高階 SOM のアルゴリズム

2019 年 8 月 22 日

表 1　変数記号表

記号	
$\mathbf{X}^{(i)}$	i 番目の子 SOM のデータ集合（$\mathbf{X}^{(i)} = (x_{nd}^{(i)}) \in \mathbb{R}^{N^{(i)} \times D}$）
	$\mathbf{x}_n^{(i)} = (x_{n1}^{(i)}, \ldots, x_{nD}^{(i)})$
$N^{(i)}$	i 番目のデータ集合 $\mathbf{X}^{(i)}$ のデータ数
D	データの次元数
I	クラス数 (親 SOM のデータ数)
$\mathbf{Y}^{(i)}$	i 番目の子 SOM の参照ベクトル集合（$\mathbf{Y}^{(i)} = (y_{kd}^{(i)}) \in \mathbb{R}^{K \times D}$）
	$\mathbf{y}_k^{(i)} = (y_{k1}^{(i)}, \ldots, k_{kD}^{(i)})$
K	子 SOM のノード数
$k_n^{(i)*}$	i 番目の子 SOM における n 個目のデータの勝者ノード番号
$\mathbf{Z^{(i)}}$	i 個目の子 SOM の潜在変数集合（$\mathbf{Z^{(i)}} = (z_n^{(i)}c) \in \mathbb{R}^{N^{(i)} \times C}$）　$\mathbf{z_n^{(i)}} = (z_{n1}^{(i)}, ..., z_{nC}^{(i)})^T$
C	子 SOM の潜在空間の次元数
$\boldsymbol{\zeta}_k^{(i)}$	i 番目の子 SOM の k 番目のノードの潜在空間における座標
$h_{nk}^{(i)}$	i 番目の子 SOM の学習率
σ_c	子 SOM の近傍半径（全部共通）
$\mathbf{V}$	親 SOM の入力データ（$\mathbf{V} = (v_{im}) \in \mathbb{R}^{I \times M}$）
	$\mathbf{v}_i = (v_{i1}, \ldots, v_{iM})$
$\mathbf{W}$	親 SOM の参照ベクトル集合（$\mathbf{W} = (w_{lm}) \in \mathbb{R}^{L \times M}$）
	$\mathbf{w}_l = (w_{l1}, \ldots, w_{lM})$
L	親 SOM のノード数
M	親 SOM の次元数 (K $\times$ D)
l_i^*	親 SOM における i 個目データの勝者ノード番号
$\mathbf{Z}$	親 SOM の潜在変数集合（$\mathbf{Z} = (z_{np}) \in \mathbb{R}^{KD \times P}$）　$\mathbf{z_n} = (z_{n1}, ..., z_{nP})^T$
P	親 SOM の潜在空間の次元数
$\boldsymbol{\zeta}_l$	親 SOM の l 番目のノードの潜在空間における座標
h_{il}	親 SOM の学習率
σ_p	親 SOM の近傍半径

1　SOM^2 のシミュレーションアルゴリズム

1.1　人工データの読み込み

github にある関数データを load

1.2　ハイパーパラメータの設定

1.2.1　近傍半径のスケジューリングの設計

■近傍半径を単調減少させるスケジュールの設計

例) 最大値 σ_{max} と最小値子 σ_{min} と時定数 τ を与え、一次関数的に減少させる.
(子 SOM 同士は同じスケジューリングを用いる.)

■ノード集合の作成

以下のように設定し、子 SOM と親 SOM それぞれで等間隔な座標集合を作る.(ただし I 個の子 SOM は同一のノード集合を用いる.)

・ノードが存在する範囲
・ノードの数

■初期化

潜在変数 (参照ベクトルでも) の初期化は子・親ともに行う.

1.3　子 SOM の学習

■潜在変数の推定

$$k_n^{(i)*} = \arg\min_k \|\mathbf{x}_n^{(i)} - \mathbf{y}_k^{(i)}\|^2 \tag{1}$$

$$\mathbf{z}_n^{(i)} := \boldsymbol{\zeta}_{k_n^{(i)*}} \tag{2}$$

■参照ベクトルの推定

$$h_{nk}^{(i)} = \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma_c^2}\|\mathbf{z}_n^{(i)} - \boldsymbol{\zeta}_k^{(i)}\|^2\Big) \tag{3}$$

$$\mathbf{y}_k^{(i)} = \frac{1}{g_k^{(i)}}\sum_n h_{nk}^{(i)}\mathbf{x}_n^{(i)} \tag{4}$$

ただし $g_k^{(i)} = \sum_n h_{nk}^{(i)}$

1.4　親 SOM の学習

1.4.1　親 SOM の入力データセット

$$\mathbf{v}_i := (y_{11}^{(i)}, \ldots, y_{1D}^{(i)}, y_{21}^{(i)}, \ldots, y_{2D}^{(i)}, \ldots, y_{KD}^{(i)}) \tag{5}$$

■潜在変数の推定

$$l_i^* = \arg\min_l \|\mathbf{v}_i - \mathbf{w}_l\|^2 \tag{6}$$

$$\mathbf{z}_i := \boldsymbol{\zeta}_{l_i^*} \tag{7}$$

■参照ベクトルの推定

$$h_{il} = \exp\Big(-\frac{1}{2\sigma_p^2}\|\mathbf{z}_i - \boldsymbol{\zeta}_l\|^2\Big) \tag{8}$$

$$\mathbf{w}_l = \frac{1}{g_l}\sum_i h_{il}\mathbf{v}_i \tag{9}$$

ただし $g_l = \sum_i h_{il}$

1.4.2　コピーバック

$$(y_{11}^{(i)}, \ldots, y_{1D}^{(i)}, y_{21}^{(i)}, \ldots, y_{2D}^{(i)}, \ldots, y_{KD}^{(i)}) := \mathbf{w}_{l_i^*} \tag{10}$$