

解説

自己組織化マップ (SOM) の 化学分析データへの応用と SOM の周辺

徳高平蔵

鳥取大学工学部電気電子工学科 〒680 鳥取市湖山町南4丁目101

tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp

(1997年8月4日受付; 1997年8月21日掲載決定)

自己組織化マップ (SOM) は、コホネン [1] により始めて導入された。この SOM を AES、XPS、そして XRD (X 線回折) のような化学分析の問題に応用した。結果は大成功であった。ここに示すように SOM 法を使うことにより、今まで定性的に処理していたことをより定量的に記述出来ることが分かってきた。SOM 法の他の応用分野についても少し言及する。

Applications of Self-Organizing Maps (SOM) to the Data of Chemical Analysis and the Surroundings of SOM

Heizo Tokutaka

Department of Electrical and Electronic Engineering, Faculty of Engineering, Tottori University,
Koyama-Minami, 4-101, Tottori 680, Japan

tokutaka@ele.tottori-u.ac.jp

(Received August 4 1997; accepted August 21 1997)

Self-Organizing Maps (SOM) method which was developed by Kohonen [1] was introduced. The applications of SOM to the problems of chemical analysis, such as AES, XPS and XRD (X-Ray Diffraction) data were successful and it became clear that the things which are described qualitatively can be explained more quantitatively by using the SOM method. Other applications of SOM are also described.

1 はじめに

コホネンの自己組織化マップは、情報処理の分野ではあまりにも有名でよく使われる手法である。最初は 1984 年に「Self-Organization and Associated Memory」[1] として出版され中谷和夫先生らによる訳本が「自己組織化と連想記憶」として 1993 年に出版された [1]。この時に初めて単行本として SOM (自己組織化マップ) と LVQ (学習ベクトル量子化) の概念が整理され発表された。以後の SOM と LVQ の工学的応用は目を見張るものがある。それには、そのソフトが SOM.PAK、および LVQ.PAK (<http://nucleus.hut.fi/nnrc/nnrc-programs.html>) としてコホネンの研究所よりインターネットを通して誰でも自由に最新のバージョンが手に入ると言うことが大いに影響している。

さて、以後の SOM および LVQ の発展に新たに焦点を当ててコホネンは「Self-Organizing Maps」を 1995 年に出版した [2]。その第 9 章に SOM および LVQ の応用例が約 1300 件に渡る膨大な参考文献として紹介されている。私共は以前から SOM および LVQ に興味を抱いており、その工学的応用に焦点を当てて研究に取り

組んでいる。だから、この新しい本が世に出た時、これは、私にとっては研究上のバイブルだと感じ、私共のグループ全員で翻訳にかかった。およそ 1 年後の昨年の 6 月に「自己組織化マップ」としてシュブリンガー・東京から出版されている [2]。その訳者前書きにも書いたが、「動くもの、動かないもの、そして、工学はもちろん、医学、農学、さらには社会科学の領域まであらゆる分野に応用できる脳の機能を模した視覚的情報処理の決定版、関係技術者、研究者、必携の書」と言うのが正直、私がこの本を訳した感想である。我々は主に、データ整理や処理に使っており、その結果の幾つかは後で紹介する。

さて、ニューラル・コンピューティングとして使われているニューラルネットワークは、ラメルハートらが導き出した階層型 BP (誤差逆伝搬型) とホップフィールドが発展させた相互結合型に分かれる [3]。コホネンのネットワークは階層型であり、そのネットワークは入力層と出力層の 2 層のみからなっている。動物の感覚様相の情報処理 (位相マップ化) は、主として大脳皮

質で行われている。脳での学習は教師なし学習である。つまり、最初(生まれた時)にランダムに配置された脳の処理ユニットは入力(刺激)によって学習し長時間経た後には、外界からの入力信号にうまく追従するように反応する。これをコホネンは学習アルゴリズムに活用している。以下、順を追って見てみよう。

2 SOM法とは

さて、コホネン [1, 2] は、生物の神経細胞、主として脳の情報処理の仕方を以下のような簡単な式にまとめて整理した。

$$m_i(t+1) = m_i(t) + h_{ci}(t)[x(t) - m_i(t)] \quad (1)$$

この式の意味は、いま神経細胞(ノード) i が時刻 t で処理している情報処理能力を $m_i(t)$ とすると、外部から入力信号 $x(t)$ が入ってきた。このとき、細胞は、この入力信号を学習して次の時刻には入力信号により近い情報処理能力 $m_i(t+1)$ を持つようになる。この時 $x(t)$ は n 次元の入力ベクトルであれば、要素 $x(t) = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n]$ を持つ。また、 $m_i(t)$ は参照ベクトルとも呼ばれ n 次元の要素 $m_i(t) = [\mu_{i1}, \mu_{i2}, \dots, \mu_{in}]$ で表される。そして、 $h_{ci}(t)$ は近傍関数で後で考察する。なお、 $t = 0, 1, 2, \dots$ は離散時間座標である。

さて、式(1)の関係から分かるようにSOMは2層のネットワークである。この第1層は n 次元の入力層 $x(t)$ であり第2層は出力を視覚的に見るため普通2次元に配列されている。第2層の競合層のベクトルは参照ベクトル $m_i(t)$ で表され、入力層の次元に合致し n 個の要素を持っている。この様子をFig.1に表している。学習は次の様になされる。入力ベクトル $x(t)$ は、ある測度、例えばユークリッド距離 $|x - m_i|$ を最小にするノード i を探し、それに添え字 c を付ければこれは以下の式で定義される。

$$c = \arg \min |x - m_i| \quad \text{、つまり}$$

$$|x - m_c| = \min |x - m_i| \quad (2)$$

式(2)で決められた参照ベクトル $m_c(t)$ を持つユニットを勝者ユニットと呼ぶ。式(1)で学習が進む時、近傍関数 $h_{ci}(t)$ は以下のように定義する。Fig.2のように勝者 c の回りに近傍集合を用意する。(a)、(b)どちらでも問題に合わせて近傍の形は考える。さて、近傍のサイズは $N_c = N_c(t)$ で時間の関数である。どちらの場合でも学習の初期には近傍を大きく取っておき、学習が進んでくると段々に近傍のサイズを減らして行く。最後には、勝者ユニットのみを学習させるようにする。式(1)による学習中、 N_c 内のノードに関しては、 $h_{ci} = \alpha(t)$ で N_c 外のノードに関しては、 $h_{ci} = 0$ である。この時、

$$m_i(t+1) = m_i(t) + \alpha(t)[x(t) - m_i(t)]$$

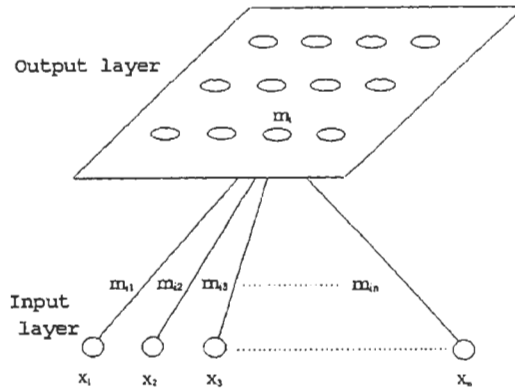


Fig.1: The connection between the multi-dimensional input vector and the reference vector m_i (unit) i

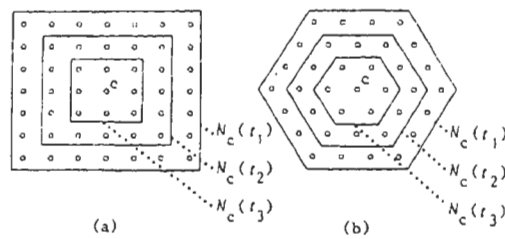


Fig.2: a,b. Two examples of topological neighborhood ($t_1 < t_2 < t_3$) (from Fig.3.2 of ref.[2])

Table.1: Animal names and their attributes (from Table 3.4 of ref.[2])

		d	h	d	g	h	a	w	t	i	l	h	z				
		o	e	u	o	a	g	o	c	l	o	e	e				
		v	n	c	s	w	l	f	a	g	e	r	b				
		c	k	e	e	k	e	x	t	r	n	s	c				
													o				
													w				
is	small	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
	medium	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
	big	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1
has	2 legs	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	4 legs	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	hair	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	hooves	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1
	mane	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1	1	0
	feathers	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	hunt	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	0	0
likes	run	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1	1	1	0
	fly	1	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
to	swim	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

$\alpha(t)$ の値を学習率係数と呼び、 $0 < \alpha(t) < 1$ で値を持つ。 $\alpha(t)$ と N_c の大きさは両方とも学習時間が経つにつれて普通、単調減少させる。 $\alpha(t)$ は例えば次の式で定義しても良い。

$$\alpha(t) = \alpha_0(1 - t/T) \quad (3)$$

ここで、 α_0 は、 α の初期値であり普通 0.2~0.5 の値を選ぶ。 T は行われるべき学習での予定された全更新回数である。ただし、式 (1) 中、比例係数の $\alpha(t)$ は、学習の始めでは大きな値を取るようにし、学習が進んでくるとだんだんと小さい値に設定する。結局、以上の議論をまとめて $h_{ci}(t) = N_c(t)\alpha(t)$ と考えた方が分かりやすいかも知れない。

コホネンの SOM アルゴリズムを整理すると以下のようになる。

1. 入力ベクトルと最も良く一致する競合層での勝者ユニット (参照ベクトル) を探す。
2. この勝者ユニットの近傍のユニットを式 (1) に従って更新する。学習 (更新回数) が進むにつれて、近傍のサイズを減らし、また学習率係数の値も例えば式 (3) のようにして減らして行く。

SOM 法は多次元データを 2次元にマップ化する時に威力を発揮する。また、NP 完全問題 (入力の長さに対して指数関数的な計算時間を要する問題) として有名な巡回セールスマン問題 (TSP) は多次元 (多くは 2次元)

データを 1次元にマップ化したものであり併せて以下に述べる。

3 SOM の簡単な応用例

3.1 多次元入力から 2次元 SOM マップの作成

多次元入力から 2次元 SOM マップを作成する例として Table 1 の例を考えて見よう。これは色々な動物をそれぞれ 13次元の属性で区別する。各属性は有れば 1、無ければ 0 の値を持つ。つまり、各動物はそれぞれ 13次元の入力ベクトルを持つ。それを、例えば 10×10 の 2次元ニューロン・ユニットを持つ SOM マップに射影すると、Fig.3 のようになる。図から分かるように 16 の動物は、属性関係の類似なものがよりまとまって仕分けされている。例えば、「鳥」は格子の左側に集まっており、「tiger」、「lion」、「cat」の様な「狩猟者」は右側でまとまり、そして「zebra」、「horse」、「cow」のような「平和的」な動物は格子の上側に配置されている。

この Fig.3 の例は非常に応用範囲が広い。例えば、動物名をある会社の従業員の氏名で置き換え、そして属性を色々な試験、例えば適性検査 1, 2, 3, ..., n や性格テスト 1, 2, 3, ..., m を点数で表したものとす。これらのテスト結果を属性として入力データとすればやはり $n + m$ 次元を 2次元 SOM マップへ射影することが出来る。その結果、よく似た属性を持つ人達がグループ化される属性マップが得られる。そのマップを利用して現実の人事配置との差を考えて、人が適性

に配置されているかどうかの判断に使用出来る。なお、Fig.3 の例では、属性値が 0, 1 で表されていたが、入力値としては、テストの点数のように実数値を用いても良い。マップ作成時には、それぞれの属性項目で規格化して使用する。

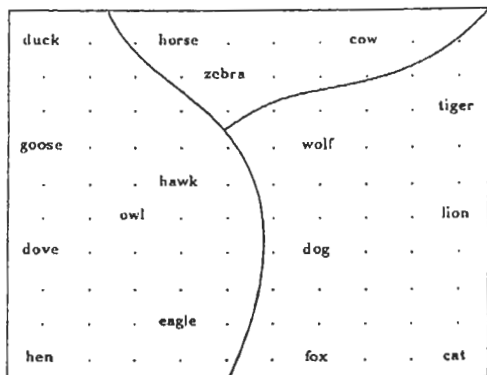


Fig.3: After the network had been trained with inputs describing attribute sets from Table 1, the map was calibrated by the columns of Table 1 and labeled correspondingly. A grouping according to similarity has emerged (from Fig.3.22 of ref.[2])

3.2 SOM の化学分析データへの応用

さて、以下に Fig.3 をまた最大限に利用する他の具体例として化学分析での測定スペクトルへの応用を考えてみる。まず 3.2.1 では組成分析、3.2.2 では形態分析、3.2.3 では形態分析ではあるが XRD(X 線回折) というご承知のように非常に孤立的 (discrete) なスペクトルへも結構有効である例を紹介する。

3.2.1 SOM の AES データへの応用 [4]

ここでは、Fig.4 のオージェ電子分光分析 (AES) のグラフを考えてみよう。先程の Fig.3 の例では、13 次元の要素があったが、この AES の例では、横軸のエネルギーきざみを次元と考える。しかし、あまり次元数は大きくは取れないので、この例では、とりあえず 10eV づつ平均して 20~982eV 迄をほぼ 100 次元にした。縦軸が信号の大きさである。Fig.3 の例では 0, 1 で信号値を表現しているが、この Fig.4 の AES の例では、0 と 1 の間の値が信号値になっている。Fig.3 と同様の自己組織化マップ (SOM) を描き、そのユニット (ニューロン) 間の距離をグレー (灰色) レベル (そこでは距離がある所は灰色が濃くなる) で表したものをグレーマップと呼ぶが、結果を Fig.5 に示す。Fig.5 から分かるよう

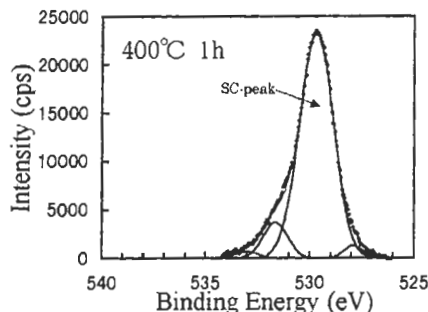


Fig.7: A standard O-1s XPS spectra from Bi-based single crystal which is heated and cleaned at 400 °C for 1 hour. In the figure, SC-peak means the O-1s XPS peak from single crystal

に Co-Ni 系の合金は、Ni100%から Co100%まで非常に系統的に並んでいるのが分かる。そして、グレーレベルでははっきりと示されているように距離はかなりあるが、Cu が次に並んでいる。さらに Ag, Au とつづいており、それぞれグループを形成している。

さて、今まではバックグラウンドを引いたり、ピーク分離をしたりして AES のグラフを解釈していた。しかし、この方法によればスペクトルの形をすべて同等の価値を持った情報として取り扱っている。実験で得られた AES グラフを用いて Fig.5 のように Co-Ni 合金は見事に系統的に分離されている。

3.2.2 SOM による Bi 系高温超伝導体の形態分析 [5]

実験データとしてまず XPS の例をとった。Bi 系高温超伝導体の単結晶、セラミクス、薄膜の試料表面を加熱によって清浄化し不純物を除去した。この清浄化の様子を酸素 (O₂) の XPS の変化で調べている。結果を Fig.6 に示している。この場合には、横軸の結合エネルギー 300 点 300 次元としてとらえ、縦軸を規格化した信号値とした。劈開した単結晶を 400 °C で加熱した表面からの O₂ の信号 (Fig.7 に示す) を標準として SOM マップを描かせると Fig.8 のようになった。Fig.8 に示すように、右上がりピーク、ダブルピーク、左上がりピークを持つ各グループがグレーレベルで示された濃い灰色の谷をはさんでそれぞれグループ化されているのが分かる。興味深いことに、右上がりのピークのグループには、温度を上げて熱処理したものが集まっている。400 °C で加熱した清浄表面からの標準試料に近いものは、単結晶、その近くにセラミクスが配置し、薄膜では 700 °C、800 °C で熱処理したものがセラミクスの隣りに配置されている。ところがダブルピークや左

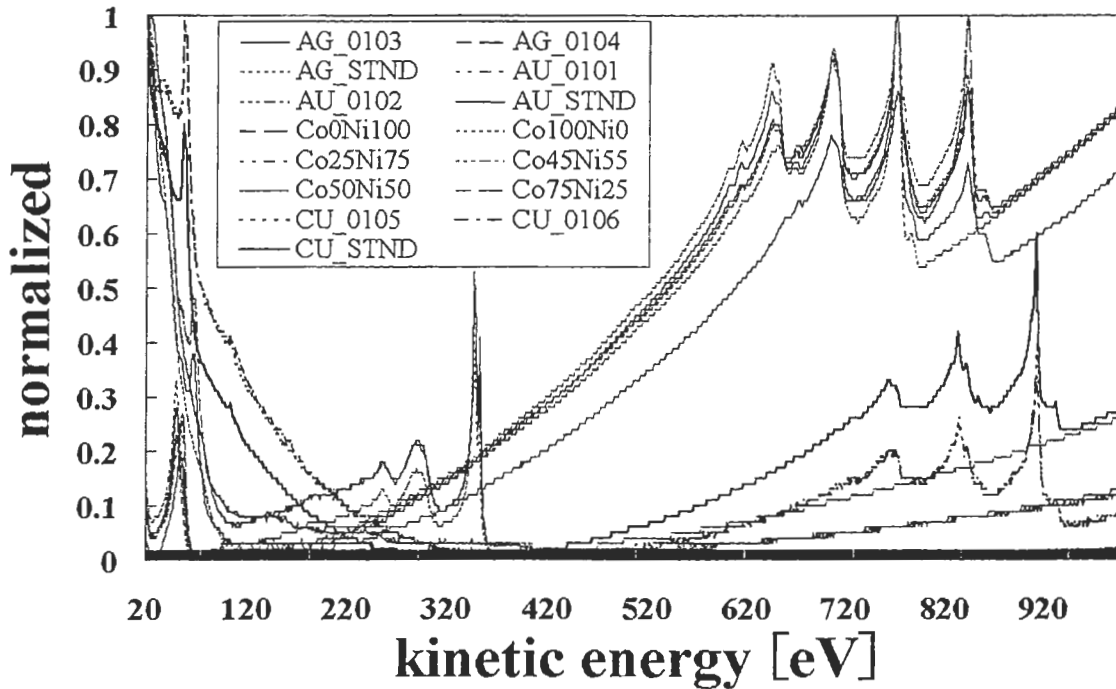


Fig.4: All AES data of 15 materials from 20 to 1,000 eV, where STND is the abbreviation of standard

上がりのピークに属するグループのものは、それぞれのピーク形状ではままとまっているが、その各グループ内では配列にまとまりがない。つまり、単結晶、セラミクス薄膜としてもグループ化されていないし、熱処理温度でもグループ化されていない。これは、左上がりやダブルピークの場合には、表面に不純物が残っているために、材料特有の性質よりも表面不純物からの影響が強いことが分かる。

3.2.3 SOMのXRD(X線回折)データへの応用 [5]

他の応用例として薄膜からのXRDの結果にこのSOM法を使った。X線回折グラフ(XRD)の実験データをFig.9に載せている。図中には調べたい薄膜のSample1、Sample2からのXRDの結果を載せている。同時に標準サンプルとしての2223(110K相)、2212(80K相)単結晶薄膜からのXRDの結果も載せている。この図から判断すると、第4番目の回折ピーク(22.5°付近)がSample1、Sample2とも合っていないので、2212(80K相)ではないだろうと言うことは大体予想は出来る。さて、得られたSOMマップの結果をFig.10に載せる。これからも分かるように2212(80K相)は他の材料と比較しても深いグレーレベルの谷で囲まれている。このことからSample1、Sample2は2212(80K相)ではないだ

ろうと言うことは分かる。しかし、Sample1、Sample2は2223(110K相)とは薄いグレーレベルでつながっている。ただSample1の方がより2223(110K相)に近く、Sample2の方が遠いと言うことが、この結果から分かった。ここには結果を示していないが抵抗-温度(R-T)特性の結果ともこの解釈は一致する。

3.3 2次元入力-1次元マップ(巡回セールスマン問題)への応用

配置された都市を最短距離で結ぶ巡回セールスマン問題(TSP)では、Angeniol[6]の方法により非常な成果を出している。これは、2次元に配置された都市を1次元につないだユニット(ノード)を都市の座標を提示することに学習してノードは都市に近づいて行く。今、Fig.11のように都市*i*が提示された時、図のように1次元につながれたノードの内、一番都市*i*にユークリッド距離で近いノードが探され学習時に都市*i*に一番強く引き寄せられる。そして、図のように左右どちらに離れたノードも離れる程度に反比例してより少ない量だが都市*i*に引き寄せられると言うアルゴリズムである。TSPはホップフィールドを始めとして色々な方法で試みられているが、私の経験から言わせて貰えば、この

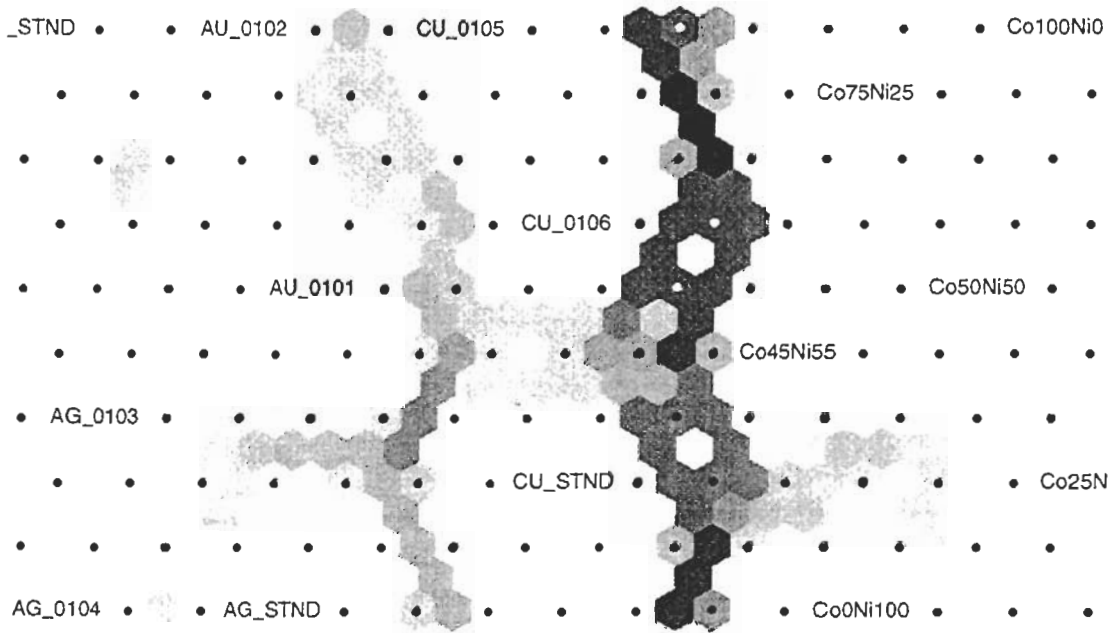


Fig.5: Two dimensional SOM map of 15 materials using their AES data of Fig.4

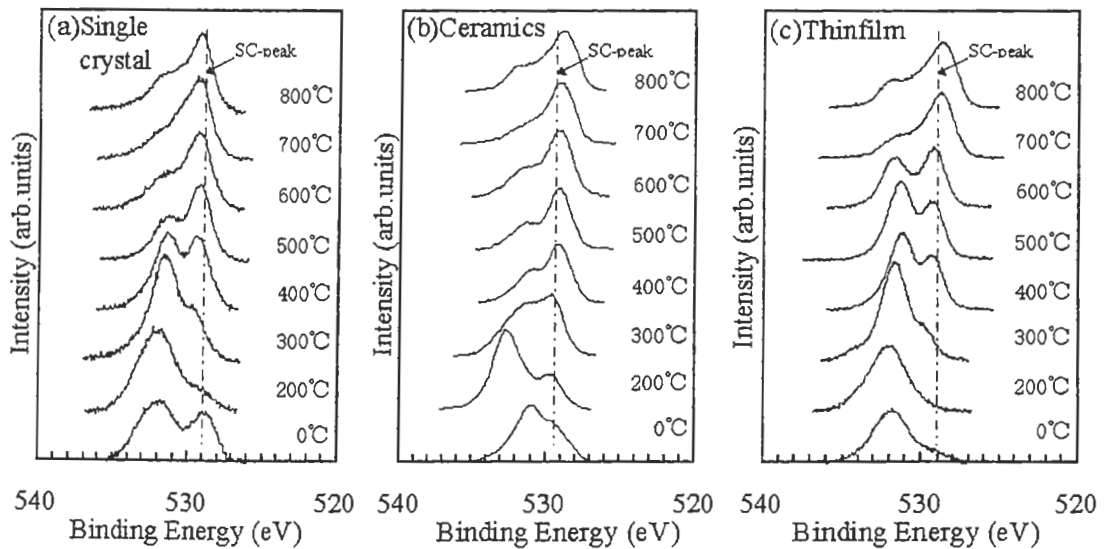


Fig.6: Changes of O-1s XPS spectra from Bi-based single crystals, ceramics and thin films during thermal annealing processes

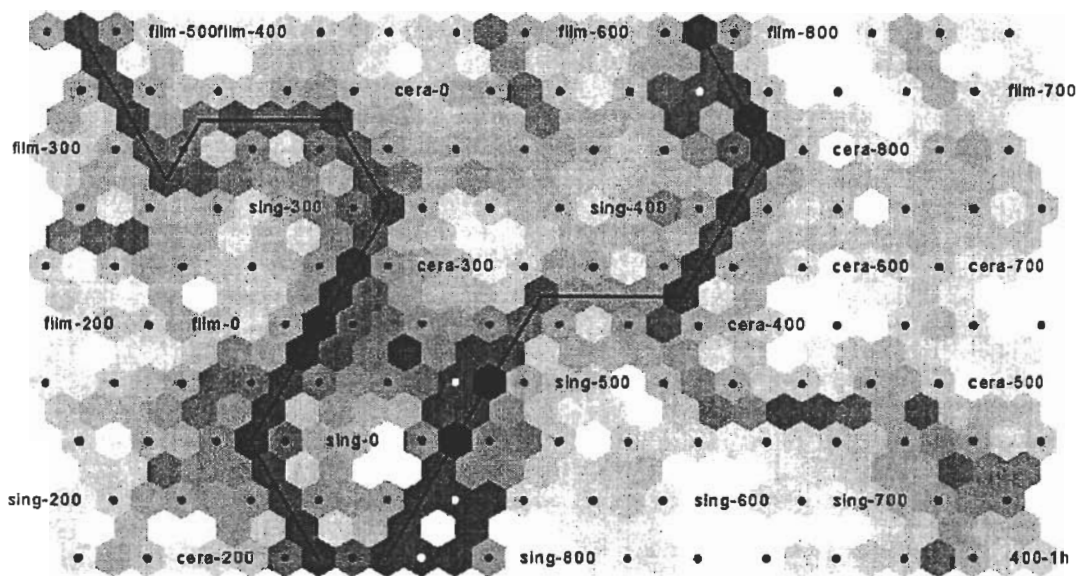


Fig.8: A SOM classification map using XPS data of Figs.6 and 7, where O-1s XPS spectra from the air-cleaved Bi-based single crystal surface which is annealed for 1 hour at 400 °C are used as a standard and indicated as 400 °C-1h

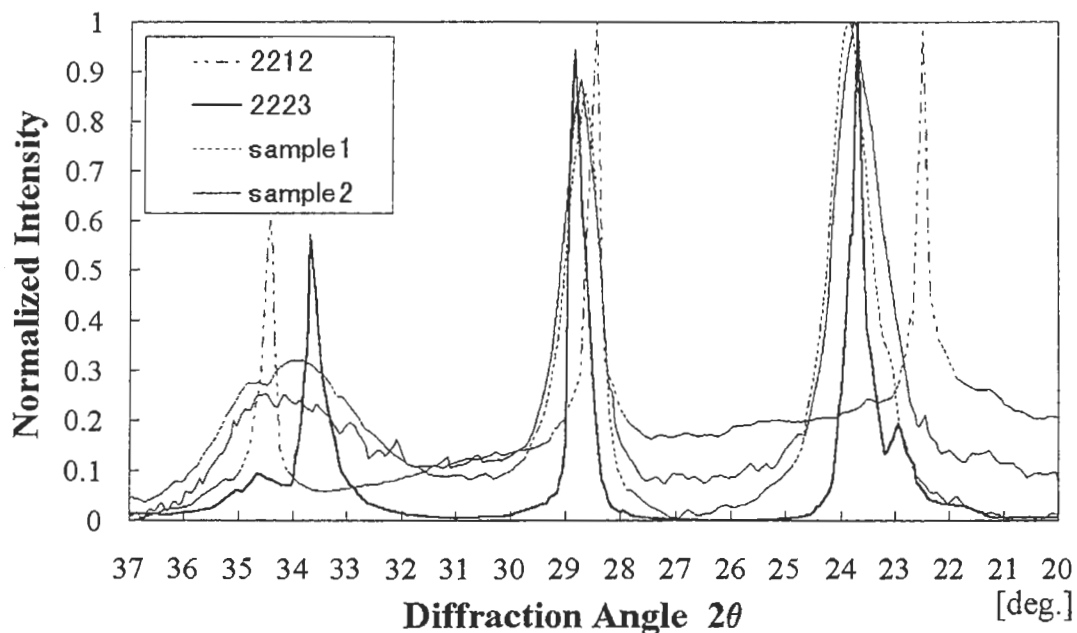


Fig.9: XRD (X-Ray Diffraction) patterns of Bi-based thin films. In the experiments, the films which are approximately the single-phases of 80 K phase (2212) and 110 K phase (2223), are used as a standard. Samples 1 and 2 are usually obtained at specialized conditions

SOMによる方法が一番簡単でかなり正解に近い解が得られる非常に有効な方法の一つであると考えている。

我々はこの方法を米国 532 都市のベンチマーク問題 [7] に応用して最適解より 2.7 % 悪いだけの非常に良い結果を得ている [8]。これを実際の問題としてプリント基板でのドリルによる孔開け問題に応用した。結果を Fig.12 に示す。Fig.12 の例では、(b) の実際の例のルートの方が、(a) の SOM 法による場合よりも 1.25 倍だけ移動距離が長くそれだけ時間もかかる。すなわち、(a) 法では 50 枚出来ているのに (b) 法ではまだ 40 枚しか出来ていないと言うことである。

4 学習ベクトル量子化 (LVQ) 法について

コホネンは SOM の特徴マップをクラス分け問題に発展させた。今、入力ベクトル $x(t)$ が用意された色々なクラス S_i の中で特にクラス S_r に属するものとする。この時、最も近い勝者ベクトル $m_c(t)$ はクラス S_r によってラベルづけされるものと仮定する。よって学習則は、正しく分類された場合には報酬を与え、誤って分類された場合には罰を加えると言うような教師つきの学習アルゴリズムとし、次のように定義される。

$$\begin{aligned}
 m_c(t+1) &= m_c(t) + \alpha(t)[x(t) - m_c(t)] \\
 &\quad \text{もし } S_i = S_r \text{ ならば} \\
 m_c(t+1) &= m_c(t) - \alpha(t)[x(t) - m_c(t)] \\
 &\quad \text{もし } S_i \neq S_r \text{ ならば} \\
 m_i(t+1) &= m_i(t) \\
 &\quad \text{但し, } i \neq c
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

なお、この場合、学習則からも分かるように SOM のような近傍と言う概念はなくて選ばれた勝者ベクトル $m_c(t)$ のみが修正される。修正の方向は、分類が正しい場合は正 (+) で、間違っている場合には負 (-) であ

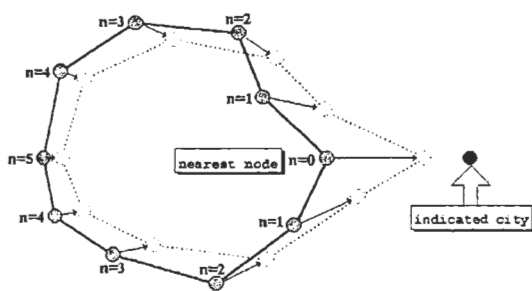


Fig.11: The movement of the node string, when the city is indicated

る。この方法はより詳細に発展されて LVQ2、LVQ3、OLVQ 法などが発表されている [1, 2]。

5 まとめ

Fig.3 は、多次元 → 2 次元への射影マップの代表的な例であるが、これは非常に広範囲で利用されている。ここでは化学分析スペクトルデータを中心に紹介した。また、SOM 法による TSP の解法は、他のニューロコンピューティングの方法と比べても非常にアルゴリズムが簡単で、また短時間で非常に有効な最適解を得ることが出来る。人間の脳はなんらかの方法で空間マップ化を行っているが、このように、この自己組織化マップの方法は、式 (1) のように非常に簡単なアルゴリズムでありながら脳の空間マップ化の情報処理の仕方に非常によく似ているので、いろいろなデータ解析の分野に応用され成功している。その多くの例は文献 [2] で紹介されているので参考にしていただきたい。

参考文献

- [1] T.Kohonen, "Self-Organization and Associative Memory" (Springer Series in Information Sciences, Volume 8, 1984).
T. コホネン, "自己組織化と連想記憶" 中谷和夫 監訳 (シュブリンガー・フェアラーク東京, 1993).
- [2] T.Kohonen, "Self-Organizing Maps" (Springer Series in Information Sciences, Volume 30, 1995).
T. コホネン, "自己組織化マップ" 徳高平蔵, 岸田 悟, 藤村喜久郎 訳 (シュブリンガー・フェアラーク東京, 1996).
- [3] 上坂吉則, "ニューロコンピューティングの数学的基礎" (近代科学社, 1993).
- [4] 徳高平蔵, 吉原一紘, PSA-97 実用表面分析講演会予稿集 (1997) 22.
- [5] 岸田 悟, 岩本和之, 徳高平蔵, 藤村喜久郎, PSA-97 実用表面分析講演会 予稿集 (1997) 30.
- [6] B.Angeniol, G.de la C.Vaubois and J.Y.Le Texier, Neural Networks 1 (1988) 289.
- [7] M.Padberg and G.Rinaldi, Operations Research Lett.6 (1987) 1.
- [8] 前納貴俊, 田中慎一, 藤村喜久郎, 徳高平蔵, 岸田 悟, 電子情報通信学会技術報告 NC96-63 (1996-12) 41.

質疑応答

査読者 福島 整 (無機材研)
高橋邦夫 (東工大)

福島 整 (無機材研)

この解説は、自己組織化マップの紹介及び概念の把握に役立つ内容であると考えます。スペクトルの形状変化をパターン認識的にとらえて分類する作業を効率よく行えることは、データベース構築・検索上の問題だけでなく、スペクトル変化の議論を行う上でも大きな助けとなります。その意味でも、この様な方法の紹介と応用への試みは大きく評価されて良いでしょう。ただ、残念ながら、情報処理の専門用語や基礎概念が多く用いられており、まったくの初心者にはこれでもまだ難解なのではないかと少々危惧している次第です。内容に関するいくつかの質問を、以下にまとめます。

本方法で作成された自己組織化マップ (SOM) は、データ間の情報距離を用いて作成されたデンドログラム (樹形図) と基本的に同じものであると考えられます。ただし、作成するシステムが学習能力を持っていること、デンドログラムが基本的に類似する2点の結合から成り立つのに対し、本方法では類似する2点以上の複数を包含する領域を明示しているところに特徴があると思われま

1. まず、この SOM の応用についておたずねいたします。

質問1 例えば Fig.5 に示された SOM について、グレースケールのもっとも明るい (白い) 領域がいくつかあります。これは、距離がある基準より小さい情報 (データ) が集まった領域を示しています。Fig.5 では、白い領域には1つのデータしか分類されていませんが、例えば複数の情報 (データ点) が一つの領域に分類されたとき、それらの点同士の SOM 上での距離はどのような意味を持つのでしょうか。また、同一の SOM 上の異なる領域間のデータ点の距離はどのような意味を持つのでしょうか。

回答1 私は、SOM を次のように考え説明したいと思います。ここで使用している多次元データの2次元へのマップ化は、例えば、Figs.3,5,8,10 でのマップ上の各点を椅子取り競争での椅子と考えて下さい。年のせいが出てくる名前は往年のスターばかりで申しわけありませんが、例えば、映画俳優の三国連太郎、高倉健、三船敏郎、仲代達也、田中絹代、

京マチ子、香川京子、岸田今日子、…… (入力信号として) がいたとします。彼らがそれぞれ何処かの椅子を占めますと彼らのファン (最初は、多次元ベクトルの各成分とも乱数で出発するが、学習中に入力ベクトルに影響されて各成分ともどれかの入力ベクトルを目指してクローン化されて行く) もそれぞれお目当てを目指して座るものとします。学習の始め (ゲームの始め) では Fig.2 での近傍範囲が大きく黒沢映画で一時期非常に人気のあった三船敏郎のファンは三国連太郎、仲代達也、京マチ子のファンをも取り込み引き寄せます。しかし、学習が進みますと (ゲームも佳境に入ると) Fig.2 での近傍範囲も狭まり (すなわち、三船の周りの椅子の数も少なくなり) 三船の周りは熱烈な彼のファンだけで占められます。他のファンも同様に「私は良く考えると仲代のファンだった、田中のファンだった」と言いながらそれぞれのお目当ての周りに集合して行きます。そして、最終的に決められた学習の最後に占められた座席表が Figs.3,5,8,10 であるとお考え下さい。例えば、Fig.5 でラベルづけされていない Co50Ni50 のすぐ右隣の席 (ユニット) を開けば Co50Ni50 に非常に近いスペクトル (Co50Ni50 の熱烈なファン) を示すはず

質問2 系統的に成分が変化している一連の参照試料から得られたデータ (例えば、Fig.5 の Co-Ni 合金系) により SOM を作成し、成分のみ既知な新たな試料のデータを付け加えたとき、データの S/N の問題が無視できる場合に成分比の決定はどの程度 (真の値からのずれ、あるいは信頼区間の真値に対する大きさなどを考慮した場合) 可能でしょうか

回答2 現在、実験中であります。例えば、CoNi 合金には、6つの試料データがありますが、今、Ni が55%のデータを未知とし残りの5つの試料データを使って SOM マップを作り、未知の55%に一番良く合うユニットを探すと一つの実験では Ni の組成 55.26%を示し、そのユニットは実際のスペクトルと殆ど一致します。

質問3 AES あるいは XPS の場合と、XRD の場合では、SOM の示している内容 (実際に比較している内容の意味合い) が違っているように思われます。XPS や AES では、たとえまったく同じ物質でも表面形態の違いでスペクトルが変化しますが (例えば、単体金属表面で、単結晶の劈開面とプラズマ処理した場合の違い等) これはほとんどの場合がバックグラウンドの出方の違いによるものです。しかし、

XRD ではこの様なバックグラウンドの大きな違いが出にくいので、直接測定スペクトルへ応用してもクリアカットなデータが得られるのではないかと考えられます。したがって XPS S や AES の場合、SOM でもバックグラウンドの変化もコミでの議論となることはさげられない (バックグラウンド処理無しのスペクトル形状変化の議論はできない) と考えますがいかがでしょうか。

回答 3 現在行っている質問 2 で回答した実験ではバックグラウンド有りの場合と無しの場合で実験を行っております。しかし、試料がこの論文にも使用している 1 研究機関、1 種類であれば、どちらも同等に学習します。つまりバックグラウンドありでも回答 2 での実験は全く同等に行えます。しかし、複数機関からのデータを使用して回答 2 の実験を行う場合には作成された SOM マップのロバスト性 (例えば耐久性) は、まだ実験を行っていないので不明です。

さて、ご質問に焦点をしばらくお答え致しますと、表面形態の違い (単結晶の劈開面とプラズマ処理した場合の違い等) でスペクトル、バックグラウンド共に影響を受け変化しその変化が再現性が有る場合には、SOM はスペクトルその通りを学習するのでこのような形態分類には SOM は非常に有利であると考えています。

2. 次に、SOM を作成するためのプロセスについておたずねいたします。

質問 4 情報距離には、ユークリッド距離が用いられています。しかし、情報距離には、このほかにもマハラビノスの距離などいくつかの方法があります。この様な方法の応用の是非、あるいは距離算出法を変えた場合の SOM への影響についてはいかがでしょうか。あるいは、情報距離のかわりに相互相関を用いた場合はいかがでしょうか。

回答 4 ご承知のように一番一般的なのはユークリッド距離です。その他の距離測度としては、目的によってベクトル間の角度を問題にする場合には方向余弦、コード表現の一致度を比較する場合にはハミング距離、また記号列間の距離を測るのにはレーベンシュタイン距離、実験心理学で用いる都市ブロック距離、文書間の関連性を表すタニモトの測度、ファジィ論理で用いられるルカシービッチ測度、ご指摘のマハラビノスの距離は入力共分散行列の逆行列で重み付けしたベクトル空間の距離のことで、このようにそれぞれ必要な情報を引き出

すためにこの他にも色々な距離測度が考案されています。SOM 法ではどのような問題が出てきても対応出来るように一番一般的なユークリッド距離が使用されています。

質問 5 ユークリッド距離の 2 乗は、基本的に二つのスペクトルを差分比較した場合の残差の 2 乗和と同じです。したがって、かなりノイズに強いというメリットがあるかと考えます。しかし、測定スペクトルそのままの比較が、必ずしも形状分類に適しているかどうか疑問に思えます。なぜなら、位置情報 (化学シフトは別として、チャージアップの違いや装置の調整の差等) の影響も無視できなくなるからです。したがって、情報距離を求める手順にさらなる工夫が必要と考えられますいかがでしょうか。例えば、比較部分の距離が最小になるようにスペクトルをシフトさせて求めた距離を用いる、重心の位置を一致させて距離を計算する、等。

回答 5 おっしゃる通りだと思います。この論文では形態分類の一応の可能性を述べましたが、より細かい議論をするときには目的に応じたより肌理の細かいスペクトルの処理が必要だと思います。

質問 6 前項と関連した質問ですが、距離を求める為に用いるスペクトルを最大値で規格化しています。しかし、これはスペクトル相互の形状比較には適していないと考えられます。なぜなら、最大値により規格化されたデータの各点の強度の比較はそのスペクトルのみで意味を持つからです (規格化の基準がスペクトルごとに異なる)。したがって、面積強度で規格化する (分光器を通じて観測される全信号エネルギーでの規格化) などの工夫をしないかぎり、物理的に正確な意味を持つ形状比較にはならないと思われまいかでしょうか。

回答 6 まず試みとして規格化値を使って見ました。問題によっては記述されているような方法が必要かもしれせん。

高橋邦夫 (東工大)

本論文は、SOM について解説し、表面分析への適応例をあげ、その有用性を示している。将来の可能性を考慮すると積極的に掲載すべき内容の解説と言える。しかし、いくつかの点において記述が不十分であるため、このまま掲載しても、表面分析の分野の研究者が SOM 法をトレースすることは不可能であり、JSA に掲

載する意味は無いと考えられます。下記の点について 回答 9 c とは、Fig.1 の例えば $3 \times 4 = 12$ 個の出力ユニット中で、今、入力された $x(t)$ 、例えば Table 1 の例では、今、fox (キツネ) の入力ベクトル (上から読んで 0100110001000) を入力した時、学習の段階でそれに一番近い $m_i(t)$ を持つユニットのことを勝者ユニット c と呼んでいます。

質問 7 p.2, 左コラム下から 20 行目「第二層の競合層のベクトル」は、(1) 2次元に配列される。(2) n 個の要素を持っている。旨が記述されているが、 n 個の要素を持っている量を、2次元に射影する際の手続きに関する記述が無い。そのため、Figs.1,3,5,8,10 の意味がまったく不明である。また、数行上で、 $m_i(t)$ を情報処理能力と定義していたが、ここでは、参照ベクトルと呼んでいる点も理解不能である。

質問 10 p.2, 左コラム下から 7 行目から 6 行目で近傍のサイズ N_c を定義しているが、これが、スカラー量なのかベクトル量なのか、全く別な量なのか不明。

回答 7 後の質問も含めてまず全般的にお答え致します。この論文は、SOM の解説を目的としたものではなく、SOM 法が化学分析と言うかスペクトル解析を含む応用物理の分野でかなり興味有る結果が得られそうだとする可能性を見るために書きました。このため、限られた頁数で SOM に重点を置いた解説をするのは中々困難な技です。しかし、以上を差し引いても SOM についてのもう少し上手な説明法あると思うのですが、今回はこれで我慢して下さい。以後に努力して見ます。なお、SOM についての卑近な説明を回答 1 で紹介させて頂きました。ご参考下さい。

回答 10 Fig.1 ではユニット数が $3 \times 4 = 12$ 個で、Fig.2 のユニット数がそれよりもずっと多くて誤解を生んでいるようです。Fig.2 が見た目の数の上からも実際適用出来るのは、実際の応用例の Figs.3,5,8,10 であります。Fig.3 の $10 \times 10 = 100$ ユニットの 경우에는、Fig.2(a) の例に相当し、Figs.5,8,10 の $15 \times 10 = 150$ ユニットの 경우에는、Fig.2(b) の形の近傍ユニットの例を使います。 N_c とは、式 (2) で決定された勝者 c の周りの近傍サイズのことで、学習が進むと (時刻 t が大きくなると) だんだんと影響サイズを Fig.2 に示しているように減少させて行きます。これを減少させて行く場合の卑近な例に関しては、先程の福島氏への回答 1 での SOM の説明の時にさせて頂きました。

$m_i(t)$ を情報処理能力とか参照ベクトル (reference vector の一般的な訳) とか呼んでいます。これは入力の数によって準備する数が経験的に決まっています。Fig.3 の例では 10×10 で 100 個の参照ベクトル (先の説明では、スターに引き寄せられるファン) を準備しています。

質問 11 Fig.2 について上記、近傍のサイズ N_c が不明な件に関連して、Fig.2 の中には、四角い枠が N_c であるととれるイラストがあるが、さらに読者を惑わしている。さらに、p.3, 左コラム下から 14 行目の式をみるとここでは N_c が、何らかのスカラー量かベクトル量であることを伺わせているが、上記の記述と矛盾しており理解できない。

質問 8 p.2, 左コラム下から 16 行目から 10 行目「...ノード i を探す」と記述があるが、ノード i は m_i によって決まるはずである。 m_i は無限に考えられるが、どういう集合から m_i を探すのか記述が無い。

回答 11 質問 10 の回答と重複しますので省略させて頂きます。

回答 8 Fig.1 を使いながら説明しています。Fig.1 に示した出力層 (競合層) は、その形から当然、Figs.3,5,8,10 を表しているものと理解されると思ったのですが...

質問 12 p.3 以後全ての記述について、上記の手続きを明確に記述していないため、全ての記述が意味不明である。

ここで、言葉の定義を再確認しておきますと、Fig.1 での出力層の i 番目のノードの学習中、時刻 t での情報処理能力 (参照ベクトル) を $m_i(t)$ と表しています。

回答 12 質問 7~10 での回答で説明させて頂きましたので省略させて頂きます。

質問 9 p.2, 左コラム下から 13 行目から 11 行目で近傍集合 c を定義しているが、どんな要素からなる集合であるかの記述が無いため、意味が不明。

質問 13 全ての数式に置いて、スカラー量とベクトル量の区別が必要。(ベクトル量は bold face. 特に、 $h_{ci}(t)$, $N_c(t)$ が不明.) 以上。

回答 13 おっしゃる通りベクトル量とスカラー量が区別出来るように bold スタイルに変更しておきます。

読者の方々には貴重なご意見をどうも有り難うございました。著者の回答で十分に意を尽くしているとはなはだ疑問ではございます。しかし、この論文を読まれた読者とのやりとりで以後の議論を続けたいと考えております。なおこの場合、議論の場は、JSA のメール掲示板で行ってもかまいませんし、論文初頁にあります著者のアドレスに直接メールを頂いても結構です。よろしくお願ひ致します。なお、SOM に関する一般的な学習書としては、是非共、参考文献 [2] をご利用下さい。