Tensor SOM のアルゴリズム

2019 年 9 月 12 日

表 1　変数記号表

記号	
$\underline{\mathbf{X}}$	データ集合（$\underline{\mathbf{X}} = (x_{n_1 n_2 d}) \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times D}$）
N_1	モード 1 のデータ数
N_2	モード 2 のデータ数
D	データの次元数
$\mathbf{Z}^{(1)}$	モード 1 の潜在変数集合（$\mathbf{Z}^{(1)} = (z^{(1)}_{n_1 l_1}) \in \mathbb{R}^{N_1 \times L_1}$） $\boldsymbol{z}_{n_1} = (z^{(1)}_{n_1 1}, \ldots, z^{(1)}_{n_1 L_1})^{\mathrm{T}}$
$\mathbf{Z}^{(2)}$	モード 2 の潜在変数集合（$\mathbf{Z}^{(2)} = (z^{(2)}_{n_2 l_2}) \in \mathbb{R}^{N_2 \times L_2}$） $\boldsymbol{z}_{n_2} = (z^{(2)}_{n_2 1}, \ldots, z^{(2)}_{n_2 L_2})^{\mathrm{T}}$
L_1	モード 1 の潜在変数の次元
L_2	モード 2 の潜在変数の次元
$\underline{\mathbf{Y}}$	2 次モデル（$\underline{\mathbf{Y}} = (y_{k_1 k_2 d}) \in \mathbb{R}^{K_1 \times K_2 \times D}$）
K_1	モード 1 のノード数
K_2	モード 2 のノード数
$\underline{\mathbf{U}}^{(1)}$	モード 1 の 1 次モデル（$\mathbf{U}^{(1)}= (u^{(1)}_{n_1 k_2 d}) \in \mathbb{R}^{N_1 \times K_2 \times D}$）
$\underline{\mathbf{U}}^{(2)}$	モード 2 の 2 次モデル（$\mathbf{U}^{(2)}= (u^{(2)}_{k_1 n_2 d}) \in \mathbb{R}^{K_1 \times N_2 \times D}$）
${k^*_{n_1}}^{(1)}$	モード 1 の n_1 番目の勝者ノード 番号
${k^*_{n_2}}^{(2)}$	モード 2 の n_2 番目の勝者ノード 番号
$\zeta^{(1)}_{k_1 l_1}$	モード 1 の潜在空間における k_1 番目のノード座標
$\zeta^{(2)}_{k_2 l_2}$	モード 2 の潜在空間における k_2 番目のノード座標
$\mathbf{R}^{(1)}$	モード 2 の学習率集合 （$\mathbf{R}^{(1)} = (r^{(1)}_{k_1 n_1}) \in \mathbb{R}^{K_1 \times N_1}$） $\boldsymbol{r}^{(1)}_{k_1} = (r^{(1)}_{k_1 1}, \ldots, r^{(1)}_{k_1 N_1})^{\mathrm{T}}$
$\mathbf{R}^{(2)}$	モード 1 の学習率集合 （$\mathbf{R}^{(2)} = (r^{(2)}_{k_2 n_2}) \in \mathbb{R}^{K_2 \times N_2}$） $\boldsymbol{r}^{(2)}_{k_2} = (r^{(2)}_{k_2 1}, \ldots, r^{(2)}_{k_2 N_2})^{\mathrm{T}}$
T	総学習回数
$\tau^{(1)}, \tau^{(2)}$	モード 1 およびモード 2 の時定数
$\sigma^{(1)}_{max}, \sigma^{(2)}_{max}$	モード 1 およびモード 2 の近傍半径の最大値
$\sigma^{(1)}_{min}, \sigma^{(2)}_{min}$	モード 1 およびモード 2 の近傍半径の最小値
$\sigma^{(1)}(t), \sigma^{(2)}(t)$	モード 1 およびモード 2 の学習回数 t 回目の近傍半径

1　Tensor SOM のシミュレーションコードの作成

1.1　TSOM の学習

1.1.1　スカラー表示

■初期化

1 次モデル $\underline{\mathbf{U}}^{(1)}$，$\underline{\mathbf{U}}^{(2)}$ と 2 次モデル $\underline{\mathbf{Y}}$ に初期値を与える．または潜在変数初期化でもよい．

以下の潜在変数の推定とモデルの更新を T 回繰り返す．

■潜在変数の推定

$$k_{n_1}^{*}{}^{(1)} = \arg\min_{k_1} \sum_{k_2=1}^{K_2} \sum_{d=1}^{D} (u_{n_1 k_2 d}^{(1)} - y_{k_1 k_2 d})^2 \tag{1}$$

$$k_{n_2}^{*}{}^{(2)} = \arg\min_{k_2} \sum_{k_1=1}^{K_1} \sum_{d=1}^{D} (u_{k_1 n_2 d}^{(2)} - y_{k_1 k_2 d})^2 \tag{2}$$

$$z_{n_1 l_1}^{(1)} = \zeta_{k_{n_1}^{*}{}^{(1)} l_1}^{(1)} \tag{3}$$

$$z_{n_2 l_2}^{(2)} = \zeta_{k_{n_2}^{*}{}^{(2)} l_2}^{(2)} \tag{4}$$

■モデルの更新

$$r_{k_1 n_1}^{(1)} = \sum_{l_1=1}^{L_1} \exp\left[-\frac{1}{2{\sigma^{(1)}}^2(t)} (\zeta_{k_1 l_1}^{(1)} - z_{n_1 l_1}^{(1)})^2\right] \tag{5}$$

$$r_{k_2 n_2}^{(2)} = \sum_{l_2=1}^{L_2} \exp\left[-\frac{1}{2{\sigma^{(2)}}^2(t)} (\zeta_{k_2 l_2}^{(2)} - z_{n_2 l_2}^{(2)})^2\right] \tag{6}$$

近傍半径は式 (7) で求める．max() 演算子は入力集合の最大値を出力として返す．

$$\sigma(t) = \max((\sigma_{max} - \sigma_{min}) \frac{t}{\tau}, \sigma_{min}) \tag{7}$$

$$g_{k_1}^{(1)} = \sum_{n_1=1}^{N_1} r_{k_1 n_1}^{(1)} \tag{8}$$

$$g_{k_2}^{(2)} = \sum_{n_2=1}^{N_2} r_{k_2 n_2}^{(2)} \tag{9}$$

1 次モデルの更新では，モデルのモードと更新式の学習率のモードが異なることに注意する．$u_{n_1 k_2 d}^{(1)}$ は $\boldsymbol{r}_{k_2}^{(2)}$，$u_{n_1 k_2 d}^{(1)}$ は $\boldsymbol{r}_{k_1}^{(1)}$ で更新する．

$$u_{n_1 k_2 d}^{(1)} = \frac{1}{g_{k_2}^{(2)}} \sum_{n_2=1}^{N_2} r_{k_2 n_2}^{(2)} x_{n_1 n_2 d} \tag{10}$$

$$u_{k_1 n_2 d}^{(2)} = \frac{1}{g_{k_1}^{(1)}} \sum_{n_1=1}^{N_1} r_{k_1 n_1}^{(1)} x_{n_1 n_2 d} \tag{11}$$

$$y_{k_1 k_2 d} = \frac{1}{g_{k_1}^{(1)} g_{k_2}^{(2)}} \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} r_{k_1 n_1}^{(1)} r_{k_2 n_2}^{(2)} x_{n_1 n_2 d} \tag{12}$$

1.1.2　テンソル，行列表示

■初期化

1 次モデル $\underline{\mathbf{U}}^{(1)}$，$\underline{\mathbf{U}}^{(2)}$ と 2 次モデル $\underline{\mathbf{Y}}$ に初期値を与える．または潜在変数初期化でもよい．

以下の潜在変数の推定とモデルの更新を T 回繰り返す．

■潜在変数の推定

$$k^{*}_{n_1}{}^{(1)} = \arg\min_{k_1} \|\mathbf{U}^{(1)}_{n_1::} - \mathbf{Y}_{k_1::}\|^2 \tag{13}$$

$$k^{*}_{n_2}{}^{(2)} = \arg\min_{k_2} \|\mathbf{U}^{(2)}_{:n_2:} - \mathbf{Y}_{:k_2:}\|^2 \tag{14}$$

$$\mathbf{Z}^{(1)} = (\boldsymbol{\zeta}^{(1)}_{k^{*}_{n_1}{}^{(1)}})_{n_1=1}^{N_1} \tag{15}$$

$$\mathbf{Z}^{(2)} = (\boldsymbol{\zeta}^{(2)}_{k^{*}_{n_2}{}^{(2)}})_{n_2=1}^{N_2} \tag{16}$$

■モデルの更新

$\mathbf{H}^{(1)}, \mathbf{H}^{(2)}$ は潜在空間のノードの距離行列に近傍半径の係数 $-\frac{1}{2\sigma^2}$ をかけ，exp をとったものである．対角成分は 1 となっている．

$$\mathbf{H}^{(1)} = \left(\exp\left[-\frac{1}{2{\sigma^{(1)}}^2(t)}\|\boldsymbol{\zeta}^{(1)}_{k_1} - \boldsymbol{\zeta}^{(1)}_{k_1'}\|^2\right]\right)_{k_1=1,k_1'=1}^{K_1,K_1} \tag{17}$$

$$\mathbf{H}^{(2)} = \left(\exp\left[-\frac{1}{2{\sigma^{(2)}}^2(t)}\|\boldsymbol{\zeta}^{(2)}_{k_2} - \boldsymbol{\zeta}^{(2)}_{k_2'}\|^2\right]\right)_{k_2=1,k_2'=1}^{K_2,K_2} \tag{18}$$

$$b^{(1)}_{k_1 n_1} = \delta(k_1, k^{*}_{n_1}{}^{(1)}) \tag{19}$$

$$b^{(2)}_{k_2 n_2} = \delta(k_2, k^{*}_{n_2}{}^{(2)}) \tag{20}$$

δ はクロネッカーのデルタであり以下の式を満たす．

$$\delta(i,j) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{21}$$

$$\mathbf{B}^{(1)} = (b^{(1)}_{k_1 n_1})_{k_1=1,n_1=1}^{K_1,N_1} \tag{22}$$

$$\mathbf{B}^{(2)} = (b^{(2)}_{k_2 n_2})_{k_2=1,n_2=1}^{K_2,N_2} \tag{23}$$

$$\mathbf{R}^{(1)} = \mathbf{H}^{(1)}\mathbf{B}^{(1)} \tag{24}$$

$$\mathbf{R}^{(2)} = \mathbf{H}^{(2)}\mathbf{B}^{(2)} \tag{25}$$

$\mathbf{G}^{(1)}, \mathbf{G}^{(2)}$ は学習率を対角に並べた対角行列である．対角成分以外は 0 となっている．

$$\mathbf{G}^{(1)} = \mathrm{diag}(\sum_{n_1=1}^{N_1} r^{(1)}_{k_1 n_1}) \tag{26}$$

$$\mathbf{G}^{(2)} = \mathrm{diag}(\sum_{n_2=1}^{N_1} r^{(2)}_{k_2 n_2}) \tag{27}$$

$$\tilde{\mathbf{R}}^{(1)} = \mathbf{G}^{(1)^{-1}}\mathbf{R}^{(1)} \tag{28}$$

$$\tilde{\mathbf{R}}^{(2)} = \mathbf{G}^{(2)^{-1}}\mathbf{R}^{(2)} \tag{29}$$

1 次モデルの更新では，モデルのモードと更新式の学習率のモードが異なることに注意する．$\underline{\mathbf{U}}^{(1)}$ は $\tilde{\mathbf{R}}^{(2)}$，$\underline{\mathbf{U}}^{(1)}$ は $\tilde{\mathbf{R}}^{(2)}$ で更新する．

$$\underline{\mathbf{U}}^{(1)} = \underline{\mathbf{X}} \times_2 \tilde{\mathbf{R}}^{(2)} \tag{30}$$

$$\underline{\mathbf{U}}^{(2)} = \underline{\mathbf{X}} \times_1 \tilde{\mathbf{R}}^{(1)} \tag{31}$$

$$\underline{\mathbf{Y}} = \underline{\mathbf{X}} \times_1 \tilde{\mathbf{R}}^{(1)} \times_2 \tilde{\mathbf{R}}^{(2)} \tag{32}$$

式 (30)，(31)，(32) はテンソル行列積であり $\times_m$ は第 m モードに関するテンソル行列式を表している．例えば式 (30) ではテンソル $\underline{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times D}$ と行列 $\tilde{\mathbf{R}}^{(2)} \in \mathbb{R}^{K_2 \times N_2}$ の第 2 モードのテンソル行列積であり，結果が $\underline{\mathbf{U}}^{(1)} \in \mathbb{R}^{N_1 \times K_2 \times D}$ となっている．

2 Tensor SOM の課題

Tensor SOM のシミュレーションプログラムの作成を行う．

2.1 人工データの用意

submodule 化された som-f を用いて人工データ (双曲面データ) を生成．用いる関数 (**URL**) は SOM の場合と生成の仕方が異なるので注意.

2.2 アルゴリズム部分の作成

用意されているコードのアルゴリズム部分を作成する．
※双曲面データを学習する際は TSOM の潜在空間は 1 次元にすること！！
以下の 2 ステップを近傍半径を減少させながら繰り返す．

2.2.1　潜在変数の更新

2.2.2　1 次モデルと 2 次モデルの更新

2.3　ペアプロ

実験条件を他の人と完全に一致させた時、学習結果も完全に一致するか確認する．

2.4　描画

自分で描画関数を作り双曲面データの学習結果を描画する．