情報理論的クラスタリングによる異常値クラスタの検出

Detecting Clusters of Outliers with Information Theoretic Clustering

安藤 晋
Shin Ando

群馬大学大学院工学研究科
Graduate School of Engineering, Gunma University
ando@cs.gunma-u.ac.jp

鈴木 英之進
Einoshin Suzuki

九州大学大学院システム情報科学研究院
Graduate School of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University
suzuki@i.kyushu-u.ac.jp

keywords: Information Bottleneck, information theoretic clustering, outlier detection, minority detection

Summary

Identifying atypical objects is one of the classic tasks in machine learning. Recent works, e.g., One-class Clustering and Minority Detection, have explored the task further to identify clusters of atypical objects which strongly contrast from the rest of the dataset. In such problems, avoiding false positive detection is an important yet significantly difficult issue. In this paper, we propose an information theoretic clustering which aims to compactly represent the global and local structures of the dataset and identify atypical clusters in terms of information geometric distance. The former objective contributes to reducing the number of false positive detections. Its formalization further yields a unifying view of the classic outlier detection and the novel tasks. We present a scalable algorithm for detecting multiple clusters of atypical objects without a pre-defined number of clusters. The algorithm is evaluated as an unsupervised two-class classification using simulated datasets and a text classification benchmark.

1. は じ め に

データ集合中の特異事例は知識発見のための重要な手掛りであり、その検出は機械学習における基本的な問題の一つである。実用的にもデータマイニングの分野で異常値検出や一クラス分類問題への取組みが多くの成果を上げている [Hodge 04]。近年さらに、典型事例と重複するような特異事例のクラスタ検出を扱う一クラスクラスタリング (OCC) [Crammer 04] や Bregman Bubble クラスタリング (BBC) [Gupta 06]、マイノリティ検出 [Ando 06, 安藤 07] 等の研究がある。これらの手法は全体と異なる分布やクラスタ化傾向を持つ部分集合を抽出する問題に取組み、遺伝子発現、テキスト、画像等のベンチマークでの有効性を示した。近年の情報爆発により、観測事例中で知識の構築に必要な関連事例は希薄化し、把握がより困難となっている。これに対し、上の取組みは知識の要素となりうる事例を抽出する手段として期待される。

本稿ではデータ集合の大部分を妥当に説明する確率分布が得られることを前提とし、その分布に従う事例を典型事例と考える。また、典型事例とは大きく異なる生成モデルにより説明される部分集合を特異事例のクラスタとみなす。実用的な問題では特異事例の存在は所与では

なく、そのクラスタが存在しない場合についての考慮を要する。データ集合が典型事例のみで構成される場合にも、その部分集合が特異事例の生成モデルや内部平均距離などの基準に適合し、クラスタとみなせてしまう場合が多い。通常のクラスタリングでは事前に指定した数のクラスタを決定するため、このような部分集合が悪局所解となり擬陽性クラスタとして検出されやすい。特異事例が存在する場合にもこのような悪局所解が擬陽性検出の原因となる。擬陽性検出の抑制は重要な問題だが、このような悪局所解への収束を回避・判別することは困難で、上述の OCC, BBC でも解決されていない。

本研究ではデータ圧縮の枠組みに基づいて特異事例のクラスタ検出に取組む。確率的情報源の圧縮・符号化における一つの中心的な問題がレート歪み理論である。これは符号化によって生じる“歪み”を抑えつつ、圧縮率の高い符号化を求める問題である。符号化をクラスタへの割当てとみなすと、歪みの抑制はクラスタ内類似度の増大、圧縮率の増大はより簡潔なクラスタリングを促すことに相当し、それらを目的とするクラスタリングが定義される。この枠組みを利用したクラスタリング手法は情報理論的クラスタリング [Dhillon 03] と呼ばれ、情報ボトルネック (IB) 法 [Tishby 00] や Bregman クラスタ

リング [Banerjee 05] 等に代表される．IB 法は基準情報を持つ変数を利用するクラスタリング手法で，多くの理論的成果 [Chechik 05, Elidan 05, Slonim 06] や，実応用 [Gao 07, Gordon 03, Hsu 06] がある．圧縮率の増大はクラスタリングにおいてはクラスタ変数の持つ情報量の減少に当たる．典型事例と特異事例のクラスタから構成されるデータ集合では，後者が小さいほどこの情報量は減少する．われわれはこれを正規化に利用することで擬陽性クラスタを縮退させ，擬陽性検出の抑制を目指す．

本研究では観測値のラベルに相当する変数をクラスタリングする問題を扱う．コスト関数には共に相互情報量で表されるクラスタ変数の持つ情報量とクラスタ間の情報幾何的距離の線形和を用いる．後者は検出されるクラスタを情報幾何的な遠さの意味で特異なクラスタとする．以下ではこの問題をマイノリティクラスタリングと呼び，検出されるクラスタを異常値クラスタと呼ぶ．

マイノリティクラスタリングでは異常値をクラスタとして検出するためその統計量を知識発見に利用できる．また，その定式化に基づき外れ値検出，OCC，マイノリティ検出等の問題について統一的に解釈することができる．本稿ではコスト関数の比較からこれらの問題がマイノリティクラスタリングの特殊ケースであることを示す．さらに，マイノリティクラスタリングのコスト関数は異常値クラスタの分布が局所的であるという前提の下でクラスタ毎の寄与に分割され，それぞれが個別に繰返しアルゴリズムによって局所最小解に収束する．われわれはこれを連続的に実行することでクラスタ数を事前に指定せず発見的に複数のクラスタを検出する手順を示す．このアルゴリズムは OCC, BBC の問題であった擬陽性検出を抑制し，高い適合率で異常値クラスタを検出する．

以下に本稿の構成を示す．2 章に情報理論の基本的な定義を示す．3 章，4 章ではマイノリティクラスタリングの定式化とコスト関数の導出を行う．5 章ではマイノリティクラスタリングの定式化に基づく従来手法の統一的な解釈と考察を述べる．6 章ではコスト関数の最小化アルゴリズムを示す．7 章では人工データとテキスト分類ベンチマークを用いて提案手法の実験的な比較検証を行う．8 章で本研究の貢献を整理し，結論を述べる．

2. 基本定義

以下に本稿で用いる情報理論の基本定義を示す． X を独立かつ同一の分布に従う変数とし，その観測値を $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^n$ とする．また， Y を有限集合 $\mathcal{Y} = \{y_i\}_{i=1}^k (k < n)$ の値をとる変数とし， $\mathcal{Y}$ の各要素が一クラスタに対応するものとする．クラスタ y_i に関する条件付確率を $p(x|y_i)$ としたとき，データ x の周辺確率は次式で与えられる．

$$p(x) = \sum_{i=1}^k p(y_i) p(x|y_i) \quad (1)$$

Kullback-Leibler (KL) ダイバージェンスは，確率分布間の情報幾何的な尺度として広く用いられている．二つの分布 $q_1(x), q_2(x)$ に対して下式で定義される．

$$KL(q_1, q_2) = \sum_{x \in \mathcal{X}} q_1(x) \log \frac{q_1(x)}{q_2(x)} \quad (2)$$

変数 X と Y の相互情報量は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} I(Y; X) &= \sum_{y \in \mathcal{Y}} \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} \\ &= \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(y) \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x|y) \log \frac{p(x|y)}{p(x)} \\ &= \langle KL(p(x|y), p(x)) \rangle_Y \end{aligned} \quad (3)$$

ただし $\langle \cdot \rangle_Y$ は Y 上の期待値を表す． $p(x|y)$ はクラスタ y に関する条件付確率であり， $KL(p(x|y), p(x))$ はデータ集合全体から見たクラスタの特異さを表す．(4) から $I(Y; X)$ はそのクラスタの間での期待値とみなせる．

$I(Y; X)$ はまた，エントロピー $H(Y)$ と Y の X に対する条件付エントロピー $H(Y|X)$ と次の関係を持つ．

$$I(Y; X) = H(Y) - H(Y|X) \quad (5)$$

ただし， $H(Y)$ ， $H(Y|X)$ は下式で与えられる．

$$H(Y) = \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(y) \log p(y)$$

$$H(Y|X) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(y|x) \log p(y|x)$$

3. 情報理論的クラスタリング

3.1 情報ボトルネック法

本節ではレート歪み理論を基礎とする学習原理である情報ボトルネック (IB) 法 [Tishby 00] の概要を述べる．

X を観測変数とし， Y を各クラスタに対応する有限個の値をとる変数とする．クラスタリングは X の Y への確率的割当て $p(Y|X)$ を決定する問題と定義される． Y を X を圧縮した符号と考えると，圧縮率 (レート) が相互情報量 $I(Y; X)$ により定量化される．

IB 法はタスクに関連する情報を持つ変数 Z と X の同時確率分布 $p(X, Z)$ を入力とする． Z は例えば一部のクラスや少数のサンプルに関するラベルと考えられる．実用的には完全なラベル付きデータが得難い場合にも，このような部分的なラベルを利用できることが多い．

Z を基にクラスタリングの悪さ (歪み) を $-I(Y; Z)$ と定量化する．レート $I(Y; X)$ と歪み $-I(Y; Z)$ は共に $p(Y|X)$ の汎関数であり，後者に関する上限が与えられたとき，変分法によりその制約の下で前者を最小化する $p(Y|X)$ が求まる．IB 法は次のような二つの相互情報量のラグランジアンを最小化する問題として定式化される．

$$\min_{p(Y|X)} I(Y; X) - \beta I(Y; Z) \quad (6)$$

ただし、一般的なクラスタリング問題では歪みの上限は与えられないため、あるトレードオフ β の下で(6)を最小化するクラスタリングを求める。

(6)の第一項は、クラスタ変数が観測変数に対して持つ情報量であり、情報量基準や最小記述長原理のような学習結果の複雑さに対する正規化項と解釈できる。第二項はクラスタ変数と基準変数間の歪みを定量化する。(6)において Z は圧縮による X に関する情報の損失を抑制する役割を果たすことからボトルネック変数と呼ばれる。

変数間の関係は X が Z の、 Y が X の関数とみなされ、 $Z \rightarrow X \rightarrow Y$ というマルコフ過程で表される。 X が所与のとき Z と Y は互いに独立であるため常に不等式 $I(Z; Y) < I(Z; X)$ が成立する。これを用いて最小化問題(6)の凸性や解析的な解が得られる [Tishby 00]。

3.2 情報理論的クラスタリングの定式化

IB 法はクラスタリング問題をクラスタ変数 Y のレート $I(Y; X)$ と教師情報 Z について持つ情報量 $I(Y; Z)$ からなるコスト関数の最小化問題として定式化する。これに対し、以下では新たに教師情報が無い場合についての情報理論的クラスタリングを定式化する。

X の観測値 $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$ を別のクラスタ変数によって記述することを考える。 x_i が文書を表す単語頻度ベクトルとすれば、これは文書をカテゴリにクラスタリングする問題に当たる。まず、 $T = \{1, 2, \dots, n\}$ の値をとる変数 T に対し $\mathcal{X}$ を 1 対 1 で割当ててを考える。これは一文書を一カテゴリとする極めて冗長なカテゴリ化とみなせる。さらに、 T を $\mathcal{Y} = \{y_1, \dots, y_k\}$ ($k < n$) の値をとるクラスタ変数 Y に割当てて問題を考える。 Y は T をより簡潔にまとめた大カテゴリに相当する。このときレートは $I(Y; T)$ で与えられる。続いて、歪みとして Y が観測変数について持つ情報量から $-I(Y; X)$ を考える。 x_i が単語頻度ならばカテゴリ Y が単語に関して多くの情報を保持するほどこの値は小さくなる。

以上より T のクラスタリングを次のようなレート歪み問題の形式の最小化問題として定式化する。

$$\min_{p(Y|T)} I(Y; T) - \beta I(Y; X) \quad (7)$$

ただし、決定変数は $p(Y|T)$ 、入力は $p(X, T)$ である。

$p(X, T) = p(T)p(X|T)$ は $|\mathcal{X}| = |T| = n$ より各データが個別の情報源から生成される n 混合モデルの記述とみなせる。(7)ではこれを入力として $p(Y|T)$ を決定し、そこからより簡潔なモデルの記述 $p(X|Y)$ を得る。(7)の第一項はこの記述の簡潔さを促す正規化項となる。一方、第二項は観測値について維持される情報量、すなわちクラスタ間のダイバージェンスの増大を促す。

(7)は(6)との比較から X をボトルネック変数とする IB 法と解釈できる。(7)では X が Y の持つ情報の損失を抑制する変数となる。ただし、IB 法が X, Z を所与と

するのに対し、(7)では X のみが所与で教師情報を用いない。変数の関係は Y が T の、 T が X の関数とみなせるため、 $X \rightarrow T \rightarrow Y$ というマルコフ過程で表される。

4. マイノリティクラスタリング

マイノリティクラスタリングは大域的に分布する典型事例と局所的に分布する特異事例が混在するデータ集合をクラスタリングする問題である。以下では、前節に示した情報理論的クラスタリングに異常値クラスタの局所性に関する制約を導入することでこの問題を定式化する。

$\tau \in T$ を観測値 x_τ に対応するクラス、 y_1 を典型的事例、 $y_2, \dots, y_k$ を異常値クラスタに対応する値とする。さらに、 T は $\mathcal{Y}$ に離散的、決定的に割当てられる、すなわち条件付確率の値が $p(y_i|\tau) \in \{0, 1\}$ に限定されるものとする。なお、決定的、確率的割当てがクラスタリングに与える影響については [Kearns 99] が詳しい。このとき T が与えられると Y に関するあいまいさはなくなるため $H(Y|T) = 0$ である。 $I(Y; T) = H(Y) - H(Y|T)$ から(7)のコスト関数は次式 F のように書換えられる。

$$F = H(Y) - \beta I(Y; X) \quad (8)$$

さらにクラスが対応する事例についても次のような制約をおく。各事例が属する異常値クラスタはただ一つと考え、他の異常値クラスタとの同時確率は無視できるものとする。このとき異常値クラスタは相互に重複や包含関係を持たない局所的な分布とみなせる。ただし、典型事例の分布はデータ集合全体を覆う大域的なものと考え、異常値クラスタとの重複を考慮する。

上の制約はクラスタ y_i に割当てられた τ に対応する事例 x_τ の他の異常値クラスタに対する条件付確率が 0 に限定されることとして、次のような式で表される。

$$p(x_\tau|y_i) = 0 \quad \forall i, \tau \text{ s.t. } p(y_i|\tau) = 0, i \neq 1 \quad (9)$$

4.1 歪みの分離

(9)の制約の下ではコスト関数(7)に対するクラスタ毎の寄与を分離することができる。

$I(Y; X)$ に対するクラスタ y_i の寄与 Φ_i は

$$\Phi_i = p(y_i) \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x|y_i) \log \frac{p(x|y_i)}{p(x)}$$

と表され、 $\sum_{i=1}^k \Phi_i = I(Y; X)$ である。ここで、

$$\mathcal{X}_i = \{x_\tau : p(y_i|\tau) = 1\} \quad (10)$$

となる部分集合 $\mathcal{X}_i$ を考えると、(9)から $x_\tau \notin \mathcal{X}_i$ となる i, τ について $p(x_\tau|y_i) = 0$ であるため異常値クラスタの寄与 Φ_j ($j \in \{2, \dots, k\}$) は下式で与えられる。

$$\Phi_j = p(y_j) \sum_{x \in \mathcal{X}_i} p(x|y_j) \log \frac{p(x|y_j)}{p(x)} \quad (11)$$

一方，典型事例の寄与分 Φ_1 も(11)と同様の式で表され，さらに各 $\mathcal{X}_i$ ($i = 1, \dots, k$) 毎の和に分離できる．これらを $\Phi_1(\mathcal{X}_i)$ と表すと

$$\Phi_1(\mathcal{X}_i) = \sum_{x \in \mathcal{X}_i} p(x, y_1) \log \frac{p(x|y_1)}{p(x)} \quad (12)$$

であり， $\Phi_1 = \sum_{i=1}^k \Phi_1(\mathcal{X}_i)$ である．

ここで，周辺分布 $p(x)$ を(1)から次のように書換える．

$$p(x) = p(y_1)p(x|y_1) + \sum_{i=2}^k p(y_i)p(x|y_i)$$

上式の $\sum$ 以下は(9)より $x \in \mathcal{X}_1$ に関しては無視できるため， $\Phi_1(\mathcal{X}_1)$ は次のように書換えられる．

$$\begin{aligned} \Phi_1(\mathcal{X}_1) &= \sum_{x \in \mathcal{X}_1} p(x, y_1) \log \frac{p(x|y_1)}{p(y_1)p(x|y_1)} \\ &= \sum_{x \in \mathcal{X}_1} p(x, y_1) \log \frac{1}{p(y_1)} \end{aligned} \quad (13)$$

(11), (12), (13) より $I(Y; X) = \sum_{i=1}^k \Phi_i$ は

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^k \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \left\{ p(x, y_1) \log \frac{p(x|y_1)}{p(x)} + p(x, y_i) \log \frac{p(x|y_i)}{p(x)} \right\} \\ + \sum_{x \in \mathcal{X}_1} p(x, y_1) \log \frac{1}{p(y_1)} \end{aligned} \quad (14)$$

と書換えられる．

4.2 記述コストの分離

(8)ではクラスタ変数の持つ情報量が $H(Y) = \sum_{i=1}^k p(y_i) \log \frac{1}{p(y_i)}$ で表される．ここで周辺分布 $p(y_i)$ が

$$p(y_i) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) p(y_i|x)$$

を満たすことから $H(Y)$ は次のように書換えられる．

$$\sum_{i=1}^k \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x, y_i) \log \frac{1}{p(y_i)} \quad (15)$$

(15)は総和の順序を交換することで $\mathcal{X}_i$ 毎の寄与分に分離できる．以下ではこれを $\Pi(\mathcal{X}_i)$ と表す．(9)より $x \in \mathcal{X}_1$ に関して $p(x, y_i)$ を無視できるため， $\Pi(\mathcal{X}_1)$ は

$$\Pi(\mathcal{X}_1) = \sum_{x \in \mathcal{X}_1} p(x, y_1) \log \frac{1}{p(y_1)}$$

と書ける．同様に $\mathcal{X}_j$ ($j \in \{2, \dots, k\}$) については $p(x, y_1)$, $p(x, y_i)$ 以外は無視できるため $\Pi(\mathcal{X}_j)$ は次式で表される．

$$\Pi(\mathcal{X}_j) = \sum_{x \in \mathcal{X}_j} \left\{ p(x, y_1) \log \frac{1}{p(y_1)} + p(x, y_j) \log \frac{1}{p(y_j)} \right\}$$

以上より $H(Y) = \sum_{i=1}^k \Pi(\mathcal{X}_i)$ は次式で表される．

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^k \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \left\{ p(x, y_1) \log \frac{1}{p(y_1)} + p(x, y_i) \log \frac{1}{p(y_i)} \right\} \\ + \sum_{x \in \mathcal{X}_1} p(x, y_1) \log \frac{1}{p(y_1)} \end{aligned} \quad (16)$$

4.3 コスト関数の分離

(14)と(16)を(8)に代入し， $\beta = 1$ とすると $\mathcal{X}_1$ に関する総和が相殺され，クラスタ毎に分離した形のコスト関数 F_L を得る．

$$\begin{aligned} F_L = - \sum_{i=2}^k \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \left\{ p(x, y_1) \log \frac{p(y_1)p(x|y_1)}{p(x)} \right. \\ \left. + p(x, y_i) \log \frac{p(y_i)p(x|y_i)}{p(x)} \right\} \end{aligned} \quad (17)$$

(17) $\sum$ 内の二項はそれぞれ $\mathcal{X}_i$ 上での $p(x, y_1)$ と $p(x)$, $p(x, y_i)$ と $p(x)$ の KL ダイバージェンスである．いずれも異常値クラスタの分布が $p(x)$ から遠いほど，すなわち非典型的であるほど増大し，同時に F_L は減少する．

本節では y_1 のみが典型事例に対応するとしたが，典型事例の分布が複数ある場合でもコスト関数は異常値クラスタ毎の総和として表される．その場合， $p(x|y_1)$ を混合分布と考えることで(17)と同様の形式が得られる．

$\beta = 1$ は情報理論的クラスタリングにおける典型的な値であり [Banerjee 04, 安藤 07]，クラスタの密度と局所最小解の変分に関する条件から導出される．7章に示す実験では全てこの値を用いる．この手法の β に対する依存については実験結果を踏まえ8章に述べる．

5. 従来手法との関連

本節ではコスト関数の比較を基に複数の従来手法とマイノリティクラスタリングについて統一的な解釈を示す．

5.1 マイノリティ検出

マイノリティ検出 (MD) 法 [Ando 06] はデータ集合中のマイノリティ，すなわち少数派のクラスタを多数派である典型事例との分布の差異に注目して検出する手法である．この手法では観測値 $\mathcal{X} = \{x_j\}_{j=1}^n$ を多数派クラス y_1 と少数派クラス y_2 のいずれかに割当てて問題を扱い，解として次のような決定的な割当てを考える．

$$p(y_i|x_j) = \delta_{hi}, h = \arg \max_{h \in \{1,2\}} p(x_j, y_h) \quad (18)$$

δ はクロネッカーのデルタを表す．さらに，少数派クラスに関する $p(y_2) \ll 1$ という前提から次の近似を用いる．

$$\begin{aligned} p(x) &= p(y_1)p(x|y_1) + p(y_2)p(x|y_2) \\ &\approx p(y_1)p(x|y_1) = p(x, y_1) \end{aligned} \quad (19)$$

その上で次のコスト関数を最小化する割当てを求める．

$$F_{MD} = \sum_{x \in \mathcal{X}_2} \log \frac{p(x; \pi^*)}{p(y_2)p(x|y_2)} \quad (20)$$

ここで， $\mathcal{X}_2$ は $\{x \in \mathcal{X} : p(y_2|x) = 1\}$ となる少数派事例集合を表す． π は $p(x|y_1)$ のパラメータであり， π^* はその $\mathcal{X}$ 上での最尤推定値である．MD 法では(19)より $p(x; \pi^*)$ を $p(x)$ の近似として固定する．

(20) は $\log \frac{1}{p(y_2)}$ と $\log \frac{p(x|\pi^*)}{p(x|y_2)}$ に分けられ，それぞれ次のように解釈できる．前者は少数派クラスターの持つ情報量を定量化し，簡潔なクラスタリングほど減少する．後者は多数派と少数派クラスターの分布間の情報幾何的距離を表し，少数派の特異性が高いほど減少する．

ここで，(17) について $k = 2$ とした場合を F_L^2 とする．

$$F_L^2 = \sum_{x \in \mathcal{X}_2} \left\{ p(x, y_1) \log \frac{p(x)}{p(y_1)p(x|y_1)} + p(x, y_2) \log \frac{p(x)}{p(y_2)p(x|y_2)} \right\} \quad (21)$$

F_L^2 と F_{MD} との比較から次の命題を得る．

命題 1. MD 法はマイノリティクラスタリングにおいて(19)を仮定し， $k = 2$ とした場合の特殊ケースであり，そのとき F_L^2 と F_{MD} の最小化は等価である．

証明.(19) の前提の下では F_L^2 の $\sum$ 内の第一項は無視できるため，第二項のみ考慮すればよい．(10) の定義から $\mathcal{X}_2$ は二つの式で同じ部分集合を指す．一方，各事例の割当ては決定的であるため $x \in \mathcal{X}_2$ に関して $p(x, y_2)$ は同一である．よって $p(x)$ を推定値 $p(x; \pi^*)$ で置換えると F_L^2 と F_{MD} は同じ形式となり同時に最小化される．□

上の命題からマイノリティクラスタリングを基に MD 法は $k > 2$ の場合に拡張することができ，そのコスト関数 F_{MD}^k は次式で与えられる．

$$F_{MD}^k = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \log \frac{p(x; \pi^*)}{p(y_i)p(x|y_i)} \quad (22)$$

5.2 外れ値検出とークラス分類

ある事例についてデータ集合中の大部分の事例と同一の分布から生成されたという仮説が棄却されるとき，その事例は外れ値とみなせる [Roth 06]．その決定関数は所与の信頼度 α と生成モデルに基づく周辺確率 $p(x)$ から定義される．例えば正規分布に従う変数では中心からのマハラノビス距離がある閾値を越える値が外れ値となる．

ークラス分類 [Schölkopf 01] は外れ値検出を二次計画問題として定義し，サポートベクトルマシン (SVM) の教師無し学習への応用であるークラス SVM によって解く．[Schölkopf 01] はさらに，ークラス分類の一つとして超球 (Ball) を用いた外れ値検出 (Ball 分類) 問題を示した．これは n 個の事例を超球によって分類する問題で

ある．超球外的事例を外れ値とし，内外の事例間のマージンが最大となるよう超球を決定する．ただし，外れ値の割合の上限としてパラメータ ν を指定する．

超球内の事例の中心を μ_c とすると， μ_c から x までの距離はカーネル関数 ϕ を用いて $\phi(x, \mu_c)$ と表される．ここで，カーネル ϕ に固有な指数関数族の確率分布 p_ϕ が

$$p_\phi(x, \mu_c) = Z(x) \exp \left(-\frac{1}{2} \phi(x, \mu_c) \right) \quad (23)$$

と定義される．ただし， Z は正規化項である．

p_ϕ を用いると Ball 分類は次のコスト関数 F_{Ball}

$$F_{Ball} = \sum_{i=1}^{\nu n} \log p_\phi(x_i, \mu_c) \quad (24)$$

の最小化問題として表される．

(24) の最小化は外れ値検出の双対問題である．すなわち，あるデータ集合中で信頼度 α で外れ値となる事例の割合には上限 ν_α が存在し， $\nu = \nu_\alpha$ とした Ball 分類と信頼度 α を用いた外れ値検出は同じ外れ値集合を出力する．

ここで，カーネル ϕ, ψ から定まる確率分布 p_ϕ, p_ψ を典型事例と異常値クラスターの生成モデルとし， p_ψ が

$$p_\psi(x, x(i)) \approx 0, \forall x \in \mathcal{X} \setminus x(i) \quad (25)$$

を満たす狭い分布となるよう ψ を選ぶ．このとき異常値クラスターは要素を一つだけ持つシングルトンクラスターとなる．これを踏まえ，Ball 分類について次の命題を得る．

命題 2. F_{Ball} の最小化は $k = \nu n$ とし，(25) を満たす異常値クラスターの生成モデルを用いた MD 法と等しい．

証明.(25) より異常値クラスターは $\mathcal{X}_i = \{x(i)\}$ のみを要素とする．この要素の y_i に対する条件付確率は(23)より， $p(x(i)|y_i) = p_\psi(x(i), x(i))$ と与えられ，これは全てのクラスターとその要素について同一である．周辺分布 $p(y_i)$ についても同様であるから(22)の最小化で意味を持つのは $p(x; \pi^*)$ のみである． π は多数派事例の分布パラメータであるから，その平均 μ_1 とカーネル ϕ により $p(x; \pi) = p_\phi(x, \mu_1)$ と表される．このとき $F_{MD}^{\nu n}$ と F_{Ball} は同じ形をとり，これらの最小化は等価である．□

5.3 ークラスクラスタリング

多くの実用的なデータ集合ではクラスタ化傾向を示さない事例が大部分を占めるが，その中に密なクラスターを構成する事例集合が存在するとき，それは知識発見の手掛かりとなることが多い．ークラスクラスタリング (OCC) はそのようなクラスターの抽出を目標とした手法で，文書や遺伝子発現量のベンチマークでの有効性が示されている [Crammer 04, Gupta 05]．

OCC は s 個の事例を内包する最小半径の超球を求める問題を扱うが，任意の Bregman ダイバージェンスを距離関数として扱えるためロジスティック関数や Pearson

相関等の幅広い尺度を利用できる点が特長である．そのコスト関数は D_φ を Bregman ダイバージェンスの定義を満たす距離関数， μ を超球の中心， $\mathcal{C}$ を s 個の要素からなるクラスタとするとき次式で定義される．

$$F_{OC} = \sum_{x \in \mathcal{C}} D_\varphi(x, \mu_{\mathcal{C}}) \quad (26)$$

Bregman ダイバージェンス D_φ からは固有の指数関数分布 p_φ が次のように定義される．

$$p_\varphi(x; \theta) = Z(x) \exp(-\beta D_\varphi(x, \mu_{\mathcal{C}})) \quad (27)$$

θ は φ に固有な分布パラメータ， Z は正規化関数を表す．

OCC と確率モデルに基づく手法の関係は p_φ を用いて次のように説明される． Y を $\mathcal{Y} = \{0, 1\}$ の値をとる変数とする． $y = 1$ をクラスタに対応する値とし，条件付確率 $p(x|y)$ を $p_\varphi(x; \theta)$ で与える．一方， $y = 0$ はクラスタ化傾向を持たない事例集合に対応する値とし，その分布は疎な一様分布とする．このとき $p(y|x)$ の最尤推定

$$\max_{p(y|x)} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(y) \sum_{x \in \mathcal{X}} \log p(x|y) \quad (28)$$

と F_{OC} の最小化は双対な問題となる [Gupta 06]．ただし，OCC では $p(y|x) \in \{0, 1\}$ となる決定的割当てのみを考える．また， $p(x|0)$ は一様分布であるため尤度最大化原理では決定されず，初期推定値に固定される．

OCC の多クラスタへの自然な拡張が Bregman Bubble クラスタリング (BBC) [Gupta 06] である．そのコスト関数 F_{BBC} は (28) を基に次式で与えられる．

$$F_{BBC} = \sum_{y=1}^k \sum_{x \in \mathcal{C}_y} \log \frac{1}{p(x, y)} \quad (29)$$

$\mathcal{C}_y = \{x \in \mathcal{X} : p(y|x) = 1\}$ は各クラスタの要素を表す．
命題 3. F_{BBC} の最小化はクラスタの要素数を s 個に限定し，かつ典型事例を一様分布とした MD 法に等しい．

証明. $p(x; \pi^*)$ が $x \in \mathcal{X}$ 上で一様であるとき (22) の最小化に関してこれを無視できる．さらに， $p(x, y) = p(x|y)p(y)$ より F_{MD}^k は F_{BBC} と同じ形式をとる． $\square$

5.4 考察

[Crammer 04] らは Ball 分類と OCC のコスト関数の解析を行い，前者ではデータ集合全体の大域的な特徴，後者ではクラスタの局所的な特徴に基づいて特異事例が決定されることを示した．両手法の対照性はコスト関数 (24)，(29) の形式からも明らかである．

ここでマイノリティ検出のコスト関数 (22) を

$$\sum_{i=1}^k \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \left\{ \log p(x; \pi) + \log \frac{1}{p(x, y_i)} \right\} \quad (30)$$

と書換えると， F_{MD}^k が上述の二手法のコスト関数を結合する形をとることが分かる．ここから命題 2，3 についてさらに次のような定性的な解釈が得られる．異常値クラスタをシングルトンに限定したとき，KL ダイバージェンスはカーネル関数で表される距離に還元し，その定義は外れ値と一致する．一方，背景雑音が一様に分布するとき，その KL ダイバージェンスへの寄与は無視できるため異常値クラスタは OCC, BBC のクラスタに等しい．ただし，MD 法は BBC とは異なり，背景が密または非一様な分布，ガウス分布等の場合も扱える．(30) から，MD 法は外れ値と密なクラスタという二つの対照的な概念を同時に一般化する手法とみなせる．

MD 法や OCC は典型事例の分布を固定して異常値クラスタを推定する．典型事例と異常値クラスタが重複し，後者の割合が非常に小さい場合，そのパラメータ決定が全体に与える影響は小さく，これは妥当と考えられる．

6. アルゴリズム

6.1 マイノリティ検出 (MD) アルゴリズム

IB 法は周辺分布 $p(y|x)$ ， $p(z|y)$ と条件付確率 $p(y)$ を繰返し更新し，コスト関数の局所最小解に収束するアルゴリズムを持つ [Tishby 00]．以下ではマイノリティクラスタリングの典型事例の分布を固定した場合，すなわち，MD 法のコスト関数 (22) について同様の枠組みにより局所最小化する手順を示す．

まず，(22) へのクラスタ i の寄与 L_i を最小化する手順を示す． $F_L = \sum_i L_i$ であり， L_i は下式で与えられる．

$$L_i(\theta_i, \mathcal{X}_i) = \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \left\{ \log \frac{p(x; \pi^*)}{p(x; \theta_i)} + \log \frac{1}{p(y_i)} \right\} \quad (31)$$

この問題における決定変数は条件付確率 $p(y|\tau)$ であり，他の分布はそこからベイズの定理等に基づき計算できる．そこで， $p(y|\tau)$ ， $p(y)$ ， $p(x|y)$ の三つの分布について，他の二つを固定したとき L_i を最小とする値を求め，その繰返しにより L_i を収束させることを考える．

あるステップ t での各分布の更新式を次のように与える．

$$p_{t+1}(y_i|\tau) = \delta_{\tau h}, h = \arg \max_{\tau \in T} p_t(x_\tau, y_i) \quad (32)$$

$$p_{t+1}(y) = \sum_{\tau \in T} p_{t+1}(y|\tau) p(\tau) \quad (33)$$

$$p_{t+1}(x|y) = p(x, \theta^*) \quad (34)$$

ただし， $\theta^* = \arg \max_{\theta} \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \log p(x|\theta)$ である．また， $\mathcal{X}_i$ は $p_t(y_i|\tau)$ から (10) に従って決定される．

命題 4. (32)-(34) を繰返し更新するアルゴリズムは $p(Y|T)$ を決定変数とする (31) の局所最小解に収束する．

証明. $p(x|y_i) < 1$ と $0 < p(x, \pi^*)$ より (31) の $\sum$ 内の第一項は下界を持つ．また， $p(y_i) < 1$ より第二項も非零で

INPUT: 観測値 $\mathcal{X} = \{x_j\}_{j=1}^n$, 最尤推定値 π^* , 初期割当て $p_0(y_i|T)$
 OUTPUT: $\theta, p(y|T)$
 METHOD:
 初期化 $\theta = \arg \max_{\theta} \sum_{\mathcal{X}_i} \log p(x|\theta)$
repeat
 for $x_{\tau} \in \mathcal{X}_i$ **do**
 if $p(x_{\tau}|\theta) < p(x_{\tau}|\pi^*)$ **then**
 $p(y_i|\tau) = 0$
 end if
end for
 $p(y_i) \leftarrow \frac{1}{n} \sum_{x_{\tau} \in \mathcal{X}_i} p(y_i|\tau)$
 $\theta \leftarrow \arg \max_{\theta} \sum_{x \in \mathcal{X}_i} \log p(x|\theta)$
until F_{MD} converges
return $\theta, \{p(y_i|\tau)\}_{\tau=1}^n$

図 1 マイノリティ検出 (MD) アルゴリズム

あるため L_i 全体でも下界を持つ。よって (32), (33), (34) がそれぞれ L_i を単調に減少させることを示せばよい。

$p(y|\tau)$ の更新は同時に (10) で定義される $\mathcal{X}_i$ を更新する。(32) は尤度比 $\log \frac{p(x, \pi^*)}{p(x, y_i)}$ が正となる事例を $\mathcal{X}_i$ から除くように更新するため, L_i は減少する。

$\mathcal{X}_i$ から要素が除かれると, 全ての観測事例は同一で $p(\tau) = \frac{1}{|T|}$ であるため (33) によって $\log \frac{1}{p(y)}$ が減少し, 同時に L_i も減少する。

(31) より, $p_{t+1}(y)$ と $p(x, \pi^*)$ がともに固定されたとき L_i を最小化する $p_{t+1}(x|y)$ のパラメータは最尤推定値 θ^* である。よって (34) の更新は L_i を減少させる。

以上から, 各式の更新は L_i は単調に減少させ, さらに $p(Y|T)$ の組合せは有限であるため (32)-(34) の有限の繰返しによって L_i は局所最小解に収束する。□

図 1 に MD アルゴリズムの擬似コードを示す。 $p_0(y_i|T)$ は初期割当てを表し, 出力 $p(y_i|T)$ から異常値クラスタが $\{x_{\tau} : p(y_i|\tau) = 1\}$ と決定される。図 1 の繰返し内ではクラスタの要素 $\mathcal{X}_i$ のみを計算で用いるため, L_i は他のクラスタとは独立に最小化することができる。

典型事例のみから構成される, すなわち全要素が $p(x, y_1)$ から生成されたクラスタ $\mathcal{X}_i$ は MD アルゴリズムにより縮退する。ステップ t において部分集合 $\mathcal{X}_i^t$ が, $\mathcal{X}_i^{t+1} = \mathcal{X}_i^t - x'$ に更新された場合を考えると, x' は典型事例であるからそれを除くことで θ_i と π^* によって表される分布間の距離は増大し, $\log \frac{p(x, \pi^*)}{p(x, \theta_i)}$ の期待値は減少する。また, クラスタの要素数が減ることから $\log \frac{1}{p(y_i)}$ が減少し, あわせて L_i も減少する。 x' を除くことで $p(x; \theta_i)$ の分散は縮小し, より狭い分布となる。 $p(x; \theta_i) < p(x; \pi^*)$ となる領域が拡大すると, 十分に密な $\mathcal{X}$ では $\log \frac{p(x, \pi^*)}{p(x, \theta_i)}$ が負となる事例 x' が増加し, さらに $\mathcal{X}_i^{t+1} = \mathcal{X}_i^t - x'$ と

INPUT: 観測値 $\mathcal{X} = \{x_i\}_{i=1}^n$, 最尤パラメータ π^* , 最大初期化回数 $t_{\max}$, 最小クラスタサイズ $s_{\min}$
 OUTPUT: $p(\mathcal{Y}|T), \Theta = \{\theta_i\}_{i=1}^k$
 METHOD:
 Initialize $t = 1, i = 1, \mathcal{X}' = \mathcal{X}, \Theta = \emptyset$
 Define $T' = \{\tau : x_{\tau} \in \mathcal{X}'\}$
repeat
 Set $p_0(y_i|T')$ s.t. $\forall x_j \in \mathcal{X}', \theta_i^0 \neq \arg \max_{\theta \in \Theta + \theta_i^0} p(x_j; \theta)$
 $\{\theta_i, p(y_i|T')\} = MD_2(\mathcal{X}', \pi^*, \theta_i^0)$
 if $\sum_{T'} p(y_i|\tau) > s_{\min}$ **then**
 $\mathcal{X}' \leftarrow \mathcal{X}' \setminus \mathcal{C}, \Theta \leftarrow \Theta + \theta$
 $p(y_i|T \setminus T') = \{0, \dots, 0\}$
 $p(y_i|T) \leftarrow p(y_i|T') + p(y_i|T \setminus T')$
 $i \leftarrow i + 1$
 end if
 $t \leftarrow t + 1$
until $t > t_{\max}$
return $p(\mathcal{Y}|T), \Theta$

図 2 シーケンシャルマイノリティ検出 (sMD) アルゴリズム

する更新が可能となる。よって, このような $\mathcal{X}_i$ は θ_i の統計的推定が可能な範囲で継続して縮退する。

上の解析は正規化項と典型事例のモデルの設定により提案したコスト関数において典型事例のみで構成される悪局所解が極めて小さいクラスタに縮退することを意味する。次節ではこの特性を利用した閾値による擬陽性クラスタの判別と逐次的なクラスタ数の決定の手順を示す。

MD アルゴリズムに要する計算量は $p(y_i|\tau)$ と $p(y_i)$ の更新に関しては $O(|\mathcal{X}_i|)$ である。 $p(x|y_i)$ の更新では $\mathcal{X}_i$ の統計量を求めるが, これは指数関数族を含め多くのモデルで逐次更新可能であり, その場合の計算量は定数オーダーである。よって MD の一ステップの計算量は $O(|\mathcal{X}_i|)$ と, 暫定の異常値クラスタの要素数に線形となる。

6.2 逐次マイノリティ検出 (sMD) アルゴリズム

異常値クラスタの局所性に関する制約 (9) は, 同時に複数のマイノリティクラスタが互いに重複しないことを意味する。この前提の下では MD アルゴリズムを繰返し用いて複数のクラスタを検出することができる。この手順を逐次マイノリティ検出 (sMD) と呼ぶ。

MD アルゴリズムを関数 $MD(\cdot)$ とすると, sMD の手順は次のように記述できる。

- (1) $\mathcal{X}' = \mathcal{X}, T' = \{\tau : x_{\tau} \in \mathcal{X}'\}$ とし, Θ, i をそれぞれ $\emptyset, 1$ に初期化する。
- (2) 初期割当て $p_0(y_i|T')$ を乱数等より適宜決定し, $\{\theta_i, p(y_i|T')\} = MD(\mathcal{X}, \pi^*, p_0(y_i|T'))$ を求める。
- (3) $\sum_{T'} p(y_i|\tau) > s_{\min}$ であるとき, $\{x_{\tau} : p(y_i|\tau) = 1\}$ を集合 $\mathcal{X}'$ から除き, θ_i を Θ に加える。

図3 UG^2 のプロット

(4) $t < t_{\max}$ ならば $t = t + 1$ とし、ステップ (2) から繰返す．そうでなければ終了する．

ここで $t_{\max}$ は最大初期化回数を表す．

ステップ (3) では閾値 $s_{\min}$ を導入し、 θ の統計的推定が困難な小クラスタを出力から除く．このとき、 $MD(\cdot)$ 内の繰返しをクラスタの大きさが $s_{\min}$ 以下になったとき終了した場合と同じ出力が得られる． $s_{\min}$ は θ の推定に十分な事例数を適宜選択する．この選択は生成モデルに関する考慮に基づいて行い、データに直接は依存しない．

図2にsMDの擬似コードを示す．sMDの特長として混合数 k に相当する入力が必要な点が挙げられる．sMDは情報量基準に基づくモデル選択のように混合数 k を変えて解を比較するのではなく、異なる初期解から $t_{\max}$ 回試行した後混合数を $|\Theta|$ と決定する．このとき、6.1節に示した悪局所解に対するロバスト性から $k + 1$ 番目のクラスタの存在が経験的に棄却される．

7. 実験結果

7.1 人工データ

以下では前節に示したアルゴリズムを人工的なユークリッド空間のデータ集合を用いて検証する．異なる中心とフルランクの分散共分散行列を持つ四つの正規分布からそれぞれ100, 150, 150, 200点ずつ生成し、特異事例とする．典型事例は二種類用意し、一方は $[-1:1]^d \equiv \Omega^d$ 上に一様分布する集合とする． d は次元数であり $d = 2, 3, 5, 8$ である．事例数は 1000×2^d であり、高次元でも低密度にはならない．もう一方は平均 $\vec{0}$ で、単位分散共分散行列を持つ正規分布から生成された10,000点とする．実験では特異事例と一種類の典型事例を混合して用いる．典型事例が一様である方を UG^d 、もう一方を GG^d と記す．

§1 視覚的検証

2次元データのクラスタリングでは視覚的な検証が効果的である．以下では UG^2 と GG^2 に対するsMDアルゴリズムの検出結果を視覚的に検証する．図3と図4に

両者のプロットを示す．典型事例 t を灰色の $\times$ で表し、特異事例 $a_1, \dots, a_4$ を各色の $+$ で表す．なお、典型事例と異常値クラスタの生成モデルは UG^2 については一様分布と正規分布、 GG^2 については共に正規分布とする．

UG^2 からの典型的な検出結果を図5に示す．異常値クラスタ $c_1, \dots, c_4$ を各色の $*$ で表し、それ以外の事例 nc を $\times$ で表す．図6は GG^2 からの典型的な検出結果で同様に異常値クラスタを各色の $+$ 、それ以外を $\times$ で示す．いずれのデータでも特異事例の分布にほぼ近い形状で異常値クラスタが検出された．

図3、図4のデータに混合分布推定や密度推定に基づくクラスタリング [Zhong 03, Hinneburg 03] や OCC 等の他のクラスタリング手法を適用した場合、クラスタが典型事例の部分集合に収束する、あるいはデータ集合全体を覆うように発散するといった現象が多く見られ、図5、図6程度の良い結果を得ることは難しい．

§2 分類としての評価

特異事例の検出は典型事例との二クラス分類問題とみなすこともできる．以下ではsMDとBBCアルゴリズム [Gupta 06] の人工データでの分類性能を比較する．

クラス分布に偏りがある場合、分類手法の評価には適合率 Pr と再現率 Re が標準的に用いられる．ここでは特異事例として生成した事例の中で異常値クラスタとして検出したものを真陽性 TP 、それ以外を擬陰性 FN とする．同様に、典型事例の中で異常値クラスタとして検出したものを擬陽性 FP 、それ以外を真陰性 TN とする．異常値クラスタの種類は区別せず2クラス分類問題として扱う． Pr と Re は次式で与えられる．

$$Pr = \frac{TP}{TP + FP}, Re = \frac{TP}{TP + FN}$$

実験ではsMDを複数のデータ集合に適用し、適合率の平均や分散を評価するが、それぞれの典型事例および特異事例が異なる分布から生成されるため、適合率のとる値の範囲がそれらの密度比によって異なる．そこでデータによる差異を減らすため、相対的な適合率の指標 Pr_{rel} [安

図4 GG^2 のプロット

表 1 sMD と BBC による適合率と再現率

d	sMD			BBC	
	Pr_b	Pr_{rel}	Re	Pr_{rel}	Re
2	0.22	1.6 ± 0.20	0.77 ± 0.082	0.49 ± 0.52	0.39 ± 0.41
3	0.20	1.8 ± 0.095	0.63 ± 0.15	0.34 ± 0.47	0.31 ± 0.40
5	0.18	2.3 ± 0.89	0.66 ± 0.11	0.23 ± 0.43	0.19 ± 0.35
8	0.18	1.7 ± 0.80	0.57 ± 0.40	-	-

藤 07] を用いる．まず，再現率が 1 となる分類を行う最小の楕円を特異事例を生成した正規分布の固有ベクトルを基に作り，そのときの適合率を Pr_b とする．相対適合率を $Pr_{rel}=Pr/Pr_b$ とする．実験では Pr_b が 0.2 前後と典型事例の密度が高いデータ集合を用いた．

[Gupta 06] は複数の BBC のアルゴリズムを示したが，本実験ではその中で最もロバストとされる BBC-Press を用いる．BBC-Press は局所解を回避するため，クラスタを徐々に縮小するスケジューリングを行う．初期クラスタの大きさを $s_0 = 100 \times (2^d)$ とし，各ステップでコスト関数(29) を最小化するような s 個の事例を選択した後， s を 1 減ずる．これを繰返し，クラスタサイズが事前に指定した値 $s_f = 200$ に到達した後一ステップ毎にコスト関数の収束を調べる．BBC はクラスタ数 k を事前に要するため $k = 4$ を与える．異なる初期値から $10 \times 2^{d-3}$ 回試行を繰返し，コスト関数が最も小さい 4 クラスタを検出結果とする．sMD も初期クラスタは同じく $s_0 = 100 \times (2^d)$ とし，コスト最小の 4 クラスタを検出結果とする．また， $i_{max} = 10 \times 2^{d-1}$ ， $s_{min} = 50$ とする．なお，sMD, BBC とも実験結果はこれらの値の選択に大きく依存しない．特異事例の生成モデルは正規分布とみなす，すなわち sMD の θ は平均と分散共分散行列を，BBC の D_ϕ はマハラノビス距離を表すものとする．典型事例・背景分布の生成モデルは一様分布とする．

特異事例の正規分布を変えて 20 個の異なる UG^d データを用意し，sMD, BBC アルゴリズムを適用した．表 1 にその際の適合率と再現率の平均と標準偏差を示す．

図 5 UG^2 からのマイノリティ検出

sMD は次元数が増しても安定した適合率と再現率を示す．また，相対的な適合率が常に 1 以上となっていることから，sMD は再現率よりも適合率に偏った分類を行うと考えられる．さらに， $d = 8$ のとき数十万件のデータ集合から 0.2% 以下の特異事例集合を高い適合率で検出していることから，sMD の規模拡張性は高いと考えられる．

一方，BBC は適合率と再現率が sMD よりも有意に低く，分散も大きい．これは BBC がクラスタが特異事例を含まない局所解に頻繁に収束した際に適合率と再現率が大きく下がることからくる．BBC の収束により得られたクラスタのうち $d = 2, 3, 5$ のときそれぞれ 53%, 76%, 88% が悪局所解，すなわち，全て典型事例から構成された擬陽性クラスタであった．これに対し sMD ではクラスタの大きさが s_{min} 未満となった場合，クラスタ無しとみなすため悪局所解は各次元数でそれぞれ 0%, 0%, 2% であった．[Gupta 06] も報告しているように，OCC, BBC には背景が疎な分布の場合も悪局所解が問題となる．sMD との差は高次でより顕著になるが，これは事例数の増大にともない局所解の数も増加するためと考えられる．この結果からは，背景分布が密な場合や次元数 d が大きい場合，BBC の適用には困難が予想される．

7.2 テキスト分類問題

ロイター 21578 コーパス^{*1} は様々な学習手法の検証に利用されるテキストベンチマークデータである．10,789 文書から構成され，各文書は一つ以上のトピックを持つ．

図 6 GG^2 からのマイノリティ検出

*1 <http://www.daviddlewis.com/resources/testcollections/reuters21578>

表 2 各特異トピックにおける sMD の適合率/再現率

topic	kMD	BBC
oilseed	0.91/0.88	0.91/0.95
money-supply	0.94/0.96	0.015/0.016
sugar	0.97/0.92	0/0
gnp	0.96/0.99	0.82/0.88
Average	0.96/0.95	0.44/0.46

実験では典型トピック *acq* と 4 つの特異トピック *oilseed*, *money-supply*, *sugar*, *gnp* を持つ文書を抽出し、結合したデータ集合 $D1$ を用いる。各トピックを持つ文書の数 は 2448, 192, 190, 184, 163 である。

文書の生成モデルは多くの従来研究で用いられる Bag-of-words モデルとする。文書 $\mathbf{x}$ は辞書 $\mathcal{W} = \{w_i\}_{i=1}^k$ に含まれる単語の出現頻度 v_i により $\mathbf{x} = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ と表す。辞書 $\mathcal{W}$ の選択には [Slonim 02] らの教師情報を用いない特徴選択法を用い、文書集合 $\mathcal{X}$ との相互情報量 $I(W; X)$ への寄与 $I(w_i)$ が大きい k 語を $\mathcal{W}$ とする。

$$I(w_i) = p(w_i) \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} p(\mathbf{x}|w_i) \log \frac{p(\mathbf{x}|w_i)}{p(\mathbf{x})}$$

以下の実験では辞書サイズ $k = 200$ を用いる。

トピック y に対する文書 $\mathbf{x}$ の条件付確率 $p(\mathbf{x}|y)$ は以下のような多項分布とする [Nigam 00]。

$$p(\mathbf{x}|y) = V! \prod_{j=1}^k \frac{p(w_j|y)^{v_j}}{v_j!}$$

ただし、 $V = \sum_{i=1}^k v_i$ は $\mathbf{x}$ 内の単語の総出現回数である。各単語の条件付確率 $p(w_j|y)$ は典型トピック q 、特異トピック $\{r_i\}$ に対してそれぞれ次のように与える。

$$p(w_j|q) = \frac{1 + \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} v_j}{k + \sum_{i=1}^k \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} v_j}, p(w_j|r) = \frac{1 + \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{Z}_i} v_j}{k + \sum_{i=1}^k \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{Z}_i} v_j}$$

ただし、 $\mathcal{Z}_i$ は $y = r_i$ となる $\mathcal{X}$ の部分集合である。

sMD と BBC-Press を以下の設定で $D1$ に適用する。BBC の距離関数は文書の多項分布間の KL ダイバージェンスとし、初期クラスタはランダムに選択した 1 文書から最も近い 800 文書とする。収束を調べる閾値は $s_f = 200$ とし、 $k = 4$ は所与とする。異なる初期解から 5 回試行し、コスト関数が最も小さい 4 クラスタを検出結果とする。sMD は $t_{\max} = 20$ とし、最小のコストを与えるクラスタ 4 つを検出結果とする。クラスタの初期化方法は BBC と同様とする。検出したクラスタについて、その要素の内 *acq* を除いて最も多いトピックをクラスタのラベルとみなし適合率と再現率を計算する。

表 2 に二つのアルゴリズムのトピック毎の適合率と再現率を示す。sMD は全てのトピックで教師付学習手法に

匹敵する高い値を示した。一方、BBC は相当回数の試行が典型トピックの部分集合に収束するため、相対適合率が sMD よりも有意に低く、再現率も大きく下がる。BBC-Press は s_f に到達してからすぐに収束するため、その適合率は s_f の選択にも依存する。 s_f が異常値クラスタの大きさに近いとき比較的良好な適合率を得やすいが、この値を事前に知るのは困難である。[Gupta 05] は OCC の s_f 値を変えて試行を繰返す手法を提案したが、その場合には試行回数が非常に大きくなるという問題がある。

BBC, sMD 共にデータの大部分が典型事例であるという前提を用いており教師無し学習手法との比較には注意を要するが、本実験の結果からは sMD が事例数が少なく、教師情報を得難いクラスタの検出に有効と考えられる。

8. お わ り に

本稿では情報理論的枠組みを基に異常値クラスタの検出問題であるマイノリティクラスタリングの定式化を示し、外れ値検出やークラスクラスタリング等の従来手法との関連を議論した。さらに、複数のクラスタを逐次的に検出するアルゴリズムを示し、教師情報の無い分類問題においてその性能を実験的に検証した。

マイノリティクラスタリングでは正規化項と典型事例のモデルの利用により、その分布に近い異常値クラスタは記述コストが見合わず縮退する。7.1 節の実験における適合率・再現率および悪局所回数への収束率からも sMD が BBC よりも擬陽性検出を抑え、悪局所解に対してロバストであることが分かる。OCC, BBC はマイノリティ検出の特殊ケースとみなせるが、クラスタの大きさを指定するため記述コストに関する正規化の効果は失われる。また、次数の増大にともないその差はより顕著になるが、これはデータの規模によって悪局所解の数が増加するためと考えられる。sMD は擬陽性クラスタの少なさを利用してクラスタの個数を一定回数の試行後に経験的に決定するが、これはクラスタ数 k を事前に決定することが難しい場合に効果的と考えられる。

sMD および BBC のアルゴリズムでは、典型事例のパラメータを更新しないため全スキャンの繰返しが必要である。これは各クラスタのパラメータ決定の全体に与える影響を簡略化したものといえる。全クラスタを同時に評価する k 平均法や最尤混合推定等と比較するとこのような処理は並列性が高く、空間計算量も抑えられるため規模拡張性が高いといえる。

マイノリティクラスタリングの入力 $p(T)p(X|T)$ は $\mathcal{X}$ からノンパラメトリックに推定される分布といえるが、更新式(32)-(34)にはその要素である $p(x|\tau)$ は直接現れない。その結果、手法自体は $p(x|y)$ のモデルのみを考えるパラメトリックなものとなる点は興味深い。また、マイノリティクラスタリングの定式化では、異常値クラスタを局所的に分布するものとみなすが、生成モデルとし

て分散の小さい正規分布や多項分布などの指数関数族を扱う場合、このような前提は妥当と考えられる。

本稿の実験で用いた β の値は擬陽性クラスタの検出を避けるという目的に適したものであった。ただし、 β は正規化項の重みであり、真陽性クラスタにおける適合率と再現率にも影響するため実用的な値の選択はデータの種類と用途に依存する。応用毎の要請に対しては本実験で用いた値を基準として実験的に調整するのが妥当である。 β の値が具体的に擬陽性クラスタの検出率や適合率・再現率に与える影響に関してさらに検討が必要である。

マイノリティクラスタリングはデータ集合中の特異事例を孤立した事象ではなくクラスタとして抽出し、その統計量を利用できる手法であり、今後の課題としてこの特徴を生かした知識発見の応用に取組む。

◇ 参 考 文 献 ◇

- [Ando 06] Ando, S. and Suzuki, E.: An Information Theoretic Approach to Detection of Minority Subsets in Database, in *ICDM '06: Procs. of the Sixth International Conference on Data Mining*, pp. 11–20, Washington, DC, USA (2006), IEEE Computer Society
- [安藤 07] 安藤 晋, 佐久間 淳, 鈴木 英之進, 小林 重信: 情報理論的枠組に基づくマイノリティ集合の検出, *人工知能学会論文誌*, Vol. 22, No. 3, pp. 311–321 (2007)
- [Banerjee 04] Banerjee, A., Dhillon, I. S., Ghosh, J., and Merugu, S.: An Information Theoretic Analysis of Maximum Likelihood Mixture Estimation for Exponential Families, in *Procs. of the 21st International Conference on Machine Learning*, pp. 182–190, ACM (2004)
- [Banerjee 05] Banerjee, A., Merugu, S., Dhillon, I. S., and Ghosh, J.: Clustering with Bregman Divergences, *J. Mach. Learn. Res.*, Vol. 6, pp. 1705–1749 (2005)
- [Chechik 05] Chechik, G., Globerson, A., Tishby, N., and Weiss, Y.: Information Bottleneck for Gaussian Variables, *J. Mach. Learn. Res.*, Vol. 6, pp. 165–188 (2005)
- [Crammer 04] Crammer, K. and Chechik, G.: A Needle in a Haystack: Local One-class Optimization, in *Procs. of the 21st International Conference on Machine Learning*, pp. 26–33, New York, NY, USA (2004), ACM Press
- [Dhillon 03] Dhillon, I. S., Mallela, S., and Kumar, R.: A Divisive Information-Theoretic Feature Clustering Algorithm for Text Classification, *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 3, pp. 1265–1287 (2003)
- [Elidan 05] Elidan, G. and Friedman, N.: Learning Hidden Variable Networks: The Information Bottleneck Approach, *J. Mach. Learn. Res.*, Vol. 6, pp. 81–127 (2005)
- [Gao 07] Gao, Y., Gu, S., Li, J., and Liao, Z.: The Multi-view Information Bottleneck Clustering, in *Advances in Databases: Concepts, Systems and Applications*, Vol. 4443 of *Lecture Notes in Computer Science*, pp. 912–917, Springer Verlag, Berlin (2007)
- [Gordon 03] Gordon, S., Greenspan, H., and Goldberger, J.: Applying the Information Bottleneck Principle to Unsupervised Clustering of Discrete and Continuous Image Representations, in *Procs. of Ninth IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, Vol. 1, pp. 370–377, Los Alamitos, CA, USA (2003), IEEE Computer Society
- [Gupta 05] Gupta, G. and Ghosh, J.: Robust One-class Clustering using Hybrid Global and Local Search, in *Procs. of the 22nd International Conference on Machine Learning*, pp. 273–280, New York, NY, USA (2005), ACM Press
- [Gupta 06] Gupta, G. and Ghosh, J.: Bregman Bubble Clustering: A Robust, Scalable Framework for Locating Multiple, Dense Regions in Data, in *ICDM '06: Procs. of the Sixth International Conference on Data Mining*, pp. 232–243, Washington, DC, USA (2006), IEEE Computer Society
- [Hinneburg 03] Hinneburg, A. and Keim, D. A.: A General Approach to Clustering in Large Databases with Noise, *Knowl. Inf. Syst.*, Vol. 5, No. 4, pp. 387–415 (2003)
- [Hodge 04] Hodge, V. and Austin, J.: A Survey of Outlier Detection Methodologies, *Artif. Intell. Rev.*, Vol. 22, No. 2, pp. 85–126 (2004)
- [Hsu 06] Hsu, W. H., Kennedy, L. S., and Chang, S.-F.: Video Search Reranking via Information Bottleneck Principle, in *MULTIMEDIA '06: Procs. of the 14th annual ACM International Conference on Multimedia*, pp. 35–44, New York, NY, USA (2006), ACM
- [Kearns 99] Kearns, M. J., Mansour, Y., and Ng, A. Y.: An Information-theoretic Analysis of Hard and Soft Assignment Methods for Clustering, in *Learning in Graphical Models*, pp. 495–520, MIT Press, Cambridge, MA, USA (1999)
- [Nigam 00] Nigam, K., McCallum, A., Thrun, S., and Mitchell, T. M.: Text Classification from Labeled and Unlabeled Documents using EM, *Machine Learning*, Vol. 39, No. 2/3, pp. 103–134 (2000)
- [Roth 06] Roth, V.: Kernel Fisher Discriminants for Outlier Detection, *Neural Comput.*, Vol. 18, No. 4, pp. 942–960 (2006)
- [Schölkopf 01] Schölkopf, B., Platt, J. C., Shawe-Taylor, J., Smola, A. J., and Williamson, R. C.: Estimating the Support of a High-Dimensional Distribution, *Neural Computation*, Vol. 13, No. 7, pp. 1443–1471 (2001)
- [Slonim 02] Slonim, N., Friedman, N., and Tishby, N.: Unsupervised Document Classification using Sequential Information Maximization, in *SIGIR '02: Procs. of the 25th annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*, pp. 129–136, New York, NY, USA (2002), ACM Press
- [Slonim 06] Slonim, N., Friedman, N., and Tishby, N.: Multivariate Information Bottleneck, *Neural Computation*, Vol. 18, No. 8, pp. 1739–1789 (2006)
- [Tishby 00] Tishby, N., Pereira, F. C., and Bialek, W.: The Information Bottleneck Method, in *Computing Research Repository (CoRR)*, physics/0004057 (2000)
- [Zhong 03] Zhong, S. and Ghosh, J.: A unified framework for model-based clustering, *J. Mach. Learn. Res.*, Vol. 4, pp. 1001–1037 (2003)

〔担当委員：鷲尾 隆〕

2008 年 2 月 13 日 受理

—— 著 者 紹 介 ——

安藤 晋 (正会員)

1999 年東京大学工学部電子情報工学科卒業。2004 年同大学大学院工学系研究科電子工学専攻博士課程修了。博士 (工学)。東京工業大学大学院総合理工学研究科特別研究員、横浜国立大学工学研究院助手を経て 2008 年 4 月より群馬大学大学院工学系研究科情報工学専攻助教。現在に至る。進化的計算手法、データマイニングの研究に従事。IEEE, ACM, 情報処理学会各会員。

鈴木 英之進 (正会員)

1988 年 3 月東京大学工学部航空工学科卒業。1993 年 3 月同大学院工学系研究科航空工学専攻博士課程修了。博士 (工学)。東京工業大学助手、横浜国立大学講師、助教授を経て 2006 年 4 月より九州大学大学院システム情報科学研究科教授。現在に至る。データマイニング、機械学習、知識工学に関する研究に従事。情報処理学会, AAAI, ACM, IEEE 各会員。