SOM-family 教室
Introduction of Self-Organizing Map

D2 渡辺 龍二

前置き

- ここでは渡辺が今まで発表した資料のつなぎ合わせでSOMを説明します
  - 途中で英語になってしまいますがあまり気にしないでください
  - 読めない英単語があったらその場で聞いてください

Introduction

SOMとは？

- 自己組織化写像（Self-Organizing Map: SOM）
- 一言じゃ言えないなぁ…
- 解釈が色々あって大変

SOMの解釈いろいろ

- 大脳視覚野における機能地図の自己組織化モデル
  - 「自己組織化」という名前の由来はここから
- 次元削減
- 潜在変数モデル
- 多様体モデリング
  - 古川研の独自の用語
  - 今後の推しはこれ！
- ベクトル量子化

SOMの解釈いろいろ

- 大脳視覚野における機能地図の自己組織化モデル
  - 「自己組織化」という名前の由来はここから

よく分からん

- 次元削減

まぁ基本

- 潜在変数モデル

今日のメイン
はこれ！

- 多様体モデリング
  - 古川研の独自の用語
  - 今後の推しはこれ！

潜在変数モデルの
話が分かれば
飲み込みやすい

- ベクトル量子化

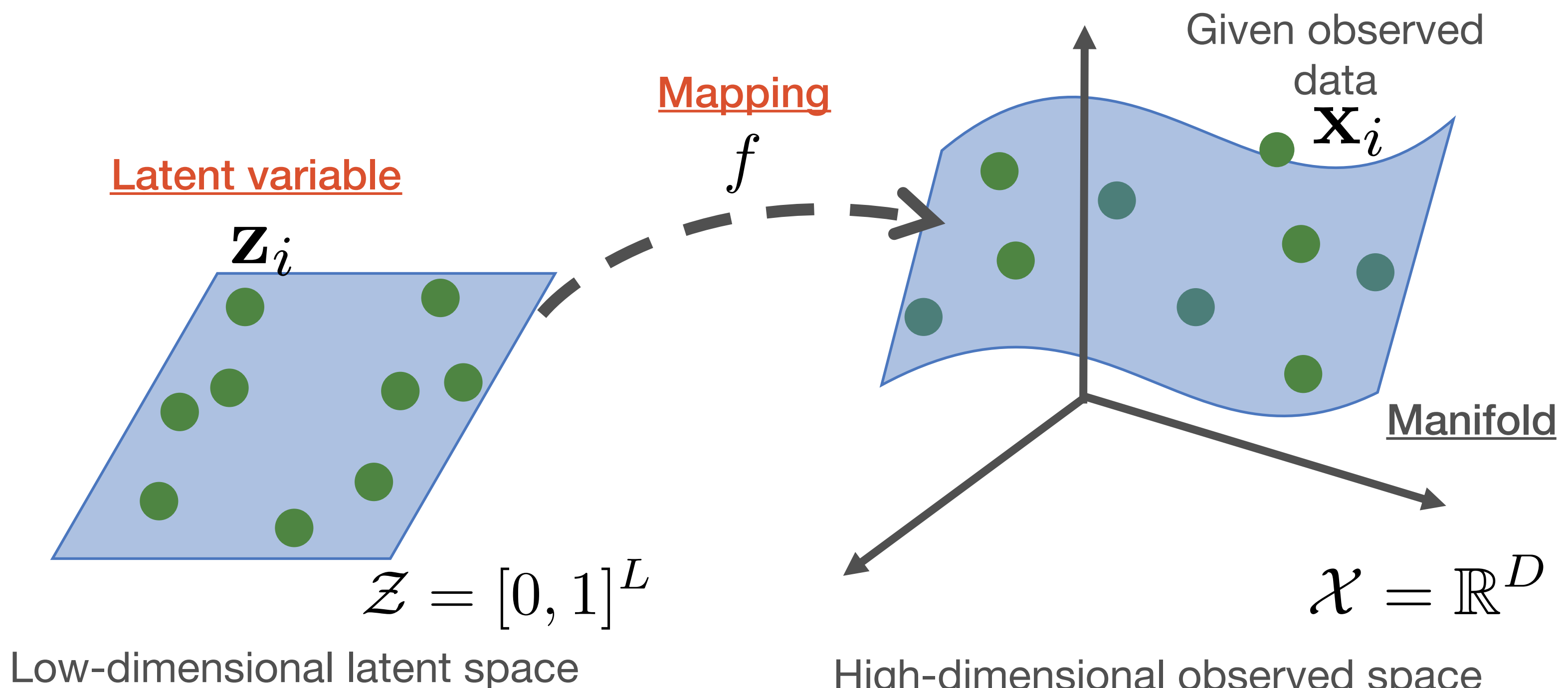
あんま知らん

Self-Organizing Map

Task setting of SOM

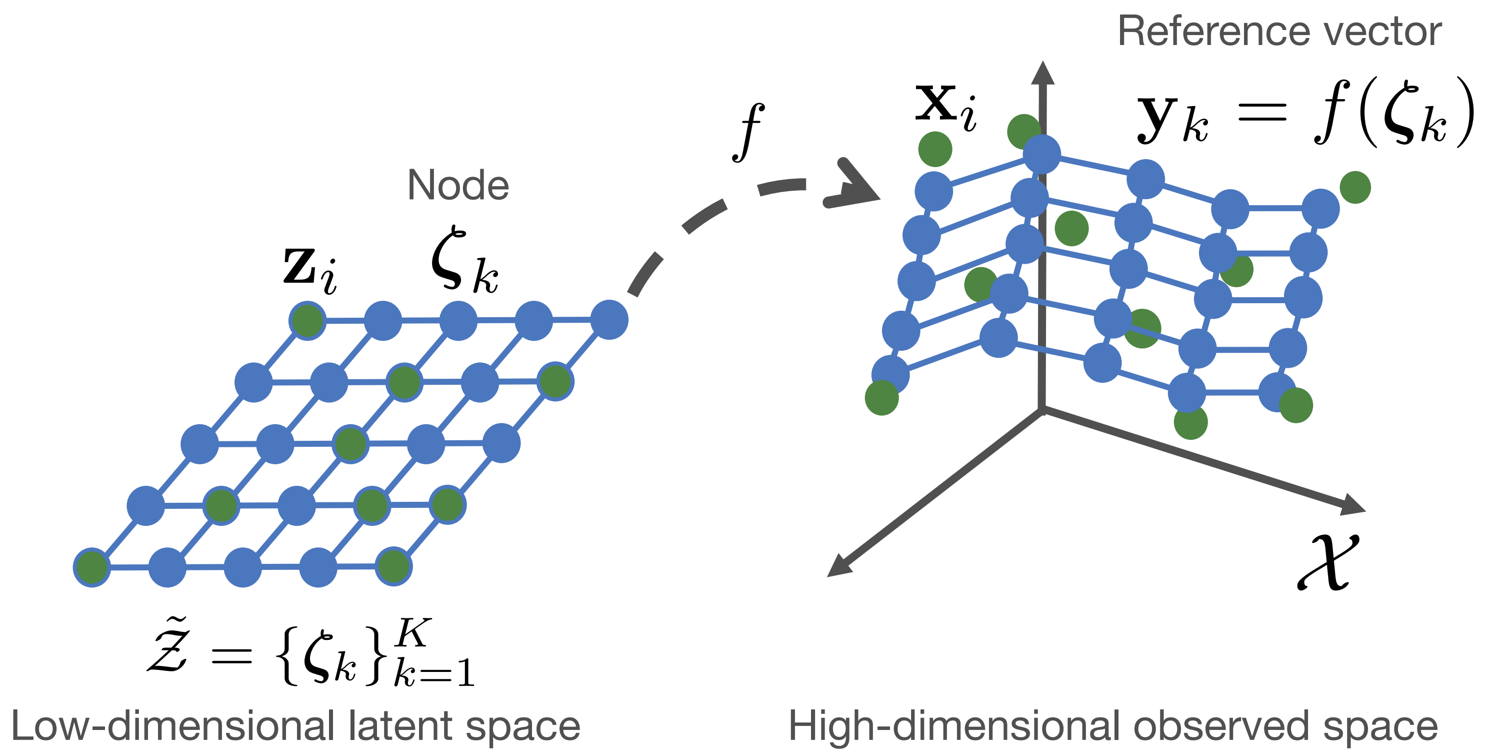
- Given: high-dimensional dataset $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_i)_{i=1}^{N}, \ \mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$
- Estimate:
  - Latent variables $\mathbf{Z} = (\mathbf{z}_i)_{i=1}^{N}, \mathbf{z}_i \in \mathcal{Z}$
  - Non-linear mapping $f : \mathcal{Z} \to \mathcal{X}$

$s.t. \ \forall i \ \mathbf{x}_i \simeq f(\mathbf{z}_i)$



The architecture of SOM

- Latent space is discretized as $\tilde{\mathcal{Z}} = \{\zeta_k\}_{k=1}^{K}$
- Mapping is represented as reference vectors $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_k)_{k=1}^{K}$



The cost function of SOM

- The cost function of SOM[17-20] is

$$E(\mathbf{Z}, \mathbf{Y}) = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{k} h\left(\zeta_k, \mathbf{z}_i\right) \left\|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_k\right\|^2$$

  - where $h(\zeta, \mathbf{z}) = \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\|\zeta - \mathbf{z}\|^2\right]$

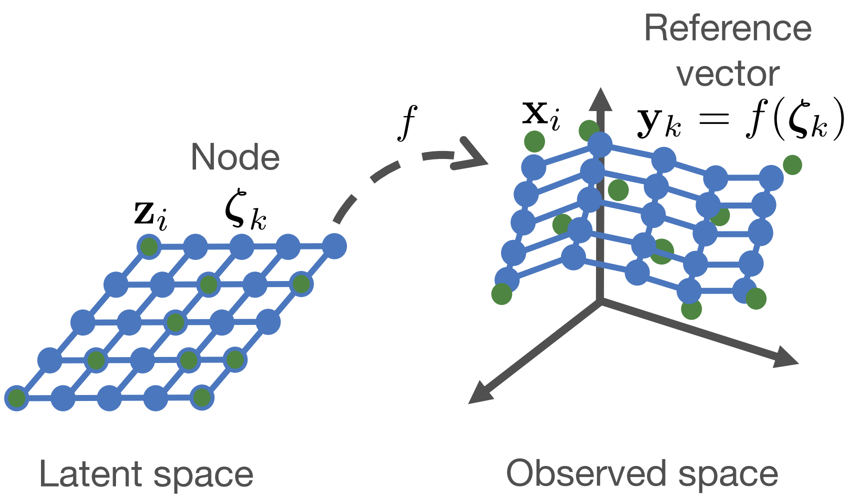
    σ is the parameter determining the neighborhood radius.

[17] Verbeek, et al.,2015. [18] Heskes, 1999. [19] Luttrell, 1989. [20] Heskes, et al., 2000

The algorithm of SOM (Overview)

Optimization

$$\underset{\mathbf{Z},\mathbf{Y}}{\text{minimize}} \quad E(\mathbf{Z},\mathbf{Y}) = \frac{1}{2}\sum_i \sum_k h\left(\zeta_k, \mathbf{z}_i\right) \left\|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_k\right\|^2$$



Repeating the following two steps alternately

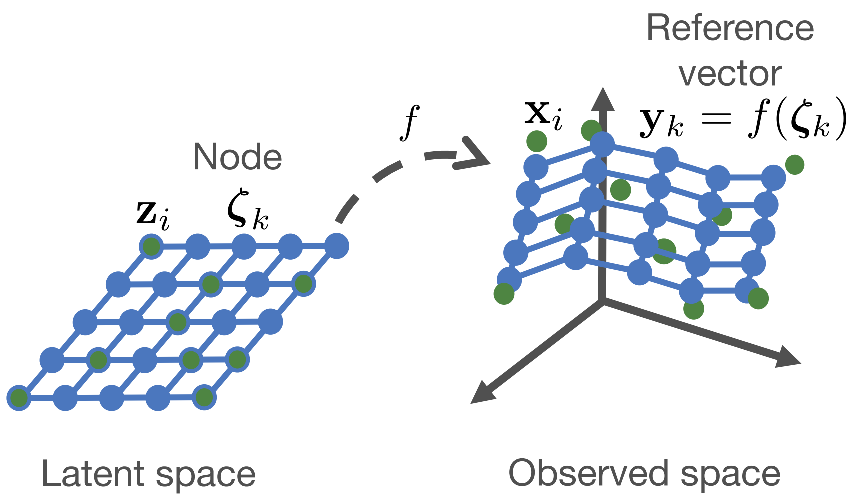
step1. estimate $\mathbf{Z}$

step2. estimate $\mathbf{Y}$

The algorithm of SOM (Step1)

Optimization

$$\underset{\mathbf{Z},\mathbf{Y}}{\text{minimize}} \quad E(\mathbf{Z},\mathbf{Y}) = \frac{1}{2}\sum_i \sum_k h(\zeta_k, \mathbf{z}_i) \|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_k\|^2$$



Step1. Estimate $\mathbf{Z}$

$$k_i^* = \arg\min_k \sum_{k'} h(\zeta_{k'}, \zeta_k) \|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_{k'}\|^2$$

$$\simeq \arg\min_k \|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_k\|^2$$

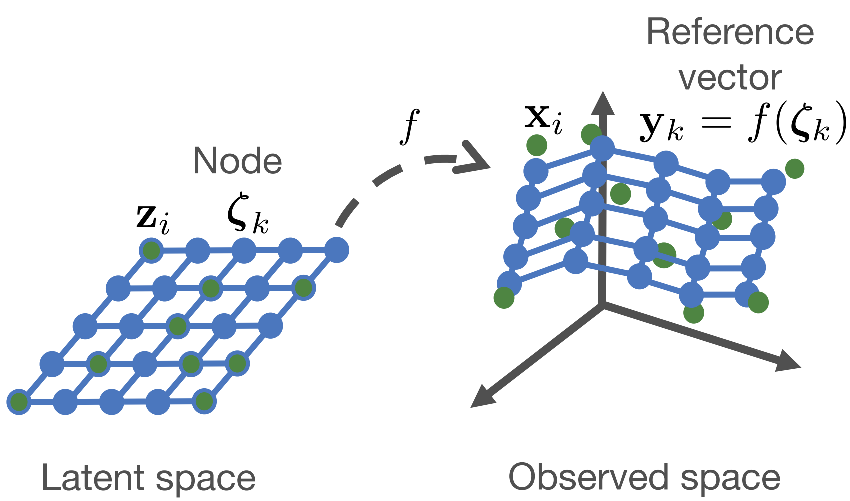
Find by brute-force search

$$\mathbf{z}_i := \zeta_{k_i^*}$$

The algorithm of SOM (Step2)

Optimization

$$\underset{\mathbf{Z},\mathbf{Y}}{\text{minimize}} \quad E(\mathbf{Z},\mathbf{Y}) = \frac{1}{2}\sum_i \sum_k h\left(\zeta_k, \mathbf{z}_i\right) \left\|\mathbf{x}_i - \mathbf{y}_k\right\|^2$$



Step2. estimate $\mathbf{Y}$

$$\mathbf{y}_k = \frac{1}{H_k} \sum_i h\left(\zeta_k, \mathbf{z}_i\right) \mathbf{x}_i$$

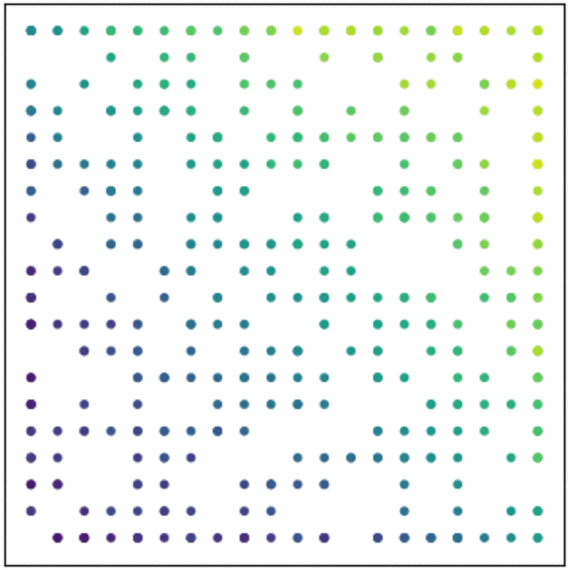
where $\quad h(\zeta, \mathbf{z}) = \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\|\zeta - \mathbf{z}\|^2\right]$

$$H_k := \sum_i h\left(\zeta_k, \mathbf{z}_i\right)$$

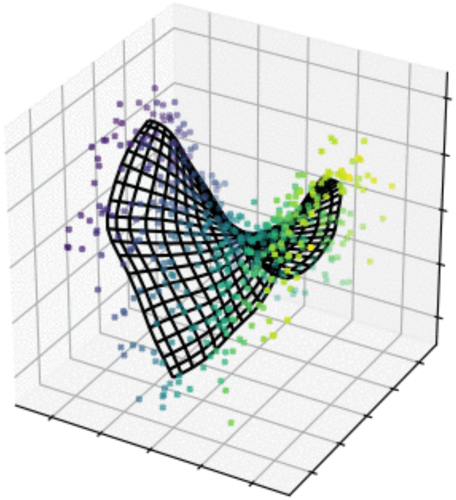
This effects low computational cost.

Reduce σ with learning process.

Simulation result with artificial dataset



Latent space



Observed space

生成モデルとしてのSOMまとめ

- GTMの考え方を逆輸入すると,
  SOMは潜在変数モデルとして解釈可能
- データが生成される過程を考える
- SOMは潜在変数だけではなく
  潜在空間から観測空間への写像を学習している
- SOMは連続的な潜在空間を離散化している
- 潜在変数の推定は総当たりでやっている
- 写像の推定は回帰と同じ問題設定