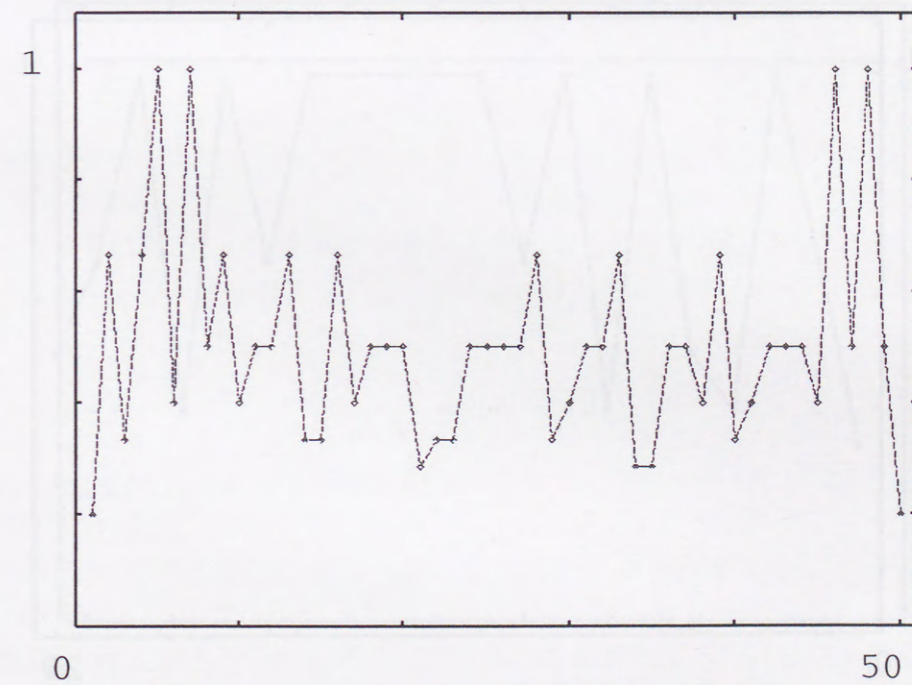
(a) network



(b) masked Voronoi partition

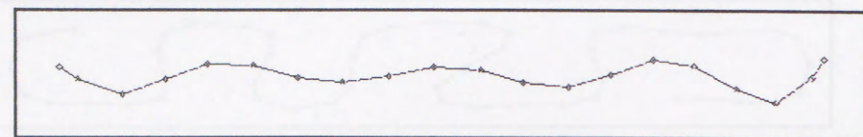


(c) masked Delaunay triangulation

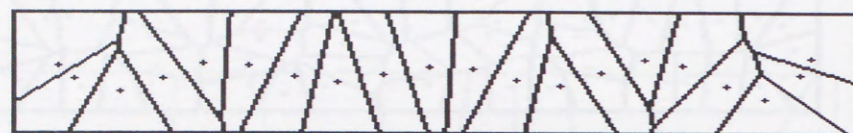


(d) local topology preservation rate

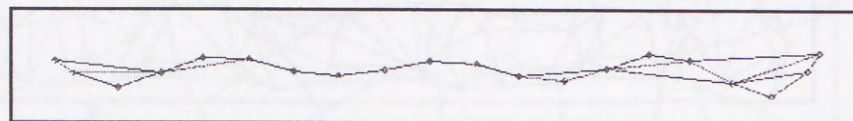
図 4.4: 50個の1次元コホーネンネットの学習結果: (a) 出力回路網 (b) 被覆ボロノイ図 (c) 被覆ドローネ3角形 (d) 局所位相保持率



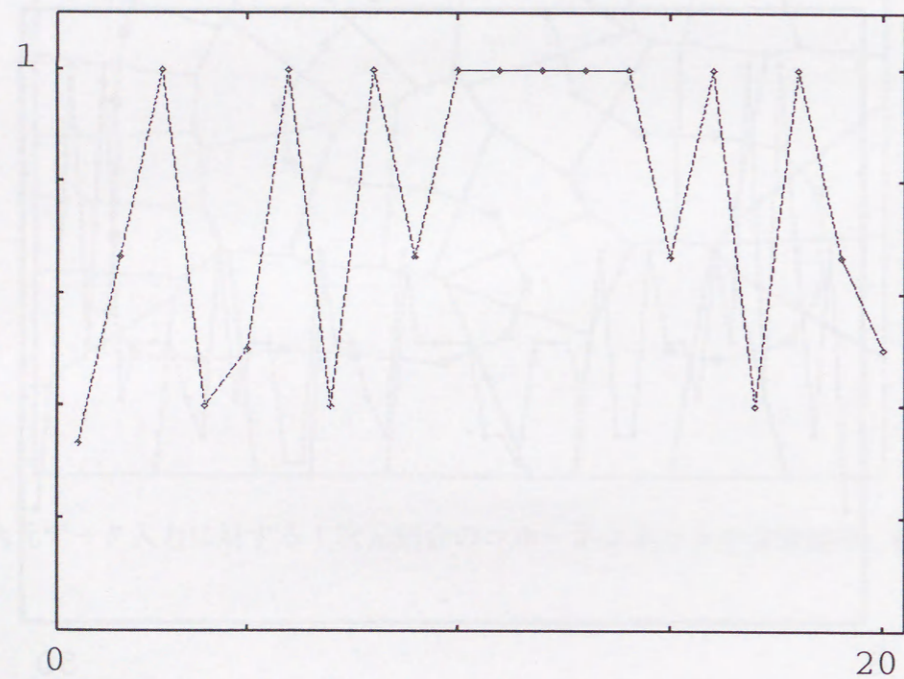
(a) network



(b) masked Voronoi partition

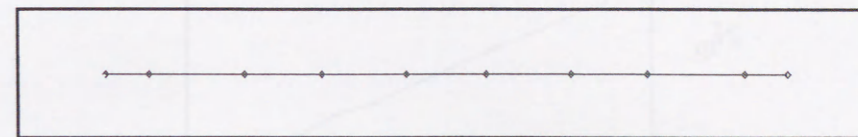


(c) masked Delaunay triangulation

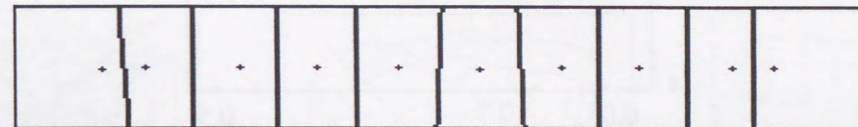


(d) local topology preservation rate

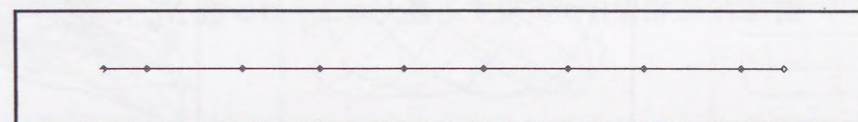
図 4.5: 20個の1次元コホーネンネットの学習結果: (a) 出力回路網 (b) 被覆ボロノイ図 (c) 被覆ドローネ3角形 (d) 局所位相保持率



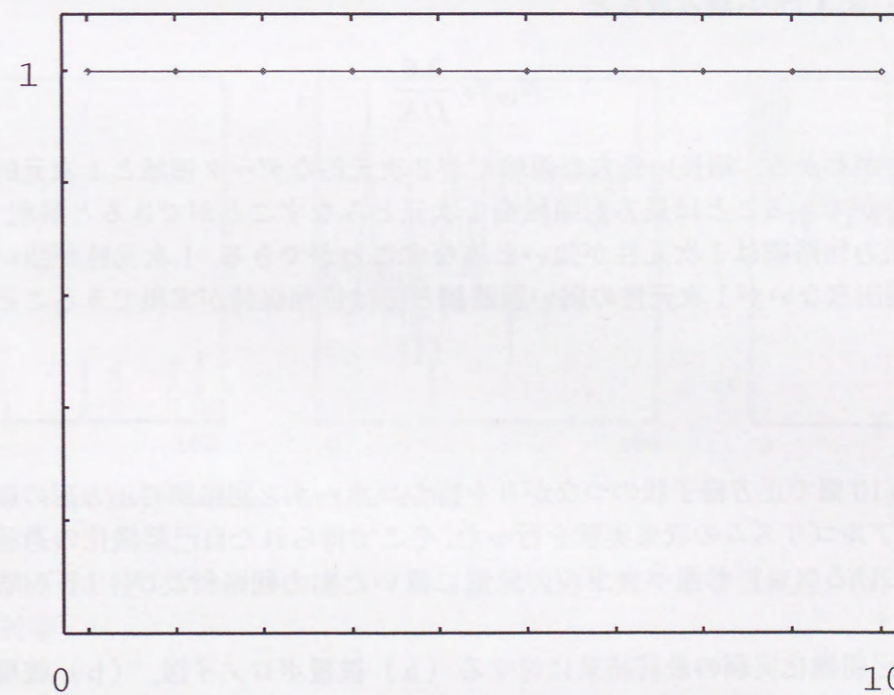
(a) network



(B) masked Voronoi partition



(c) masked Delaunay triangulation



(d) local topology preservation rate

図 4.6: 10個の1次元コホーネンネットの学習結果: (a) 出力回路網 (b) 被覆ボロノイ図 (c) 被覆ドローネ3角形 (d) 局所位相保持率

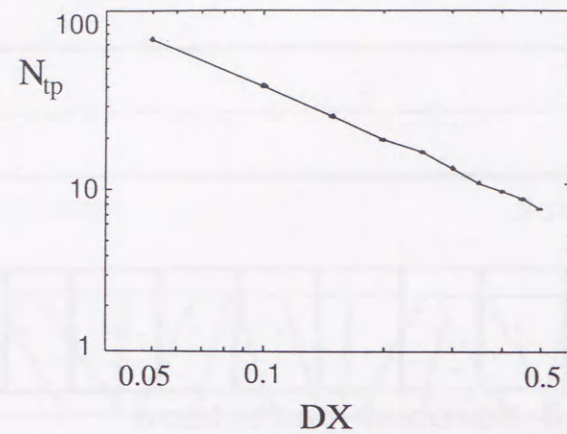


図 4.7: 位相保持が実現する最大ニューロン数:  $N_{tp} \approx \frac{3.6}{DX}$

50回のシミュレーションの平均である。横軸は長方形領域を  $1 * DX$  とした時の幅  $DX$  である。縦軸は位相保持が実現できる最大神経素子数  $N_{tp}$  である。両軸とも対数目盛りで目盛って直線になっている。図 4.7から読み取ると

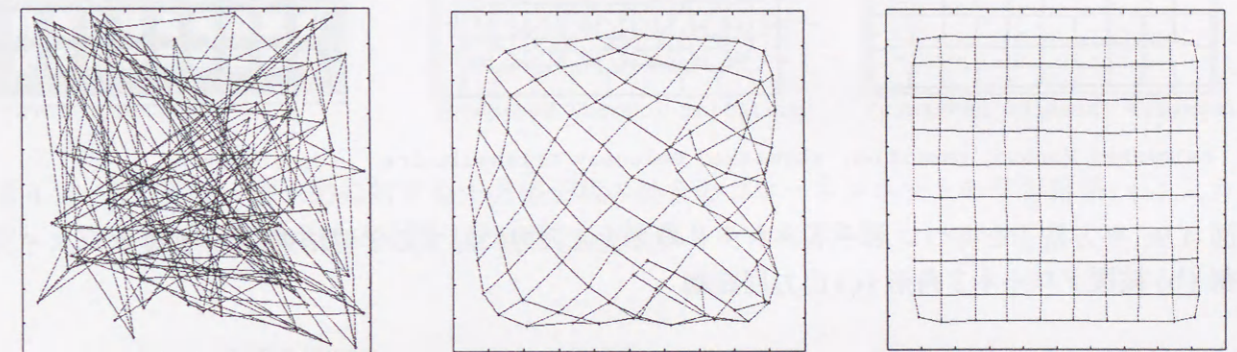
$$N_{tp} \approx \frac{3.6}{DX} \quad (4.5)$$

が成り立つことがわかる。細長い長方形領域だが2次元的なデータ領域と1次元的な出力回路網とで位相保持ができることは長方形領域を1次元とみなすことができると解釈できる。神経素子数の多い出力回路網は1次元性が強いとみなすことができる。1次元性が強い回路網とは位相保持は実現出来ないが1次元性の弱い回路網とでは位相保持が実現できることは示唆的である。

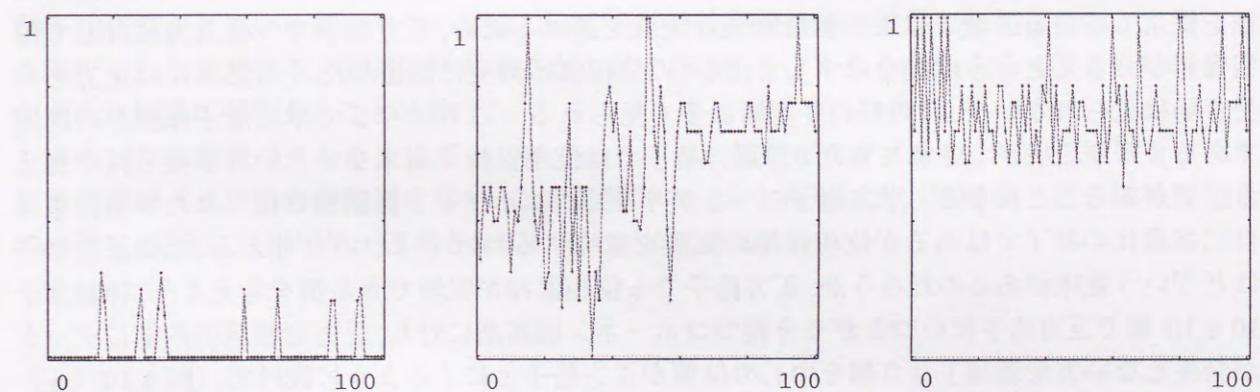
#### 4.3.3 正方格子

神経素子  $10 * 10$  個で正方格子状のつながりを持つコホーネン回路網で正方形の領域への一様入力を仮定し、アルゴリズムの収束実験を行った。そこで得られた自己組織化の過程の始めと中盤及び終盤における (a) 参照ベクトルの位置に置いた出力回路網及び、(b) 局所位相保持率を図 4.8に示す。

図 4.9には自己組織化実験の最終結果に対する (a) 被覆ポロノイ図, (b) 被覆ドロネ3角形, (c) 出力回路網を示す。出力回路網が正方形のつながりを持っているのに対し、得られた被覆ドロネ3角形は正方格子状のつながりに加えて対角線がつながった形になるので複雑になり一致しない。つまり、我々の位相保持の測度は正方格子状のつながりを仮定しても一様入力に対して位相保持は出来ないという結果をもたらす。平均位相保持率は 0.67 程度までしか上がらない。これまで提案されている位相保持の測度ではコホーネンが最初に提案した正方格子状の隣接関係をもつ回路網は一様入力に対して位相保持が実現できるという前提で考えられ

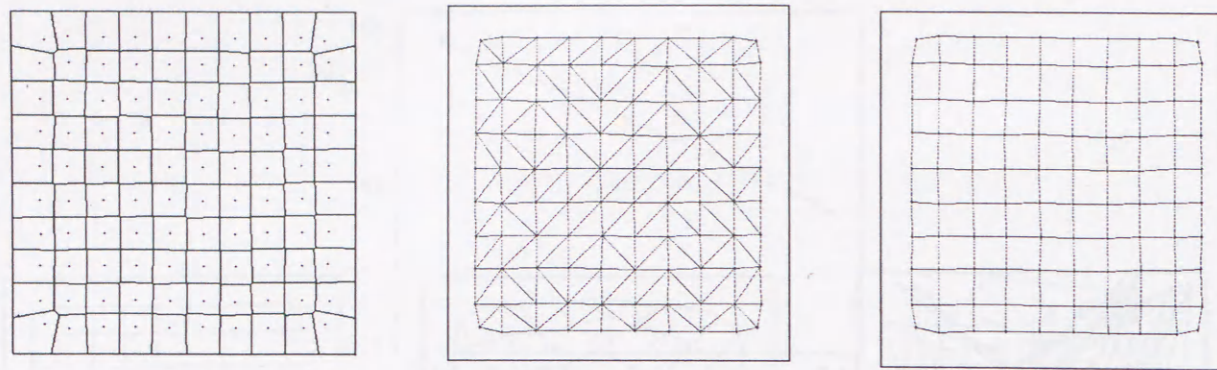


(a) network



(b) local topology preservation rate

図 4.8: 正方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習経過: (a) 出力回路網 (b) 局所位相保持率



(a)masked Voronoi partition (b)masked Delaunay triangulation (c)network

図 4.9: 平方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習結果: (a) 被覆ボロノイ分割 (b) 被覆ドローネ3角形 (c) 出力回路網

てきた。ビルマンやマルチネスの研究 [20] で明らかな様に順方向と逆方向の写像において隣接関係の評価に違った測度を採用するという無理な定義にならざるを得ない。つまり順方向に於いては最大値距離を採用し、逆方向に於いてはユークリッド距離やマンハッタン（街路）距離を採用している。我々はこの様な無理な定義を避けるため、平方格子で一様入力に対して位相保持ができるという前提をはずして、我々の位相保持測度に到達した。自然界には正方形の受容場は見られないが、六角形の受容場は多く見られる。これは今まで単に量子化誤差の問題であるような説明がなされてきたが、平方格子では位相保持が出来ないという事実も付け加える必要があることになる。平方格子のつながりをもつコホーネン回路網で得られた学習結果は自己組織化の終了ではあるが位相保持の実現を意味するわけではないと考える。では平方格子はどういう意味があるのだろうか。平方格子でも位相保持が実現できる例を考えよう。神経素子  $10 \times 10$  個で平方格子状のつながりを持つコホーネン回路網に対し、正方形領域の内部にデータが発生しない方形領域  $100$  個を中心の位置が平方格子上にくるように設けて（図 4.10 (a) 参照）、入力データを発生させた（つまり、このように入力空間を設定した）場合に得られた被覆ボロノイ分割を図 4.10 (b) に示す。これに対応する被覆ドローネ3角形を図 4.10 (c) に示す。出力回路網の形と完全に一致している。局所位相保持率も  $1.0$  になっている。つまり図 9 (a) のようにデータ発生に意図的な誘導を行えば平方格子状の隣接関係を持つ受容場が形成され、位相保持が実現する。図 4.10 (a) では4隅の矩形を円形に置き換えているのは矩形状にデータ入力を抑制したのでは完全な位相保持が実現しなかったからである。

#### 4.3.4 六方格子

六方格子状の結合を持つ神経回路網は既にコホーネンによって提案されており、教科書にも載っている。コホーネン自身も平方格子より六方格子の方の自然さを認識していたものと見える。平方格子の部分に六方格子に置き換えたシミュレーション結果を

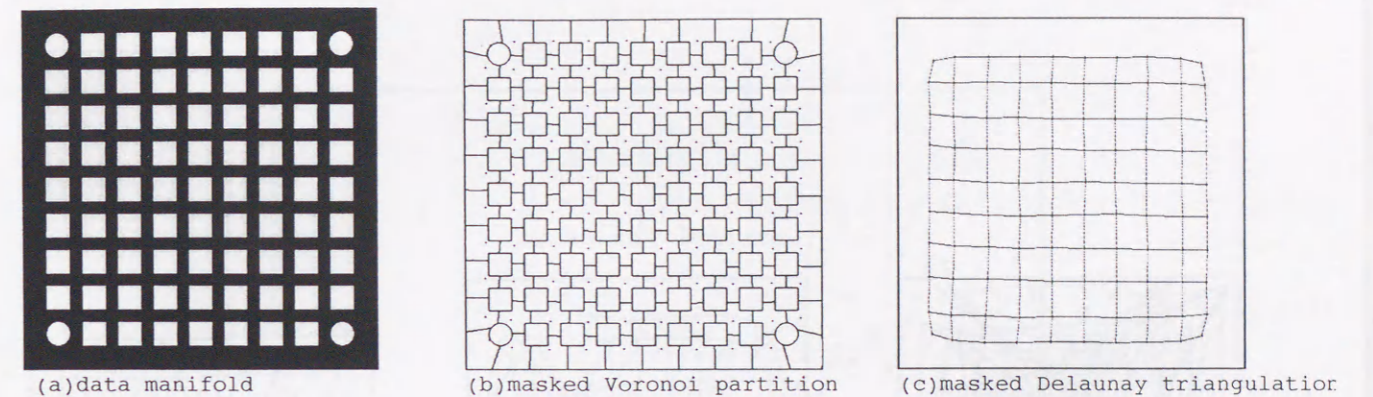
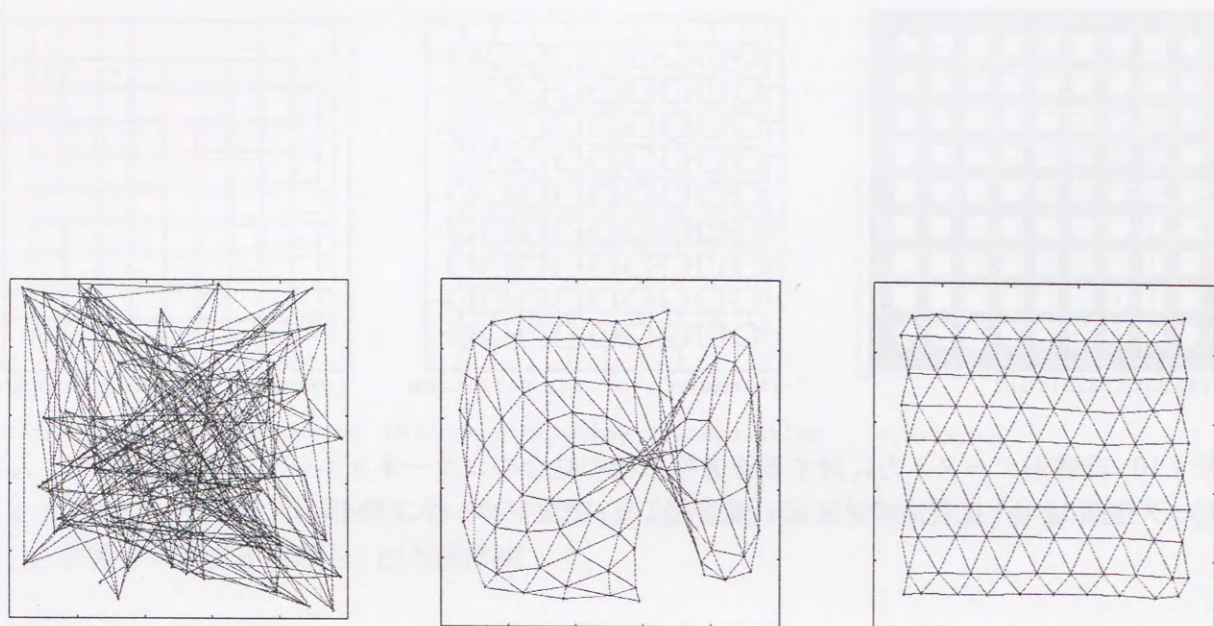


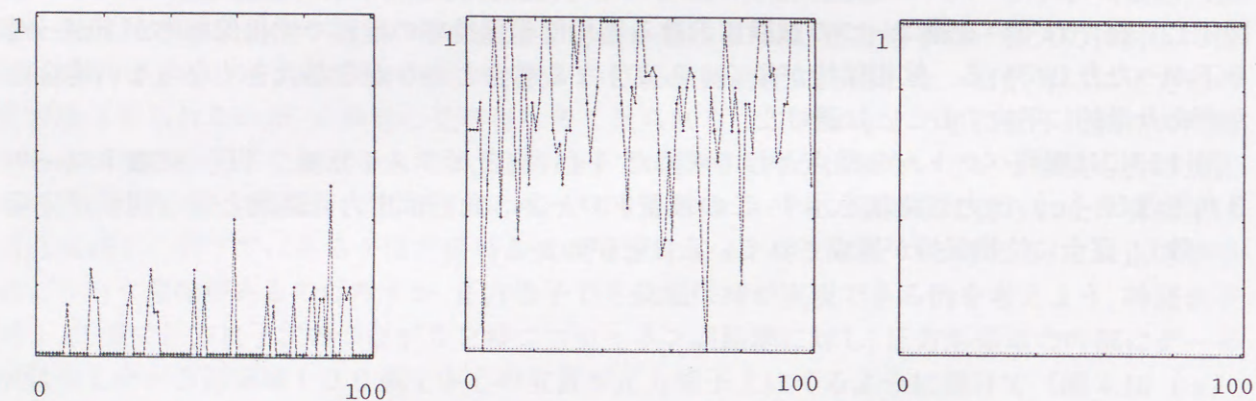
図 4.10: 非線形データ入力に対する平方格子状の結合のコホーネンネットの学習結果: (a) 入力データ空間  $M$  (b) 被覆ボロノイ図（受容場） (c) 被覆ドローネ3角形

図 4.11 に示す。時間の経過とともに平均位相保持率は上がり  $1.0$  に達する。図 4.12 には平方格子（図 4.8）と六方格子（図 4.11）の数値実験で平均位相保持率がどのように上がっていったかを示す。横軸はシミュレーションのステップ数を対数で表したものである。グラフでは六方格子では  $1.0$  になっているが平方格子の場合は平均位相保持率  $1.0$  には達しないことわかる。図 4.12 に描かれている線は一つの試験における平均位相保持率の推移で位相保持率が上がり下がりしたりしている。位相保持が早くから高くなる場合とかなかなか大きくならない場合とかがあり単純に平均することは避けた。

図 4.13 には参照ベクトルを母点として求めた (a) 被覆ボロノイ分割、(b) 被覆ドローネ3角形及び (c) 出力回路網を示す。この被覆ドローネ3角形は出力回路網と結合関係が完全に一致し、完全に位相保持が達成されていることがわかる。



(a) network



(b) local preservation rate

図 4.11: 六方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習経過 (a) 出力回路網 (b) 局所位相保持率

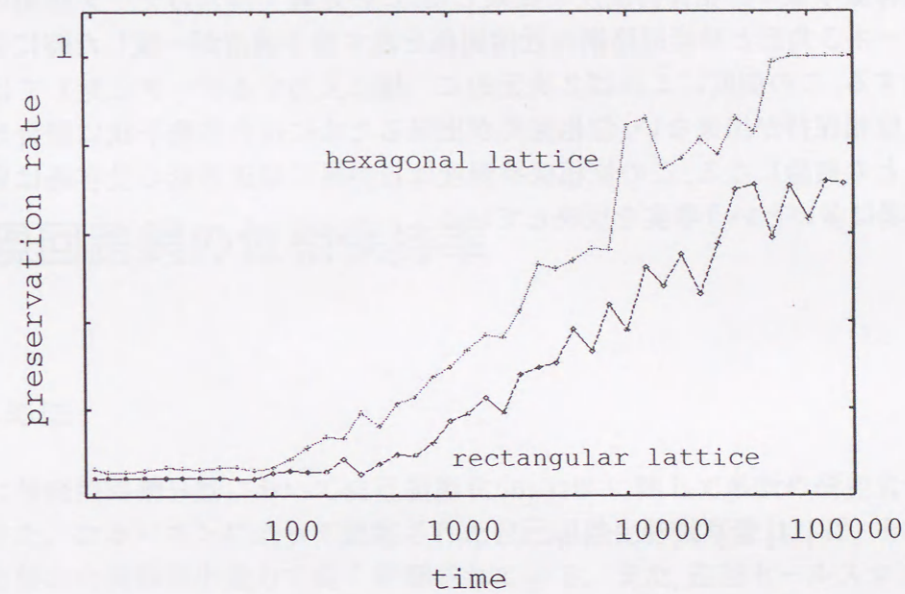
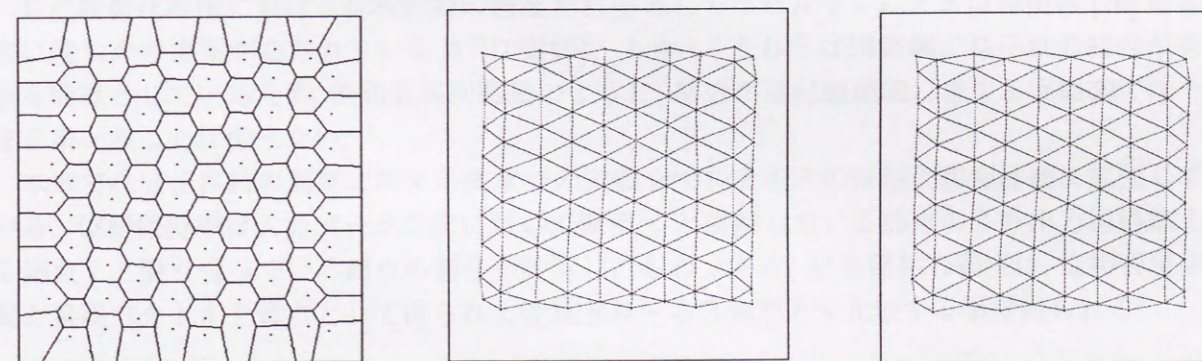


図 4.12: 平方格子及び六方格子を持つコホーネンネットの平均位相保持率の変化の例



(a) masked Voronoi partition (b) masked Delaunay triangulation (c) network

図 4.13: 六方格子を持つコホーネンネットの2次元入力に対する学習結果: (a) 被覆ポロノイ分割 (b) 被覆ドロネ3角形 (c) 出力回路網

#### 4.4 まとめ

自己組織化特徴写像の位相保持測度を提案した. この定義では入力データ空間の近傍関係を示す被覆ドローネ3角形と神経回路網の近傍関係を表す格子構造が一致した時に位相保持が完成したと判断する. この測度によれば2次元的に一様に入力するデータに対しては正方格子の近傍関係では位相保持が出来ない. 位相保持が出来るためには六方格子状に結合していることが必要であるとの結論になる. この位相保持測度は自然界には正方形の受容場は見られないが六角形の受容場は多いという事実を反映している.

## 第5章

### 位相表現回路網の位相保持率

#### 5.1 はじめに

これまでに神経回路網分野において自己組織化 [6] [10] に関して多数の研究者によって研究がなされてきた. コホーネンによって提案された自己組織化特徴写像 [11] は, そのアルゴリズムの単純さと優れた特徴抽出能力で高く評価されている. また, 巡回セールスマン問題 [13] やベクトル量子化などさまざまな分野への応用が研究されている.

しかし, コホーネンの回路網は結合関係が予め決定されているため, 入力データの特徴がうまく表現出来ない場合がある. これに対し, マルチネスは回路網の結合関係を自己組織的に決定する位相表現回路網 [18] [19] を提案した.

マルチネスの位相表現回路網は入力データ間の位相的なつながりを抽出する. 回路網の結合が自己組織的に決定され, 荷重ベクトル間の隣接関係が学習終了時に得られる. この荷重ベクトルの位置と隣接関係が, 入力データの特徴ということになる.

自己組織化写像における位相保持の程度の目安としてはビルマンによる位相関数 [20] など過去に幾つかの提案がなされている [17][18][19]. しかし, それらは回路網に格子状の結合が有る事を前提としているため, 位相表現回路網のように, 結合が自己組織的に求まる回路網ではそのまま用いることは出来ない.

本章では位相保持の測度に関する前章での定義をマルチネスの位相表現回路網に拡張して用いる. 位相保持率は入力データ空間において節点  $i$  と隣接している節点のうち出力回路網上でも節点  $i$  と隣り合っている節点の割合を計算したものである. 位相保持の程度は, 位相表現回路網と参照ベクトルを母点として得られる被覆ドローネ3角形とを比較する事で得られる.

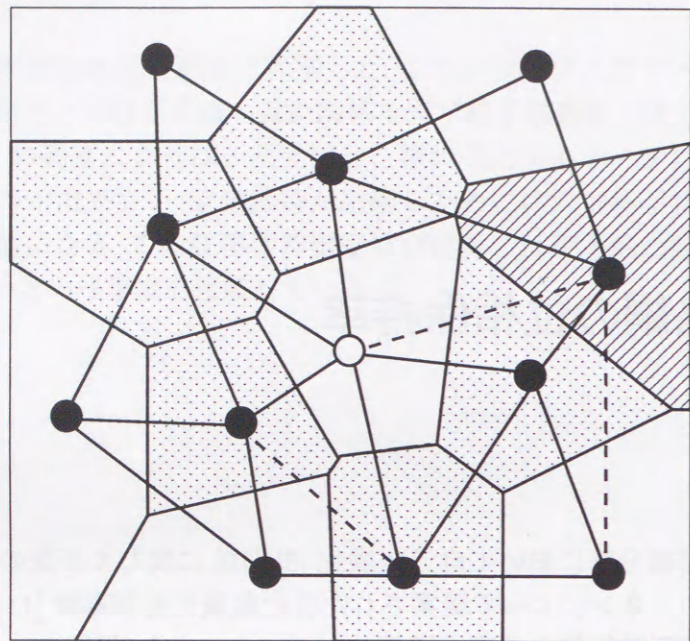
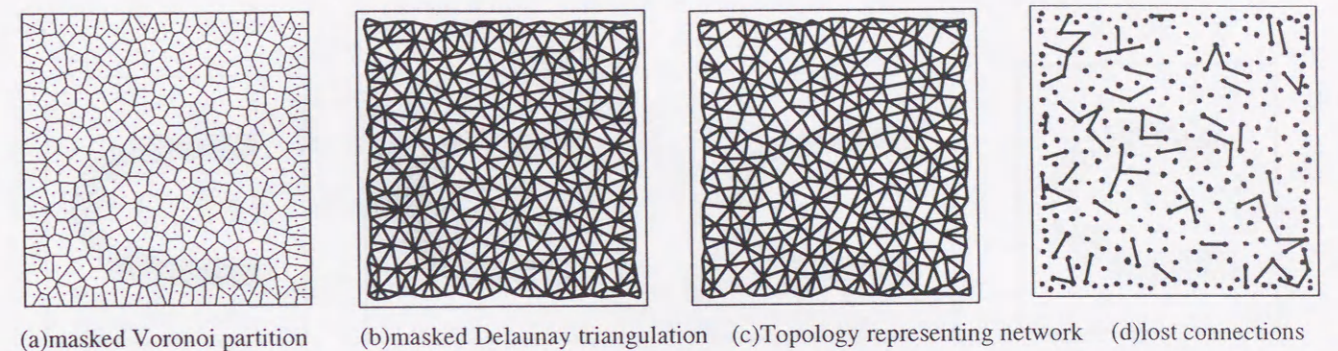


図 5.1: 参照ベクトルの受容場 (ボロノイ領域) と位相表現回路網.

## 5.2 位相表現回路網での入出力の位相構造の一致

コホーネン回路網では位相構造は予め決められており、その構造により位相的近傍が定義される。しかし、位相表現回路網では回路網の結合関係は自己組織的に時間と共に決められるため、コホーネン回路網とは位相的近傍の定義が若干異なる。ここでは、位相表現回路網の位相的近傍は最終的に完成した回路網のグラフ  $A$  上において距離が1であるもの、すなわち  $A$  において継っているものだけを最隣接近傍と定義する。位相表現回路網では、最終的に完成した回路網  $A$  上において距離が1であるもの、すなわち  $A$  において直接つながっているものだけを最隣接近傍と定義する。一方、入力データ空間を代表する参照ベクトル間の間の位相構造は、被覆ドロネ三角形で与えられる。両者が一致したときに特徴抽出が成功したとみなす。別の言葉で言えば、入力データの位相が出力空間でも保持されていると解釈する。

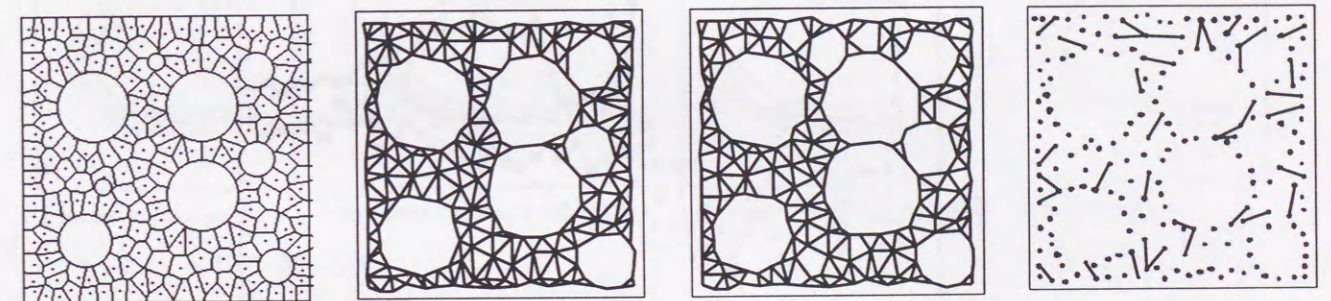
図 5.1に参照ベクトルの受容場 (ボロノイ領域) と位相表現回路網を示す。受容場の隣接状態から、点線部分は実線でなければならないが、つながっていない。



(a)masked Voronoi partition (b)masked Delaunay triangulation (c)Topology representing network (d)lost connections

図 5.2: 平面状の一樣な入力に対する 300 素子の位相表現回路網の学習結果.

$$\Psi_{mean} = 0.914$$



(a)masked Voronoi partition (b)masked Delaunay triangulation (c)Topology representing network (d)lost connections

図 5.3: 非線形入力データに対する 200 素子の位相表現回路網の学習結果.

$$\Psi_{mean} = 0.916$$

## 5.3 位相表現回路網における数値実験

### 5.3.1 被覆ドロネ三角形の計算とパラメータ

本章では位相表現回路網に対し、一樣・非一樣な 2次元の入力ベクトルを与え、その結果としてできる回路網における位相保持率を求めた結果について報告する。

被覆ドロネ三角形の計算には渡邊と村島により提案されたボロノイ分割法 [21] を利用した。学習回数は  $t_{max} = 200N$  である。パラメータ  $\lambda$ , ステップサイズ  $\varepsilon$ , そして寿命  $T$  は、既に実行された学習ステップ数  $t$  に依存する。この時間依存は全ての 3つのパラメータについて同じ型であり、以下の通りである。

$$\lambda(t) = \lambda_i (\lambda_f / \lambda_i)^{t/t_{max}}, \lambda_i = 0.2N, \lambda_f = 0.01$$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_i (\varepsilon_f / \varepsilon_i)^{t/t_{max}}, \varepsilon_i = 0.3, \varepsilon_f = 0.05$$

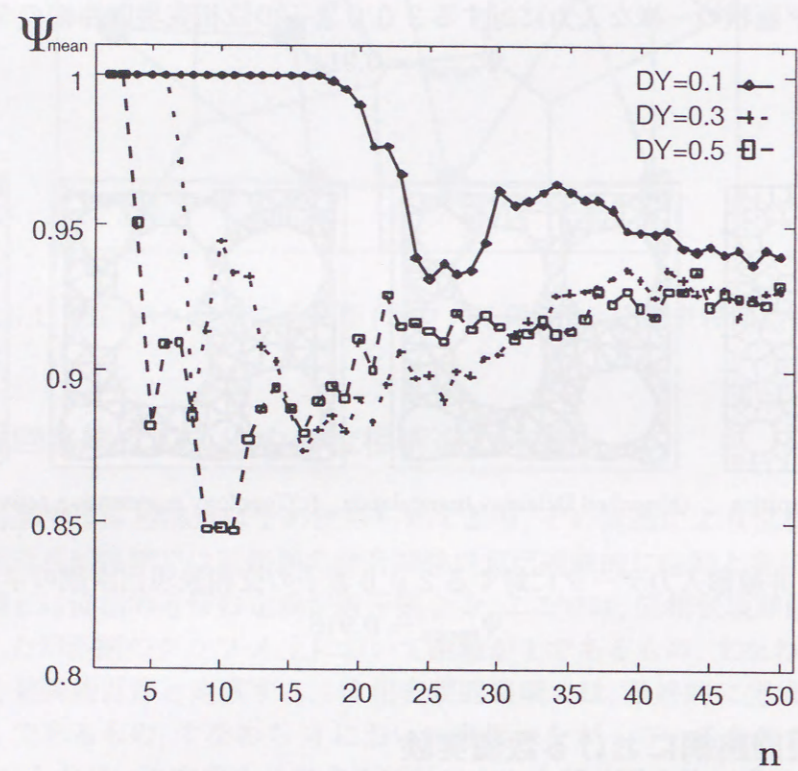
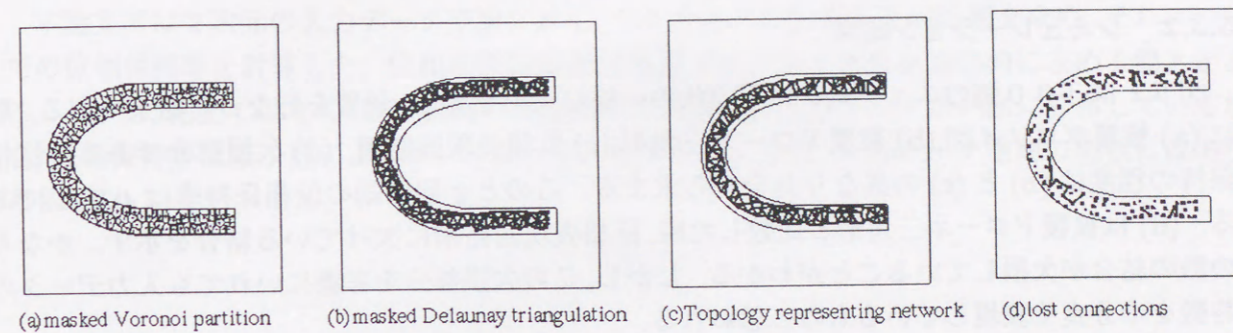
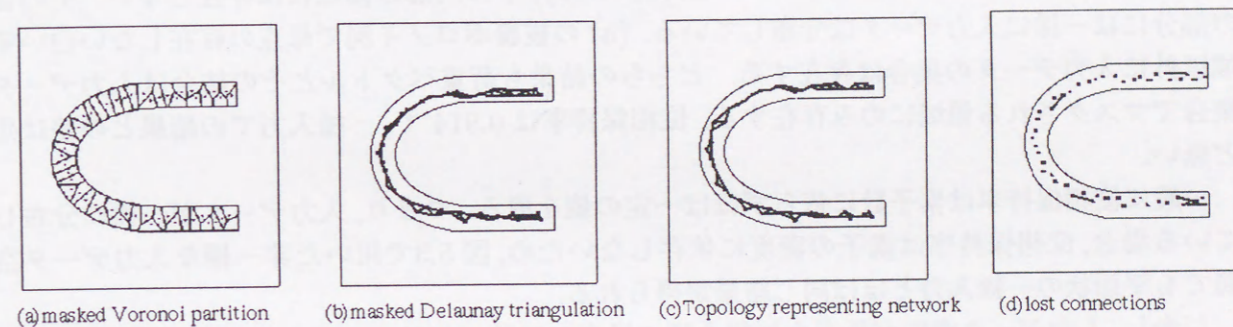


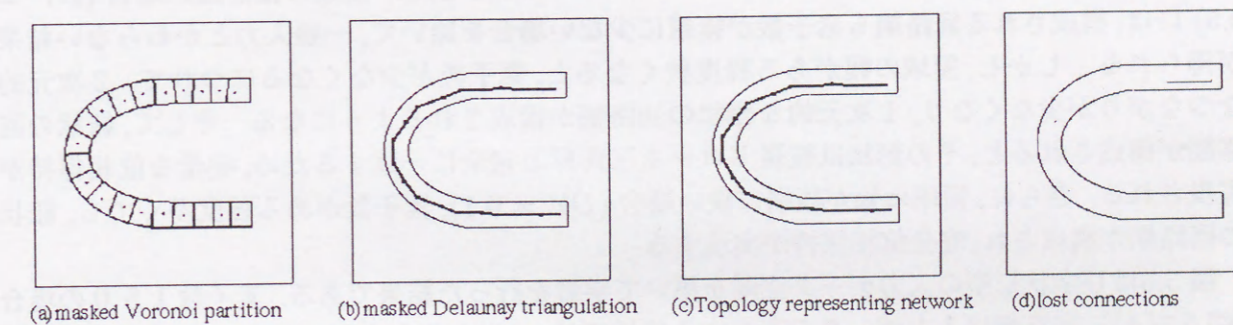
図 5.4: 非一様な入力データ空間での位相保持率



(A) ニューロン数 150



(A) ニューロン数 50



(A) ニューロン数 20

図 5.5: U字型形状の一様入力に対する位相表現回路網.  
(A). 素子数 150 (B) 素子数 50 (C) 素子数 20



$$T(t) = T_i(T_f/T_i)^{t/t_{\max}}, T_i = 0.001, T_f = N$$

### 5.3.2 シミュレーション結果

図 5.2 は 300 個のニューロンに平面状の一樣な入力を与え、学習を行なった結果である。順に (a) 被覆ポロノイ図, (b) 被覆ドロネ三角形, (c) 位相表現回路網, (d) 欠損部分である。位相保持の程度は (b) と (c) の異なり具合から求まる。このとき回路網の位相保持率は 0.914 である。(d) は被覆ドロネ三角形と比較した時、位相表現回路網に欠けている結合を示す。かなりの数の結合が欠損していることがわかる。しかし、この欠損部分を考慮にいれても入力データの特徴を十分良く表現しているものと思われる。

図 5.3 は 200 個のニューロンで構成される回路網へ非一樣な入力データを与え、学習させた結果である。入力データは被覆ポロノイ図 (図 5.3(a)) 中の円形の領域には存在しない。その他の部分には一樣に入力データは分布している。(a) の被覆ポロノイ図で母点の存在しない白い領域以外に入力データの集合は存在する。どちらの結果も荷重ベクトルとその結合は入力データ集合でマスクされる領域にのみ存在する。位相保持率は 0.914 で、一樣入力での結果との差は殆ど無い。

一般に位相保持率は素子数に依らずほぼ一定の値を取る。つまり、入力データが一樣に分布している場合、位相保持率は素子の密度に依存しないため、図 5.3 で用いた非一樣な入力データ空間でも平面状の一樣入力とほぼ同じ結果が得られる。

しかし、入力データ空間が極端な形状を持つ場合には位相保持率も変わってくる。図 5.4 は帯状の狭い領域にのみ入力データが存在するときの素子数と位相保持率の関係を表した図である。領域のサイズは横幅を 1.0、縦幅を各々  $DY = 0.1 \sim 0.5$  とした。領域の幅が広い場合 ( $DY = 0.5$ ) には、構成される回路網も素子数が極端に少ない場合を除いて、一樣入力とかわらない結果が得られる。しかし、領域の幅がある程度狭くなると、素子数が少なくなるにつれて、2 次元的なつながりが少なくなり、1 次元的な紐状の回路網が構成されるようになる。そして、紐状の回路網が構成されると、その形状は被覆ドロネ三角形と完全に一致するため、完全な位相保持が実現される。さらに、領域の幅が極端に狭い場合 ( $DY = 0.1$ )、素子数がある程度多くても、紐状の回路網が構成され、完全位相保持が実現する。

図 5.5 は U 字状形型の入力データ空間を用いて学習を行った結果である。素子数 150 の場合 (図 5.5(A)), 回路網は入力データの存在する領域では、一樣な入力空間における回路網と同じような形状を持つ。また、そのときの位相保持率も一樣入力とほぼ同じ値をもつ。しかし、素子数が少なくなるにつれて回路網は 2 次元的な広がりを持つ形状から、1 次元的な紐状の形状へと変化する。また、それに伴って位相保持率は徐々に上がり、回路網の形状が紐状に近くなったところで完全に位相保持がなされる (図 5.5(B), (C))。この結果はアルファベット、ひらがな等の文字認識等への応用の可能性を示している。

### 5.4 まとめ

本論文では 2 次元の入力データ空間に対し、マルチネスの位相表現回路網を求め、それについての位相保持率を計算した。位相表現回路網は被覆ドロネ 3 角形を適応的に求める働きがある。しかし、完全ではなく、約 1 割弱の欠損部分が出る。入力データが一樣に分布している場合、位相保持率は素子数によらず、ほぼ一定の値をとる。また、入力データ空間の形状にはあまり依らない。

## 第 6 章

### 結論

本論文では脳内における位相保持写像に関する研究について述べた。脳内における位相保持写像は、自己組織化のアルゴリズムを用いて実現される。位相保持写像を実現するためのアルゴリズムは、これまでに数種類提案されている。第 2 章ではこれら位相保持写像を実現するためのアルゴリズムを紹介した。

また、第 3 章では位相保持の測度の変遷について紹介した。

第 4 章では、自己組織化写像についての位相保持について、新しい考え方を提案し、それに基づいた位相保持の測度を導入した。位相保持は入力データ空間の近傍関係を表す被覆ドロネ三角形と神経回路網の近傍関係を表す回路網の形が一致した時、位相保持が完成する。また、その測度は両者の比を求めることで得られる。

さらに、その測度をコホーネン回路網に適用して妥当性を論じた。一般的に、2次元の平面上に一様に分布した入力データの完全な位相保持は、2次元の平方格子状の結合を持つコホーネン回路網で可能であるとされてきた。しかし、本論文で導入した定義に基づく、正方格子では一様入力に対して位相保持は実現できないが、六方格子状の結合を持っていれば位相保持が実現できることが明らかになった。

また、第 5 章では第 4 章で導入した位相保持率をマルチネスの位相表現回路網に適用し、位相保持率の妥当性について述べた。位相表現回路網は入力データの特徴を近似的な被覆ドロネ三角形のかたちで表現する。実験の結果、位相表現回路網は入力データの特徴を良く抽出していることが明らかになった。

### 謝辞

本論文を作成するにあたり、多くの方々の御指導と御協力を頂きました。特に3年に渡り研究や論文作成など直接御指導頂いた鹿児島大学情報工学科教授村島定行先生には心より感謝いたします。また、専攻ゼミや本論文の作成に際し数多くの有益な御指導及び御助言を頂いた鹿児島大学情報工学科教授長澤庸二先生、鹿児島大学電気電子工学科宮島廣美先生に感謝いたします。

研究に際し御助言や御協力を頂いた鹿児島大学情報工学科助教授森邦彦先生、鹿児島大学情報工学科 淵田孝康氏、同大学村島研究室の井田氏をはじめとした数多くのメンバーの方々に感謝いたします。

## 参考文献

- [1] 松葉育雄: ニューラルシステムによる情報処理, 昭晃堂 (1993).
- [2] Hopfield J.J, Tank D.W,: Neural computation of decisions in optimization problems, Biological Cybernetics, vol.52, pp.141-152, 1985.
- [3] Ceszti T.: Physical Models of Neural Networks, World Scientific, (1992).
- [4] 甘利俊一: 神経回路網の数理, 産業図書 (1978).
- [5] 麻生英樹: ニューラルネットワーク情報処理, 産業図書 (1988).
- [6] 中野馨: ニューロコンピュータの基礎, コロナ社 (1990).
- [7] 中野肇: 脳をつくる, 共立出版株式会社, 1995.
- [8] Maeda M., Miyajima H., Murashima S.: An Adaptive Learning and Self-Deleting Neural Network for Vector Quantization, IEICE TRANS.FUNDAMENTALS, Vol.E79-A, No.11, 1996-11.
- [9] Minsky M., Papert S.A.: Perceptrons, The Massachusetts Institute Technology (1996).
- [10] Willshaw D.J. and Malsburg C., How patterned neural connections can be set up by self-organization, Proc.R.Soc. Lond. B., Vol.194, pp.431-445 (1976).
- [11] Kohonen T.: Self-organization and associative memory, Springer Series in Information Science 8. Berlin:Springer (1984).
- [12] Kohonen T.: Self-organization Maps, Berlin:Springer (1996).
- [13] 松山泰男: 自己組織化できるニューラルネットと巡回セールスマン問題, 電子情報通信学会論文誌 (D-II), j74-D-II, pp.416-425 (1991).
- [14] Ritter H, Schulten K: Extending Kohonen's self-organizing mapping algorithm to learn ballistic movements. In: Eckmiller R von der Masburg C (des) Neural computers. Springer, Berlin Heidelberg New York, pp.393-406 (1987).
- [15] Ritter H, and Schulten K: Convergence properties of Kohonen's topology conserving maps: fluctuations, stability and dimension selection, Biol Cybern, Vol.60, pp.59-71 (1988).
- [16] 淵田孝康, 村島定行, 宮島広美, 豊平隆之: 自己組織的パターン特徴抽出のシミュレーション, 信学技報, Vol.93, No.432, pp.93-104, 1994-01.
- [17] Bauer H. U. and Pawelzik: Quantifying the neighborhood preservation of self-organizing feature maps., IEEE Trans. Neural Networks, Vol.3, pp.570-579 (1992).
- [18] Martinetz T.: Competitive Hebbian learning rule forms perfectly topology preserving maps, in Proc. Int. Conf. Artificial Neural Networks 1993, Gielen S. and Kappen B., Eds. Berlin:Springer-Verlag, pp.427-434 (1993).
- [19] Martinetz T. and Schulten: Topology representing networks, Neural Networks, Vol.7, no.3, pp.507-522 (1994).
- [20] Villmann T., Der R., Herrmann M. and Martinetz T.M.: Topology Preservation in Self-Organizing Feature Maps: Exact Definition and Measurement. IEEE Transactions on Neural Networks, Vol.8, No.2, pp.256-266 (1997).
- [21] 渡辺貴史, 村島定行: 2次元離散ポロノイ図を  $O(1)$  の計算時間で描く方法, 電子情報通信学会論文誌, D-I Vol.J79-D-I No.3 pp.114-122 (1996).
- [22] 村島定行, 渡辺貴史, 淵田孝康, 森邦彦, 栗園貢: 非ユークリッド距離に基づく2次元離散ポロノイ図の作成, 電子情報通信学会論文誌 D I, Vol.J81-DI, No.3, pp.1-8 (1998).
- [23] 稲垣宏, 杉原厚吉, 杉江昇: 3次元ポロノイ図構成のための数値的に安定な逐次添加法, 情報処理学会論文誌, Vol.35, No.1, Jan.1994.
- [24] 淵田孝康, 森邦彦, 村島定行: 2次元離散ポロノイ図を用いた母点の隣接情報抽出, 電子情報通信学会技術報告, NC97-47, pp.25-32 (1997).
- [25] Kishida K., Miyajima H.: A Learning Method of Fuzzy Inference Rules by Vector Quantization., 1997 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Honolulu, U.S.A., pp.389-392, Nov.29-Dec.2, 1997.
- [26] Murashima S., Ida T., Fuchida T., Mori K.: A Divide and Rule Method for Solving Traveling Salesman Problem using Kohonen's Self-Organized Feature Map, 1998 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Crans-Montana, Switzerland, pp.1165-1168, Sept.14-17, 1998.
- [27] Ridella S., Rovetta S., Zunino R.: Plactic Algorithm for Adaptive Vector Quantisation, Neural Comput and Applic, pp.37-51, (1998)7.

- [28] 佐藤明美, 淵田孝康, 森邦彦, 村島定行: 高次の入力データに対する位相表現回路網の結合数について, 平成10年度電気関係学会九州支部連合会大会論文集, pp229.
- [29] 勝田元樹, 淵田孝康, 森邦彦, 村島定行: 位相表現回路網によるドローネ網を用いた3次元形状のポリゴンパッチ生成平成10年度電気関係学会九州支部連合会大会論文集, pp163.
- [30] 淵田孝康, 森邦彦, 村島定行: 2次元離散ポロノイ図を用いた母点の隣接情報の抽出, 情報処理学会九州支部研究会, 3B-3, pp.224-233, 1998-03.
- [31] 杉原厚吉: 幾何アルゴリズムの数値的破綻とその対策, 応用数理, Vol.1, No.4, pp.288-299, (1991).
- [32] Inoue M., Nakamoto K., Prog.Theor.Phys, Vol.92, (1992).
- [33] 川人光男, 脳の計算理論, 産業図書, (1996).
- [34] 村島定行, 鹿嶋雅之, 淵田孝康: 自己組織化特徴写像における位相保持測度, 電子情報通信学会論文誌, D-II, Vol.J81-DII, No.10, pp.2457-2466.
- [35] 鹿嶋雅之, 村島定行, 淵田孝康, 森邦彦: マルチネスの位相表現回路網の位相保持率, 電子情報通信学会論文誌, D-II, Vol.J81-DII, Vol.12, 28920-2896.
- [36] Kashima M., Murashima S., Fuchida T. and Mori K.,: Topology Preservation of Topology Representing Network by Martinetz., 1998 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Crans-Montana, Swizerland, pp.1161-1164.
- [37] 鹿嶋雅之, 淵田孝康, 森邦彦, 村島定行: コホーネンアルゴリズムにおける位相保持測度の1提案, 電子情報通信学会技術報告, NC97-47, pp.25-32 (1997).
- [38] 鹿嶋雅之, 淵田孝康, 森邦彦, 村島定行: マルチネスの位相表現回路網に関する数値実験, 1998年情報処理学会九州支部研究会報告, pp.242-251.

