Medical Association Rule Mining Using Genetic Network Programming

Kaoru Shimada Student Member (Waseda University, k.shimada@ruri.waseda.jp)

Rouchen Wang Non-member (Waseda University, zyaku@akane.waseda.jp)

Kotaro Hirasawa Member (Waseda University, hirasawa@waseda.jp)

Takayuki Furuzuki Member (Waseda University, jinglu@waseda.jp)

Keywords: Evolutionary Computation, Genetic Network Programming, Data Mining, Association Rule, Classification

An efficient algorithm for building a classifier is proposed based on an important association rule mining using Genetic Network Programming (GNP). The proposed method measures the significance of the association via the chi-squared test. Users can define the conditions of important association rules for building a classifier flexibly. The definition can include not only the minimum threshold chi-squared value, but also the number of attributes in the association rules. Therefore, all the extracted important rules can be used for classification directly. GNP is one of the evolutionary optimization techniques, which uses the directed graph structure as genes. Instead of generating a large number of candidate rules, our method can obtain a sufficient number of important association rules for classification. In addition, our method suits association rule mining from dense databases such as medical datasets, where many frequently occurring items are found in each tuple. In this paper, we describe an algorithm for classification using important association rules extracted by GNP with acquisition mechanisms and present some experimental results of medical datasets.

Association rule mining is the discovery of association relationships or correlations among a set of attributes in a database. Association rule in the form of ‘If X then Y ($X \Rightarrow Y$)’ is interpreted as ‘database tuples satisfying that X (antecedent) are likely to satisfy Y (consequent)’. In this paper, we deal with a given consequent specified by the user. Let A_i be an attribute (item) in a database and its value be 1 or 0, and Z be the set of class labels. The proposed method extracts the following association rules: $(A_m = 1) \wedge \dots \wedge (A_n = 1) \Rightarrow (Z = C)$, ($C = 0, 1, 2, \dots, K$) Attributes in the database correspond to judgement nodes in GNP, respectively. We are able to represent the connection of nodes as association rules and nodes are reused and shared with some other association rules because of GNP’s feature.

Fig. 1. GNP for association rule mining

GNP examines the attribute values of database tuples using judgement nodes and calculates the measurements of association rules using processing nodes. The measurements include support (frequencies of occurring patterns) and confidence (strength of implication). Fig.1 shows a basic structure of GNP. P_1 is a processing node and is a starting point of association rules. N is the number of total tuples, and a , b , c and d are the numbers of tuples moving to Yes-side at each judgement node. In addition, each judgement node examines the ‘ $Z = C$ ’. For example, in Fig.1, the number of tuples ‘ b ’ indicates $support((A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1))$, and GNP calculates $support((A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \wedge (Z = 1))$ at the same time. Using $support((A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \wedge (Z = 1)) = b(Z = 1)$, support and confidence of rule $(A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \Rightarrow (Z = 1)$ are obtained $b(Z = 1)/N$ and $b(Z = 1)/b$, respectively. As $support(Z = 1)$ is known in advance, we also can obtain the chi-squared value of the rule $(A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \Rightarrow (Z = 1)$. Extracted rules are stored in a pool all together through the generations. The rules can be used for classification directly, because they satisfy the conditions of importance. We propose two methods to build a classifier from the extracted rules, and have performed experiments and estimated the performance.

遺伝的ネットワークプログラミングを用いた医療関連ルールの抽出

学生員 嶋田 香* 非会員 王 若晨*
正員 平澤 宏太郎* 正員 古月 敬之*

Medical Association Rule Mining Using Genetic Network Programming

Kaoru Shimada*, Student Member, Rouchen Wang*, Non-member, Kotaro Hirasawa*, Member,
Takayuki Furuzuki*, Member

An efficient algorithm for building a classifier is proposed based on an important association rule mining using Genetic Network Programming (GNP). The proposed method measures the significance of the association via the chi-squared test. Users can define the conditions of important association rules for building a classifier flexibly. The definition can include not only the minimum threshold chi-squared value, but also the number of attributes in the association rules. Therefore, all the extracted important rules can be used for classification directly. GNP is one of the evolutionary optimization techniques, which uses the directed graph structure as genes. Instead of generating a large number of candidate rules, our method can obtain a sufficient number of important association rules for classification. In addition, our method suits association rule mining from dense databases such as medical datasets, where many frequently occurring items are found in each tuple. In this paper, we describe an algorithm for classification using important association rules extracted by GNP with acquisition mechanisms and present some experimental results of medical datasets.

キーワード：進化型計算，遺伝的ネットワークプログラミング，データマイニング，関連ルール，クラス分け

Keywords: Evolutionary Computation, Genetic Network Programming, Data Mining, Association Rule, Classification

1. はじめに

関連ルール⁽¹⁾は、データマイニング⁽²⁾の一手法であり、関係データベースにおいて属性（アイテム）間にみられる関係に注目したものである。関連ルールは「 $X \Rightarrow Y$ 」の形で表現され、 X, Y に属性に関する条件が入る。これは、あるレコードが X （前提部）を満たせば Y （結論部）も満たすというような事実を表現しようとするものである。Agrawalら⁽³⁾によって提案された関連ルール抽出のアルゴリズム（アプリアリ法）によれば、サポート（レコードの出現頻度）と確信度（ルールを構成する属性の結びつきの強度）を指標として、ユーザの指定した基準を満たす関連ルールを導出することができる。しかしながら、密なデータベース⁽⁴⁾を扱うなどのアイテムの出現頻度が高くなる場合には計算量が指数関数的に増えること、計算量を抑えようとすると

重要なルールを失うなどの問題がある。また、関連ルールの興味深さの指標に関する問題も指摘されている。Brinら⁽⁵⁾はサポートと確信度の両者が、どの程度の値を満たせば興味深いルールであると判断できるかという客観的な基準は存在せず、これらは関連ルールの重要度の判断には適当でないと指摘し、統計学で用いられる χ^2 値を指標とする方法に注目している。しかし、 χ^2 値を算出する際に必要となる関連ルール的前提部・結論部のサポートをどのように効率よく扱うかという問題があり、関連ルールを構成する属性数が増加した場合には対応が困難となる。

これらの問題点を改善すべく、我々は進化論的計算手法の1つである遺伝的ネットワークプログラミング（Genetic Network Programming, GNP）^{(6)~(8)}を用いた関連ルールの抽出方法⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾を提案している。GNPは、関連ルール抽出への応用にあって有益と考えられる次のような特徴をもっている。

- グラフ上のノードの再利用／共有が可能であり、探索空間を有効に構成できる。
- GNPにおける1つのノードが関連ルールの1つの属性を表し、ノードの連結とその遷移を関連ルールと対応させることができる。

* 早稲田大学大学院情報生産システム研究科
〒808-0135 福岡県北九州市若松区ひびきの2-7
Graduate School of Information, Production and Systems,
Waseda University
2-7, Hibikino, Wakamatsu-ku, Kitakyushu, Fukuoka, 808-0135, Japan

- 興味深い相関ルールを抽出することができた場合、そのルールの一部を遺伝的操作によって変化させ、さらなるルールの探索が可能である。

GNP を用いた相関ルール抽出方法では、相関ルールの結論部を構成する属性を自動的に設定するものと、結論部の属性を予め指定して抽出するものがある⁽⁹⁾が、これらの手法には、次のような特徴がある。

- 相関ルールのサポートと確信度を GNP を用いて直接算出することができる。統計学で用いられる χ^2 値の算出についても GNP の構造上の特性を活かして直接行うことができる。
- アプリオリ法のように頻出アイテム集合のすべてのサポートを記憶しておく必要はないため、各レコードに多くのアイテムが含まれる密なデータベース⁽⁴⁾からのルール抽出が可能になる。
- ユーザが定義した興味深さの指標に基づいた相関ルールを抽出する。興味深さの定義には相関ルールの χ^2 値やルールを構成する属性数を含めることができる。また、GNP の適合度は、興味深さの指標を反映した関数を設定することができる。
- 通常の進化論的計算手法にみられるような最良の個体(解)を発見することを目的とはせずに、GNP の各世代の個体が抽出した興味深い相関ルールを相関ルールライブラリーに蓄積する方式である。すべてのルールを抽出することはできないが、指定した世代終了時点で蓄積されている興味深い相関ルールをユーザは活用することができる。

ところで、相関ルールを用いて分類や予測を行う手法も提案されている⁽⁴⁾⁽¹¹⁾。これらは、結論部を予め指定して抽出した相関ルールを利用してクラス分け問題を扱う。従来手法においては、サポートと確信度を指標として相関ルールを抽出した後、これらの相関ルールから、分類に適した相関ルールの集合を作成して分類を実行している。このため、信頼度の高い分類を行うための相関ルールの集合の作成方法が課題となる。我々の提案している GNP を用いた相関ルール抽出では、 χ^2 値の指標を含むユーザの定義した興味深い相関ルールのみが抽出されるため、抽出された相関ルールを直ちに分類に用いることができる。

本論文では、結論部の属性を予め指定した相関ルールを GNP を用いた興味深い相関ルール抽出法によって抽出し、さらに抽出された相関ルールを用いた分類手法を提案する。GNP を用いた相関ルール抽出法は、密なデータベースからの相関ルール抽出に適すること、興味深さの指標に χ^2 値を用いていること、などの特徴から医療系のデータベースへの応用が有効であるため、実際の医療系のデータセットを用いて提案手法の評価を行っている。

本論文の構成は以下の通りである。第 2 章で GNP の基本構成、遺伝子表現および進化方法について概説する。また、第 3 章はデータマイニングの一手法である相関ルールと指標について、さらにこれを用いた分類問題について説

明する。第 4 章では、GNP を用いた興味深い相関ルール抽出の方法と抽出されたルールを用いた分類方法を提案し、第 5 章はシミュレーション結果とその考察を述べる。第 6 章はまとめである。

2. 遺伝的ネットワークプログラミング (GNP)

本章では遺伝的ネットワークプログラミング (Genetic Network Programming, GNP)⁽⁶⁾⁻⁽⁸⁾ について概説する。GNP は、進化型計算手法の 1 つであり、ノードをネットワーク状に接続することによって、プログラムの自動生成を行う。

GNP の基本構造を図 1 に示す。GNP は、判定ノード (Judgement node)、処理ノード (Processing node) の 2 種類のノードからなり、有向グラフの構造になっている。ノード間の接続と遷移によりプログラムが生成される。判定ノードは判定内容が記載されているノードであり、入力に従って、予め設計者の用意したとおりに分岐を行う。処理ノードは、GP の終端記号に対応づけることができるが、環境に対して行う処理など、扱う問題に応じて設計者の用意した処理内容が記載されている。図 1 において、 J_n は判定ノード用のライブラリーに記載されている n 番目の判定内容 (関数) を示しており、同様に P_n は処理ノード用のライブラリーに記載されている n 番目の処理内容 (関数) を示している。図 1 の S は初期起動ノードでありただ 1 度だけ使用される。

GNP の遺伝子表現は、全ノードにそれぞれ固有なノード番号 i が与えられており、ノード番号 i の遺伝子の構成が図 2 で示されている。図 2 の各変数を以下に示す。

- NT_i : 種別遺伝子
(0: 初期起動ノード, 1: 判定ノード, 2: 処理ノード)
- ID_i : 判定・処理内容遺伝子
(GNP のライブラリーに示されている判定、処理内容のコード番号)
- C_{ij} : 接続遺伝子
(ノード番号 i から分岐する j 番目のノード番号)

また、GNP の進化方法として、次に示す通常の方法を使用する。

- 突然変異: 親個体のノードの接続先の変更とノード関数の変更を確率的に行い子個体を生成する。
- 交叉: 親個体間の対応するノードの接続先とノード関数を確率的に交換し子個体を生成する。
- 再生: エリート保存選択, トーナメント選択を併用する。

3. 相関ルール

本章では、データマイニングの手法の 1 つである相関ルール (association rule)⁽¹⁾⁽²⁾ と相関ルールを用いた分類について概説する。

3・1 相関ルールとサポート・確信度 関係データベースにおいて、1 つのレコードがある条件を満たすか否かの判断をテストとよぶことにする。 X と Y をテストとす

図 1 GNP の構造

Fig. 1. Basic structure of GNP.

図 2 GNP の遺伝子構造 (ノード番号 i)Fig. 2. Gene structure of GNP (node i).

るとき、相関ルールとは、 $X \Rightarrow Y$ と記述できる関係であり、「あるレコードが X を満たせば Y も満たす」というような事実を表現しようとするものである。 X は相関ルール的前提部 (antecedent)、 Y は結論部 (consequent) とよばれ、データベース中で、 X と Y の両方を満たすレコードの割合を相関ルールのサポート (support)、 X を含むレコードのうち Y を含むものの割合を確信度 (confidence) という。例えば表 1 において、 $(A = 1) \wedge (C = 1) \Rightarrow (D = 1)$ のサポートは 0.25、確信度は 0.5 である。

サポートと確信度は、相関ルールの重要度を評価する指標として用いられている。Agrawal ら⁽³⁾ は、サポートと確信度がそれぞれユーザによって与えられたしきい値以上である相関ルールを興味深いルールとして抽出するアプリアリ法 (apriori algorithm) を提唱している。アプリアリ法は、サポートと確信度の条件を満たす頻出アイテム集合をすべて抽出するため、この集合の数が巨大になる場合にはコンピュータの処理能力の問題が生じてくる可能性もある。アプリアリ法の効率を向上させるために、ハッシュを用いるなど多くの手法⁽¹²⁾ が提案されている。

3.2 相関ルールとカイ 2 乗値 相関ルールのサポートと確信度の両者が、どの程度の値を満たせば興味深いルールであると判断できるかという客観的な基準は存在せず、前提部と結論部の相関関係の判断には適当でないとの指摘が Brin ら⁽⁵⁾ によってなされている。Brin らは統計学で用いられる χ^2 値 (chi-squared) を指標とする方法に注目しており、これを用いたアルゴリズムを提唱している。相関ルール $X \Rightarrow Y$ において、 X 、 Y および $X \wedge Y$ を満たすレコード数の割合 (サポート) をそれぞれ x 、 y および z とし、レコードの総数を N とする。表 2 は、 X と Y が独立しており同じレコード内に含まれるのが偶然であると仮定したときの期待度数 (上段) と、実際のレコード数である観測度数 (下段) を示したものである。この分割表に対して、

表 1 データベースの例

Table 1. An example of database.

TID	A	B	C	D
1	1	0	1	0
2	0	1	1	1
3	1	1	1	1
4	0	1	0	1

表 2 分割表

Table 2. The contingency of X and Y .

	Y	$\neg Y$	$\sum_{row}$
X	N_{xy} N_z	$N(x - xy)$ $N(x - z)$	N_x
$\neg X$	$N(y - xy)$ $N(y - z)$	$N(1 - x - y + xy)$ $N(1 - x - y + z)$	$N(1 - x)$
$\sum_{col}$	N_y	$N(1 - y)$	N

$$T = \sum_{\text{全セル}} \frac{(\text{観測度数} - \text{期待度数})^2}{\text{期待度数}} \dots \dots \dots (1)$$

とすると、 T は自由度 1 の χ^2 分布に従うことが知られている。これに表 2 の各値を代入すると、

$$T = \frac{N(z - xy)^2}{xy(1 - x)(1 - y)} \dots \dots \dots (2)$$

となる。 T の値によって、 X と Y の相関を判断するが、ある有意水準を定めて相関ルールの取捨を行うことができる。例えば、有意水準を 5% とすると $T > 3.84$ 、1% とすると $T > 6.63$ であればその相関ルールは興味深いものとして抽出できる。

3.3 相関ルールを用いた分類 相関ルールを分類問題に応用する場合には、訓練用データベースから抽出された相関ルールの集合を用いて分類がなされる。通常の相関ルールの抽出とは異なり、結論部を分類したいクラスに制限してルールの抽出を行うため、これに特化した抽出法が提案されている⁽⁴⁾。分類の基本的な方法として、相関ルールを確信度やサポートを用いてランク付けしておいて、評価用のレコードに対して最初に適合した相関ルールを適用するものがある。しかし、適合するルールがない場合には、デフォルトのクラスになるなどの問題があるため、分類の精度を向上する各種の手法が提案されている。Liu ら⁽¹¹⁾ は、クラス相関ルール (CARs, class association rules) を抽出して分類を行う CBA 法 (classification based on associations) を提案している。CARs は、連続型属性があればこれを離散化して整数属性で表されるアイテムとして扱い、結論部が分類に用いられる属性に限定された相関ルールである。指標には、サポートと確信度を用い、最小サポートが 1%、最小確信度が 50% 以上の CARs を抽出している。最小サポートの設定は、分類の特性に強い影響を与える。値が大きすぎると精度が下がり、小さすぎると訓練用データへの過学習を起こしやすくなる。CBA 法で

は、確信度の大きなルールから分類ルールを構成する。分類の評価には、10-fold cross validations を用いている。これはデータベース全体をランダムに 10 分割し、そのうち 9 グループを訓練用に、残りの 1 グループを評価用に用いる方法である。この試行を 10 回行い、平均の誤分類率を算出する。また、Antonie ら⁽¹³⁾ は、確信度が大きい相関ルールの集合を作り、対象となるレコードについて相関ルールの条件部をみたすすべてのルールについて分類を行い、各クラスに分類したルールの確信度を用いた得点を比較して最終的な分類結果を得る方法を提案している。

4. GNP を利用した相関ルール抽出と分類

本章では、GNP を応用して、データベース中に存在する興味深い相関ルールを抽出し分類問題に適用する方法を提案する。提案手法においては、通常の進化論的計算手法のように最適な個体（解）を発見するものではなく、初期世代から最終世代までの間に、進化を遂げながら存在した全個体の中から興味深い相関ルールの抽出を実行する。したがって、特定の世代において個体内部に興味深いルールを数多く含む個体が発見するのではなく、たとえこのような個体でも未知の興味深いルールを数多く獲得すべく積極的に変化をとげていき、このようにして各世代で出現する興味深いルールを相関ルールライブラリーに蓄積する方式である。

4.1 データベースと相関ルールの抽出 相関ルールの前提部を構成する属性（アイテム）を条件属性、結論部を構成する属性を目的属性とよぶ。条件属性は 1 または 0 の値をとり、目的属性はクラスに応じた整数値 (0, 1, 2, ..., K) をとる。したがって、対象となるデータベースは表 1 のような形態となる。抽出する相関ルールは、 A_i を条件属性、 Z を目的属性として、目的属性を特定の Z の属性値に固定した「 $(A_m = 1) \wedge \dots \wedge (A_n = 1) \Rightarrow (Z = C)$ 」, ($C = 0, 1, 2, \dots, K$) を対象とする。とくに、本論文では条件属性の属性値を 1 としているが、GNP の遺伝子の設定によって、属性値が 0 の場合を含めて指定することもできる。

4.2 GNP と相関ルールの対応 1 つの条件属性を GNP の 1 つの判定ノードで表現する。指定した属性値であるかどうかを判定し、Yes/No に 2 分岐する。また、処理ノードは固有の順番が付けてあり、相関ルールの管理や諸指標の算出を行う。相関ルールの抽出に用いる GNP の基本構造を図 3 に示す。図中の $A_1 = 1, A_2 = 1, A_3 = 1$ および $A_4 = 1$ は判定ノードの判定内容を表しており、それぞれのノードで指定された条件属性の属性値と目的属性の属性値を調査する。後述するように、図 3 のノード接続によって、 $(A_1 = 1) \Rightarrow (Z = C), (A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \Rightarrow (Z = C), (A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \wedge (A_3 = 1) \Rightarrow (Z = C), (A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \wedge (A_3 = 1) \wedge (A_4 = 1) \Rightarrow (Z = C)$ のサポート、確信度および χ^2 を算出することができる。このように「1 つの処理ノードを始点とする一定個数以内の判定ノードの連結の範囲」で「相関ルールの前提部の集団」を

表現し、データベースのレコード 1 つずつについて、GNP のノードを処理ノードから順に遷移していく。例えば、あるレコードについて $A_1 = 1, A_2 = 0$ であれば、 $A_1 = 1$ を満たすが、 $A_2 \neq 1$ なので、図 3 において P_1 から遷移を始めて P_2 に達することになる。図 3 の処理ノード P_1 を通過したレコード数を N とし、この N 個のレコードのうち、判定ノード群を Yes 側に進んだレコード数を図中の位置で判定ノードが調査して a, b, c および d とする。ここで、例えば、図 3 で示したレコード数 b のうち、さらに目的属性が「 $Z = 1$ 」となるレコード数 $b(Z = 1)$ を調査する。これら $b, b(Z = 1)$ が、 $(A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \Rightarrow (Z = 1)$ についての、表 2 における Nx および Nz に対応し、この相関ルールのサポートは $b(Z = 1)/N$ 、確信度は $b(Z = 1)/b$ となる。同様に、図 3 で示したレコード数 d のうち、さらに目的属性が「 $Z = 1$ 」となるレコード数 $d(Z = 1)$ を調査する。これら $d, d(Z = 1)$ より、 $(A_1 = 1) \wedge (A_2 = 1) \wedge (A_3 = 1) \wedge (A_4 = 1) \Rightarrow (Z = 1)$ のサポートは $d(Z = 1)/N$ 、確信度は $d(Z = 1)/d$ となる。判定ノードを No 側に進む場合は、探索中の次の順番の処理ノードに接続し、次の判定ノード群の探索を行うことになる。判定ノードを Yes 側に連続して遷移する場合は、処理ノードから遷移したノード数が予め指定した個数、すなわち相関ルールの前提部を構成する属性数の最大に達したら、判定ノードの判定結果に関わらず次の順番の処理ノードに接続する。

GNP のノードの接続は、判定ノードの Yes 側の接続は必ず判定ノードとし、No 側の接続先は、探索中の処理ノードの次の順番の処理ノードとする。したがって、同一の判定ノードに遷移してきても、どの処理ノードに関連したレコード調査を行っているかによって No 側の接続先の処理ノードは変わってくる。また、処理ノードは、判定ノードに接続するものとする。これは、予め判定ノードだけでネットワークを構成しておき、あとから処理ノードを組み込んだことに相当する。判定ノードの Yes 側の接続からなるネットワークは、ループを形成していたり、特定の判定ノードに複数の判定ノードから接続していてもよい。

GNP の探索は、第 1 番目の処理ノード P_1 からスタートし、すべての処理ノードについてレコード調査を終えたらレコードを更新し、また P_1 に戻る。規定のレコードを探索したら、サポートや確信度、 χ^2 値を計算して一世代を終える。この探索はレコードごとに全個体について平行して進める。各世代で求めた興味ある相関ルールは、逐次、新規かどうかを判定する。このとき、同一の属性がルール内で重複して用いられているかどうかの確認を行う。新規の場合は、サポートや確信度、 χ^2 値などの値とともに、世代間に共通の相関ルールライブラリーに蓄積していく。

4.3 GNP の適合度 興味深い相関ルールとして、サポートと χ^2 値を用いて、例えば、

$$\chi^2 > \chi_{min}^2 \dots\dots\dots (3)$$

$$support \geq sup_{min} \dots\dots\dots (4)$$

図3 関連ルールと GNP

Fig. 3. GNP for association rule mining.

の基準を満たす関連ルールを抽出する。ただし、 χ_{min}^2 , sup_{min} はユーザが指定する χ^2 値, サポートの最小値である。また, 結論部が $Z = C$ ($C = 0, 1, 2, \dots, K$) であるとき, 目的属性が $Z = C$ となるレコードの頻度よりも関連ルールの確信度が大きい場合のみを抽出する。これらの条件を満たすルールが抽出された時点で, 未抽出であるかどうかを判定し, 新規の場合には, 関連ルールライブラリーに加える。各個体の適合度 F は, 未抽出の興味深い関連ルールを次世代において抽出することが期待できる個体ほど大きな値をもつように設定するため, 次のような個体を高く評価する。

- 新規の興味深い関連ルールを抽出できた個体
 - 新規ではなくても興味深い関連ルールを多く含む個体
- また属性数に関しては,
- ルールを構成する属性数が多い興味深い関連ルールを含む個体ほど高い適合度とする。

こうした観点から, 適合度 F には抽出の基準を満たす関連ルール i の χ_i^2 値とルール i の前提部を構成する属性数 $n(i)$ を用いる。また, その関連ルール i がライブラリーにない場合は, ルール i を次世代に残す価値が高いとして α_{new} を加算するものとする。したがって,

$$F = \sum_{i \in I} \{\chi_i^2 + 10(n(i) - 1) + \alpha_{i_{new}}\} \dots \dots \dots (5)$$

を適合度とする。ここで, I は (3) 式かつ (4) 式の興味深い関連ルールの基準を満足する GNP 個体の関連ルールの添字の集合である。また,

$$\alpha_{i_{new}} = \begin{cases} \alpha_{new} & (\text{ルール } i \text{ が新規の場合}) \\ 0 & (\text{ルール } i \text{ が新規でない場合}) \end{cases} \dots \dots \dots (6)$$

と表される。

4.4 GNP の進化 GNP の進化では, 各個体の適合度の値が大きいものだけを選択する。未抽出の関連ルールを獲得するために, 選択された全個体について, 交叉または突然変異を行う。遺伝子は, 判定ノードの遺伝子群と, 処理ノードの遺伝子群に区分して, それぞれのノード群内で交叉と突然変異の操作を行う。突然変異には, ノードの接続先をランダムにかえる突然変異 1 と, 判定ノードの属性を別の属性に交換する突然変異 2 の 2 通りを考える。特

に後者は, 興味深い関連ルールが抽出されたときに, 例えば前提部の属性を変えたルールの評価を行うことを可能にする。なお, 突然変異や交叉による接続先の変更は, 前世代の個体内に存在する興味深い属性の組合せの一部を組みかえて新しいルールの候補を作り出すことに対応する。適合度によって, 上位 1/3 の個体を選択し, それらを 3 個ずつ再生し, 交叉, 突然変異 1 および突然変異 2 の 3 種類の遺伝子操作を行う。

進化の操作方法について, GNP の個体数が 120 の場合について, 具体例をあげて説明する。120 個体中, 適合度の高い 40 個体をランク付けして選出し, 各個体を 3 個ずつ再生する。その後, 交叉, 突然変異 1 (接続先の変更), 突然変異 2 (ノードの交換) により各 40 個体, 計 120 個体を形成する。交叉は, 判定ノードの遺伝子群について 40 個体を 20 組として一様交叉を確率 P_c で行う。突然変異については次のように行う。判定ノードの遺伝子群については, 突然変異 1 の発生確率 P_{m1} は 1/3, 突然変異 2 の発生確率 P_{m2} は 1/5 が標準的な値とする。突然変異 1, 突然変異 2 の発生確率は抽出される関連ルールを構成する属性の個数を考慮して定めることができる。これらの発生確率の設定により, 探索的なルールの抽出を行うか, 既に抽出されたルールの一部の属性を変更した精査的な抽出を行うかを調節できる。なお, 処理ノードの遺伝子群については突然変異 1 を確率 1 で行い, 接続先をランダムに決定する。

4.5 レコードの分類 GNP を用いて結論部の属性を指定した興味深い関連ルールを抽出した場合, 抽出されたルールを用いて未知のレコードを分類する (目的属性 Z の値を予想する) 方式を以下に示す。

- (方式 1(Method 1))

- 1) 結論部が $Z = C$ ($C = 0, 1, 2, \dots, K$) である関連ルールの個数 $total(C)$ を求める。
- 2) 結論部が $Z = C$ ($C = 0, 1, 2, \dots, K$) である関連ルールのうち, 対象レコードがルールの前提部を満たす関連ルールの個数 $agree(C)$ を求める。
- 3) $Z = C$ と分類する関連ルール数に関する割合 $agree(C)/total(C)$ を計算し, この値が最大となる C の値を用いて, 対象となるレコードを $Z = C$ と分類する。(割合に等しいものがある場合は, 予め設定した優先順位により分類する。)

- (方式 2(Method 2))

- 1) 結論部が $Z = C$ ($C = 0, 1, 2, \dots, K$) である関連ルールの個数 $total(C)$ を求める。
- 2) 前提部を構成する属性数が m 個である関連ルール $(A_{j_1} = 1) \wedge \dots \wedge (A_{j_m} = 1) \Rightarrow (Z = C)$ と評価の対象となるレコードの距離 D を以下のように定める。レコードの属性値について, 属性値が $A_{j_k} = 1$ となる属性が t 個あるとき, 属性値が $A_{j_k} \neq 1$ となる属性は, $m - t$ 個ある。ただし, $1 \leq k \leq m$ である。これらを用いて, $D = \max\{t - (m - t)/m, 0\}$ とする。
- 3) 結論部が $Z = C$ である関連ルールについて対象レ

コードとの距離 D を求め、これらの和を $Dsum(C)$ とする。

4) $Z = C$ と分類する相関ルール数に関する割合 $Dsum(C)/total(C)$ を計算し、この値が最大となる C の値を用いて、対象となるレコードを $Z = C$ と分類する。(割合に等しいものがある場合は、予め設定した優先順位により分類する。)

5. シミュレーション

本章では、UCI ML Repository⁽¹⁴⁾ のデータを用いて、GNP を用いて抽出された相関ルールを用いた分類法の有効性の検討を行う。

5.1 設定 データベースの属性のうち、連続値をとるものについては相互情報量⁽²⁾を用いて2つの値(0または1)に離散化して新たな属性(アイテム)とし、カテゴリ型の属性についてはカテゴリごとに新たな属性(アイテム)を作ること、属性値が1または0からなる相関ルール抽出用のデータベースに変換する。データベースのレコードを10組に分け、このうち9組を訓練用データとし、残り1組を評価用データとして、10-fold cross validationsを行う。

興味深い相関ルール抽出にあたり、興味深さの指標は $\chi_{min}^2 = 6.63$ かつ $sup_{min} = 0.05$ とし、相関ルールの前提部を構成する属性の個数 $n(i)$ は $1 \leq n(i) \leq 8$ とする。GNPの1個体中の判定ノードの個数は75個、処理ノードの個数は10個とし、GNPの個体数は120個、終了世代数500世代とする。また、突然変異確率 $P_{m1} = 1/3$, $P_{m2} = 1/5$, 交叉確率 $P_c = 1/5$ を用い、 $\alpha_{new} = 150$ とする。

実験に用いるデータセットを以下に示す。

- cleveland

心臓病に関するデータセットである cleveland は、条件属性となる属性が13個であり、目的属性は、心臓病にかかわる危険度を表している。データセットのうち、各属性値に洩れのない297個のレコードを用いる。13個の条件属性からなるデータセットを25個の条件属性(属性値が1または0)からなるデータベースに変換する。また、目的属性(Z)は、心臓病である($Z = 1$)、または、心臓病でない($Z = 0$)の2つの値をとる。 $Z = 1$ を優先のクラスとする。

- breast-w

乳がんに関するデータセットである breast-w は、条件属性となる属性が9個でありそれぞれの属性値が10段階の数値をとる。目的属性は、乳がんに関して悪性か良性かのいずれかを表している。データセットのうち、各属性値に洩れのない683個のレコードを用いる。9個の条件属性からなるデータセットを18個の条件属性(属性値が1または0)からなるデータベースに変換する。また、目的属性(Z)は、悪性($Z = 1$)、または、良性($Z = 0$)の2つの値をとるものとした。 $Z = 1$ を

優先のクラスとする。

5.2 結果と考察 訓練用データから抽出された全ルールを用いて評価用データのレコードを分類した場合の平均の誤分類率を表3に示す。表3において、抽出された全ルールを用いた場合を *all*、確信度が0.8以上の相関ルールの集合を用いた場合を0.8、確信度が0.9以上の相関ルールの集合を用いた場合を0.9と表している。なお、表3における *CBA*, *c4.5* は文献(11)における結果を参考として示したものである。表3の結果から提案手法の分類精度は従来手法と同程度かそれ以上であると評価できる。抽出された興味深い相関ルールの中で、さらに確信度の最小値により分類に用いる相関ルールに制限を加えると、誤分類率に差がみられる。とくに、*cleveland* では、最小確信度を設定したルールの集合を用いた場合には、分類の誤りが多くなる。医療系のデータの場合には、データに個人差があることなどから厳密すぎるルールのみを用いることは適当でない可能性が指摘できる。

表4は、分類に用いる相関ルールの数を変えた場合の分類結果である。プールに抽出された順番に相関ルールに番号を付け、10番目、30番目、100番目、300番目および1000番目までの相関ルールを分類に用いている。また、*all* は抽出されたすべての相関ルールを用いた場合である。300個のルールを用いれば、すべてのルールを用いた場合と同様の誤分類率となることがわかる。

表5は、表4で用いた相関ルールを抽出するのに要した平均計算時間を示したものである。プールに300番目のルールが抽出されるまでに要する時間は、*cleveland*($Z = 1$ の場合)で0.43秒、*breast-w*($Z = 0$ の場合)で1.4秒程度であり、短時間で分類に用いるルールが獲得されていることがわかる。GNPを用いた興味深い相関ルールの抽出では、ユーザの設定した興味深さの指標を満たすすべてのルールを抽出することはできないが、ユーザの目的に十分と考えられるルールを効率よく短時間で獲得できる。

表6は、抽出された相関ルールのうち、前提部を構成する属性数が7個または8個のもののみを抽出された順番に応じた場合の誤分類率を示したものである。方式1では、分類に用いる相関ルール数が少ないと、評価用のレコードを分類することができずデフォルトのクラスに分類することが多くなるために誤分類率が大きくなっている。これに対し、方式2ではルール数が少なくても有効に分類できていることがわかる。いずれの方式においても、分類に用いる相関ルールの数が増えると、誤分類率は小さくなっている。

提案手法では、抽出されたルールすべてが、興味深さの指標を満たすものであり、すでに分類のための根拠をもっている。このため、従来手法と異なり分類に適した相関ルールの集合を新たに構成する必要がない。GNPを用いたルール抽出では、すべてのルールを抽出することはできないが、与えられた時間(世代数)で抽出できたルールだけを用いて分類することができるため、短時間で相関ルール抽出から

表 3 確信度の最小値の基準の有無による分類結果 (誤分類率 (%))

Table 3. Classification results versus threshold of confidence (Error rates (%)).

	Method1			Method2			CBA	c4.5
	all	0.8	0.9	all	0.8	0.9		
cleveland	17.7	17.7	18.3	16.3	17.3	17.7	16.7	18.2
breast-w	3.2	3.4	3.5	3.4	3.5	3.5	3.9	3.9

表 4 分類に用いるルール数による分類結果 (誤分類率 (%))

Table 4. Classification results versus number of rules (Error rates (%)).

	Method1						Method2					
	10	30	100	300	1000	all	10	30	100	300	1000	all
cleveland	30.3	19.3	18.3	18.0	17.3	17.7	27.3	19.7	18.0	17.0	17.0	16.3
breast-w	4.1	4.1	3.4	3.1	—	3.2	4.1	3.7	3.4	3.4	—	3.4

表 5 ルール抽出に要した平均計算時間 (秒)

Table 5. Averaged run-time versus number of extracted rules in the pool (sec).

	100	300	1000
cleveland($Z = 1$)	0.13	0.43	1.63
cleveland($Z = 0$)	0.14	0.41	1.60
breast-w($Z = 1$)	0.39	1.14	—
breast-w($Z = 0$)	0.35	1.38	—

表 6 属性数の多いルールを用いた場合の分類結果 (誤分類率 (%))

Table 6. Classification results using long rules (Error rates (%)).

	Method1					Method2				
	10	30	100	300	all	10	30	100	300	all
cleveland	34.7	28.3	22.0	21.0	19.7	18.3	18.0	19.7	19.0	19.0
breast-w	8.2	5.3	—	—	4.1	3.5	3.2	—	—	3.5

分類まで行うことが可能になる点は提案手法の特徴である。また、分類の対象となるレコードのデータの一部が欠落していても用いることが可能である。提案手法では、最小サポートを 5% として関連ルールを抽出しているが、CBA などの従来手法では 1% となっている。このため、提案手法の方が、過学習による影響が小さくなるなど、分類に用いているルールの信頼性が高いと考えられる。従来手法との比較については、他の病気に関するデータセットを用いてさらに検討していきたい。

シミュレーションにおいては、抽出された興味深いルールを用いた分類手法を検討したが、とくに個々のルールについての考察は行っていない。シミュレーションで抽出された各ルールの前提部は、患者 (悪性) と正常者 (良性) に対して興味深い差異をもった属性の組合せであり、これらを解析することで新規の知見を獲得することが期待できる。提案手法は、興味深いルールの抽出、新規の知見の獲得を目的として用いることもできる。提案手法の特徴として、 χ^2 値を指標に用いており、密なデータベースに適用できるため、従来手法では困難と考えられていた医療系のルール抽

出にとくに有効であると考えられる。例えば、特定の疾患に関する患者と正常者についての遺伝子多型に関するデータセットから、どの遺伝子多型の組合せがその疾患に関与しているかというようなデータマイニングへの適用が考えられる。

6. まとめ

遺伝的ネットワークプログラミングを用いた関連ルール抽出法による医療関連データベースからの興味深い関連ルール抽出と抽出されたルールの有効性を検討した。本研究で用いた関連ルール抽出法は、興味深さの指標に統計学で用いられる χ^2 値を用いており、密なデータベースからの関連ルール抽出が可能であるなど医療分野のデータベースへの応用に適していると考えられる。本論文では、結論部の属性を固定して抽出した関連ルールを用いたレコード分類法を提案した。今後は、多くの実際のデータベースに興味深い関連ルールの抽出とこれを用いた分類を展開していく予定である。

(平成 17 年 10 月 24 日受付, 平成 18 年 2 月 28 日再受付)

文 献

- (1) C. Zhang and S. Zhang: "Association Rule Mining: models and algorithm", Springer (2002)
- (2) T. Fukuda, Y. Morimoto, and T. Tokuyama: "Data Mining", Kyoritsu Shuppan (2001) (in Japanese)
福田剛志・森本康彦・徳山 豪: データマイニング, 共立出版 (2001)
- (3) R. Agrawal and R. Srikant: "Fast Algorithms for Mining Association Rules", In Proc. of the 20th VLDB Conf., Santiago, Chile, pp.487-499 (1994)
- (4) R.J. Bayardo Jr., R. Agrawal, and D. Gunopulos: "Constraint-Based Rule Mining in Large, Dense Databases", In Proc. of the 15th Int. Conf. on Data Eng., pp.188-197 (1999)
- (5) S. Brin, R. Motwani, and C. Silverstein: "Beyond market baskets: generalizing association rules to correlations", In Proc. of ACM SIGMOD, pp.265-276 (1997)
- (6) T. Eguchi, K. Hirasawa, J. Hu, and N. Ota: "A Study of Evolutionary Multiagent Models Based on Symbiosis", *IEEE Trans. on Syst., Man and Cybernetics* -PART B-, Vol.35, No.1, pp.179-193 (2006)
- (7) H. Katagiri, K. Hirasawa, J. Hu, and J. Murata: "Network Structure Oriented Evolutionary Model - Genetic Network Programming", In Proc. of Genetic and Evolutionary Computation Conference, pp.219-226 (2001)
- (8) K. Hirasawa, M. Okubo, H. Katagiri, J. Hu, and J. Murata: "Comparison between Genetic Network Programming and Genetic Programming using evolution of ant's behaviors", *Trans. IEE Japan*, Vol.121-C, No.6, pp.1001-1009 (2001) (in Japanese)
平澤宏太郎・大久保雅文・片桐広伸・胡 敬炉・村田純一: 「蟻の行動進化における Genetic Network Programming と Genetic Programming の性能比較」, 電学論 C, 121, 6, pp.1001-1009 (2001)
- (9) K. Shimada, K. Hirasawa, and T. Furuzuki: "Association rule mining using genetic network programming", The 10th Int. Symp. on Artificial Life and Robotics 2005, pp.240-245 (2005)
- (10) K. Shimada, K. Hirasawa, and J. Hu: "Genetic Network Programming with Association Rule Acquisition Mechanisms", SICE Annual Conference 2005, pp.13-19 (2005)
- (11) B. Liu, W. Hsu, and Y. Ma: "Integrating Classification and Association Rule Mining", In Proc. of ACM Int. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining, pp.80-86 (1998)
- (12) M.S. Chen and P.S. Yu: "An Effective Hash-Based Algorithm for Mining Association Rules", In Proc. of the 1995 ACM SIGMOD Conf., pp.175-186 (1995)
- (13) M-L. Antonie and O.R. Zaiane: "An Associative Classifier based on Positive and Negative Rules", In Proc. of DMKD, Paris, France, pp.64-69 (2004)
- (14) C. Blake and C. Merz: UCI repository of machine learning databases.
<http://www.ics.uci.edu/mllearn/MLRepository.html>.

嶋田 香 (学生員) 1986 年早稲田大学理工学部応用物理学学科卒業。1999 年筑波大学大学院修士課程医科学研究所医科学専攻修了。現在, 早稲田大学大学院情報生産システム研究科博士後期課程在学中。

王 若 晨 (非会員) 2003 年中国上海交通大学外国语学院日本語学科卒業。2005 年早稲田大学大学院情報生産システム研究科修士課程修了。

平 澤 宏太郎 (正員) 1964 年九州大学工学部電気工学科卒業。1966 年同大学大学院工学研究科修士課程電気工学専攻修了。工学博士。同年 (株) 日立製作所入社 日立研究所勤務, 1989 年 8 月同研究所副所長。1991 年 8 月同大みか工場主管技師長。92 年 12 月九州大学工学部教授。1996 年 5 月同大学院システム情報科学研究科教授, 2000 年同大学大学院システム情報科学研究院教授。2002 年 9 月早稲田大学大学院情報生産システム研究科教授, 現在に至る。計測自動制御学会, 情報処理学会, IEEE 各会員。

古 月 敬 之 (正員) 1986 年中国中山大学大学院修士修了。同年, 同大学電子工学科助手, 1988 年同講師, 1993 年来日, 1997 年九州工業大学情報工学研究科博士後期課程修了。博士 (情報工学) 同年九州大学ベンチャービジネスラボラトリ非常勤研究員を経て, 同大学システム情報科学研究科助手, 2000 年同大学大学院システム情報科学研究院助手, 2003 年早稲田大学大学院情報生産システム研究科助教授, 現在に至る。計測自動制御学会会員。