

レート歪み理論による ディリクレ過程平均法の閾値パラメータ解釈

小林 真佐大[†] 渡辺 一帆[†]

[†] 豊橋技術科学大学工学部情報・知能工学課程

1. はじめに

代表的なクラスタリング手法の一つである k-means 法を拡張する形で、DP-means 法が考案された[1].

DP-means 法は、閾値となるペナルティパラメータを指定すれば、データからクラスタ数を推定することができる。しかし、ペナルティパラメータの変化に対し、推定されるクラスタ数の変化は未だに明かされていない。本研究では、ペナルティパラメータを変化させたときの、クラスタ数の曲線が、データの次元数を大きくする極限でレート歪み曲線に近づくことを示す。

2. DP-means 法について

DP-means 法は、データ $\mathbf{x}^n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ ($\mathbf{x}_i = (x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(L)}) \in \mathbb{R}^L$) が与えられたとき、クラスタ数推定を行いデータ \mathbf{x}^n に対し順次、クラスタ割り当てを行うものである。 $\{\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_K\}$ をクラスタ中心とすると、クラスタが増えるのは、ペナルティパラメータ λ より、各データ点 \mathbf{x}_i と最も近いクラスタ中心との擬距離の値が大きい、すなわち $\min_k d(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\mu}_k) > \lambda$ を満たす時である。なお、本研究では、データの各次元は非負整数値である混合二項分布を仮定し、擬距離は、以下とする。

$$d(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \left\{ x^{(j)} \ln \frac{x^{(j)}}{\mu^{(j)}} + (N - x^{(j)}) \ln \frac{N - x^{(j)}}{N - \mu^{(j)}} \right\}$$

3. レート歪み理論における平均歪みと最大歪みの関係

平均歪み、最大歪みは、それぞれ(1)、(2)で定義される。またその時のレート R を平均歪み、最大歪みの値が得られた時のクラスタ数 K を(3)に代入した値とする。

$$D_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \min_k d(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\mu}_k) \quad (1)$$

$$D_m = \max_i \min_k d(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\mu}_k) \quad (2)$$

$$R = \frac{\ln K}{L} \quad (3)$$

データの数が $n \rightarrow \infty$ であるとき、平均歪み、最大歪みのそれぞれに対応するレートには、次元数 $L \rightarrow \infty$ の極限で達成される同一の下限が存在することが知られ[2]、この下限のことをレート歪み曲線 $R(D)$ という。DP-means 法において、クラスタ数が K となるときのペナルティパラメータ λ の下限を λ^* とおくと、 $\lambda^* = D_m$ がすべての K で成り立つ。このことから、次元 L を上げていった場合、ペナルティパラメータ λ を変化させた時

のクラスタ数の曲線(3)は、レート歪み曲線に近づくと考えられる。

4. 数値実験

各データ点の次元 L を変化させ、次元ごとに、最大値 $N = 100$ 、成功確率 $p = 0.3$ となる二項分布より、学習データセットとテストデータを作成した。作成した学習データセットに対して、次元ごと、学習データ別にペナルティパラメータを変化させて、DP-means 法を行い、そのときのクラスタ数、学習データとテストデータのそれぞれに対し、平均歪み、最大歪みを求め、それらの学習データセットの出方に関する平均の結果とした。図1に次元ごとのクラスタ数の変化とレート歪み曲線を示す。

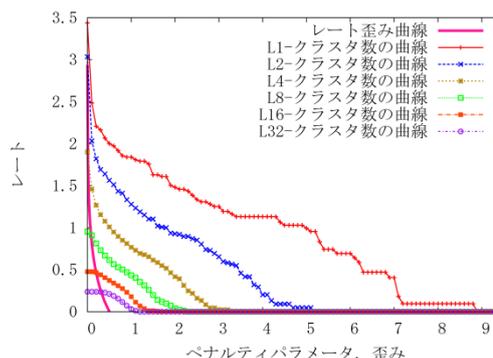


図1. 次元変化に対するクラスタ数とレート歪み曲線

図1よりクラスタ数の曲線は次元を上げると、レート歪み曲線に近づいていることが分かる。しかし、歪みが0となる近辺では、レート歪み曲線の下にクラスタ数の曲線が来ている。これはデータ数を有限の値で抑えていることが原因だと考えられる。また、データ数の影響が少ないと考えられる、レートが0となる歪み0.5032に着目し、次元を上げて調べたところ、0.5032に近づいていく様子が確認できた。

5. まとめ

DP-means 法のクラスタ数変化とレート歪み曲線の間関係を示した。また、数値実験によりデータの次元数を上げて、ペナルティパラメータを変化させたとき、歪みが大きい領域ではクラスタ数の曲線はレート歪み曲線に近づくことが確認できた。

参考文献

- [1] B. Kulis and M. I. Jordan, "Revisiting k-means: New Algorithms via Bayesian Nonparametrics," *Proc. ICML* 2012.
- [2] 韓太舜, 『情報理論における情報スペクトル的方法』, 1998.