2007－CVIM－158 (23)
2007／3／20

競合型ニューラルネットワークによるオンライン追加学習と高密度オーバーラップの分離

小倉和貴[†] 申 富饒[††] 長谷川 修[†,†††]

一般に競合型ニューラルネットワークを用いた教師なしクラスタリングにおいて，追加学習を行うと過去の学習結果が破壊されてしまう．Self-Organizing Incremental Neural Network (SOINN) (Shen, 2006) はニューロンを増殖させることでこの問題に対応し，さらにノイズ耐性なども有するが，異なるクラス間の分布に重なりがある場合におけるクラス分離性能が低い．そこで SOINN に改良を加え，SOINN の利点を全て継承した上で，クラス間に高密度な重なりが存在する場合にも安定してそれらを分離できるオンライン学習手法を実現した．

A Competitive Neural Network for Online Incremental Learning and Separating High-Density Overlap

Tomotaka Ogura,[†] Furao Shen [††]
and Osamu Hasegawa[†,†††]

A new incremental learning mechanism is proposed to solve some unsupervised classification task. The proposed method adopts single-layer network to represent the topological structure of unsupervised on-line data, report the reasonable number of clusters, give typical prototype patterns of every cluster without any priori conditions such as suitable number of nodes, separate clusters with high-density overlap, and realize the incremental learning. The experiments for both artificial data set and real-world data set show the efficiency of the proposed method.

1. まえがき

教師なし学習の手法として，競合型ニューラルネットワークを用いた学習がある．自己組織化マップ (SOM)[1] はネットワークの構造を事前に決定する必要があり，Competitive Hebbian Learning と組み合わされた Neural Gas (NG)[2] はネットワークのノード数を事前に決定する必要がある．そのため，これらの手法は追加学習に適さない．Growing Neural Gas (GNG)[3] は定期的にノードを挿入することで追加学習に対応しているが，ノード数が恒久的に増加するため永続的な学習に適さない．

追加学習は非定常的な入力を学習する場合に必要となる．つまり，既にある学習結果に対して新しいクラスのデータが入力された場合，それに対応するクラスを追加的に形成するために必要である．このとき，以前の学習結果を改悪あるいは忘却せずに，新しい入力データに適応することが求められる．GNG-U[4] はデータが低密度に分布する領域に位置するノードを削除することで非定常的な入力への対応を実現しているが，追加学習には対応しておらず，以前の学習結果は破壊されてしまう．Hamker (2001)[5] は GNG を拡張して教師有りでの追加学習を実現したが，この手法は教師なし学習には適さない．

Shen と Hasegawa は Self-Organizing Incremental Neural Network (SOINN)[6],[7] と呼ばれるオンライン教師なし学習の手法を提案した．SOINN は 2 層ネットワーク構造をしており，非定常的な入力を学習でき，分布に複雑な形状を持つクラスに対しても適切なクラス数及び位相構造を出力できるなど多くの利点を持つ．また，追加学習も部分的に実現している．一方で以下の問題点がある．(1)1 層目は追加学習が可能であるが，2 層目は追加学習ができない．(2)2 層目の学習を開始するタイミングを適切に決定することが難しい．(3) 分布に低密度の重なりがあるクラスは分離できるが，重なりが高密度の場合には分離できず，複数のクラスが連結して 1 つのクラスタを形成してしまう．

本論文では以上のような SOINN の問題点を解決した新しい手法として Enhanced-SOINN (E-SOINN) を提案する．E-SOINN はオンライン教師なし学習が可能な SOINN の持つすべての機能を失うことなく，追加学習を可能とした手法であり，SOINN より少ないパラメータで動作する．

2. SOINN の概要

ここでは，提案手法の基となった SOINN の概要について述べる．

† 東京工業大学大学院総合理工学研究科知能システム科学専攻
Department of Computational Intelligence and System Science, Tokyo Institute of Technology
†† 中国南京大学計算機科学技術系
The Department of Computer Science of Nanjing University, China
††† 東京工業大学像情報工学研究施設
Imaging Science and Engineering Laboratory, Tokyo Institute of Technology

2.1 学習アルゴリズム

SOINNは2層ネットワーク構造により学習を行うが，1層目と2層目は同じ学習アルゴリズムで動作する．SOINNは入力ベクトルが与えられると，入力ベクトルに最も近いノード (以降，第1勝者ノードと呼ぶ) 及び2番目に近いノード (以降，第2勝者ノードと呼ぶ) を探索し，3.2で述べる類似度閾値という基準を用いて，入力ベクトルが同一のクラスタに属すかどうかを判定し，第1勝者ノードと異なるクラスタに属す場合は入力ベクトルと同じ位置にノードを挿入し，次の入力を処理する．このときの挿入はクラス間挿入と呼ばれる．また，同一のクラスタに属す場合は，第1勝者ノード及び第2勝者ノードを辺によって接続し，第1勝者ノードと辺によって直接的に接続しているノード (以降，隣接ノードと呼ぶ) の重みベクトルを更新する．また,「辺の年齢」という基準を用いて第1勝者ノードに接続している辺のうち不要な辺を削除する．更に，入力が λ 回与えられるごとにノイズと判定されたノードを削除し，入力データとノードの位置との誤差が大きい領域にノードを挿入する．ただし，挿入によって誤差が減少しない場合は，挿入は取り消される．このときの挿入はクラス内挿入と呼ばれ，Growing Neural Gas (GNG) や Growing Cell Structure (GCS)[8] などの伝統的な追加的ネットワーク構造学習と同様の仕組みである．

SOINNの1層目は入力回数があらかじめ設定された回数 LT に達すると学習結果としてノードの重みベクトル及び位相構造を出力する．学習結果として得られた重みベクトルは，学習データとして2層目に入力される．ただし，追加学習を行う場合は，2層目に残っている以前の学習結果を消去し，その上で2層目の学習を行う．2層目の学習が終了すると，SOINNはクラス数及び各クラスの代表的なプロトタイプベクトルを出力する．ここで，プロトタイプベクトルとは代表的な入力データを集約的に表現したベクトルのことである．SOINN及びE-SOINNにおいてはノードの重みベクトル (アルゴリズム *4.3* における W) がプロトタイプベクトルに相当する．

2.2 1層目と2層目の違い

1層目では入力データの分布が未知であるので，類似度閾値を適応的に変化させる．しかし，2層目では1層目の結果から入力データの分布を知ることができる．このため，2層目では類似度閾値として適切な値を算出し，その値 (固定値) を用いる．これにより2層目は1層目に比べて学習結果が安定する．一方で，2層目では学習領域全体で同じ類似度閾値を用いるため，局所的に類似度閾値の値が不適切となる領域が存在する．そのような領域では入力ベクトルとノードの位置との誤差が増加するため，クラス内挿入が多く行われる．これに対して，1層目では類似度閾値が適切に変化するため，未知の入力が適切に検出され，クラス間挿入が行われる．そのため，誤差があまり増加せず，クラス内挿入はほとんど行われない．

通常，1層目と2層目ではノイズ削除に関するパラメータに対して異なる値を設定して削除の振る舞いを変化させる．すなわち，1層目では隣接ノード数が1つであるノードをノイズとして無条件に削除する．一方，2層目では位相構造を適切に抽出するために，隣接ノード数が1つであるノードのうち第1勝者ノードになった回数が他と比べて極端に少ないノードのみ削除する．追加学習において2層目の学習結果を削除する理由はここにある．追加学習において新規に挿入されるノードは，長期間学習を行ったノード (以前の学習結果) に比べれば第1勝者ノードになった回数が少ない．そのため，追加学習のために必要なノードのほとんどがノイズとして削除されてしまう．これを防ぐため，以前の学習結果を削除し，再学習を行う．

3. Enhanced-SOINN (E-SOINN)

3.1 SOINNとE-SOINNの違い

SOINNは2層ネットワーク構造により学習を行うが，そのために次の問題点を持つ．(1)1層目の学習を停止して2層目の学習を始める適切なタイミングを利用者が決定する必要がある．(2)1層目はオンラインでの追加学習が可能であるが，2層目はそれができない．

E-SOINNはSOINNと同じ機能を1層ネットワーク構造で実現する．そのため，2層目の学習を始めるタイミングを決定する必要がない．また，E-SOINNはSOINNの1層目を基に改良を加えた手法であり，SOINNの1層目が持つ追加学習などの機能を受け継いでいる．つまり，オンラインでの追加学習を実現できる．

SOINNでは追加学習のために1層目及び2層目においてネットワークに新しいノードを挿入する．このとき，クラス内挿入とクラス間挿入の2種類を用いるが，クラス内挿入には多くのパラメータが必要である．そのため，SOINNの動作には合計8つのパラメータが必要となる．一方，E-SOINNではクラス間挿入のみを用いるため，SOINNより少ない合計4つのパラメータで動作する．また，クラス内挿入の削除による学習結果への影響はほとんどない．これらの詳細は3.2.で述べる．

SOINNでは3.3で述べるCompetitive Hebbian Learningによりノード間を接続する．E-SOINNではこの接続規則に以下の改良を加える．(1) 接続が必要かどうか事前に判定する．(2) 一定期間ごとにクラス間における分布の重なり領域を検出し，そこに存在する接続を消去する．これにより，E-SOINNは分布に高密度の重なりを持つクラスを分離できる．これらの詳細は4.で述べる．

3.2 ノードの挿入

追加学習を実現し，適切な位相構造を獲得するには，ネットワークを成長させることが重要である．これはノードの挿入によって実現できるが，ノード数の恒久的な増加による悪影響を防ぐには，十分な数のノードが得られた時点で挿入を停止する必要がある．

SOINNではノードの挿入にあたってクラス間挿入とクラス内挿入の2種類を用いているが，2.2で述べたように，クラス内挿入は1層目の学習にはほとんど寄与しない．そのため，E-SOINNではクラス間挿入のみを用いてノードの挿入を行う．クラス間挿入では，入力ベクトルが未学習領域への入力であるかどうかを判定し，そのような入力の場合にノードを挿入する．すなわち，入力ベクトルとその最近傍ノード k との距離がノード k の

類似度閾値 T_k より大きい場合には，未学習領域への入力であると判断し，入力ベクトルの位置に新しいノードを挿入する．類似度閾値はボロノイ領域の考えに基づいて計算されるが，ノードの位置は学習を進めることで次第に変化し，それに伴ってボロノイ領域も変化する．つまり，類似度閾値はノードの位置変化に応じて適応的に変化する必要がある．

ボロノイ領域 V_i の内部に入力ベクトルが与えられた場合，その入力はノード i によって学習済みの領域に入力されたと判断する．ここで，ボロノイ領域の定義から，ボロノイ領域 V_i の内部にはノード i 以外のノードは存在しないため，ノード i から最も遠い隣接ノードまでの距離より離れた領域は明らかにノード i のボロノイ領域 V_i の外側であると考えることができる．つまり，類似度閾値を隣接ノードまでの最大距離とすることで，未学習領域を適切に判定できる．E-SOINN ではアルゴリズム *3.1* に従って類似度閾値を計算する．これは SOINN における類似度閾値の計算と同じである．

アルゴリズム *3.1*: 類似度閾値 T の計算

Step1.新しく挿入されたノード i の類似度閾値 T_i を $+\infty$ とする．

Step2.ノード i が入力ベクトルから最も近いノードまたは 2 番目に近いノードになったとき，類似度閾値 T_i を以下の手順で更新する．

- ノード i が隣接ノードを持つ場合: T_i を隣接ノードへの最大距離とする ($T_i = \max_{c \in N_i} \|W_i - W_c\|$)．ここで，$N_i$ はノード i の隣接ノードの集合とする．
- ノード i が隣接ノードを持たない場合: ノード i からそれ以外の各ノードへの距離を計算し，その最小距離を T_i とする ($T_i = \min_{c \in A \setminus \{i\}} \|W_i - W_c\|$)．ここで，$A$ はノードの集合とする．

E-SOINN においてクラス内挿入を削除したことは学習結果に影響しない．既に述べたように，SOINN のクラス内挿入は 1 層目の学習にはほとんど寄与しない．つまり，1 層構造で学習を行う E-SOINN ではクラス間挿入のみで位相構造を表現するにあたって十分な数のノードを得ることができる．クラス間挿入では未学習領域への入力が与えられた場合にノードを挿入する．そして，その後の処理により，挿入されたノードと既にクラスタを形成しているノードが接続されることで，それらが 1 つのクラスタとしてまとまる．このとき，類似度閾値が適応的に変化することで，ネットワークの形成に十分な数のノードが挿入される．また，ノードが各クラスの境界位置まで挿入されると，未学習領域が存在しなくなり，ノードの挿入は自動的に停止される．つまり，ノードの永続的な挿入を防ぐことができる．5. で述べる実験結果も，クラス間挿入のみで適切な位相構造を獲得できることを示している．

3.3 ノードの接続

SOINN では，ノード間を接続するために Martinetz が Topology Representing Network (TRN)[9] において提案した Competitive Hebbian Learning を用いる．すなわち，第 1 勝者ノード及び第 2 勝者ノードを探索し，

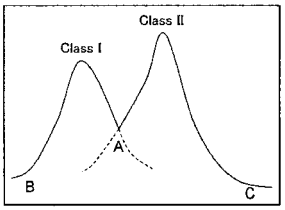


図 1 分布に重なりのあるクラス

それらの間に辺を作ることでそれらを接続する (既に辺が存在する場合はその辺を更新する)．この規則により生成されるネットワークは位相構造を適切に表現することが証明されている．オンライン学習において，ノードはその位置を恒久的に少しずつ変化させる．それゆえ，始めは隣接していたノードが一定期間を経た後には隣接しないことが起こり得る．このような場合にも，一定期間を経ても更新されない辺を削除することで対処できる．

E-SOINN では Competitive Hebbian Learning に変更を加える．すなわち，E-SOINN では第 1 勝者ノード及び第 2 勝者ノードを接続する前にその必要性を判定し，接続が必要な場合のみ辺を生成する．例えば，図 1 において，2 つのクラス間には分布の重なり (図 1 における A の部分) が存在する．このため SOINN の仕組みを用いると，2 つのクラスは接続されて 1 つのクラスタを形成してしまう．これを防ぐためには，第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードが分布の重なり領域に位置する場合には，それらを接続しない仕組みが必要である．

アルゴリズム *3.2*: E-SOINN における辺の生成

Step1.入力ベクトルに対し，第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードを探索する．

Step2.第 1 勝者ノードに接続されているすべての辺の年齢を 1 増加させる．

Step3.第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードの間に辺が必要かどうか判定する．

- 必要な場合: 第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードの間に辺が存在しなければ，辺を生成し，第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードの間に存在する辺の年齢を 0 に更新する．
- 不要な場合: 第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードの間に辺が存在すれば，それを削除する．

アルゴリズム *3.2* において，第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードが分布の重なり領域に位置するかどうかを基準として接続の必要性を判定することで，分布に重なりのあるクラスを分離できる．

E-SOINN は分布に高密度の重なりのあるクラスを分離できる．これは，辺の生成にあたってその必要性を判定すること，及びクラス間の分布の重なり領域を検出する仕組みを導入したことで実現される．これらの詳細は 4. で述べる．

3.4 ノードの属すクラスを決定する

文献[6] では，いくつかの辺を通して 2 つのノードが接続していることを，それら 2 つのノード間には “パス” が存在すると表現している．つまり，$a, b, x_i \in A$, $i = 1, 2, \ldots, n$ として (a, x_1), (x_1, x_2),..., (x_{n-1}, x_n), $(x_n, b) \in C$, という辺の連続が存在するとき，ノード a

とノード b の間にはパスが存在する．ここで，A はノードの集合，C は辺の集合である．

Martinetz と Schulten は[9] において，Competitive Hebbian Learning によって，与えられた多様体を適切に表現するパスが形成されることを証明した．パスが適切に形成されているとき，与えられた多様体はどの部分が分離しているか，すなわち，異なるクラスタを形成しているかを決定できる．つまり，2 つのノードがパスによって接続していれば，それらのノードは同一のクラスタに属すと判断できる．E-SOINN では，SOINN と同じアルゴリズムを用いてノードの属すクラスを決定する．

アルゴリズム *3.3*: ノードの属すクラスを決定する

Step1. すべてのノードをどのクラスにも属していない状態にする．

Step2. どのクラスにも属していないノード i をランダムに選択し，新しいクラスのラベルを貼る．

Step3. ノード i とパスによって接続しているノードをすべて探索し，ノード i と同じラベルを貼る．

Step4. どのクラスにも属していないノードが存在するなら，Step2 に戻る．

3.5 ノイズに相当するノードを削除する

SOINN では分布が低密度の領域に位置するノードをノイズと見なして削除する．すなわち，入力されたベクトルの総数がパラメータ λ の倍数になったとき，隣接ノード数が 1 つ以下であるノードを低密度の領域に位置すると見なして削除する．ただし，1 次元のデータ若しくはノイズの少ないデータに対しては，削除対象のノードが第 1 勝者ノードになった回数を利用して削除のふるまいを調節する．SOINN が 2 層構造であることもノイズの削除において有効な役割を果たす．つまり，1 層目と 2 層目のそれぞれでノイズ削除を行うため，より効果的にノイズを削減できる．

E-SOINN では，SOINN とよく似た仕組みを用いてノイズに相当するノードを削除する．すなわち，入力されたベクトルの総数がパラメータ λ の倍数になったとき，隣接ノード数が 2 つ以下であるノードを削除する．また，E-SOINN ではノードの密度という概念，及び 2 つのパラメータ c_1(隣接ノード数が 2 つの場合), c_2(隣接ノード数が 1 つの場合) を用いて，削除のふるまいを調節する．ノードの密度の詳細は 4. で述べる．

4. クラス間における分布の重なり

ここでは，ノードの密度の定義，クラス間における分布の重なりを検出する方法，及び第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードの接続における判定基準について述べる．重なり領域の検出にあたって，重なり領域の密度はクラス中心部分の密度より低いという仮定を用いる．

4.1 ノードの密度

ノードの密度は局所的に与えられる入力の数によって定義できる．すなわち，あるノードの近くに多くの入力が与えられるなら，そのノードの密度は高く，逆にその近くに入力がほとんど与えられないなら，そのノードの密度は低いと考えられる．つまり，ノードが第 1 勝者ノードになった回数 (勝者の回数) をノードの密度として定義できる．この定義は GCS や SOINN などの手法に導入されている．これは自然な定義であるが以下の問題点を持つ．

(1) 一般に分布が高密度の領域には多くのノードが生成されるため，そのような領域では第 1 勝者ノードになる機会が少ない．つまり，より高密度の領域に位置するノードほど勝者の回数が多いとは限らない．

(2) 追加学習を行う場合，以前の学習において生成されたノードは第 1 勝者ノードにならないことが多い．つまり，追加学習によってそれらのノードの勝者の回数が相対的に少なくなり，以前の学習で得られた結果に悪影響を与えてしまう．

E-SOINN では，上記の問題を解決するために密度に対する新しい定義を用いる．基本的な考えは “勝者の回数” と同じであるが，“回数” の代わりに “ポイント” を用い，ノードの密度を累積ポイントの平均として定義する．“勝者の回数” による定義では特定のノードのみを用いて密度の計算を行うが，新しい定義ではノード間の関係を考慮する．ポイントの計算において，ノード i における隣接ノードへの平均距離を $\bar{d}_i$ とするとき，ノード i のポイント p_i を以下の式で定義する．

$$p_i = \begin{cases} \frac{1}{(1+\bar{d}_i)^2} & \text{第 1 勝者ノードの場合} \\ 0 & \text{それ以外の場合} \end{cases} \quad (1)$$

隣接ノードへの平均距離が大きい場合は，その領域にはノードが少ないと考えられ，逆に平均距離が小さい場合は，その領域にはノードが多いと考えられる．式 (1) を用いることで，ノードの多い領域で第 1 勝者ノードになった場合には高いポイントが与えられ，逆にノードの少ない領域で第 1 勝者ノードになった場合には低いポイントが与えるられることが分かる．つまり，“勝者の回数” による密度の定義における最初の問題点を解決できる．式 (1) において，ポイントの値を 1 未満にするために分母に 1 を加えている．

連続して与えられる入力を一定回数 λ ごとの区間に分け，各区間においてノード i に与えられたポイントの合計を累積ポイント s_i と呼ぶことにする．

$$s_i = \sum_{j=1}^{n} (\sum_{k=1}^{\lambda} p_i^{(j,k)}) \quad (2)$$

ここで，n は区間の総数を表す (n は入力総数を LT とするとき，LT/λ によって計算される)．また，$p_i^{(j,k)}$ は j 番目の区間における k 番目の入力によってノード i に与えられたポイントを意味する．

そして，ノード i の密度 $density_i$ を累積ポイントの平均として以下で定義する．

$$density_i = \bar{s}_i = \frac{1}{N} s_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{n} (\sum_{k=1}^{\lambda} p_i^{(j,k)}) \quad (3)$$

ここで，N は与えられたポイントの合計が 0 以上の区間の数である (N と n は必ずしも同じでない点に注意する)．追加学習に対応するために n の代わりに N を用いている．追加学習において，以前の学習で生成されたノードにはポイントが与えられないことが多く，n を用いて密度を算出すると，以前学習したノードの密度は次第に

低くなってしまう．しかし，N を用いて密度を算出することで，追加学習を長時間行っても，追加されるデータが以前学習したノードの近くに入力されない限り，そのノードの密度は変化せずに保持される．つまり，“勝者の回数” による密度の定義における 2 番目の問題点を解決できる．

4.2 分布の重なり領域の検出

密度の定義を用いて分布の重なり領域を検出する簡単な方法は，密度の低い領域を重なり領域として検出する方法である．GCS や SOINN などの手法はこの考えを用いている．しかし，この考えが正しいとは限らない．例えば，図 1 のようないくつかのガウス分布で与えられるクラスにおいて，分布の重なり領域である領域 A の密度は重なり領域でない領域 B や領域 C の密度より高い．これは，重なり領域が複数のクラスから構成されるため，密度がある程度高くなってしまうために起きる．つまり，単純に密度の高低を用いるだけでは重なり領域の検出は難しい．この問題を解決するため，E-SOINN では新しい方法を導入する．

いくつかのクラス間の分布に重なりがある場合，学習が進むと，それらのクラスに属すノードが互いに接続して 1 つのクラスタを形成することがある．ここでは，そのような混合クラスタ (複数のクラスからなるクラスタ) において分布の重なり領域を検出する方法，及び異なるクラスから生成されたクラスタが接続されることを防止し，クラスタを適切に分離する方法について述べる．

始めに，分布の重なり領域を検出するために，混合クラスタをいくつかのサブクラスタに分割する．

アルゴリズム *4.1*: 混合クラスタのサブクラスタへの分割

Step1.密度が局所的に最大となっているノードをサブクラスタの頂点とする．そのような頂点をすべて探索し，それぞれに異なるラベルを貼る．

Step2.それ以外の全ノードに対して，密度が最大の隣接ノードと同じラベルを貼る．

Step3.異なるラベルを貼られたノード間に接続がある場合，それらのノードをサブクラスタの境界，つまり，分布の重なり領域とする．

アルゴリズム *4.1* を用いることで，図 1 には 2 つのサブクラスタがあり，領域 A が重なり領域であることが検出できる．しかし，この方法にはいくつかの問題が存在する．例えば，図 2 には 2 つのクラスが存在するが，密度の分布には細かい凹凸がある (これはノイズや学習サンプルが少ないことが原因となって起きる)．このような状況でアルゴリズム *4.1* を用いると，非常に多くのサブクラスタ及び重なり領域が検出されてしまう．この問題を解決するには，サブクラスタへの分離を行う前に，図 2 を図 1 のように平滑化する必要がある．実際には，ある基準を満たした 2 つのサブクラスタを 1 つに統合することで平滑化を実現する．

例えば，図 2 における 2 つのサブクラスタ A と B において，サブクラスタ A の頂点の密度が A_{max}，サブクラスタ B の頂点の密度 B_{max} であるとする．ここで，第 1 勝者ノード及び第 2 勝者ノードがサブクラスタ A 及び B の間にある分布の重なり領域に位置し，以下の条件のいずれかを満足するとき，サブクラスタ A と B を統合する．

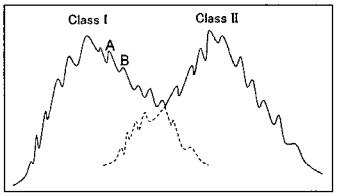


図 2 分布に重なりのあるクラス (細かい凹凸がある場合)

$$\min\left(density_{win}, density_{sec\text{-}win}\right) > \alpha_A A_{max} \quad (4)$$

$$\min\left(density_{win}, density_{sec\text{-}win}\right) > \alpha_B B_{max} \quad (5)$$

ここで，$density_{win}$ 及び $density_{sec\text{-}win}$ はそれぞれ第 1 勝者ノード及び第 2 勝者ノードの密度を表す．

式 (4) 及び式 (5) によって密度の凹凸の大きさを判定している．つまり，サブクラスタ A と B の間にある谷間の密度 (左辺) が閾値 (右辺) より大きい場合，小さな凹凸であると判定する．閾値はサブクラスタの頂点の密度を α 倍した値とし，$\alpha \in [0,1]$ は式 (6) により算出する．

$$\alpha_A = \begin{cases} 0.0 & 1 \geq A_{max}/mean_A - 1 \\ 0.5 & 2 \geq A_{max}/mean_A - 1 > 1 \\ 1.0 & A_{max}/mean_A - 1 > 2 \end{cases} \quad (6)$$

ここで，$mean_A$ はサブクラスタ A に属すノードの密度の平均値である．

式 (6) において，サブクラスタの密度の凹凸の程度を判定し α の値を決定している．$A_{max}/mean_A$ の値によって A_{max} と $mean_A$ 大きさの比を算出できる．ここで，その値が 1 以下の場合には，密度の凹凸はノイズの影響によるものと判断する．そして，α の値を 0.0 とすることで，サブクラスタが統合されるようにしている．また，値が 2 を超える場合には，明らかな密度の凹凸が存在すると判断する．そして，α の値を 1.0 とすることで，サブクラスタが分離されるようにしている．それ以外の場合は，α の値を 0.5 とすることで，密度の凹凸の大きさに応じてサブクラスタが統合または分離されるようにしている．

以上をまとめると，混合クラスタを異なるサブクラスタに分割し，それらを適切に統合することで，分布の重なり領域を検出できる．そして，異なるサブクラスタに属するノード間に存在する接続を削除することで，分布に重なりのあるクラスを分離できる．

アルゴリズム *4.2*: ノード間を接続する条件

Step1.第 1 勝者ノードまたは第 2 勝者ノードが，どのサブクラスタにも属していないノードであるなら，ノード間に辺を生成し，それらを接続する．

Step2.第 1 勝者ノード及び第 2 勝者ノードが同じサブクラスタに属す場合，ノードの間に辺を生成し，それらを接続する．

Step3.第 1 勝者ノードと第 2 勝者ノードが異なるサブクラスタ A と B に属すなら，以下の方法により，2 つのノード間の接続が必要であるかどうか判定する．

- $m = \min(density_{win}, density_{sec\text{-}win})$ を計算する．ここで，$density_{win}$ 及び $density_{sec\text{-}win}$

はそれぞれ第1勝者ノードの密度及び第2勝者ノードの密度を表す.

- $\alpha_A A_{max} > m$ かつ $\alpha_B B_{max} > m$ を満たすなら，2つのノードを接続しない．また，既にノード間に接続がある場合には接続を削除する.
- $m \geq \alpha_A A_{max}$ または $m \geq \alpha_B B_{max}$ を満たすなら，2つのノードを接続し，サブクラスタ A と B を統合する.

サブクラスタへの分割処理において，ノイズなどの影響によりサブクラスタが誤って分割される場合がある．このような場合でも正しい再分割を行うために，アルゴリズム *4.2* では第1勝者ノードと第2勝者ノードが異なるサブクラスタに属す場合も，それらのノードを接続する機会を与えている.

E-SOINN の結果は SOINN の結果に比べて安定するが，これは以下の理由による．クラス間に低密度の重なりがある場合，SOINN はある程度それらを正しく分割できるが，分割に失敗して1つのクラスタを形成することもあり，結果が安定しない．一方，E-SOINN では低密度の分布の重なりを安定的に分離できる.

4.3 E-SOINN 全体のアルゴリズム

2. 及び 3. のまとめとして，E-SOINN 全体のアルゴリズムを述べる.

アルゴリズム *4.3*: Enhanced-SOINN (E-SOINN)

Step1. 入力ベクトル群からランダムに2つのベクトルを選択し，ノード集合 A をそれらに対応する2つのノードのみを含む集合として初期化する．また，辺集合 $C \subset A \times A$ を空集合として初期化する.

Step2. 新しい入力ベクトル $\xi \in R^n$ を入力する.

Step3. ξ に最も近いノード a_1(第1勝者ノード) 及び2番目に近いノード a_2(第2勝者ノード) を探索する.

$$a_1 = \arg\min_{a \in A} \|\xi - W_a\|$$
$$a_2 = \arg\min_{a \in A \setminus \{a_1\}} \|\xi - W_a\|$$

ここで，ξ と a_1 または ξ と a_2 の距離が類似度閾値 T_{a_1} または T_{a_2} より大きければ，入力ベクトルを新しいノードとしてノード集合 A に加え，Step2 に進み，次のベクトルを処理する．類似度閾値 T はアルゴリズム *3.1* によって算出される.

Step4. アルゴリズム *4.2* を用いて，a_1 と a_2 の間に接続が必要かどうかを判定し，アルゴリズム *4.2* に従って接続を生成する.

Step5. 式 (3) を用いて第1勝者ノードの密度を更新する.

Step6. 第1勝者ノードの累積入力数 M_{a_1} を1増やす.

$$M_{a_1} = M_{a_1} + 1$$

Step7. 第1勝者ノード及びその隣接ノードの重みベクトルを微少量 $\epsilon_1(t)$, $\epsilon_2(t)$ 及び入力ベクトルまでの距離を用いて更新する.

$$\Delta W_{a_1} = \epsilon_1(M_{a_1})(\xi - W_{a_1})$$
$$\Delta W_i = \epsilon_2(M_{a_1})(\xi - W_i)$$

ここで，ノード i はノード a_1 の隣接ノードとする．また，重みベクトルの更新は SOINN と同じ仕組みを用いて行う．すなわち，次の式を用いて，入力数に応じて学習率を変化させる.

$$\epsilon_1(t) = 1/t$$

表 1 入力環境

Area	Environment						
	I	II	III	IV	V	VI	VII
A	○	×	○	×	×	×	×
B	×	○	×	○	×	×	×
C	×	×	○	×	×	○	×
D	×	×	×	○	○	×	×
E1	×	×	×	×	○	×	×
E2	×	×	×	×	×	○	×
E3	×	×	×	×	×	×	○

$$\epsilon_2(t) = 1/100t$$

Step8. あらかじめ設定された閾値 age_t を超えた年齢を持つ辺を削除する.

Step9. これまでに入力されたベクトルの総数がパラメータ λ の倍数となった場合，以下を行う.

(a) 各ノードのサブクラスタのラベルをアルゴリズム *4.1* を用いて更新する.

(b) A に属す全ノードに対して，以下の手順でノイズに相当するノードを削除する.

(i) 隣接ノードを2つ持つ場合: ノードの密度が $c_1 \sum_{j=1}^{N_A} density_j / N_A$ 未満なら，ノードを削除する．ここで，N_A はノード集合 A の要素数である.

(ii) 隣接ノードを1つ持つ場合: ノードの密度が $c_2 \sum_{j=1}^{N_A} density_j / N_A$ 未満なら，ノードを削除する.

(iii) ノードが隣接ノードを持たない場合: ノードを削除する.

Step10. オンライン学習を終了するなら，アルゴリズム *3.3* を用いてノードの分類を行い，クラス数及び各クラスのプロトタイプベクトルを出力し，学習を停止する.

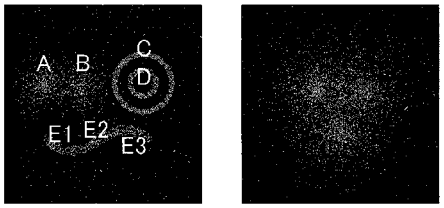
Step11. 学習を終了しない場合，Step2 に進み，学習を続ける.

5. 実　　験

5.1 人工データ

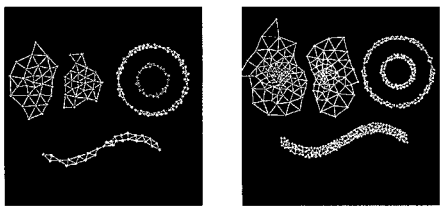
最初に，図3の (a) に示した人工データセットを用いて SOINN と E-SOINN の比較実験を行った．データセットは分布に重なりのある2つのガウス分布，2つの同心円，及びサインカーブの合計5つのクラスによって構成されている．また，実世界の環境を想定して，10%の一様ノイズが加えられている．SOINN では文献[6] において同じデータセットを用いた実験が行われ，定常的な環境及び非定常的な環境における実験ともに，5つのクラス及び各クラスの位相構造を適切に出力することが示された．ここで，定常的な環境では，データセット全体からランダムに入力ベクトルを与え，非定常的な環境では，データセットを図3の (a) に示す7つの領域に分け，一定期間ごとに入力環境を表1に従って切り替えながら入力ベクトルを与えた．非定常的な環境における実験はオンラインでの追加学習を想定して行われた.

同じデータセットを用いて，E-SOINN(パラメータは $\lambda = 100$, $age_t = 100$, $c_1 = 0.001$, $c_2 = 1.0$ とした．) による実験を行った．図4は定常的な環境及び非定常的な環境における実験結果である．どちらの環境においても，



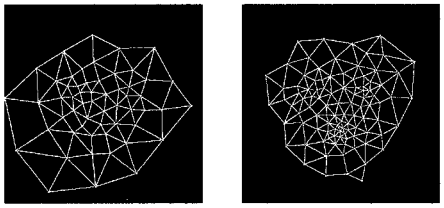
(a) 人工データセット I　(b) 人工データセット II

図 3 人工データセット



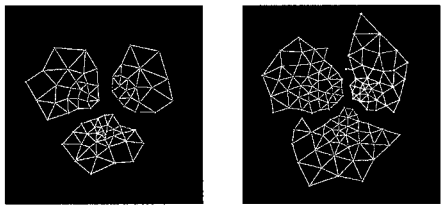
(a) 定常的な環境　(b) 非定常的な環境

図 4 データセット I における E-SOINN の結果



(a) 定常的な環境　(b) 非定常的な環境

図 5 データセット II における SOINN の結果



(a) 定常的な環境　(b) 非定常的な環境

図 6 データセット II における E-SOINN の結果

E-SOINN は 5 つのクラス及び各クラスタの位相構造を適切に出力した．これにより，E-SOINN が SOINN と同程度の機能を有していることが確認された．

次に，図 3 の (b) に示した人工データセットを用いて比較実験を行った．データセットは分布に重なりのある 3 つのガウス分布から構成され，10%の一様ノイズが加えられている．このデータセットは図 3 の (a) に示したデータセットに比べて分布に高密度の重なりを持つ．定常的な環境では，データセット全体からランダムに入力ベクトルを選択し，非定常的な環境では，各クラスから順にそれぞれ 10,000 回ずつ入力ベクトルを選択して学習を行った．

図 5 は SOINN(パラメータは $\lambda = 200$, $age_t = 50$, $c = 1.0$, $\alpha_1 = 1/6$, $\alpha_2 = 1/4$, $\alpha_3 = 1/4$, $\beta = 2/3$, $\gamma = 3/4$ とした．λ, age_t, c は実験により定め，α_1, α_2, α_3, β, γ は文献[6] と同様とした．) における結果である．これらの結果から，定常的な環境，非定常的な環境ともに，SOINN では高密度の重なりのあるクラスを分離できないことが分かる．図 6 は E-SOINN(パラメータは $\lambda = 200$, $age_t = 50$, $c_1 = 0.001$, $c_2 = 1.0$ とした．) における結果である．これらの結果から，E-SOINN では高密度の重なりを持つクラスを分離でき，3 つのクラス及び各クラスの位相構造を適切に出力することが分かる．

5.2 実データ

ここでは 2 種類の実データセットを用い，SOINN と E-SOINN の性能を比較する．

最初に，AT&T_FACE データベース (http://www.uk.research.att.com) を用いた比較実験を行った．データセットは，AT&T_FACE データベースから選択された 10 クラス (各クラス 10 サンプルを含む) を用いた．実験にあたって，オリジナルの画像を 23×28 ピクセルに縮小し，平滑化を行った画像を入力ベクトルとした．

定常的な環境では，入力ベクトルをデータセット全体からランダムに選択し，非定常的な環境では，各クラスから順にそれぞれ 1,000 回ずつ入力ベクトルを選択して学習を行った．定常的な環境，非定常的な環境ともに E-SOINN(パラメータは $\lambda = 25$, $age_t = 25$, $c_1 = 0.0$, $c_2 = 1.0$ とした．) はクラス数として 10 クラスを出力する場合が最多であった．また，そのとき得られたプロトタイプベクトルの一つを用い，文献[6] における SOINN の実験と同様に，オリジナルのデータセットの識別を行った．その結果，SOINN と同程度の認識率 (定常的な環境で 90%，非定常的な環境で 86%) が得られた．SOINN と E-SOINN で同程度の結果が得られたが，これはデータセットのサンプル数が少なく，クラス間の分布の重なりが低密度であるためと考えられる．これにより，E-SOINN は SOINN と同程度の機能を有していることが示された．

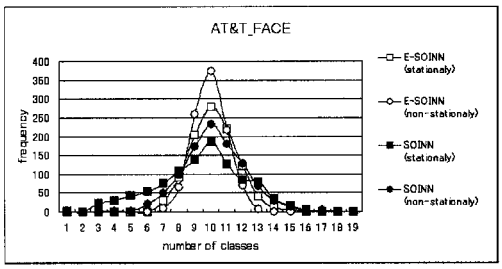


図 7 SOINN および E-SOINN の出力クラス数

SOINN 及び E-SOINN の安定性を比較するため，それぞれ 1,000 回ずつ実験を行い，出力クラス数の頻度を調べた．図 7 が SOINN 及び E-SOINN における結果である．この図は，定常的な環境及び非定常的な環境ともに E-SOINN は SOINN に比べて 10 クラス前後を出力する回数が多いことを示している．つまり，E-SOINN は SOINN に比べて安定していることが分かる．

更に，別の実データを用いて比較実験を行った．データとして，Optical Recognition of Handwritten Digits database (Optdigits) (http://www.ics.uci.

図 8 SOINN におけるプロトタイプベクトル

図 9 E-SOINN におけるプロトタイプベクトル

edu/~mlearn/MLRepository.html) を選択した．このデータセットは 10 クラスの手書き数字からなり，学習データとして 3823 個，テストデータとして 1797 個のサンプルがある．サンプルの次元数は 64 である．

まず，SOINN(パラメータは $\lambda = 200$, $age_t = 50$, $c = 1.0$, $\alpha_1 = 1/6$, $\alpha_2 = 1/4$, $\alpha_3 = 1/4$, $\beta = 2/3$, $\gamma = 3/4$ とした．λ, age_t, c は実験により定め，α_1, α_2, α_3, β, γ は文献[6] と同様とした．) による実験を行った．その結果，定常的な環境，非定常的な環境ともに，クラス数として 10 クラスを出力する場合が最多であった．図 8 は SOINN の結果におけるプロトタイプベクトルの一例である．ここで，SOINN で得られたプロトタイプベクトルを用いてテストデータの分類を行った．その結果，定常的な環境で 92.2%，非定常的な環境で 90.4%の認識率を得た．更に，SOINN について 100 回の実験を行い，クラス数の変動を調べたところ，定常的な環境，非定常的な環境ともに 6〜13 クラスが出力された．

次に，E-SOINN(パラメータは $\lambda = 200$, $age_t = 50$, $c_1 = 0.001$, $c_2 = 1.0$ とした．) による実験を行った．その結果，定常的な環境，非定常的な環境ともに，クラス数として 12 クラスを出力する場合が最多であった．図 9 は E-SOINN の結果におけるプロトタイプベクトルの一例である．図 8 と図 9 を比べると，数字の「1」を，SOINN では 1 つのクラスとして出力し，E-SOINN では 2 クラスに分けていることが分かる (同様に，E-SOINN では数字の「9」も 2 クラスに分けている)．オリジナルのデータセットにおいて，図 9 の 1 と 1' のようなサンプルの間には大きな違いがある (同様に 9 と 9' の間にも大きな違いがある) ため，E-SOINN ではこれらを分離したと考えられる．また，SOINN では図 9 の 1' や 9' のようなサンプルは抽出されていない．これらの結果から，E-SOINN では分布に重なりのあるクラス (図 9 の 1 と 1' や 9 と 9') を分離でき，オリジナルデータの情報を SOINN より適切に保存できることが示された．

更に，E-SOINN で得られたプロトタイプベクトルを用いてテストデータの分類を行った結果，定常的な環境で 94.3%，非定常的な環境で 95.8%という SOINN を超える認識率を得た．また，E-SOINN について 100 回の実験を行い，クラス数の変動を調べた結果，定常的な環境，非定常的な環境ともに 10〜13 クラスが出力され，SOINN より安定することが示された．

実データ Optdigits を用いた実験の結果から，E-SOINN は SOINN と比べ，分布に重なりのあるクラスを分離できること，高い認識率を得ること，及び安定性が高いことが示された．

6. むすび

本論文では，SOINN を改良した新しい手法として Enhanced-SOINN (E-SOINN) を提案した．提案手法は SOINN の持つすべての機能を実現できるため，オンライン教師なし学習が可能である．また，2 層構造で学習を行う SOINN に対して，E-SOINN は 1 層構造での学習を実現し，完全なオンラインでの追加学習が可能である．E-SOINN は，ノード間を接続する条件を与えることで，高密度の重なりのあるクラスを分離できる．また，ノードの挿入にあたってクラス間挿入のみを採用したことで，SOINN より 4 つ少ないパラメータで動作する．更に，平滑化の手法を導入したことで，SOINN より安定的に動作する．

残された課題として以下があげられる．E-SOINN は SOINN より少ないパラメータで動作するが，まだ 4 つのパラメータの値を決定する必要があり，これらのパラメータは学習結果に影響を与える．E-SOINN は SOINN より安定して動作するが，ノイズが多く，学習データが少ない場合には結果が安定しない．このため，いかなるタスクに対しても十分な安定性を持つとはいえない．将来的にはこれらの課題を解決する必要がある．

参考文献

1) T. Kohonen. "Self-Organized Formation of Topologically Correct Feature Maps," Biol. Cybern., vol.43, no.1 pp.59-69, Jan 1982.
2) T.M. Martinetz, S.G. Berkovich, and K.J. Schulten. ""Neural-Gas" Network for Vector Quantization and its Application to Time-Series Rrediction," IEEE Trans. Neural Networks, vol.4, no.4, pp.558-569, Jul 1993.
3) B. Fritzke. "A Growing Neural Gas Network Learns Topologies," In Advances in neural information processing systems (NIPS), vol.7, pp.625-632, 1995.
4) B. Fritzke. "A self-organizing network that can follow non-stationary distributions," Proceedings of ICANN'97, pp.613-618, 1997.
5) F.H. Hamker. "Life-long learning Cell Structures – continuously learning without catastrophic interference," Neural Networks, vol.14, no.4-5, pp.551-573, May 2001.
6) F. Shen and O. Hasegawa. "An incremental network for on-line unsupervised classification and topology learning," Neural Networks, vol.19, no.1, pp.90-106, Jan 2006.
7) F. Shen. "An algorithm for incremental unsupervised learning and topology representation," Ph.D thesis, 2006.
8) B. Fritzke. "Growing Cell Structures – A Self-organizing Network for Unsupervised and Supervised Learning," Neural Networks, vol.7, no.9, pp.1441-1460, 1994.
9) T. Martinetz and K. Schulten. "Topology representing networks," Neural Networks, vol.7, no.3, pp.507-522, 1994.