特集論文

2 値データにおける顕示変数の効率的な選択手法

Efficient Variable Selection Method for Exposure Variables on Binary Data

大野 学

Manabu Ohno

岡山大学大学院自然科学研究科資源管理科学専攻

Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University, 3-1-1 Tsushima-Naka, Okayama 700-8530, Japan

ohno@ems.okayama-u.ac.jp

垂水 共之

Tomoyuki Tarumi

岡山大学アドミッションセンター

Admission Center, Okayama University, 3-1-1 Tsushima-Naka, Okayama 700-8530, Japan

tarumi@ems.okayama-u.ac.jp

keywords: AIC, apriori algorithm, anti-monotone, chi-squared test

Summary

In this paper, we propose a new variable selection method for "robust" exposure variables. We define "robust" as property that the same variable can select among original data and perturbed data. There are few studies of effective for the selection method. The problem that selects exposure variables is almost the same as a problem that extracts correlation rules without robustness. [Brin 97] is suggested that correlation rules are possible to extract efficiently using chi-squared statistic of contingency table having monotone property on binary data. But the chi-squared value does not have monotone property, so it's is easy to judge the method to be not independent with an increase in the dimension though the variable set is completely independent, and the method is not usable in variable selection for robust exposure variables. We assume anti-monotone property for independent variables to select robust independent variables and use the apriori algorithm for it. The apriori algorithm is one of the algorithms which find association rules from the market basket data. The algorithm use anti-monotone property on the support which is defined by association rules. But independent property does not completely have anti-monotone property on the AIC of independent probability model, but the tendency to have anti-monotone property is strong. Therefore, selected variables with anti-monotone property on the AIC have robustness. Our method judges whether a certain variable is exposure variable for the independent variable using previous comparison of the AIC. Our numerical experiments show that our method can select robust exposure variables efficiently and precisely.

1. は じ め に

近年,商品選好の Web アンケート調査,流通業の POS データといった購買履歴データ等の質的情報を多く含むデータが,大量に安価に入手・蓄積することが可能になった.そのような質的データは,特にマーケティング分野に多く存在し,データの分析結果に基づいて企業の商品開発,ターゲットマーケティングへの意思決定がなされる場合が多い.一般に分析者は,調査項目や商品の購買を表す変数同士の関連性に興味がある場合が多い.逆に,関連性がないという情報は,あまり有益でない.本稿では,関連性がないことと独立であることを同じとみなして扱う.

研究者は,いったん独立であると判断した変数をあらためて取り上げ,新たな要因に照らし合わせて再分析しようとは,あまり思いつかないと [松田 88] は指摘しており,これは研究者だけでなく,一般のデータ分析者にも同じことがいえる.また,分析コストの問題で,その

ような新たな変数(要因)の存在を仮定せずに分析する場合もある.よって,その変数の存在の発見は,重要な問題であり,それらを効率よく発見(選択)し分析者に知らせることは有益であると考える.

いったん独立であると判断した変数に,新たな変数を照

表 1 顕示変数の例

性別	商品 A	商品 B		オッズ比
		購入	非購入	
女	購入	75	150	0.25
	非購入	600	300	
男	購入	275	50	5.5
	非購入	100	100	

らし合わせて再分析すると,その関係が成り立たなくなるとき,新たな変数のことを一般に顕示変数 (exposure variable) を呼ぶ.ここで,顕示変数の例を表 1 の分割表を使って示す.この分割表は,性別ごとの商品 A と商

品 B の同時購買の人数を表すものである．性別のカテゴリを潰した (collapse) 商品 A × 商品 B の分割表のオッズ比は $\frac{(350/200)}{(700/400)} = 1$ で独立がいえそうであるが、表 1 のように性別を考慮した 3 元分割表では、その関係が成り立たない．よって、性別が顕示変数になる．

顕示変数についてより正確に定義するために、[松田 88] の定義に従い、確率モデルを使って定義する．

変数 X_i ($i = 1, \dots, p$) は、0, 1 の値をとる． p 次の同時確率 $p(x_1, \dots, x_p)$ は

$$\sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_p=0}^1 p(x_1, \dots, x_p) = 1$$

を満たす k 個 ($k < p$) の変数を要素にもつ変数集合 $\{X_1, \dots, X_k\}$ と、その変数集合に X_{k+1} を加えた変数集合 $\{X_1, \dots, X_k, X_{k+1}\}$ に関する同時確率 $p(x_1, \dots, x_k)$, $p(x_1, \dots, x_k, x_{k+1})$ が、次の 2 つの確率モデル

$$\begin{cases} p(x_1, \dots, x_k) = p(x_1) \cdots p(x_k) \\ p(x_1, \dots, x_k, x_{k+1}) \neq p(x_1) \cdots p(x_k) p(x_{k+1}) \end{cases} \quad (1)$$

を満たすとき、変数 X_{k+1} を顕示変数とする．

本研究の目的は、単純に顕示変数を効率的に選択するのでなく、頑強性をもつ顕示変数を選択することである．

本稿での「頑強性」とは、与えたデータから選択した変数が、そのデータに摂動を与えたデータからも、同じように選択できることをいう．このように頑強性をもつ変数を選択することにより、(1) を高度に支持する顕示変数を選択することができる．

本提案手法では、効率的に頑強性をもつ顕示変数を選択するためにアプリアリアルゴリズム [Agrawal 94] を応用する．アプリアリアルゴリズムの詳細を次章で述べる．

2. 相関ルールとアプリアリアルゴリズム

相関ルール [Agrawal 93] (以降、ルールと記す) とは、ある商品とある商品が同時に購買された商品同士を矢印を使って表すものである．ユーザーは、閾値としてその商品同士の最低購買頻度を指定し、その最低頻度を満たす全ての商品のルールを抽出することが目的である．例えば商品 A と商品 B のルールを

$$A \Rightarrow B$$

とあらわす．アソシエーション分析では、この頻度のことをサポート (support) とよび、最低購買頻度を最小サポートとよぶ．ルールのサポートだけに注目する場合は、矢印の方向は本質的な意味を持たず、 $B \Rightarrow A$ と等価である．本稿は、これ以降、サポートだけを議論する．データの中の全ての 2 値変数の集合を V として、商品 A の購買・非購買を表す変数を X ($X \in V$)、商品 B を Y ($Y \in V$) とすると、ルール $A \Rightarrow B$ は自然に

$$(X = 1) \Rightarrow (Y = 1) \quad (2)$$

と表すことが出来る．ただし、2 値応答は、1 を購買、0 を非購買とする．よって、サポートは、変数集合 $\{XY\}$ の 2×2 の 2 元分割表の同時購買の頻度を表すセルだけに注目をしていることになる．本稿では、 k 個の変数からなる変数集合を k 次の変数集合といい、対応する分割表を k 元分割表という．同様の議論により、ルールを多次元まで拡張することができる．例えば、(2) に任意の変数 Z ($Z \in V$) を要素に加えた 3 次の変数集合 $\{XYZ\}$ のルールは

$$(X = 1) \Rightarrow (Y = 1)(Z = 1) \quad (3)$$

と書き、対応する分割表は、 $2 \times 2 \times 2$ の 3 元分割表になる．

アプリアリアルゴリズムは、ID 付き POS データ等の顧客の購買履歴データからルールを抽出するアルゴリズムであり、データは 2 値データを仮定する．このアルゴリズムは、ルールのサポートが逆単調性 (anti-monotone) もつことを利用し、ユーザーが与えた最小サポートを満たさないルールを生成しないようにしている．特に、最小サポートを満たす変数集合を頻出変数集合という．例えば、ルール (2) のサポートを

$$\text{support}[(X = 1) \Rightarrow (Y = 1)]$$

と表し、ルール (3) のサポートを

$$\text{support}[(X = 1) \Rightarrow (Y = 1)(Z = 1)]$$

と表すと、サポートの逆単調性とは、 $\forall Z \in V$ に対して

$$\begin{aligned} \text{support}[(X = 1) \Rightarrow (Y = 1)] &\geq \\ \text{support}[(X = 1) \Rightarrow (Y = 1)(Z = 1)] \end{aligned}$$

が成り立つ性質である．すなわち、ある任意の変数集合が頻出変数集合ならば、その部分集合は必ず頻出変数集合になる．上式の不等号が逆の場合で成り立つ性質を単調性 (monotone) をもつという．

k 次の頻出変数集合の集合を L_k と表す．このアルゴリズムは、逆単調性の性質を使いながら L_k から C_{k+1} の生成 ($k \geq 2$) を効率化したものである．ただし、 C_{k+1} は L_{k+1} の候補の集合である．すなわち、 C_{k+1} の要素は必ず頻出変数集合になるとは限らない．アプリアリアルゴリズムは、その頻出変数集合の候補の生成において、必ず頻出変数集合にならない候補を生成しないことによって効率化を図るものである．その詳しい動作を以下に述べる．

アプリアリアルゴリズムは、Join-Step と Prune-Step から構成されている．いま、変数集合の変数の並びは、あらかじめ決まった任意の順序に従ってソートされているとする．このとき、 k 個の変数 $c_1, c_2, \dots, c_k$ からなる k 次の変数集合 $\{c_1 c_2 \cdots c_k\}$ において、一番右側の変数 c_k を最後の変数とよび、 c_1 を最初の変数とよぶことにする．アルゴリズムの動作を以下に示す．

Join-Step L_k の各変数集合に対して、変数集合の変数の最後の 1 変数だけが違う変数集合同士を結合させ新たな変数集合を生成する。

Prune-Step Join-Step で生成した新たな変数集合の部分集合が、 L_k にないものを削除する。削除されなかった変数集合を C_{k+1} の要素にする。

C_{k+1} から L_{k+1} の生成は、データに対して実際にサポートを数えることで最小サポートを満たすかどうかを確認し、満たせば L_{k+1} の要素とする。ここで、この 2 つのステップの例を示す。いま、 L_3 が $\{X_1X_2X_3\}, \{X_1X_2X_4\}, \{X_1X_3X_4\}, \{X_1X_3X_5\}, \{X_2X_3X_4\}$ のとき、Join-Step で $\{X_1X_2X_3\}$ と $\{X_1X_2X_4\}$ が結合し $\{X_1X_2X_3X_4\}$ を、 $\{X_1X_3X_4\}$ と $\{X_1X_3X_5\}$ が結合して $\{X_1X_2X_4X_5\}$ を生成する。Prune-Step では $\{X_1X_2X_4X_5\}$ の部分集合 $\{X_1X_4X_5\}$ が L_3 の要素ではないので、 $\{X_1X_2X_4X_5\}$ は削除される。結局、 C_4 は $\{X_1X_2X_3X_4\}$ だけになる。

Join-Step の効率性を上の例を使って説明する。 $\{X_1X_2X_3\}$ と $\{X_1X_2X_4\}$ が結合して $\{X_1X_2X_3X_4\}$ が生成されるということは、 $\{X_1X_2X_3X_4\}$ の部分集合として、少なくとも $\{X_1X_2X_3\}$ と $\{X_1X_2X_4\}$ が存在することを意味する。逆に考えれば、結合する相手がいない変数集合に、任意の L_3 中の 1 変数を加えて生成した変数集合の部分集合には、確実に L_3 にない変数集合が含まれる。例えば、 $\{X_2X_3X_4\}$ に X_5 を加えて $\{X_2X_3X_4X_5\}$ が生成されるが、その部分集合 $\{X_2X_3X_5\}$ は、 L_3 中に確実に含まれない。

3. 従来の手法の問題点

3.1 2 値データにおける分割表の独立性の検定

顕示変数の効率的な変数選択の問題について、いままでほとんど議論されていない。それは、2 値データを含めた質的データの分析手法が大規模データをあまり想定していなかったためである。

(1) より、顕示変数を選択するためには、独立な変数集合と関連のある (独立ではない) 変数集合を効率よく識別することが重要になる。2 値データにおける関連のある変数集合を抽出する方法を、[Brin 97, Silverstein 98] が提案した。しかし、その手法は、変数の頑強性を考慮していない。[Brin 97, Silverstein 98] は、関連のある変数をルールとみなして選択しており、そのルールを correlation rule と呼んでいる。例えば、変数集合 $\{X_1X_2X_3\}$ に関連があれば、 $\{X_1X_2X_3\}$ は correlation rule である。

correlation rule の抽出アルゴリズムは、全ての関連のある変数集合を選択するために、独立の判断をピアソンの独立性の検定を用いて判断している。すなわち、帰無仮説「変数集合が独立である」を棄却すれば関連があると判断し、採択すれば独立であると判断する。

2 値データでは変数集合の次元に関係なくその検定統計量の χ^2 値は、自由度 1 のカイ二乗分布に従うと [Brin

97, Silverstein 98] は述べており、その場合、任意の変数集合 Z, Y ($Z \subset Y$) の対応するカイ 2 値 $\chi^2(Z), \chi^2(Y)$ は

$$\chi^2(Z) \leq \chi^2(Y)$$

の単調性の関係が成り立つことを証明した。この単調性を利用することによって、 χ^2 値によって棄却される最小次元の変数集合さえわかれば、全ての独立でない変数集合を網羅したこととなり、同時に、全ての独立な変数集合も網羅できる。

一般に 3 元以上の分割表に関するピアソンの独立性の検定についてあまり論じられていない。独立な 3 次元以上の分割表のカイ二乗値の確率分布をシミュレーションを用いて次節で検証する。

3.2 多次元分割表のカイ二乗値の分布

$X_1, X_2, \dots, X_5$ は互いに独立な 0.5 のベルヌーイ分布に従う確率変数とし、各確率変数から 1000 個のサンプルを生成し、そのサンプルから $\{X_1X_2\}, \{X_1X_2X_3\}, \dots, \{X_1X_2X_3X_4X_5\}$ の 2 ~ 5 元分割表のカイ二乗値を求める。この操作の 10000 回のシミュレーションから得られたカイ二乗値の正規化されたヒストグラムを図 1 に示す。各ヒストグラムの実線は、各々、自由度 (d.f.) 1, 4, 11, 26 のカイ二乗分布の密度関数を表す。この結果より、独立な 2 値データの分割表におけるカイ二乗値は、常に自由度 1 のカイ二乗分布に従わず、 k 元分割表 (k ways C.T. と記す) のカイ二乗値は、自由度 $2^k - (k+1)$ のカイ二乗分布に従うことがわかる。また、同時に単調性も成り立たず、[Brin 97, Silverstein 98] の手法をそのまま適用すると、実際の分布のもとでの有意確率が大きくなり、高次の分割表ほど棄却されやすくなる。

4. 変数選択アルゴリズム

4.1 独立な変数の逆単調性

2 次変数集合 $\{X_1X_2\}$ が互いに独立とは、その同時確率 $p(x_1, x_2)$ が $p(x_1, x_2) = p(x_1)p(x_2)$ のときに成り立つ。同様の議論により、3 次変数集合 $\{X_1X_2X_3\}$ が互いに独立であれば、その同時確率 $p(x_1, x_2, x_3)$ は $p(x_1, x_2, x_3) = p(x_1)p(x_2)p(x_3)$ となる。もし $\{X_1X_2X_3\}$ の ${}_3C_2$ 個の部分集合が独立でないなら、 $\{X_1X_2X_3\}$ も明らかに独立ではない。逆に、独立な変数集合を生成するためには、その部分集合が独立でなければならない。よって、この変数集合の独立性には、逆単調性が成り立つ。

変数集合が、独立か関連があるかを判断するために、何らかの指標 (判断基準) が必要である。一般的には前述したピアソンの独立性の検定や確率モデルの AIC の比較がある。しかし、何れの指標にも逆単調性の性質がないため、例えば $\{X_1X_2X_3\}$ が独立と判断されたからといって、その部分集合 $\{X_1X_2\}$ が独立と判断される確実な保

図 1 2 値データにおける多次元分割表のカイ二乗値の分布

証はない。本研究の目的は、ある指標のもとで独立と判断される全ての変数集合を選択することではなく、頑強性をもつ顕示変数を選択することである。そのため、(1) の $p(x_1, \dots, x_k) = p(x_1) \cdots p(x_k)$ に注目し、 $p(x_1) \cdots p(x_k)$ に関して頑強性をもつ変数集合を選択することによって、その目的を達成する方法をとる。本手法では、独立性を判断する基準として分割表の確率モデルの AIC を用いる。その AIC については、次節で述べる。

4.2 分割表の確率モデルの AIC

本研究では、分割表における確率モデルの AIC によって顕示変数を判断する。そのモデルの導出を以下で行う。

データには、 p 個の変数 X_i ($i = 1, \dots, p$) があり、値 0, 1 をとる。 k 個の変数からなる任意の変数集合 $c = \{X_1, \dots, X_k\}$ ($k \leq p$) が値 $x_1, \dots, x_k$ をとる確率を $p(x_1, \dots, x_k)$ とし、対応する観測度数を $n(x_1, \dots, x_k)$ とすると、

$$\sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 p(x_1, \dots, x_k) = 1 \quad (4)$$

$$\sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 n(x_1, \dots, x_k) = n \quad (5)$$

である。ただし、 n はサンプルサイズである。母集団が十分大きいとすると、確率 $p(x_1, \dots, x_k)$ の下での観測度

数の集合 $n(x_1, \dots, x_k)$ が得られる確率は、多項分布

$$\begin{aligned} M(n(x_1, \dots, x_k) | p(x_1, \dots, x_k)) \\ = \frac{n!}{\prod_{x_1=0}^1 \cdots \prod_{x_k=0}^1 n(x_1, \dots, x_k)!} \\ \times \prod_{x_1=0}^1 \cdots \prod_{x_k=0}^1 p(x_1, \dots, x_k)^{n(x_1, \dots, x_k)} \end{aligned}$$

で与えられる。いま、 $n(x_1, \dots, x_k)$ が与えられたもとでの $p(x_1, \dots, x_k)$ の対数尤度関数 $l(p(x_1, \dots, x_k) | n(x_1, \dots, x_k))$ は、 $p(x_1, \dots, x_k)$ に無関係な定数項を無視すれば

$$\begin{aligned} l(p(x_1, \dots, x_k) | n(x_1, \dots, x_k)) \\ = \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 n(x_1, \dots, x_k) \log p(x_1, \dots, x_k) \quad (6) \end{aligned}$$

で与えられる。一般に成り立つ関係

$$p(x_1, x_2, \dots, x_k) = p(x_1, x_2, \dots, x_{k-1} | x_k) p(x_k) \quad (7)$$

について、次の 3 つのモデルを考える。1) 独立を仮定するモデル Model (Ind) を、

$$\begin{aligned} \text{Model (Ind): } p(x_1, x_2, \dots, x_{k-1} | x_k) p(x_k) \\ = p(x_1) p(x_2) \cdots p(x_{k-1}) p(x_k) \end{aligned}$$

とする。2) $X_1, \dots, X_k$ の関連を仮定するモデル Model (Dep) を

$$\begin{aligned} \text{Model (Dep): } p(x_1, x_2, \dots, x_{k-1} | x_k) p(x_k) \\ = p(x_1, x_2, \dots, x_k) \end{aligned}$$

とする. 3) X_k の条件のもとで $X_1, \dots, X_{k-1}$ の独立を仮定する条件付独立モデル Model(Cin) を

$$\begin{aligned} \text{Model(Cin): } p(x_1, x_2, \dots, x_{k-1} | x_k) p(x_k) \\ = p(x_1 | x_k) p(x_2 | x_k) \cdots p(x_{k-1} | x_k) p(x_k) \end{aligned} \quad (8)$$

とする. この 3 つのモデルの AIC を以下で導出する.

§1 Model(Ind) の AIC

Model(Ind) は, 以下の制約条件

$$\sum_{x_1=0}^1 p(x_1) = \cdots = \sum_{x_k=0}^1 p(x_k) = 1$$

をもつ. ただし, $p(x_1) = \sum_{x_2=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 p(x_1, \dots, x_k)$, $\dots, p(x_k) = \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_{k-1}=0}^1 p(x_1, \dots, x_k)$. よって, Model(Ind) の自由パラメータの個数は, $2k$ 個である. この個数と Model(Ind) における (6) の最尤推定量 $\tilde{p}(x_i) = n(x_i)/n$ ($i = 1, \dots, k$) を考慮すると, Model(Ind) の AICAIC(Model(Ind)) は

$$\begin{aligned} \text{AIC(Model(Ind))} = \\ (-2) \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 n(x_1, x_2, \dots, x_k) \times \\ \log \frac{n(x_1)n(x_2) \cdots n(x_k)}{n^k} + 2(k) \end{aligned}$$

となる.

§2 Model(Dep) の AIC

Model(Dep) は, 以下の制約条件

$$\sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 p(x_1, x_2, \dots, x_k) = 1$$

をもつ. よって, Model(Dep) は $2^k - 1$ 個の自由パラメータをもつ. この個数と Model(Dep) のもとでの (6) の最尤推定量 $\tilde{p}(x_1, x_2, \dots, x_k) = n(x_1, x_2, \dots, x_k)/n$ を考慮すると, その AICAIC(Model(Dep)) は

$$\begin{aligned} \text{AIC(Model(Dep))} = \\ (-2) \sum_{x_1=0}^1 \cdots \sum_{x_k=0}^1 n(x_1, x_2, \dots, x_k) \times \\ \log \frac{n(x_1, x_2, \dots, x_k)}{n} + 2(2^k - 1) \end{aligned}$$

となる.

§3 Model(Cin) の AIC

Model(Cin) は, 以下の制約条件

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{x_1=0}^1 p(x_1 | x_k) = \cdots = \sum_{x_{k-1}=0}^1 p(x_{k-1} | x_k) = 1 \\ \sum_{x_k=0}^1 p(x_k) = 1 \end{array} \right. \quad (x_k = 0, 1)$$

をもつ. よって, Model(Cin) は $2k - 1$ の自由パラメータをもつ. この個数と Model(Cin) のもとでの (6) の最尤推定量

$$\begin{aligned} \tilde{p}(x_i | x_k) &= \frac{n(x_i, x_k)}{n(x_k)} \quad i = 1, \dots, k-1 \\ \tilde{p}(x_k) &= \frac{n(x_k)}{n} \end{aligned}$$

を考慮すると, その AICAIC(Model(Cin)) は

$$\begin{aligned} (-2) \sum_{x_k=0}^1 \left(\sum_{x_1=0}^1 n(x_2, x_k) \log \frac{n(x_2, x_k)}{n(x_k)} + \cdots \right. \\ \left. + \sum_{x_{k-1}=0}^1 n(x_{k-1}, x_k) \log \frac{n(x_{k-1}, x_k)}{n(x_k)} + n(x_k) \times \right. \\ \left. \log \frac{n(x_k)}{n} \right) + 2(2k - 1) \end{aligned} \quad (9)$$

となる.

4.3 独立な変数集合の生成

本研究では, 頑強性をもつ独立な変数集合を選択する方法として, 選択する独立な変数集合が, AIC による独立性の判断に関して逆単調性を満たす変数集合を選択する. それは, 例えば, 選択した変数集合 $\{X_1 X_2 X_3\}$ は, その全ての部分集合 $\{X_1 X_2\}, \{X_1 X_3\}, \{X_2 X_3\}, \{X_1 X_2 X_3\}$ が, 独立であると判断されている変数集合になる. 逆に, $\{X_1 X_2\}, \{X_1 X_3\}, \{X_2 X_3\}$ の中で 1 つでも独立でないと判断されれば, $\{X_1 X_2 X_3\}$ を選択しない. このような性質を満たす変数集合が, 独立に関して頑強性をもつということを数値実験によって確認する.

いま, $X_1, \dots, X_k$ $k = 3, \dots, 6$ は, 互いに独立な 0.5 のベルヌーイ分布に従う確率変数とし, データ D は k 個の確率変数から生成した 1000 個のサンプルによって構成する. $\{X_1 X_2, \dots, X_k\}$ の独立な部分集合の個数のパターンの頻度と, そのときの $\{X_1 X_2, \dots, X_k\}$ の独立の頑強性は, D と同じサンプルサイズで 1000 回のブートストラップ複製で評価する. パターンとは, 例えば $k = 3$ とすれば, 2 次の独立な部分集合が 2 個, 3 次の独立な部分集合が 1 個のとき, $\{2, 1\}$ が 1 つのパターンになる. ブートストラップによる評価とは, 例えば $k = 3$ のとき, 変数集合 $c = \{X_1 X_2 X_3\}$ の独立の頑強性を, 1000 回のブートストラップ複製によって $\text{AIC}(\text{Model}(\text{Ind}), c) < \text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), c)$ の関係を満たす確率を求めることである. ただし, $\text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), c)$ は, 変数集合 c の Model(Dep) の AIC を表す. 以上の操作の 5000 回のシミュレーションによって, パターンの頻度とブートストラップ確率の平均値を算出する. また, 独立の判定について, [Brin 97, Silverstein 98] の自由度 1 のカイ 2 乗の独立性の検定方法 (有意確率 5%) との比較を行った. その実験結果を表 2 に示す.

表 2 高次の独立な変数集合における逆単調性

$k = 3$						$k = 4$					
	$s_3^{(2)}$	$s_3^{(3)}$	freq	b.s.	prob	$s_4^{(2)}$	$s_4^{(3)}$	$s_4^{(4)}$	freq	b.s.	prob
AIC	3	1	2941	70.8		6	4	1	1778	70.4	
	2	1	1437	50.3		5	4	1	1519	59.9	
	1	1	155	39.9		4	4	1	404	51.9	
$\chi^2(1)$	3	1	2836	34.9		6	4	1	137	0.8	
	3	0	1458	13.8		6	4	0	949	0.2	
	1	0	36	1.5		6	3	0	1082	0.1	

$k = 5$							$k = 6$							
	$s_5^{(2)}$	$s_5^{(3)}$	$s_5^{(4)}$	$s_5^{(5)}$	freq	b.s. prob.	$s_6^{(2)}$	$s_6^{(3)}$	$s_6^{(4)}$	$s_6^{(5)}$	$s_6^{(6)}$	freq	b.s.	prob.
AIC	10	10	5	1	779	70.0	15	20	15	6	1	300	69.1	
	9	10	5	1	1092	63.8	14	20	15	6	1	595	63.4	
	8	10	5	1	574	58.8	13	20	15	6	1	462	61.8	
$\chi^2(1)$	10	7	0	0	482	0.0	14	11	0	0	0	209	0.0	
	10	6	0	0	454	0.0	14	10	0	0	0	191	0.0	
	10	8	0	0	435	0.0	15	13	0	0	0	190	0.0	

表 2 は、ブートストラップ確率 (b.s. prob と記す) で降順にソートしたものから上位 3 位のみを表示している。ただし、ブートストラップ確率がタイの場合は、パターンの出現頻度 (freq と記す) で降順にソートしている。 $s_k^{(m)}$ $m = 2, \dots, k$ は、 k 次の変数集合における m 次の部分集合の中で、AIC によって独立を判断された個数を表す。よって、 $s_k^{(k)}$ は、 k 次の変数集合そのものが独立のときに 1 になる。

表 2 の各 k の AIC の結果より、全ての部分集合が独立のとき、すなわち、 ${}_k C_i = s_k^{(i)}$ $i = 2, \dots, k$ のときに、その変数集合のブートストラップ確率が最も高いことがわかる。よって、AIC の判断に関して逆単調性を満たす変数集合が、より独立に関して頑強性をもつといえる。各 k の $\chi^2(1)$ の結果より、前述したとおり、高次の変数集合に対して、帰無仮説を棄却するために独立と判断されないことがわかる。

4.4 変数選択アルゴリズム

前述した AIC を用いた顕示変数の選択・識別方法を述べる。(1) の顕示変数の定義に対応して、以下の関係

$$\begin{cases} \text{AIC}(\text{Model}(\text{Ind}), c) < \text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), c) \\ \min_{R \in \{\text{Ind}, \text{Dep}, \text{Cin}\}} \text{AIC}(\text{Model}(R), c \cup X_{k+1}) = \\ \text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), c \cup X_{k+1}) \end{cases}$$

成り立つとき、 X_{k+1} を顕示変数として選択する。ただし、変数集合 $c = \{X_1, \dots, X_k\}$ である。提案するアルゴリズムを図 2 に示す。このアルゴリズムの補足説明をアルゴリズムの行番号ごとに述べる。

Line 2) データ D は、 p 個の 2 値変数 $X_1, X_2, \dots, X_p$ をもつ。

Line 4) 2 次の変数集合 c が $\text{AIC}(\text{Model}(\text{Ind}), c) < \text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), c)$ のとき、 I_2 の要素にする。

Line 6) ~ 7) Join-Step は、 I_k の要素である独立な変数集合から、 $k+1$ 次の独立になる候補の変数集合を生成する。Prune-Step では、その変数集合の部分集合が、 I_k にないものを削除する。

Line 15 ~ 16) $\text{AIC}(\text{Model}(\text{Cin}), d)$ は、 v を条件とする $\text{Model}(\text{Cin})$ の AIC である。 $\text{Model}(\text{Dep})$ を支持する変数集合 d をみつけるために $\text{Model}(\text{Ind})$ との関係だけでなく、 $\text{Model}(\text{Cin})$ も考慮する理由は、 d が $\text{Model}(\text{Dep})$ 以外のモデルを支持する場合、それは顕示変数の定義を満たさないことになるため。比較するモデルが多いほど $\text{Model}(\text{Dep})$ の支持の信頼性が増すことになる。しかし、考えられる $\text{Model}(\text{Dep})$ 以外の全てのモデルの個数は膨大なため、それら全てを比較することは困難である。変数集合 i は、独立に関して頑強性をもつ変数集合であるから、 v が条件のもとで i が独立になる条件付独立の状態になる可能性が高い。よって、 $\text{Model}(\text{Cin})$ を比較の対象として考慮している。その有効性を次章の数値実験で示す。

5. 数 値 実 験

2 値の人工データを用いて、本提案手法の有効性を確認する。実験方法とその結果を以下に示す。

5.1 実 験 方 法

X_1, X_2, X_3 は、互いに独立で 0.5 のベルヌーイ分布に従う変数とし、 X_1, X_2, X_3 に関する顕示変数 X_4 を作成するために、その 3 変数の表 3 に示す実現値に応じて 95%

```

1) Algorithm ExposureVariableSelection(Dataset  $D$ ){
2)   /*Dataset  $D$  consists of  $p$  variables and  $n$  samples */
3)    $V = \text{Sets of } pC_1 \text{ variable} = \{X_1, X_2, \dots, X_p\}$ 
4)    $I_2 = \text{Sets of } pC_2 \text{ independent variable combinations in } D$ 
5)   for ( $k = 3; I_{k-1} \neq \emptyset; k++$ ) do
6)      $C_k := \text{apriori-join}(I_{k-1})$ 
7)      $C_k := \text{prune}(C_k)$ 
8)     foreach  $c \in C_k$  do
9)       if  $\text{AIC}(\text{Model}(\text{Ind}), c) < \text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), c)$  then
10)         $I_k = I_k \cup c$ 
11)     end
12)     foreach  $i \in I_{k-1}$  do
13)       foreach  $v \in V$  do
14)         if  $v \not\subset i$  then
15)            $d = i \cup v$ 
16)           if  $\min_{R \in \{\text{Ind}, \text{Dep}, \text{Cin}\}} \text{AIC}(\text{Model}(R), d) = \text{AIC}(\text{Model}(\text{Dep}), d) \wedge d \notin I_k$  then
17)              $E_k = E_k \cup d$ 
18)           end
19)         end
20)       end
21)     return  $\bigcup_{i=3}^k E_i$ 
22)   }

```

図 2 顕示変数選択アルゴリズム

表 3 顕示変数 X_4 の生成パターン

X_1	X_2	X_3	X_4
0	0	0	1
0	0	1	0
0	1	0	0
0	1	1	1
1	0	0	0
1	0	1	0
1	1	0	1
1	1	1	0

の確率で X_4 を生成する (5% の確率で, X_4 に 0, 1 をランダムに与える). $X_5, \dots, X_8$ と $X_9, \dots, X_{12}$ は独立で同一な表 4 に示す確率をもつ同時分布に従う変数とする. 残る 4 変数 $X_{12}, \dots, X_{15}$ は, 互いに独立で 0.5 のベルヌーイ分布に従う変数とする. $X_1, \dots, X_{15}$ から 1000 個のサンプルを生成したものをデータセット D とする. 顕示変数 X_4 の選択の有無ごとに $\{X_1 X_2 X_4\}, \{X_1 X_2 X_3 X_4\}$ の頑強性を評価するために, D と同じサンプルサイズの 1000 回のブートストラップ複写によって, $\{X_1 X_2 X_3\}$ の図 3 の Line 9), $\{X_1 X_2 X_3 X_4\}$ の Line 16) の関係を支持するブートストラップ確率を求める. 以上の操作の 1000 回のシミュレーションによって得られる顕示変数の選択頻度とブートストラップ確率の平均値を算出する.

5.2 実験結果

実験結果を表 5 に示す. 表 5 の $S, \neg S$ は, それぞれ本提案手法によって $\{X_1 X_2 X_3 X_4\}$ が選択された状態,

表 4 同時分布の設定

$X_{5,9}$	$X_{6,10}$	$X_{7,11}$	$X_{8,12}$	p
0	0	0	0	0.3
0	0	0	1	$\frac{0.4}{14}$
0	0	1	0	$\frac{0.4}{14}$
0	0	1	1	$\frac{0.4}{14}$
0	1	0	0	$\frac{0.4}{14}$
0	1	0	1	$\frac{0.4}{14}$
0	1	1	0	$\frac{0.4}{14}$
0	1	1	1	$\frac{0.4}{14}$
1	0	0	0	$\frac{0.4}{14}$
1	0	0	1	$\frac{0.4}{14}$
1	0	1	0	$\frac{0.4}{14}$
1	0	1	1	$\frac{0.4}{14}$
1	1	0	0	$\frac{0.4}{14}$
1	1	0	1	$\frac{0.4}{14}$
1	1	1	0	$\frac{0.4}{14}$
1	1	1	1	0.3

選択されなかった状態を表す. S の頻度 (Frequency と記す) は, 595 回 (59.5%) と高い値ではない. これは人工データが, 頑強性のある顕示変数ばかりを生成するのではなく, 頑強性をもたない顕示変数も生成しているためである. そのため, 頻度そのものを注目するのはではなく, $S, \neg S$ のときの, それぞれのブートストラップ確率に注目する必要がある. $S, \neg S$ の $\{X_1 X_2 X_3 X_4\}$ のブートストラップ確率が 100.0% より, $S, \neg S$ に関係なく $\{X_1 X_2 X_3 X_4\}$ の関連に関する頑強性をもつことがわか

表 5 $\{X_1X_2X_3\}$, $\{X_1X_2X_3X_4\}$ の選択結果

	Frequency	Bootstrap Probability (%)	
		$\{X_1X_2X_3\}$	$\{X_1X_2X_3X_4\}$
S	595	70.9	100.0
$\neg S$	405	43.7	100.0

る。よって、頑強性のある顕示変数を選択するには、独立に関して頑強性をもつ変数集合が選択できるかどうかで決まる。 $\{X_1X_2X_3\}$ の S のブートストラップ確率 70.9% は、 $\neg S$ のブートストラップ確率 43.7% に比べて高い値をもつ。これを統計的検定を行って確認する。 S のブートストラップ確率の母平均 μ_S と $\neg S$ のブートストラップ確率の母平均 $\mu_{\neg S}$ に関して、帰無仮説 $H_0: \mu_S = \mu_{\neg S}$ 、対立仮説 $H_1: \mu_S > \mu_{\neg S}$ のウェルチの検定を行う (有意確率 5% の等分散性の検定結果より等分散性が成り立たなかった)。その検定統計量 t は $t = -\frac{0.709-0.437}{\sqrt{\frac{0.015}{595} + \frac{0.023}{405}}} = 30.0$ となり、 t 値の 5% 点 $t_{0.05}(743) = 1.64$ より帰無仮説は棄却される。以上の結果から提案手法は、独立に関して頑強性をもつ変数集合を選択することができるため、頑強性をもつ顕示変数を選択することができることがわかった。

次に、図 2 の Line 16) の Model(Cin) の有効性を示

表 6 Model(Cin) の有効性

	$(\bigcup_{i=3}^k E_i)$	S -Frequency
Ind, Dep	2717.4	595
Ind, Dep, Cin	177.3	595

す実験結果を表 6 に示す。表 6 は、Line 16) で、2 つのモデルの AIC の関係

$$AIC(\text{Model}(\text{Dep}), d) < AIC(\text{Model}(\text{Ind}), d)$$

で比較した場合と本選択アルゴリズムのように、3 つのモデルの AIC の関係で比較した場合の $(\bigcup_{i=3}^k E_i)$ の平均個数と $\{X_1X_2X_3X_4\}$ の選択頻度 (S -Frequency と記す) を示す。選択頻度は同数で、 $(\bigcup_{i=3}^k E_i)$ の平均個数は、3 つのモデルを使った場合の方が少ないという結果から、Model(Cid) の導入が、不要な変数集合を選択しないように有効に機能していることがわかる。

最後に、変数の個数が 15 個なので、考えられる全ての変数集合の個数は約 $2^{15} = 32768$ 個である。本手法では、考慮した変数集合 d の平均個数は 4758.4 個 (14.5%) であり、より少ない変数集合の組合せを探索するだけで顕示変数を選択できる。

6. ま と め

本稿では、効率的な頑強性をもつ顕示変数の選択手法を提案した。数値実験の結果から、独立モデルの AIC に基づく逆単調性を満たす変数集合を選択することにより、

頑強性をもつ顕示変数を効率的に選択することができた。この性質は、例えば、条件付独立をより満たすような変数を選択する場合にも応用することが可能であると考えられる。

謝 辞

本論文を作成するにあたり、大変貴重なコメントを頂いた査読者殿に感謝致します。

◇ 参 考 文 献 ◇

- [Agrawal 93] Agrawal, R., Imielinski, T. and Swami, A. (1993). Mining Association rules between sets of items in large databases. *The Proceedings of the ACM SIGMOD Conference on Management of Data*, 207-216.
- [Agrawal 94] Agrawal, R., Imielinski, T. and Swami, A. (1994). Fast Algorithm for mining association rules. *The Proceedings of International Conference on Very Large Data Bases*, 487-499.
- [Brin 97] Brin, S., Motwani, R. and Silverstein, C. (1997). Beyond market Baskets; Generalizing Association Rules to Correlations. *The Proceedings of the ACM SIGMOD '97*, 265-276.
- [松田 88] 松田 紀之. (1988). 質的情報の多変量解析. 朝倉書店.
- [Sakamoto, 91] Sakamoto, Y. (1991). *Categorical Data Analysis*. Kluwer Academic Publishers.
- [Silverstein 98] Silverstein, C., Brin, S. & Motwani. (1998). Beyond Market Baskets; Generalizing Association Rules to Dependence Rules. *Data Mining and Knowledge Discovery*. 2-1, 39-68.

〔担当委員：下平 英寿〕

2006 年 8 月 15 日 受理

著 者 紹 介

大野 学

2000 年東海大学海洋学部船舶工学科卒業。2003 年立教大学大学院社会学研究科応用社会学専攻修了。現在、岡山大学大学院自然科学研究科博士後期課程在籍。専攻は計算機統計学。2 値データの分析方法やマーケティングデータ等の分析方法に興味がある。日本計算機統計学会、日本マーケティングサイエンス学会、日本データベース学会、日本船舶海洋工学会各会員。

垂水 共之

1970 年九州大学理学部数学科卒業。1972 年九州大学大学院理学研究科修士課程修了。1973 年広島大学助手。岡山大学講師、助教授を経て、現在、岡山大学アドミッションセンター教授 (環境学研究科併任)。工学博士。統計ソフトウェア、空間統計学に興味がある。専攻は計算機統計学。日本計算機統計学会、日本統計学会、応用統計学会、日本行動計量学会各会員。