ショートノート

ファジィクラスタリングによる 局所的マイナー成分の抽出と欠測値の推定[†]

呉 志賢^{*1} 本多 克宏^{*2} 市橋 秀友^{*2}

本研究では、ファジィクラスタリングを用いた、局所的マイナー成分のニューラルネットアプローチによる抽出法を提案する。さらに、抽出されたマイナー成分を用いて、データ集合における欠測値の推定を行う方法も同時に提案する。欠測値の推定は、マイナー成分ベクトルを法線とする超平面を求めて、データ点を超平面に射影することで行う。提案法は、データの部分構造を考慮した簡便な欠測値の推定法である。

キーワード：マイナー成分、ファジィクラスタリング、ニューラルネットアプローチ、欠測値の推定

1. はじめに

標準的な主成分分析 (Principal Component Analysis (PCA)) は、変量の分散共分散行列の固有値計算から主成分を求めるが、Oja らによって、ヘブ学習を行うニューラルネットアプローチ [1] [2] も提案されている。本研究では、ニューラルネットワークによってマイナー成分を抽出するアルゴリズムを、ファジィクラスタリング [3] に応用し、ファジィクラスターから図 1 のような、データの部分構造を考慮した局所的マイナー成分を求めることができることを示す。さらに、局所的マイナー成分を用いた、欠測値の推定法を提案する。

欠測値の含まれることが多い実データの事前処理など、データ解析において欠測値の推定は重要な役割を担っている。欠測値の推定方法としては、一般的に回帰分析が用いられている。しかし、回帰分析では目的変数ごとに回帰を行う必要がある。また、最小2乗基準に基づく FCV 法を用いた欠測値の推定法 [4] は、データ行列の低階数近似行列を求める解析的な方法であり、計算アルゴリズムが複雑である。ここでは、ニューラルネットの学習によって求めた局所的マイナー成分を

用いた、簡便な欠測値の推定法を提案する。

2. 局所的マイナー成分の抽出

Bezdek らによって提案された Fuzzy c -Varieties (FCV) 法 [5] は、データ x_i とベクトル w_{ck} が張る線形多様体状のプロトタイプとの距離の総和を、最小にすることでクラスターを形成する。ただし、

$$x_i = (x_{i1}, \dots, x_{iK})^T, \quad i=1, \dots, N \quad (1)$$

$$w_{ck} = (w_{ck1}, \dots, w_{ckK})^T, \\ c=1, \dots, C, k=1, \dots, K-m \quad (2)$$

である。ここで、 N はデータの個数で、 C はクラスターの数である。また、 K はデータの次元、 m はマイナー成分ベクトルの数とする。ベクトル w_{ck} を主成分ベクトルとみなすと、FCV 法はファジィクラスタリングと主成分分析の同時分析法と考えることができる。

ここで、マイナー成分を考えると、FCV 法のクラスタリング基準は、以下のように表わすことができる。

図 1：局所的マイナー成分の抽出

[†] Extraction of Local Minor Component by Fuzzy Clustering and Missing Value Estimation
Chi-Hyon OH, Katsuhiko HONDA, Hidetomo ICHIHASHI

^{*1} 大阪経済法科大学 教養部
Faculty of Liberal Arts and Sciences Osaka University of Economics and Law

^{*2} 大阪府立大学大学院 工学研究科 電気・情報系専攻 経営工学分野
Graduate School of Engineering,
Electrical Engineering and Information Science,
Industrial Engineering, Osaka Prefecture University

$$\sum_{c=1}^C \sum_{i=1}^N \sum_{k=K-m+1}^K u_{ci} \mathbf{w}_{ck}^\top (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c) (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c)^\top \mathbf{w}_{ck} \quad (3)$$

式(3)のベクトル $\mathbf{w}_{ck}$ は、マイナー成分を表す。また、 u_{ci} はデータのクラスターへの帰属の度合いを表すメンバシップで、 $\mathbf{v}_c$ はクラスターの中心 (平均) である。

式(3)の最適化は、ラグランジュの未定乗数法により、以下の目的関数 L の最小化問題に帰着させることができる。

$$\begin{aligned} L = & \sum_{c=1}^C \sum_{i=1}^N \sum_{k=K-m+1}^K u_{ci} \times \\ & \mathbf{w}_{ck}^\top (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c) (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c)^\top \mathbf{w}_{ck} \\ & + T_0 \sum_{c=1}^C \sum_{i=1}^N u_{ci} \log u_{ci} \\ & + \sum_{i=1}^N T_i \left(\sum_{c=1}^C u_{ci} - 1 \right) \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)の第1項目は、FCV法のクラスタリング基準であり、第2項目はエントロピー最大化による正則化を表す。 $T_0 > 0$ はファジィ度を調整するパラメータであり、 T_0 の値が大きいくほどあいまいなクラスターを得る。第3項目は、全てのクラスターに対するメンバシップの総和が1であるという制約条件を表す。 T_i はラグランジュ乗数である。

L を最小にする $\mathbf{v}_c$ 、 $\mathbf{u}_i$ は、 L の最適性の必要条件より導出される不動点反復アルゴリズムによって求める。最適性の必要条件 $\partial L / \partial v_{ck} = 0$ より、

$$v_{ck} = \frac{\sum_{i=1}^N u_{ci} x_{ik}}{\sum_{i=1}^N u_{ci}} \quad (5)$$

を得る。また、 $\partial L / \partial u_{ci} = 0$ より、

$$u_{ci} = \exp(A_{ci}) / \sum_{c=1}^C \exp(A_{ci}) \quad (6)$$

ただし、

$$\begin{aligned} A_{ci} = & -\frac{1}{T_0} \sum_{k=K-m+1}^K \mathbf{w}_{lk}^\top (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c) (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c)^\top \mathbf{w}_{lk} \end{aligned} \quad (7)$$

マイナー成分ベクトル $\mathbf{w}_{ck}$ は、Oja のニューラルネットアプローチにメンバシップを考慮して求める。まず、 $\partial L / \partial \mathbf{w}_{ck}$ より、

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}_{ck}} = 2 \sum_{i=1}^N u_{ci} (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c) (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c)^\top \mathbf{w}_{ck} \quad (8)$$

を得る。上記の式に基準化と直交化を加味することで、局所的マイナー成分ベクトルの更新則は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{w}_{ck} = & \gamma u_{ci} \left\{ -y_{ck} (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c) \right. \\ & + \left(y_{ck}^2 + 1 - (\mathbf{w}_{ck}^{old})^\top \mathbf{w}_{ck}^{old} \right) \mathbf{w}_{ck}^{old} \\ & \left. - \alpha \sum_{l>k} y_{cl} y_{ck} \mathbf{w}_{cl}^{old} \right\} \end{aligned} \quad (9)$$

ここで、

$$y_{ck} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c)^\top \mathbf{w}_{ck}^{old} \quad (10)$$

である。また、 γ は学習率であり、 α は正の係数で、十分大きければ、求まるベクトルが互いに直交する。

提案アルゴリズムを以下に示す。

局所的マイナー成分ベクトルの抽出アルゴリズム

Step 1: C , T_0 , γ , α , ξ , ϵ を定める。メンバシップ $\mathbf{u}_i$ 、およびマイナー成分ベクトル $\mathbf{w}_{ck}$ の初期値を乱数により定める。

Step 2: 式(5)よりクラスター中心 $\mathbf{v}_c$ を求める。

Step 3: 式(9)の更新則を用いて、 $\max_{c,k} |\mathbf{w}_{ck}^{new} - \mathbf{w}_{ck}^{old}| < \xi$ を満たすまで、マイナー成分ベクトル $\mathbf{w}_{ck}$ の学習を行う。

Step 4: 式(6)よりメンバシップ $\mathbf{u}_i$ を求める。

Step 5: 収束判定条件 $\max_{c,i} |u_{ci}^{NEW} - u_{ci}^{OLD}| < \epsilon$ を満たせば終了。その他は Step 2 へ戻る。

3. 局所的マイナー成分を用いた欠測値の推定

前節のアルゴリズムによって抽出された、局所的マイナー成分ベクトルを用いる欠測値の推定法を提案する。データに欠測値がある場合、欠測した属性を無視して局所的マイナー成分ベクトルの抽出を行う。そして、欠測したデータがマイナー成分ベクトル $\mathbf{w}_{ck}$ を法線とする超平面上に存在すると仮定する。すなわち、データを $K-1$ 次元の主成分ベクトルの張る超平面上に射影し、欠測した属性を推定する。この際、データがファジィクラスターによって分割されているので、どの超平面に射影するかを決定しなければならない。そこで、最大のメンバシップを持つクラスターの超平面に射影する、最大値ルールを採用する。

いま、データ $\mathbf{x}_i$ において、属性 x_{il} が欠測しているとする。属性 l を推定するために、マイナー成分ベクトル $\mathbf{w}_{ck}$ を法線ベクトルとする $K-1$ 次元の超平面を表す線形関数は、

$$(\mathbf{x}_i - \mathbf{v}_c)^\top \mathbf{w}_{ck} = 0 \quad (11)$$

と表される。属性 x_{il} がこの超平面上に存在すると仮定すると、式(11)より、

$$x_{il} = -\frac{1}{w_{cl}} \sum_{m=1, m \neq l}^M (x_{im} - v_{cm}) w_{cm} + v_{cl} \quad (12)$$

と表すことができる。

2つの属性が欠測している場合は、以下のような、第2マイナー成分ベクトル w_{cK-1} を法線とする超平面を考える。

$$(x_i - v_c)^T w_{cK-1} = 0 \quad (13)$$

式(11)と式(13)の超平面からなる連立方程式を解くことにより、2つの属性が欠測している場合の推定を行うことができる。欠測値が3属性以上の場合も、欠測した属性の数だけマイナー成分ベクトルを求めれば、欠測値を推定することができる。

4. 数値実験

人工的に生成した3次元データを用いて、提案法による欠測値の推定を行った。図2に、生成したデータを示す。データ点の数は20である。図2より、データは2つの部分構造を有することがわかる。数値実験では、図2のデータのうち、2つのデータ点の属性を1つ欠測させ、ある1つのデータ点に関しては、2つの属性を欠測させて欠測値の推定を行った実験で用いたパラメータは、クラスター数： $C:2$ 、エントロピー項の係数 $T_0:0.2$ 、ヘブ学習の学習率 $\gamma:0.000001$ 、直交化係数 $\alpha:10$ 、ヘブ学習の収束判定条件 $\xi:0.000001$ 、不動点反復法の収束判定条件 $\varepsilon:0.001$ である。

提案法を用いた欠測値の推定結果を、図3、図4に示す。図3、図4は、それぞれ3次元データの x_1-x_2 平面、 x_2-x_3 平面の2次元プロット図である。図中の△はクラスターの中心 v_c を表し、○と●は、それぞれ異なるクラスターに属するデータ点を表す。データ点は、最大のメンバシップを持つクラスターに属するとした。図における×は、3件の欠測値を持つデータ点 (Data 1-3) を表している。点線で結ばれたデータ点は、提案

図2：3次元人工データ

図3：提案法による欠測値の推定結果 (x_1-x_2)

図4：提案法による欠測値の推定結果 (x_2-x_3)

法によって推定されたデータ点である。図3、図4より、データの部分構造を考慮した、妥当な欠測値の推定が行われていることがわかる。

5. おわりに

本研究では、ニューラルネットアプローチを用いて、データの部分構造を考慮した局所的マイナー成分の抽出法を提案した。また、抽出されたマイナー成分を用いる欠測値の推定方法も提案した。提案法を、インフォメーションフィルタリングなどの実用アプリケーションに適用することが、今後の課題である。

参考文献

- [1] E. Oja: A simplified neuron model as a principal component analyzer, *Journal of Mathematical Biology*, Vol.15, pp.267-273 (1982)
- [2] E. Oja: Principal components, minor components, and linear neural networks, *Neural Networks*, Vol.5, pp.927-935 (1992)
- [3] 宮本定明：クラスター分析入門，森北出版（1999）
- [4] 本多克宏，杉浦伸和，市橋秀友，荒木昭一，九津見洋：最小2乗基準を用いた Fuzzy c -Varieties 法における欠測値の処理法，日本ファジィ学会誌，Vol.

- 13, No.6, pp.132-140 (2001)
- [5] J. C. Bezdek, C. Coray, R. Gunderson and J. Watson: Detection and characterization of cluster substructure. II. fuzzy c -varieties and convex combinations thereof, *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol.40, No.2, pp.358-372 (1981)
- (2002年 8 月 1 日 受付)
(2002年11月16日 採録)

[問い合わせ先]
〒581-8511 大阪府八尾市楽音寺6-10
大阪経済法科大学教養部
呉 志賢
TEL : 0729-41-8211
FAX : 0729-41-4145
E-mail : ch_oh@keiho-u.ac.jp

著者略歴

お ちひよん
呉 志賢 [正会員]

2002年大阪府立大学大学院工学研究科博士後期課程電気・情報系専攻修了, 同年大阪経済法科大学教養部講師となり, 現在に至る. 工学博士. ファジィクラスタリング, データマイニングの研究に従事. 日本ファジィ学会, システム制御情報学会, 電子情報通信学会, IEEE の会員.

ほんだ かつひろ
本田 克宏 [正会員]

1999年 3 月大阪府立大学大学院工学研究科博士前期課程電気・情報系専攻修了, 同年 4 月日本電信電話(株)入社, 同年10月大阪府立大学工学部助手となり現在に至る. ニューラルネットワーク, ファジィクラスタリングの研究に従事. 日本経営工学会, 日本ファジィ学会の会員.

いちはし ひでとも
市橋 秀友 [正会員]

1971年大阪府立大学工学部経営工学科卒業. 同年松下電器産業(株)入社, 1981年大阪府立大学工学部経営工学科助手, 1987年同講師, 1989年同助教授, 1993年同教授となり, 現在に至る. 工学博士. ファジィ理論やニューラルネットワークなどでのデータ解析法の知的システムや人間機械システムへの応用研究に従事. IEEE, 日本ファジィ学会, システム制御情報学会, 電子情報通信学会, 日本経営工学会などの会員.

Extraction of Local Minor Component by Fuzzy Clustering and Missing Value Estimation

by

Chi-Hyon OH, Katsuhiko HONDA, Hidetomo ICHIHASHI

Abstract :

In this paper, a method of extracting local minor components, that takes memberships to cluster into account, is presented. A simple neural PCA approach is employed to extract the components. The components well represent the distinctive structures of the data set. The way of estimating missing values by using the local minor components is also introduced.

Keywords : minor component, fuzzy clustering, neural PCA approach, missing value estimation

Contact Address : **Chi-Hyon OH**

6-10 Gakuonji, Yao-shi, Osaka 581-8511, Japan

TEL : 0729-41-8211

FAX : 0729-41-4145

E-mail : ch_oh@keiho-u.ac.jp