クラスタサイズ調整変数を導入したクラスタリング手法の評価

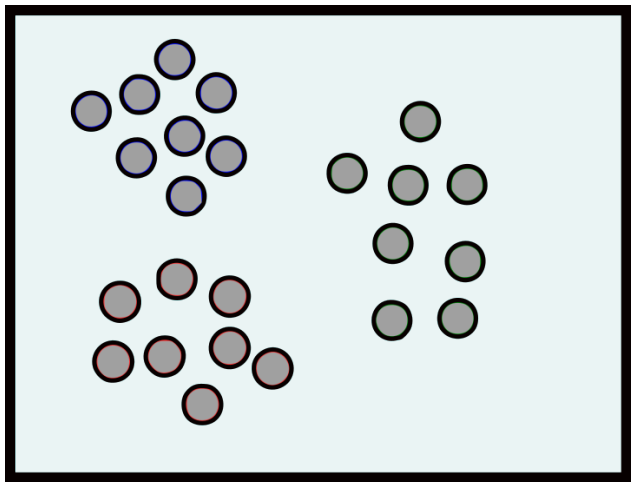
池辺 颯一

芝浦工業大学 工学部 通信工学科

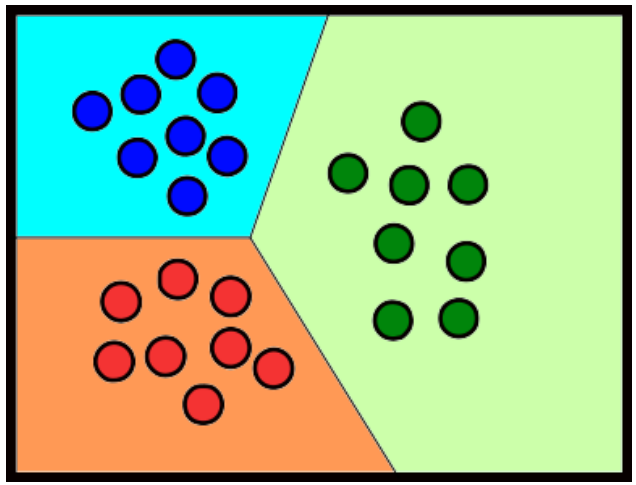
2018 年 1 月 16 日

概要・背景

- 情報化社会の発展によりデータが複雑かつ膨大に
- ビッグデータを人の手で分類するのは難しい
- それらのデータを自動的に分類するクラスタリングに着目



クラスタリング前



クラスタリング後

目的・目標

目的

より精度が高いクラスタリング手法の発見

目標

クラスタサイズ調整変数を導入した 3 つの手法について比較と評価を行う

実験対象

提案手法

- eFCMA
- qFCMA
- sFCMA

クラスタリングの最適化問題

eFCMA

$$\underset{u,v,\alpha}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^{C}\sum_{k=1}^{N} u_{i,k}\|x_k - v_i\|_2^2 + \lambda^{-1}\sum_{i=1}^{C}\sum_{k=1}^{N} u_{i,k}\log\left(\frac{u_{i,k}}{\alpha_i}\right)$$

$$\text{subject to } \sum_{i=1}^{C} u_{i,k} = 1\ ,\ \sum_{i=1}^{C}\alpha_i = 1 \text{ and } \lambda > 0, \quad \alpha_i > 0$$

N	データ数	x_k	データ数
C	クラスタ数	v_i	クラスタ中心
λ	ファジィ化パラメータ	$u_{i,k}$	帰属度
α_i	クラスタサイズ調整変数		

クラスタリングの最適化問題

qFCMA

$$\underset{u,v,\alpha}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^{C} \sum_{k=1}^{N} (\alpha_i)^{1-m} (u_{i,k})^m \|x_k - v_i\|_2^2 + \frac{\lambda^{-1}}{m-1} \sum_{i=1}^{C} \sum_{k=1}^{N} (\alpha_i)^{1-m} (u_{i,k})^m$$

$$\text{subject to } \sum_{i=1}^{C} u_{i,k} = 1 \ , \ \sum_{i=1}^{C} \alpha_i = 1 \ \text{ and } \ \lambda > 0 \ , \ m > 1 \ , \ \alpha_i > 0$$

N	データ数	x_k	データ数
C	クラスタ数	v_i	クラスタ中心
λ, m	ファジィ化パラメータ	$u_{i,k}$	帰属度
α_i	クラスタサイズ調整変数		

クラスタリングの最適化問題

sFCMA

$$\underset{u,v,\alpha}{\text{minimize}} \sum_{i=1}^{C} \sum_{k=1}^{N} (\alpha_i)^{1-m} (u_{i,k})^m \|x_k - v_i\|_2^2$$

$$\text{subject to } \sum_{i=1}^{C} u_{i,k} = 1 \ , \ \sum_{i=1}^{C} \alpha_i = 1 \ \text{ and } \ m > 1 \ , \ \alpha_i > 0$$

N	データ数	x_k	データ数
C	クラスタ数	v_i	クラスタ中心
m	ファジィ化パラメータ	$u_{i,k}$	帰属度
α	クラスタサイズ調整変数		

研究方法

1. 人工データ実験
2. 実データ実験
3. 実データ実験で算出した ARI により各手法を評価

評価方法

ARI (Adjusted Rand Index)

- -1 から 1 までの範囲で精度評価を行う指標
- 1 の時に完全一致で 0 の時にランダム
- ARI の値が高いほど高評価

人工データ実験

使用する人工データ

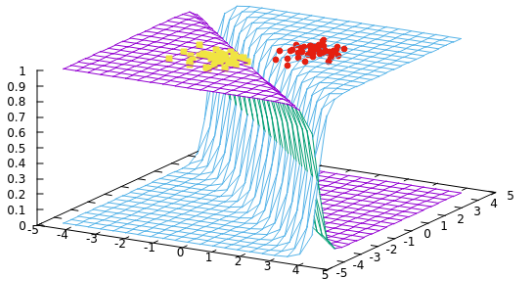
- **平均値** $(-1, -1)$, **標準偏差** $(0.5, 0.5)$ **及び平均値** $(-1, -1)$, **標準偏差** $(0.5, 0.5)$ **のガウスサンプリングで生成**
- **データ数**: 100
- **クラス数** : 2

人工データ実験のアルゴリズム

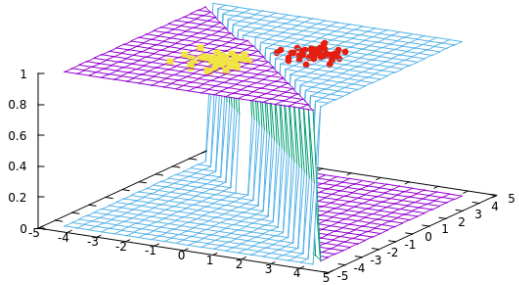
1. クラスタ中心 V をランダムに与える。
2. V を用いて帰属度 U を更新する。
3. U を用いて V 及びクラスタサイズ調整変数 A を更新する。
4. 収束条件すれば終了し、そうでない場合は 2 に戻る。

実験結果:人工データ

eFCMA



$\lambda = 1$



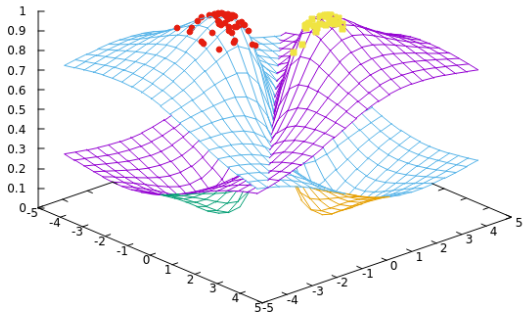
$\lambda = 10000$

eFCMA の特徴

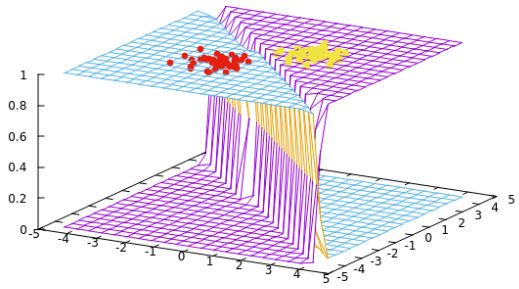
パラメータ λ を無限大に近づけるほど HCM に近づく

実験結果:人工データ

sFCMA



$m = 2$



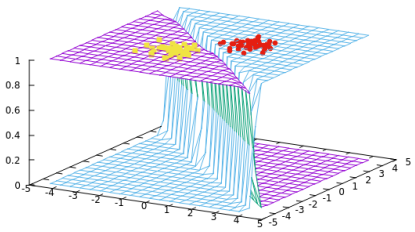
$m = 1.01$

sFCMA の特徴

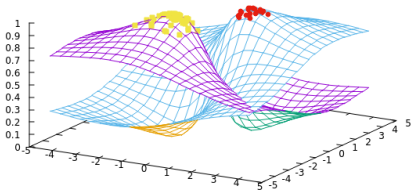
パラメータ m を 1 に近づけるほど HCM に近づく

実験結果:人工データ

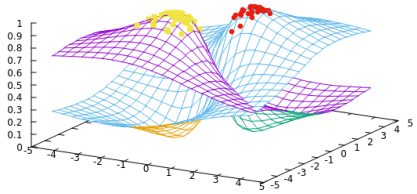
qFCMA



$m = 1.01\ ,\ \lambda = 10$



$m = 2\ ,\ \lambda = 10$

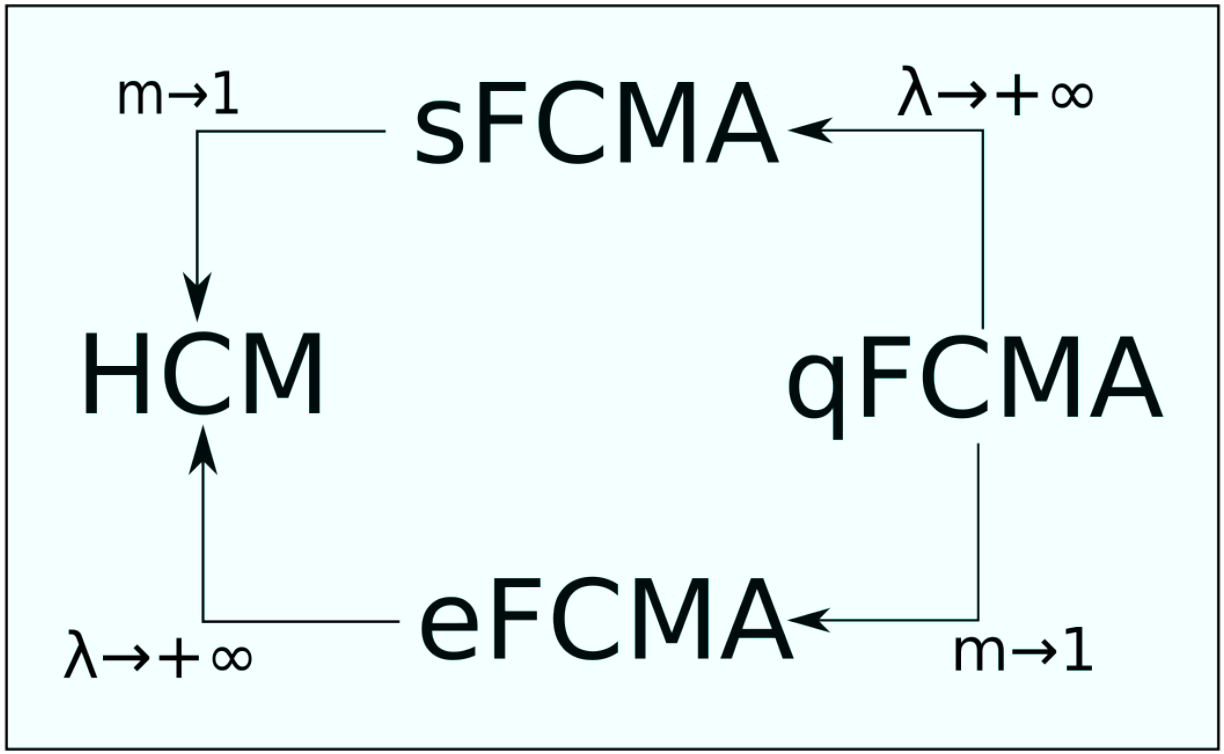


$m = 2\ ,\ \lambda = 10000$

qFCMA の特徴

- **パラメータ λ を無限大に近づけると sFCMA に近づく**
- **パラメータ m を 1 に近づけると eFCMA に近づく**

各手法間の関係



実データ実験

User Knowledge Modeling Data Set

- **被験者の勉強時間、試験結果など** 5 **属性を収録したデータ**
- **ソース** : UCI Machine Learning Repository
- **個体数** : 403
- **クラス数** : 4(**非常に低い、低い、中央、高い**)

実験条件

eFCMA

パラメータ λ を 0.1 から 0.1 刻みで 100 まで変化させる

qFCMA

- **パラメータ λ を 0.1 から 0.1 刻みで 100 まで変化させる**
- **パラメータ m を 2 から 0.01 刻みで 1.01 まで変化させる**

sFCMA

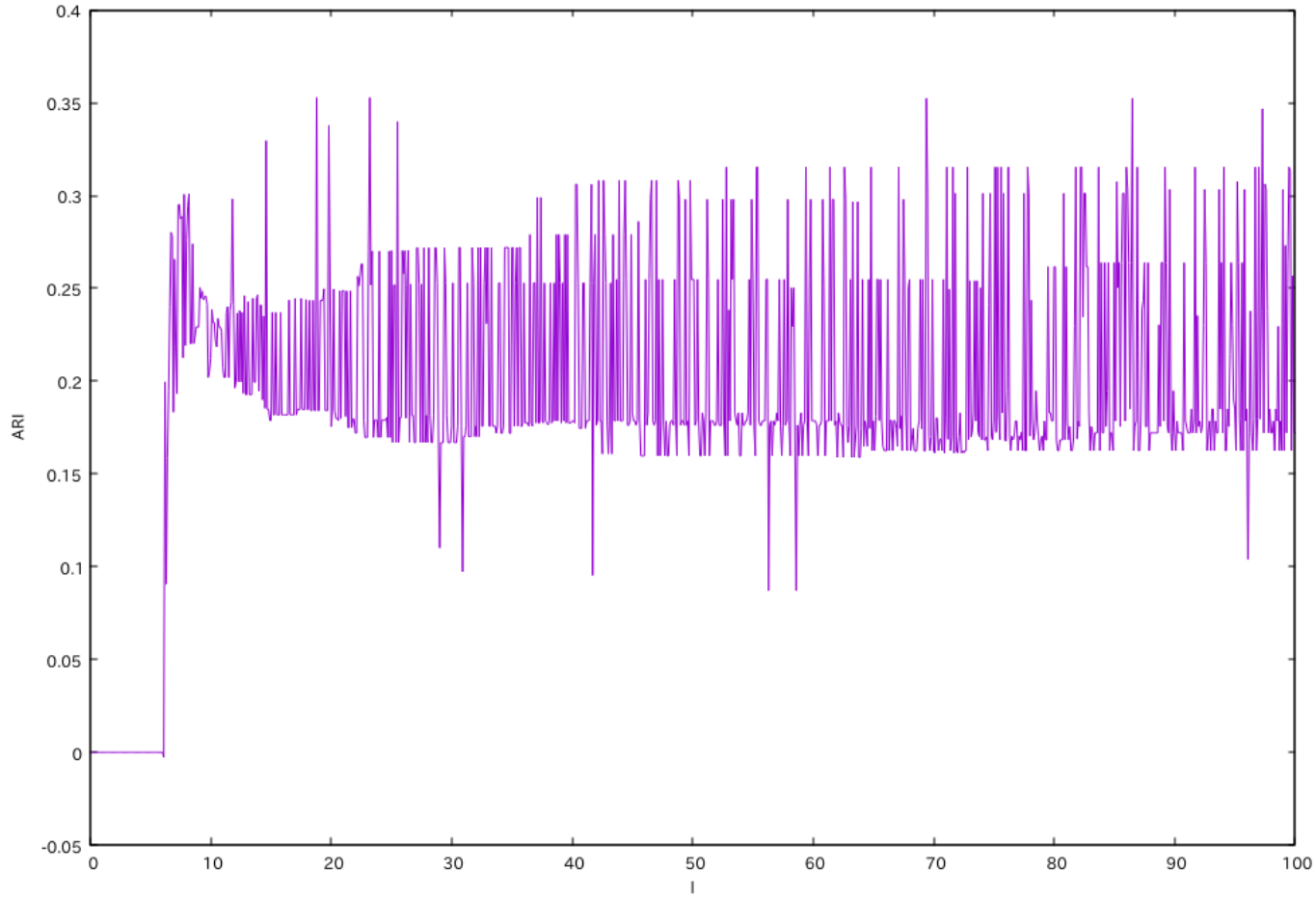
パラメータ m を 2 から 0.01 刻みで 1.01 まで変化させる

実データ実験のアルゴリズム

1. 正解帰属度を用いて U を初期化する。
2. U を用いてクラスタ中心 V 及びクラスタサイズ調整変数 A を更新する。
3. 収束すれば終了し、そうでない場合は 2 に戻る。

実験結果:実データ

eFCMA



最高 ARI:0.315282 ($\lambda = 99.5$))

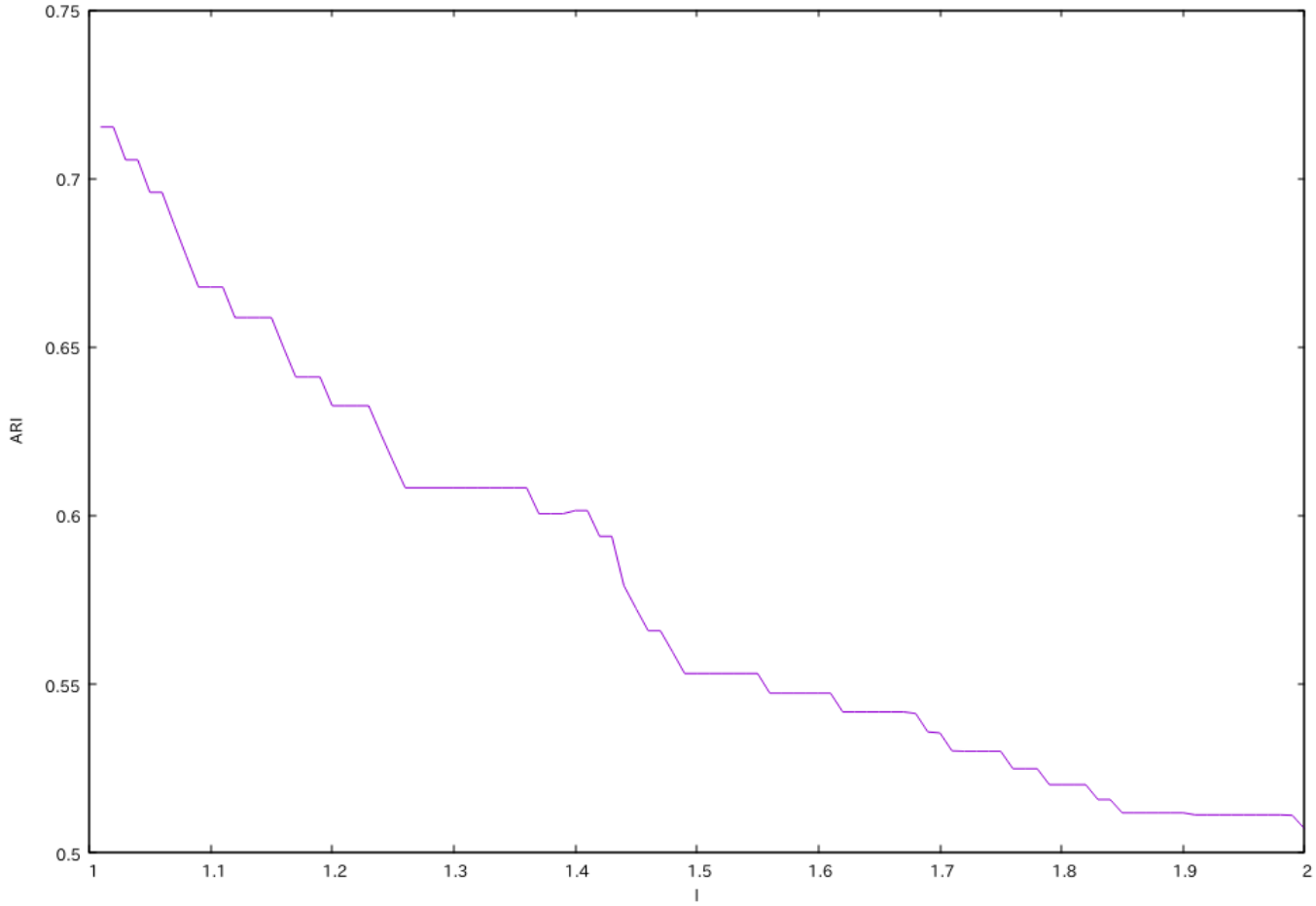
実験結果:実データ

qFCMA

最高 ARI:

実験結果:実データ

sFCMA



最高 ARI:0.715312 $(m = 1.01)$

実験結果

各手法の最高 ARI

eFCMA	0.315282	$\lambda = 99.5$
qFCMA		$\lambda = ,\ m =$
sFCMA	0.715312	$m = 1.01$

評価

sFCMA が最も高評価

考察・課題

考察

- sFCMA と eFCMA、qFCMA との差は、エントロピー項の有無。
- エントロピー項を削除したことが計算結果に影響したと考えられる。

課題

- 他の実データでも同様の傾向が現れるかどうかの検証。
- エントロピー項が影響する原因及び理由の調査。

まとめ

目的

より精度が高いクラスタリング手法の発見

目標

クラスタサイズ調整変数を導入した 3 つの手法について比較と評価を行う

実験結果

sFCMA が高評価となった

考察

エントロピー項を削除したことが計算結果に影響したと考えられる

補足:eFCMA の更新式

$$
\begin{aligned}
v_i &= \frac{\sum_{k=1}^{N} u_{i,k} x_k}{\sum_{k=1}^{N} u_{i,k}}, \\
u_{i,k} &= \frac{\pi_i \exp(-\lambda \|x_k - v_i\|_2^2)}{\sum_{j=1}^{C} \alpha_j \exp(-\lambda \|x_k - v_j\|_2^2)}, \\
\alpha_i &= \frac{\sum_{k=1}^{N} u_{i,k}}{N}.
\end{aligned}
$$

補足:qFCMA の更新式

$$
\begin{aligned}
v_i &= \frac{\sum_{k=1}^{N}(u_{i,k})^m x_k}{\sum_{k=1}^{N}(u_{i,k})^m}, \\
u_{i,k} &= \frac{\alpha_i(1+\lambda(1-m)\|x_i - v_k\|_2^2)^{\frac{1}{1-m}}}{\sum_{j=1}^{C}\alpha_j(1+\lambda(1-m)\|x_j - v_k\|_2^2)^{\frac{1}{1-m}}}, \\
\alpha_i &= \frac{1}{\sum_{j=1}^{C}\left(\sum_{k=1}^{N}\frac{(u_{j,k})^m(1-\lambda(1-m)d_{j,k})}{(u_i,k)^m(1-\lambda(1-m)d_{i,k})}\right)^{\frac{1}{m}}}.
\end{aligned}
$$

補足:sFCMA の更新式

$$
\begin{aligned}
v_i &= \frac{\sum_{k=1}^{N} (u_{i,k})^m x_k}{\sum_{k=1}^{N} (u_{i,k})^m}, \\
u_{i,k} &= \frac{1}{\sum_{j=1}^{c} \frac{\alpha_j}{\alpha_i} \left(\frac{d_{j,k}}{d_{i,k}} \right)^{\frac{1}{1-m}}}, \\
\alpha_i &= \frac{1}{\sum_{j=1}^{C} \left(\sum_{k=1}^{N} \frac{(u_{j,k})^m d_{j,k}}{(u_{i,k})^m d_{i,k}} \right)^{\frac{1}{m}}}.
\end{aligned}
$$