# パラメータ化した FCM 識別器のベンチマークテスト

#### 市橋 秀友, 長浦一哉, 野津 亮, 本多 克宏

本研究では,FCM クラスタリング法を用いる識別器の三つの自由パラメータに加えて,さらにクラスター中 心ベクトルの長さをパラメータとする場合とクラスターの混合比率をパラメータとする場合の比較を行った.提 案の識別器ではマハラノビス距離による楕円状のクラスターを得るために,アルゴリズムを簡略化した繰り返 し重み付最小2 乗法に基づく更新式を用いる.ただし,自由パラメータの最適化に粒子群最適化法 (PSO)を用 いるので,厳密なクラスタリングアルゴリズムの収束は必要でない.そこで,本研究では繰り返し回数を1回 に簡略化した場合の識別性能を比較する.このことで,マハラノビス距離によるクラスタリングアルゴリズム でよく起こる発散や振動,収束までの計算時間などの問題が解消される.

クラスタリングアルゴリズムは識別器の第1フェーズで用いられ、FCM 識別器 (FCMC) と呼ばれる.FCM 識別器は二つのフェーズから成り、第1フェーズではクラス毎にクラスタリングを行い、第2フェーズでは評価 用データの識別及びメンバシップ関数の自由パラメータの最適化を行う.一般に高性能識別器は、調整できる自 由パラメータを持っている.例えば、サポートベクターマシン(SVM)にはマージンやカーネルと呼ばれるパラ メータがある.これらのパラメータが何らかの最適化手法で選択されることで、識別器の汎化能力を高めている. FCM 識別器には複数の自由パラメータがあり、パラメータと誤識別率の関係は単峰形の関数ではない.そこで、 パラメータ探索の簡便な手法として粒子群最適化法(PSO)を適用する.ベンチマークデータを用いた幾通りか の分割による交差確認法(CV法)での比較から,再代入誤識別率(1-CV)を最小化する方法が有効であること を示す.また,自由パラメータにクラスターの混合比率,または中心ベクトルの変更割合を加えた場合の比較 結果を報告する.提案 FCM 識別器は,k 最近傍法(k-NN)よりも優れ、高性能な識別器として知られた SVM にほぼ等しい汎化性能を示した.また 10-CV 法の評価用データに対する識別精度は SVM よりも優れた結果が 得られた.

キーワード:ファジィc平均クラスタリング,識別器,粒子群最適化

### 1 はじめに

標準ファジィc平均法 (FCM法) と呼ばれるファジィ クラスタリング法では,クラスター中心がデータ点に 重なった場合にメンバシップ関数の分母がゼロとなり 関数が不連続になることを特異であるという[1].この ことは実用上ほとんど問題にならない.しかし,標準 FCM 法のファジィ化パラメータ *m* を大きくしてファ ジィなクラスタリング結果を得ようとすると,図1左に 示すようにメンバシップ関数がクラスター中心で尖っ た特異な形状になる.図の右上は3つのクラスターの 最大メンバーシップの等値線を,右下はデータ点とク ラスター中心を示している.図2は提案クラスタリン グ法(式(2))でm = 1.05,  $\nu = 2$ とした場合のクラ スタリング結果でガウス混合モデル [4] やエントロピー 正則化 FCM 法 [2] によく似た結果となっている [2,3]. mとvを調節することで両者の中間的な形状にするこ とができる.また,ガウス混合モデルやエントロピー 正則化 FCM 法では,図3に示すようにどちらのクラ スターからも遠いデータ点 (図3では原点付近)のメ ンバシップが1か0に近いクリスプな値になってしま う性質がある (宮本 [2]).提案クラスタリング法では図 4のようにそれらのデータ点をファジィに分類するこ とができ、その度合いをパラメータで調節できる.こ れらの自由パラメータを調節して識別器の性能を高め ようとするのが,提案の FCM 識別器である.

本研究では FCM 識別器の自由パラメータとして、 さらにクラスター中心ベクトル  $v_{qj}$  の長さの変更割合を 用いる場合とクラスターの混合比率  $\alpha_{qj}$  の変更割合を 用いる場合の比較を行った.

提案の識別器ではマハラノビス距離による楕円状の クラスターを得るために,アルゴリズムを簡略化した 繰り返し重み付最小2乗法(IRLS)[5,6]に基づく更新 式を用いる[2].ただし,クラスター中心,または混合 比率の最適化に粒子群最適化法(PSO)[7,8,9]を用い るので,厳密なクラスタリングアルゴリズムの収束は



図 1: 標準 FCM 法で m = 4 とした場合の尖ったメン バシップ関数



図 2: 提案クラスタリング法(式(2))でm = 1.05,  $\nu = 2$ とした場合のクラスタリング結果



図 3: ガウス混合モデルによるクラスタリング結果



図 4: 提案クラスタリング法でパラメータの値を $m = \gamma = \nu = 1$ とした場合の結果

必要でない.そこで,本研究では繰り返し回数を1回 に簡略化した場合の識別性能を比較する.このことで, マハラノビス距離によるクラスタリングアルゴリズム でよく起こる発散や振動,収束までの計算時間などの 問題が解消される.高次元データの識別器[10]のよう に厳密な収束が必要である場合のためにセミハードク ラスタリング法[11]が提案されているが本論文では用 いない.

クラスタリングアルゴリズムは識別器の第1フェーズ で用いられ、FCM 識別器 (FCMC) と呼ばれる [2,3,10]. FCM 識別器は2つのフェーズから成り、第1フェーズ ではクラス毎にクラスタリングを行い、第2フェーズ では評価用データの識別及びメンバシップ関数のパラ メータ最適化を行う.一般に高性能識別器は、調整でき る自由パラメータを持っている.例えば、サポートベク ターマシン (SVM)[12,13] にはマージンやカーネルと 呼ばれるパラメータがある.これらのパラメータが何 らかの最適化手法で選択されることで、識別器の汎化 能力を高めている.SVM では自由パラメータが1個 か2個であるのでグリッドサーチが用いられている.

FCM 識別器には複数のパラメータがあり, パラメー タと誤識別率の関係は単峰形の関数ではない. そこ で, パラメータ探索の簡便な手法として粒子群最適化 法 (PSO)を適用する.3章で比較するように提案識別 器の PSO による最適化は単純なランダム探索に比べ て大きな差は無いが, アルゴリズムの簡単さやプログ ラミングの容易さもランダム探索とあまり変わらない.

4章では、ベンチマークデータを用いた幾通りかの 分割による交差確認法(CV法)での比較から、再代 入誤識別率(1-CV)を最小化する方法が有効であるこ とを示す.また、自由パラメータにクラスターの混合 比率,または中心ベクトルの変更割合を加えた場合の 比較結果を報告する.提案 FCM 識別器は、k 最近傍 法(k-NN)よりも優れ、高性能な識別器として知られ たサポートベクターマシン(SVM)にほぼ等しい汎化 性能を示した.また10-CV法の評価用データに対する 識別精度は SVM よりも優れた結果が得られた.

### 2 FCM 識別器

FCM 識別器は 2 つのフェーズに分けられる.第1 フェーズではクラス毎にクラスタリングを行う.標準 FCM 法 [1] の目的関数は

$$J_{\rm fcm}(U,V) = \sum_{i=1}^{c} \sum_{k=1}^{N} (u_{ki})^m D(x_k, v_i) \quad (m > 1) \quad (1)$$

と表される.ただし, $D(x_k,v_i)$ はデータベクトル $x_k \in \mathcal{R}^p$ からクラスター中心 $v_i \in \mathcal{R}^p$ までのユークリッド

距離の 2 乗で,メンバシップの m乗 $(u_{ki})^m$ が誤差  $D(x_k, v_i)$ の重みである.これを少し一般化した FCM 法 [2, 3] の目的関数は次のように表される

$$J_{\rm gfc}(U,V) = \sum_{i=1}^{c} \sum_{k=1}^{N} (u_{ki})^m D(x_k, v_i) + \nu \sum_{i=1}^{c} \sum_{k=1}^{N} (u_{ki})^m$$
(2)

最適性の必要条件(ラグランジュ関数の微分)からメ ンバシップの更新式は

$$u_{ki} = \left[\sum_{j=1}^{c} \left(\frac{D(x_k, v_i) + \nu}{D(x_k, v_j) + \nu}\right)^{\frac{1}{m-1}}\right]^{-1}$$
(3)

となる.クラスタリングアルゴリズムは $v_i \ge u_{ki}$ を交 互に更新し収束するまで繰り返すことになる.

式(3)は

$$u_{ki}^* = \frac{1}{(D(x_k, v_i) + \nu)^{\frac{1}{m-1}}}$$
(4)

$$u_{ki} = \frac{u_{ki}^*}{\sum_{l=1}^c u_{kl}^*} \tag{5}$$

のように基準化したもので,以下の式 (11) は式 (4) か ら定められたものである.

楕円状のクラスターを得るための FCM 法としては Gustafson と Kessel[1, 14] による方法がよく知られて いる.しかし,この方法ではクラスター容量と呼ばれる S<sub>i</sub>の行列式の値を指定する必要があるが,その値は事 前には分からないという欠点がある.マハラノビス距 離による楕円状のクラスターを得るために,アルゴリ ズムを簡略化し繰り返し重み付最小2乗法(IRLS)[5,6] に基づく更新式が用いられている[2,3].メンバシップ 関数を重みとして最小2乗法(IRLS)の目的関数は次 のように定められる.

$$J_{\rm ifc}(U, V, S) = \sum_{i=1}^{c} \sum_{k=1}^{N} u_{ki} \left( D(x_k, v_i; S_i) + \log|S_i| \right)$$
(6)

 $x_k \ge v_i$ 間のマハラノビス距離を,

$$D(x_k, v_i; S_i) = (x_k - v_i)^{\top} S_i^{-1} (x_k - v_i)$$
(7)

とする. クラスター中心  $v_i$  と第 i クラスターの分散共 分散行列  $S_i \in \mathcal{R}^{p \times p}$  はラグランジュ関数の微分から次 のようになる.

$$v_{i} = \frac{\sum_{k=1}^{N} u_{ki} x_{k}}{\sum_{k=1}^{N} u_{ki}}$$
(8)

$$S_{i} = \frac{\sum_{k=1}^{N} u_{ki} (x_{k} - v_{i}) (x_{k} - v_{i})^{\top}}{\sum_{k=1}^{N} u_{ki}}$$
(9)

クラスター中心が重なり合わず競合的になるように, メンバシップ関数  $u_{ki}$  は

$$u_{ki} = \frac{u_{ki}^*}{\sum_{l=1}^c u_{kl}^*} \tag{10}$$

のように基準化され、 $u_{ki}^*$ は次のように定義される.

$$u_{ki}^* = \frac{\alpha_i |S_i|^{-\frac{1}{\gamma}}}{(D(x_k, v_i; S_i)/0.1 + \nu)^{\frac{1}{m}}}$$
(11)

 $u_{ki}^*$ は式(4)から定めたものであるが,M推定での Cauchyの重み関数,またはコーシー分布の確率密度 関数を多次元にして,かつパラメータを増やした関数 でもある.パラメータ $\gamma$ はK-L情報量正則化FCM法 [2]ではファジィ化パラメータとして扱われているもの で,ベンチマークデータによっては有効な場合がある のでパラメータに含めた.分母の定数0.1はスケーリ ングファクターで,三つのパラメータm, $\gamma$ , $\nu$ をすべ て1とした時に図4の様にファジィにクラスタリング されるように選んだ. $\alpha_i$ は第iクラスターの混合比率 であり,

$$\alpha_i = \frac{\sum_{k=1}^N u_{ki}}{\sum_{j=1}^c \sum_{k=1}^N u_{kj}} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N u_{ki}$$
(12)

となる.

標準的なアルゴリズムでは S<sub>i</sub>, v<sub>i</sub>, α<sub>i</sub>, u<sub>ki</sub> を繰り返し 計算するが, 本研究では繰り返し数を1回に設定する. これは, 第2フェーズでクラスターの中心や混合比率 を PSO で最適化するために, クラスタリングの収束 があまり意味を持たないことと, クリスプに近いクラ スタリング結果を得ようとすると発散してしまう場合 があるためである.クリスプに近いクラスタリング結 果が誤識別率を小さくするベンチマークデータもあり, その際に特徴量(変数)の次元に対してクラスター内 のデータ数が十分でないと共分散行列が特異行列とな る.繰り返しアルゴリズムの確実な収束が必要な場合 のためにセミハードクラスタリングの計算時間を短く することを優先しているので用いていない.

全てのクラス毎のクラスタリングが終わると,第2 フェーズとして各クラスへのメンバシップ値を求めて 識別を行う.  $\pi_q$ をクラス q の混合比率,すなわちクラ ス q の事前確率とする.  $x_k$ のクラス q へのメンバシッ プは次のように計算される.

$$u_{qjk}^* = \frac{\alpha_{qj}|S_{qj}|^{-\frac{1}{\gamma}}}{(D(x_k, v_{qj}; S_{qj})/0.1 + \nu)^{\frac{1}{m}}}$$
(13)

$$\tilde{u}_{qk} = \frac{\pi_q \sum_{j=1}^{c} u_{qjk}^*}{\sum_{s=1}^{Q} \pi_s \sum_{j=1}^{c} u_{sjk}^*}$$
(14)

cはクラス毎のクラスター数であり, Qはクラス数である.

 $S_i$ が特異行列にならないように確率的主成分分析に おける共分散行列の低階数近似法 [15, 16] を用いる. 式 (15)の $S'_i$ は式 (9)の $S_i$ の近似行列である. $P^r_i$ は r(< p-1)個の大きな固有値 $\delta_{il}, l = 1, ..., r$ に対応す るr個の固有ベクトルの $p \times r$ 行列を示している.pは 入力データの次元数と同じである. $\Delta^r_i$ はr個の大き な固有値 $\delta_{il}, l = 1, ..., r$ の $r \times r$ 対角行列である.rは 全ての $S'_i$ が特異でなく,評価用データに対する識別性 能も良くなるように選択する.

 $S'_i$ の逆行列は次のようになる.

$$S_i^{\prime-1} = P_i^r ((\Delta_i^r)^{-1} - \sigma_i^{-2} I_r) P_i^{r\top} + \sigma_i^{-2} I_p$$
(15)  
ただし,  $I_r, I_p$ はそれぞれ r と p 次元の単位行列である.

$$\sigma_i^2 = (\operatorname{trace}(S_i) - \Sigma_{l=1}^r \delta_{il})/(p-r)$$
(16)

r=0のとき, $S'_i$ は単位行列の定数倍になる.

一般に高性能の識別器には自由パラメータが設定さ れていることが多い.例えば,SVM[12,13]にはマー ジンパラメータやカーネルパラメータがある.交差確 認法(CV法)を用いて最も良いパラメータを決定した 後に,識別器のパラメータが固定され,全てのデータ で訓練される.提案の FCM 識別器では, クラス毎の全 てのデータがクラスタリングされる.そして,本稼動 で未知のデータに適用される.そのため識別器の性能 が乱数による初期値に大きく依存するなら,最終の訓 練結果は必ずしも平均的な誤識別率を保証しない.こ れは重要な問題である.そこで,クラスタリング結果 が初期値に大きく依存せず決定論的であるように,主 成分ベクトルに基づいて初期クラスター中心を決定す る.4章のベンチマークテストの結果から多くの場合 にクラスター数は1~2で良いと考えられる.ファジィ 化パラメータを大きくした場合は事実上1クラスター の場合に等しい.クラスター数を多くすると ||v<sub>ai</sub>||や *α<sub>qj</sub>*に対応するパラメータ数が増えて最適化が難しく なる.

次式の  $p_1^* \in R^p$  は一つのクラスのデータ行列  $D = (x_1, ..., x_n)^\top$ の主成分ベクトルであり,共分散行列の 最大固有値,すなわち第1主成分(スコアー)の標準 偏差  $\sigma_1^*$ に対応する固有ベクトルである.本研究では クラス毎に二つのクラスター中心とするが,その初期 値は次のように与えられる.

$$v_{1} = v^{*} + \sigma_{1}^{*} p_{1}^{*}$$

$$v_{2} = v^{*} - \sigma_{1}^{*} p_{1}^{*}$$
(17)

 $v^*$ はクラスの平均ベクトルである.正規分布  $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ の場合  $\mu \pm 2\sigma$ の外側の確率は 5%,  $\mu \pm 3\sigma$ の外側は 0.3% であるので,このように初期中心を決める.以下 の交差確認法では,複数回(10-CV 法では 10 回)この

計算が行われるので,クラス平均から第1クラスター の中心までのベクトルが毎回ほぼ同じ方向であるよう に,すなわち,一回目と二回目以降の *p*<sup>\*</sup><sub>1</sub>の内積が正に なるように *p*<sup>\*</sup><sub>1</sub>のサインを決定する.

10-CV 法ではベンチマークデータを 10 個のサブセットに分ける.続いて,訓練セット(9つのサブセット全体)から得られたクラスタリング結果を利用して残りの1つの評価用セットをテストする.このようにすれば全てのデータに対する誤識別件数がカウントされるので,交差確認法の誤識別率は間違って識別されたデータの全データに対する割合となる.本研究ではデータ3



図 5: データ 3 分割法 (3-WDS)

分割法 (Three-way data splits, 3-WDS) で識別器を評 価する.パラメータ  $(m, \gamma, \nu, \alpha_{qj}, ||v_{qj}||)$ は 10-CV 法の評価用セットに対する誤識別率が最小化されるよ うに選ばれるが,性能評価は 10-CV 法で用いられてい ないテストセットに対して行われる (図 5).そして全 データの 1/10 の互いに素なテストセット 10 個につい て繰り返されその誤識別率の平均が 3-WDS での汎化 性能の評価値となる.

## 3 PSOによるパラメータ選択

PSO とは魚や鳥の群れのように、群を構成する個体 (粒子)間で情報を共有しながら最良解を探す確率的な 最適化手法である. 粒子と呼ばれる個体は多次元空間 での位置を表し、これに速度を加えることで解の探索 を行う. 個体の位置をベクトル Para とし、各個体の最 良の位置を pbest、群全体の最良の位置を gbset、速度ベ クトルを Velo とすると、更新則は

$$Para^{t+1} = Para^t + Velo^{t+1}$$
(18)

$$Velo^{t+1} = w_0 Velo^t + c_1 Rand_1 (pbest - Para^t)$$

$$+ c_2 Rand_2 (gbest - Para^t)$$
(19)

となる. *Para* は最適化されるパラメータベクトルで あり, m,  $\gamma$ ,  $\nu$ ,  $\alpha_{qj}$  や  $||v_{qj}||$  がその要素となる. *Rand* は区間 [0, 1] の乱数の対角行列で,  $w_0$ ,  $c_1$ ,  $c_2$  はスカ ラーの定数である. クラスター中心を摂動させる方法の概念図を図 6 に 示す.クラスターの中心ベクトル(原点は全データの 重心 CG)の長さが PSO によって最適化される.CV 法においては全分割(10-CV 法の場合は 10 分割され た互いに素な評価用データの集合)に対してパラメー タの値は同じでなければならないため, $v_{qj}$ をそのま まパラメータ化することはできない.そこで,その長 さの変更割合を自由パタメータとし,粒子の位置ベク トルの要素とする.図の黒い丸はクラスター中心であ り,-0.21 はクラスター中心ベクトル(原点は全データ の重心 CG)の長さを 21% 短くすることを,+0.13 は 13% 長くすることを表していて,これらの数値が PSO で最適化される.



図 6: PSO によるクラスター中心の摂動

同様にして混合比率  $\alpha_{qi}$ の変更率をパラメータとして最適化することもできる.

4章ではクラスター中心ベクトルの長さ ||v<sub>qj</sub>||また は  $\alpha_{qj}$  の変更率をパラメータとして最適化する場合の 比較を行う.どちらも同時に自由パラメータとするこ とは可能であるが,パラメータ数が増え最適化が困難 になるのと,クラスの境界を摂動するのは同様である と考えられるのでどちらか一方を用いることとした.

ベンチマークデータは表 1 に示す Iris plant, Wisconsin breast cancer, Ionosphere, Glass, Liver disorder, Pima Indian diabetes, Sonar, Wine の八つの データを用いた. これらのベンチマークデータは UCI repository[17] のものから,種々の平均をプロトタイプ とする識別器の性能比較のために文献 [18] で使われた ものを取り上げた. Breast cancer で欠測値のあるデー タは取り除かれている.全てのカテゴリー属性は整数 化し,さらに属性値は平均0,分散1に基準化した.

図 7 は, Iris データでの 10-CV 法の評価用データに 対する誤識別率を自由パラメータ  $m \ge \gamma$  の関数として 表したもので,図 8 は Ionosphere データについてグラ フにしたものである.これらのデータは4章で用いる UCI のベンチマークデータ(表1)から選んだ.PSO

表	1:	ベン	チマ	ィーク	「デー	-タ
-	<b>+</b> •		~ `	. /	-	-

	features $(p)$	objects $(N)$	classes $(Q)$
Iris	4	150	3
Breast	9	683	2
Iono	33	351	2
Glass	9	214	6
Liver	6	345	2
Pima	8	768	2
Sonar	60	208	2
Wine	13	178	3

v=200



図 7: Iris データでの FCM 識別器の評価用データに対 する誤識別率 ( $m \ge \gamma$ の関数)

はこれらの多峰性関数の最小値に対応するパラメータ の値を探索する.Iris データでは広い範囲で平坦になっ ているので勾配が考慮される PSO よりもむしろランダ ム探索の方が有効である例を示している. Ionosphere データでは勾配の情報が有効と考えられる. Iris デー タのように平坦な部分の多い関数に対応するために, PSO 自体のパラメータ  $w_0, c_1, c_2$  は表 2 のように大き な値とした.表3はデータ3分割法で10-CV法を100 回実行したときの誤識別率を示している.(20×100)の 場合とランダム探索である (1×2000) の場合で評価用 データの誤識別 (validation error) が小さい方を太字 で示している.合計の評価回数を同じにして, PSOの 繰り返し回数と粒子数を変えた場合の比較である.繰 り返し数 (Iteration) を1とした時はランダム探索であ る. 各 10-CV 法の実行毎に PSO でパラメータ探索が 行われる.

PSO の繰り返し数を 20 から 50 に増やすと, ほとん



図 8: Ionosphere データでの FCM 識別器の評価用デー タに対する誤識別率 ( $m \ge \gamma$ の関数)

_ 衣 2: PSO のハラメー	ツ旭
number of particles	100
number of iterations	20
$w_0$	0.8
$c_1$	0.4
$c_2$	0.4

どのデータで評価用データの誤識別率は少し良くなっ ている.また,20の場合は五つのデータ(Iono,Glass, Liver, Pima, Sonar)でランダム探索よりも良くなって いる.改善される度合いは僅かであるがテスト用データ についても五つのデータで同じ傾向が見られる.Breast Cancer データではほとんど同じで, Wine データでは ほとんどゼロになっている.ランダム探索による Iris データの結果は繰り返し数が20の場合より良くなって いる.これらの八つのデータ中で Iris だけが例外的で あるが,図7の平坦な領域の広いグラフから分かるよ うに、このような場合にはランダムネスを大きくする 必要がある.また,繰り返し数を増やした場合にテス ト用データに対する誤識別は増えていない.これらの 値は計算時間と誤識別率の改善度合いで決定すべきで ある.表3の結果から次章の性能比較では, PSO にお ける繰り返し数は 20, 粒子数は 100 とした.

#### ベンチマークデータの識別結果 4

PSO によるパラメーター探索は, CV 法での評価用 データの誤識別率を最小化するように行われる. その

### 表 3: データ3分割法(100回)における PSO の繰り 返し数と粒子数の誤識別率(%)への影響の比較

iteration×particlsvalidation errortest errorIris $20\times100$ $2.00\pm0.10$ $3.27\pm0.66$ $1\times2000$ $1.84\pm0.07$ $2.40\pm0.56$ $50\times100$ $1.96\pm0.07$ $3.13\pm0.63$ Breast $20\times100$ $2.51\pm0.01$ $3.15\pm0.21$ $1\times2000$ $2.51\pm0.01$ $2.97\pm0.12$ $50\times100$ $2.51\pm0.01$ $2.94\pm0.23$ Iono $20\times100$ $3.61\pm0.15$ $4.17\pm0.39$ $1\times2000$ $4.06\pm0.09$ $4.69\pm0.39$ $50\times100$ $3.37\pm0.13$ $4.00\pm0.52$ Glass $20\times100$ $26.98\pm0.23$ $29.81\pm1.06$ $1\times2000$ $27.87\pm0.19$ $30.19\pm0.85$ $50\times100$ $26.31\pm0.25$ $29.81\pm1.53$ Liver $20\times100$ $25.50\pm0.16$ $28.71\pm1.14$ $1\times2000$ $25.52\pm0.13$ $28.21\pm0.79$ Pima $20\times100$ $22.76\pm0.09$ $24.64\pm0.52$ Sonar $20\times100$ $11.07\pm0.13$ $14.40\pm1.39$ $1\times2000$ $12.06\pm0.13$ $15.65\pm1.86$ $50\times100$ $12.06\pm0.13$ $15.65\pm1.86$ $50\times100$ $0.04\pm0.04$ $0.06\pm0.19$ Wine $20\times100$ $0.04\pm0.04$ $0.06\pm0.19$ $1\times2000$ $11.07\pm0.13$ $14.40\pm1.79$ Wine $20\times100$ $0.04\pm0.04$ $0.06\pm0.19$				
Iris $20 \times 100$ $2.00 \pm 0.10$ $3.27 \pm 0.66$ $1 \times 2000$ $1.84 \pm 0.07$ $2.40 \pm 0.56$ $50 \times 100$ $1.96 \pm 0.07$ $3.13 \pm 0.63$ Breast $20 \times 100$ $2.51 \pm 0.01$ $3.15 \pm 0.21$ $1 \times 2000$ $2.51 \pm 0.01$ $2.97 \pm 0.12$ $50 \times 100$ $2.51 \pm 0.01$ $2.97 \pm 0.12$ $50 \times 100$ $2.51 \pm 0.01$ $2.94 \pm 0.23$ Iono $20 \times 100$ $3.61 \pm 0.15$ $4.17 \pm 0.39$ $1 \times 2000$ $4.06 \pm 0.09$ $4.69 \pm 0.39$ $50 \times 100$ $3.37 \pm 0.13$ $4.00 \pm 0.52$ Glass $20 \times 100$ $26.98 \pm 0.23$ $29.81 \pm 1.06$ $1 \times 2000$ $27.87 \pm 0.19$ $30.19 \pm 0.85$ $50 \times 100$ $26.31 \pm 0.25$ $29.81 \pm 1.53$ Liver $20 \times 100$ $25.50 \pm 0.16$ $28.71 \pm 1.14$ $1 \times 2000$ $26.40 \pm 0.18$ $29.06 \pm 0.84$ $50 \times 100$ $22.98 \pm 0.05$ $24.64 \pm 0.52$ Pima $20 \times 100$ $22.76 \pm 0.09$ $24.89 \pm 0.51$ Sonar $20 \times 100$ $11.07 \pm 0.13$ $14.40 \pm 1.39$ $1 \times 2000$ $12.06 \pm 0.13$ $15.65 \pm 1.86$ $50 \times 100$ $10.78 \pm 0.20$ $14.90 \pm 1.17$ Wine $20 \times 100$ $0.04 \pm 0.04$ $0.06 \pm 0.19$ $1 \times 2000$ $10.3 \pm 0.30$ $0 \pm 0.50 \pm 0.50$		iteration×particls	validation error	test error
$1 \times 2000$ $1.84 \pm 0.07$ $2.40 \pm 0.56$ $50 \times 100$ $1.96 \pm 0.07$ $3.13 \pm 0.63$ Breast $20 \times 100$ $2.51 \pm 0.01$ $3.15 \pm 0.21$ $1 \times 2000$ $2.51 \pm 0.01$ $2.97 \pm 0.12$ $50 \times 100$ $2.51 \pm 0.01$ $2.94 \pm 0.23$ Iono $20 \times 100$ $3.61 \pm 0.15$ $4.17 \pm 0.39$ $1 \times 2000$ $4.06 \pm 0.09$ $4.69 \pm 0.39$ $50 \times 100$ $3.37 \pm 0.13$ $4.00 \pm 0.52$ Glass $20 \times 100$ $26.98 \pm 0.23$ $29.81 \pm 1.06$ $1 \times 2000$ $26.31 \pm 0.25$ $29.81 \pm 1.53$ Liver $20 \times 100$ $25.50 \pm 0.16$ $28.71 \pm 1.14$ $1 \times 2000$ $26.40 \pm 0.18$ $29.06 \pm 0.84$ $50 \times 100$ $25.22 \pm 0.13$ $28.21 \pm 0.79$ Pima $20 \times 100$ $22.76 \pm 0.09$ $24.89 \pm 0.51$ Sonar $20 \times 100$ $11.07 \pm 0.13$ $14.40 \pm 1.39$ $1 \times 2000$ $12.06 \pm 0.13$ $15.65 \pm 1.86$ $50 \times 100$ $12.06 \pm 0.13$ $15.65 \pm 1.86$ $50 \times 100$ $0.04 \pm 0.04$ $0.06 \pm 0.19$ $1 \times 2000$ $0.03 \pm 0.03$ $0 \pm 0.19$ $1 \times 2000$ $0.03 \pm 0.03$ $0 \pm 0.19$	Iris	20×100	$2.00{\pm}0.10$	$3.27 {\pm} 0.66$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		1×2000	$1.84 \pm 0.07$	$2.40{\pm}0.56$
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $		$50 \times 100$	$1.96{\pm}0.07$	$3.13{\pm}0.63$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Breast	20×100	$2.51{\pm}0.01$	$3.15{\pm}0.21$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$1 \times 2000$	$2.51{\pm}0.01$	$2.97{\pm}0.12$
$\begin{array}{ c c c c c c c } & \text{Iono} & 20{\times}100 & 3.61{\pm}0.15 & 4.17{\pm}0.39 \\ & 1{\times}2000 & 4.06{\pm}0.09 & 4.69{\pm}0.39 \\ & 50{\times}100 & 3.37{\pm}0.13 & 4.00{\pm}0.52 \\ \hline & 60{\times}100 & 26.98{\pm}0.23 & 29.81{\pm}1.06 \\ & 1{\times}2000 & 27.87{\pm}0.19 & 30.19{\pm}0.85 \\ & 50{\times}100 & 26.31{\pm}0.25 & 29.81{\pm}1.53 \\ \hline & 100 & 25.50{\pm}0.16 & 28.71{\pm}1.14 \\ & 1{\times}2000 & 26.40{\pm}0.18 & 29.06{\pm}0.84 \\ & 50{\times}100 & 25.22{\pm}0.13 & 28.21{\pm}0.79 \\ \hline & 100 & 22.98{\pm}0.05 & 24.64{\pm}0.52 \\ & 1{\times}2000 & 22.76{\pm}0.09 & 24.89{\pm}0.51 \\ \hline & 50{\times}100 & 11.07{\pm}0.13 & 14.40{\pm}1.39 \\ & 1{\times}2000 & 10.78{\pm}0.20 & 14.90{\pm}1.17 \\ \hline & \text{Wine} & 20{\times}100 & 0.04{\pm}0.04 & 0.06{\pm}0.19 \\ & 1{\times}2000 & 0.03{\pm}0.03 & 0{\pm}0 \\ \hline & 50{\times}100 & 0.04{\pm}0.05 & 0.12{\pm}0.25 \\ \hline \end{array}$		$50 \times 100$	$2.51{\pm}0.01$	$2.94{\pm}0.23$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Iono	20×100	$3.61 \pm 0.15$	$4.17 {\pm} 0.39$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$1 \times 2000$	$4.06 {\pm} 0.09$	$4.69 {\pm} 0.39$
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $		$50 \times 100$	$3.37 {\pm} 0.13$	$4.00 {\pm} 0.52$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Glass	20×100	$26.98 \pm 0.23$	$29.81{\pm}1.06$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$1 \times 2000$	$27.87 {\pm} 0.19$	$30.19 {\pm} 0.85$
$\begin{array}{c cccccc} {\rm Liver} & {\bf 20 \times 100} & {\bf 25.50 \pm 0.16} & 28.71 \pm 1.14 \\ & 1 \times 2000 & 26.40 \pm 0.18 & 29.06 \pm 0.84 \\ & 50 \times 100 & 25.22 \pm 0.13 & 28.21 \pm 0.79 \\ \hline {\rm Pima} & {\bf 20 \times 100} & {\bf 22.98 \pm 0.05} & 24.64 \pm 0.52 \\ & 1 \times 2000 & 23.34 \pm 0.07 & 25.01 \pm 0.45 \\ & 50 \times 100 & 22.76 \pm 0.09 & 24.89 \pm 0.51 \\ \hline {\rm Sonar} & {\bf 20 \times 100} & {\bf 11.07 \pm 0.13} & 14.40 \pm 1.39 \\ & 1 \times 2000 & 12.06 \pm 0.13 & 15.65 \pm 1.86 \\ & 50 \times 100 & 10.78 \pm 0.20 & 14.90 \pm 1.17 \\ \hline {\rm Wine} & 20 \times 100 & 0.04 \pm 0.04 & 0.06 \pm 0.19 \\ & 1 \times 2000 & 0.03 \pm 0.03 & 0 \pm 0 \\ & 50 \times 100 & 0.04 \pm 0.05 & 0.12 \pm 0.25 \\ \hline \end{array}$		$50 \times 100$	$26.31 {\pm} 0.25$	$29.81{\pm}1.53$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Liver	20×100	$25.50 \pm 0.16$	$28.71 \pm 1.14$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$1 \times 2000$	$26.40 {\pm} 0.18$	$29.06 \pm 0.84$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$50 \times 100$	$25.22 {\pm} 0.13$	$28.21 {\pm} 0.79$
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Pima	20×100	$22.98 \pm 0.05$	$24.64{\pm}0.52$
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$1 \times 2000$	$23.34{\pm}0.07$	$25.01 {\pm} 0.45$
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$50 \times 100$	$22.76 {\pm} 0.09$	$24.89 {\pm} 0.51$
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Sonar	20×100	$11.07 \pm 0.13$	$14.40{\pm}1.39$
		$1 \times 2000$	$12.06 {\pm} 0.13$	$15.65{\pm}1.86$
Wine $20 \times 100$ $0.04 \pm 0.04$ $0.06 \pm 0.19$ $1 \times 2000$ $0.03 \pm 0.03$ $0 \pm 0$ $50 \times 100$ $0.04 \pm 0.05$ $0.12 \pm 0.25$		$50 \times 100$	$10.78 {\pm} 0.20$	$14.90{\pm}1.17$
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Wine	20×100	$0.04{\pm}0.04$	$0.06 {\pm} 0.19$
$50 \times 100$ $0.04 \pm 0.05$ $0.12 \pm 0.25$		$1 \times 2000$	$0.03{\pm}0.03$	$0\pm0$
		$50 \times 100$	$0.04{\pm}0.05$	$0.12{\pm}0.25$

ため、CV法の評価用データの誤識別率は未知のデータ に対する誤識別率より小さくなると考えられる. そこ で, FCM 識別器の汎化性能を正確に測定するために データ三分割法 (3-WDS) を適用する. 3-WDS はデー タを訓練データ、評価用データ、テスト用データに分 割する手法である. 訓練データはクラスタリングによ り, クラスターの中心と分散共分散行列を求めるため に使用される.評価用データは CV 法によって識別器 のパラメーターを調節するために使用される. テスト 用データは未知のデータとして扱われ,パラメータの 調整が終了した後で識別器の性能評価に用いられる.

本章のテストでは,第一フェーズのクラスタリング は $m = 0.1, \gamma = 1, \nu = 5$ として,繰り返し数を1とし た.表5~表13は,データセットの1/10をテスト用 データとして性能評価のみに用いた結果である.残り の 9/10 には CV 法を適用して訓練データと評価用デー タに分割し, PSO で評価用データの誤識別率が最小と なるようにパラメータ値を選択した.そして,9/10の データに対するクラスタリング結果と選択されたパラ メータの値を用いて,テスト用データの誤識別率を評 価した. この際に 1/10 のデータの選び方で結果が変動 するので,1/10のテスト用データ10個が互いに素で あるように分割して,以上の手順を10回繰り返し,全 てのデータに対するテスト用データでの誤識別率を求 めた. 3-WDS は 10 回で 1 つのセッションを構成して おり, 1 セッションで全てのデータが 1 度ずつテストさ れる. "resubstitution" (1-CV, 再代入法) での訓練セッ トはデータの 9/10 から成り, テストセットは残りの 1/10 で 10 回で 1 セッションとする.

表4は CV 法の種々の分割法での $m, \gamma, \nu \geq ||v_{qj}||$ の変更率をパラメータとする FCMC( $||v_{qj}||$ )の評価用 データに対する誤識別率を示している.10-CV での誤 識別率は文献 [3] と [19] に掲載されている SVM での結 果に比べてすべてのデータで小さくなっている.表5と 表6は評価用データの分割方法を変えてテスト用デー タの誤識別率を測定した場合の結果である.3-WDS は 1 セッション行った.表5 は FCMC( $||v_{qj}||$ )の誤識別 率を示す.  $\blacklozenge$  は表6の k-NN の "10-CV" 欄と比べて 誤識別率が大きい又は等しい場合を示している.下線 付きの太字は各データセットにおける最も小さい誤識 別率を示す.表5 でテスト用データに対して最も識別 性能が良かったのは,誤識別率が最小となるデータが 四つで,  $\blacklozenge$  がない "resubstitution"(1-CV, 再代入法) で ある.

表 4: CV 法の種々の分割法での FCMC(||*v*<sub>qj</sub>||)の評価 用データに対する誤識別率 (%)

	resubstitution	20-CV	10-CV	5-CV
Iris	0.67	0.75	1.77	1.41
Breast	2.34	2.50	2.38	2.34
Iono	2.97	3.33	3.45	3.52
Glass	7.98	27.44	25.79	29.32
Liver	21.06	23.87	22.61	22.77
Pima	20.33	22.16	22.26	22.26
Sonar	1.86	12.00	12.00	10.86
Wine	0.00	0.06	0.06	0.44

表 6 は k-NN の誤識別率を示す. パラメータ k は 1 ~50 の全ての整数値をテストし最良値を選んだ.  $\blacklozenge$  は 表 5 の "resubstitution" より誤識別率が大きい又は等 しいことを示している. FCMC( $||v_{qj}||$ ) は多くのベン チマークセットに対して k-NN より優れた識別性能を 示した.

表 5 と表 6 の結果より,以下では, PSO の最適化を "resubstitution"と "10-CV"に限定して比較を行う. 3-WDS のセッションを 10 回実行するので,再代入法 や 10-CV 法は 100 回実行することになる.したがって, ベンチマークデータの全てのサンプルは 10 回テスト

表 5:	CV 法	の種々	の分割法で	ົ	FCMC	$  v_{qj}  $	)のテ	ス
ト用う	データ	に対する	5 誤識別率	(%	)			

	resubstitution	20-CV	10-CV	5-CV
Iris	2.67	4.00	3.33	5.33
Breast	2.94	<b>\$</b> 3.38	2.50	2.35
Iono	4.29	4.29	4.00	5.14
Glass	$\underline{25.71}$	<b>\$</b> 30.00	<b>\$</b> 30.95	<b>4</b> 29.05
Liver	28.53	26.76	$\underline{25.59}$	26.18
Pima	24.21	$\underline{23.42}$	23.95	23.82
Sonar	15.00	<b>•</b> 18.00	<b>•</b> 16.50	<b>•</b> 15.50
Wine	0.59	1.18	0.59	0.59

表 6: CV 法の種々の分割法での k-NN のテスト用デー タに対する誤識別率 (%)

	k-NN classifier							
	resubstitution	20-CV	10-CV	5-CV				
Iris	<b>•</b> 5.33	<b>4.67</b>	♠ 6.00	<b>4.67</b>				
Breast	<b>4</b> .71	<b>\$</b> 3.53	<b>4</b> 3.24	<b>\$</b> 3.09				
Iono	<b>▲</b> 13.14	13.14	<b>\$13.14</b>	<b>\$13.14</b>				
Glass	\$30.48	28.57	<b>\$</b> 28.10	<b>\$</b> 30.48				
Liver	<b>\$</b> 34.71	<b>\$</b> 35.59	<b>\$</b> 35.00	<b>\$</b> 36.18				
Pima	<b>\$</b> 29.74	<b>\$</b> 24.47	<b>\$</b> 24.47	<b>\$</b> 25.00				
Sonar	14.00	<b>\$</b> 17.00	<b>♠</b> 15.50	15.00				
Wine	<b>4</b> .12	<b>\$</b> 2.94	<b>4</b> .12	<b>\$ 2.94</b>				

#### される.

表7に k-NN による "resubstitution" と "10-CV" で のテスト用データに対する誤識別率を再掲し評価用デー タと訓練用データに対する誤識別率を追加して示す. 以下ではこの表を元に FCM 識別器の性能を比較する. "Training error" は訓練データに対する誤識別率 (再代 入誤識別率), "Validation error" は評価用データに対 する誤識別率、"Test error"はテスト用データに対する 誤識別率を示す. 表7より, Liver の "Test error" はほ ぼ同等であり、"resubstitution"は二つのデータ(Iris, Sonr)で"10-CV"より誤識別率が小さく、"10-CV"は 三つのデータ (Breast, Glass, Pima) で "resubstitution"より小さい結果となった. "resubstitution" のテ スト用データに対する誤識別率は、"10-CV"より小さ くなる傾向があるが大きな差は無い.k-NN では訓練 データが全て記憶されるので、1-NN 識別器では訓練 データに対する誤識別が0になる.

表 8~表 10 はパラメータ選択に 10-CV を用いた FCM 識別器の誤識別率 (%) ± 標準偏差を示す.表 11 ~表 13 は再代入誤識別率を最小化するようにパラメー 夕選択した場合 (Trained by resubstitution, 1-CV) で ある.

表 8 と表 11 は  $m, \gamma, \nu$  のみをパラメータとする FCM

識別器 (FCMC) の誤識別率を示す. 表 9, 表 12 は  $m, \gamma, \nu \geq \alpha_{qj}$  の変更率をパラメータとした FCM 識 別器 (FCMC( $\alpha_{qj}$ )) の誤識別率を示す. 表 10 と表 13 は $m, \gamma, \nu \geq ||v_{qj}||$ の変更率をパラメータとした FCM 識別器 (FCMC( $||v_{qj}||$ )) の誤識別率を示す. "k" の欄 は FCM 識別器と k-NN との平均値の差の t 検定の結 果を示す. 〇 は FCM 識別器の誤識別率が k-NN の誤 識別率より両側検定 (p < 0.05) で有意に小さいことを 表す.  $\blacklozenge$  は FCM 識別器の誤識別率が k-NN の誤識別 率より優位に大きいことを表す.

表8では、Sonor以外の全てのデータで FCMC の方 が *k*-NN より評価用データの誤識別率が小さい.テス ト用データの誤識別率は、Glass と Pima の場合だけ *k*-NN の方が小さい.

表9の"k"欄と"F"欄は、FCMC( $\alpha_{qj}$ )がk-NNや 三つのパラメータのみのFCMCに比べて、明らかに評 価用データの識別性能が良いことを示している。テス ト用データの誤識別率では、k-NNがFCMC( $\alpha_{qj}$ )よ り有意に小さいのはGlassのみである。FCMC( $\alpha_{qj}$ )と 三つのパラメータのみのFCMCとの比較では、Irisと BreastはFCMCの方が小さく、Iono、Pima、Sonarは FCMC( $\alpha_{qj}$ )の方が小さいので、明白な違いは認められ なかった。

表 10 では、FCMC のテスト用データの誤識別率が FCMC( $||v_{qj}||$ ) より有意に小さいのは Iris のみである. k-NN は Glass と Sonar で FCMC( $||v_{qj}||$ ) より小さく なっている.

表 11-13 は、テスト用データを除く全てのデータを 用いて訓練とPSO によるパラメータ最適化を行った場 合, すなわち再代入誤識別率を最小化するようにした 場合の,それぞれFCMC,FCMC( $\alpha_{qj}$ ),FCMC( $||v_{qj}||$ ) の結果を示す.表11より、テスト用データの識別では Pima と Sonar 以外はパラメータが三つだけの FCMC の方が 10-CV の k-NN(誤識別率は表 7, "Trained by 10-CV"-"Test error" に示したもの) より誤識別率が 小さいか等しい.表 12 は  $\text{FCMC}(\alpha_{qj})$  の場合で, テ スト用データの識別では、全てのベンチマークデータ において FCMC( $\alpha_{qj}$ ) の方が k-NN(resubstitution) よ り有意に誤識別率が小さいか等しくなった.k-NN が FCMC( $\alpha_{ai}$ )より誤識別率が小さいのは "10-CV"-"k" 欄の Glass のみである. 表7 で, 10-CV を用いた場合の k-NNのGlassは、テスト用データの誤識別率が評価用 データの誤識別率より小さい. このことから, k-NN で の Glass の結果は少し特殊な場合であるといえる.

表 13 は再代入誤識別率を最小化するようにした場 合の FCMC(||v<sub>qj</sub>||)の誤識別率と性能比較を示す.テ スト用データの識別結果は、全てのデータセットにお いて、10-CV を用いた k-NN より誤識別率が有意に小 さいか等しくなった.表12,表13の結果から,再代 入法で(訓練データに対する誤識別率を最小化するよ うに)パラメータ最適化を行った FCM 識別器は高い 汎化能力を示すと言える.このことは、FCM 識別器を 用いる際には全てのデータに対して訓練を行うだけで よいことを意味している.訓練データが大量にある場 合は、訓練データの誤識別率が重要となる.

表 8 から表 13 の太字で示す誤識別率は,3 通りの自 由パラメータの設定法  $(m, \gamma, \nu$  のみの場合, $\alpha_{qj}$  の変 更率を含む場合, $||v_{qj}||$ の変更率を含む場合)と2通 りの CV 法 (10-CV, 1-CV)の組み合わせの中でデー タ毎に最も誤識別率が小さいものを示している.全て のデータが 10 回ずつテスト用データとして選ばれた結 果であるので,もしベンチマークデータ毎にこれらの 方策を選択するなら 3-WDS での性能は大きく改善さ れる.また自由パラメータが  $m, \gamma, \nu$  のみの FCM 識別 器の場合は太字の結果が無いことから,自由パラメー タを増やすことの効果は大きいと言える.

表14,表15は,それぞれFCMC( $\alpha_{qj}$ ),FCMC( $||v_{qj}||$ )のk-NN及びサポートベクターマシン(SVM)との性能比較を示す.SVMは優れた識別手法として知られている.性能比較はランダムに選ばれた1/3のテスト用データを用いて行い,識別器の訓練やパラメータ最適化は残りの2/3を用いて行った.訓練/評価用データはランダムに選択され,選択されなかった1/3のデータをテスト用データとした.比較する三つの識別器のテスト用データに対する性能は,全て以下の手順で評価されている.

1. ランダムに選択した訓練/評価用データに 10-CV を適用して,評価用データの誤識別率が最も小さくな るパラメータ値を選択する.

2. 求めたパラメータを用いて識別器を構築する.

3. 残りの 1/3 のテスト用データに対する誤識別率を求め, 識別器の精度を評価する.

表 14,表 15 の SVM の誤識別率と標準偏差("SVM-RBF 10 runs"欄)は、ステップ1から3を10回行っ てその平均を求めたものであり、文献[19]から引用し た.SVM-RBF のパラメータ(kernel, regularization) は10-CV での評価用データの誤識別を最少化するよ うにグリッドサーチにより求められている.最適なパ ラメータは訓練/評価用データの選び方で大きく変化 するので、識別性能を厳密に測定するために、FCM 識 別器と k-NN についてはステップ1から3を100回 行って誤識別率の平均を求めた.Glass は文献[19]に 含まれていないので、Statlog Australian credit (Australia, N=690, p=14, Q=2), Statlog German credit (German, N=1000, p=20, Q=2), Statlog heart disease (Heart, N=270, p=13, Q=2)の三つのベンチマー クデータを加えた.

FCM 識別器, k-NN, SVM の性能比較は平均値の差 の両側 t 検定 (p < 0.05)を用いた.t 検定の結果は表 の "k" 欄, "S" 欄に示す. "S" は SVM との比較結果 を表す.表 14,表 15 で 〇 は誤識別率が 5% 以上小 さいか、半分以下であることを示している.表14よ り、 $FCMC(\alpha_{qj})$ は多くのデータでk-NNより誤識別率 が小さい.表 15 は FCMC(||v<sub>qj</sub>||)の識別性能を示す. Pimaは "SVM" と同等となっている.計算時間もここ で取り上げたベンチマークデータでは大きな差は無い が, SVM ではカーネル行列のサイズが $N \times N$ で,訓 練データ数が大量であればワーキングセットに分解し て計算を繰り返すこと(decomposition method)が必 要で, 誤識別が多くサポートベクターが大量になる場 合も計算時間が増大する.提案法ではほぼ訓練データ 数に比例して計算時間が増えるので,訓練データ数が 多い場合に有効である.

以上より, FCM 識別器はテスト用データと評価用 データの両者に高精度な識別器であると言える.

	k-NN classifier						
	Trained by	10-CV	Trained by resubstitution				
	Validation	Test	Training	Test			
	error	error	error	error			
Iris	3.85	6.00	0.0	5.33			
Breast	3.02	3.24	0.0	4.71			
Iono	13.10	13.14	0.0	13.14			
Glass	29.42	28.10	0.0	30.48			
Liver	32.55	35.00	0.0	34.71			
Pima	23.75	24.47	0.0	29.74			
Sonar	13.28	15.50	0.0	14.00			
Wine	2.25	4.12	0.0	4.12			

表 7: k-NN の誤識別率 (%)

## 5 おわりに

本論文では FCM 識別器の性能評価を行った.提案 の FCM 識別器のテスト用データに対する汎化性能は, 高精度識別器として知られる SVM にほぼ等しく,評価 用データに対してはより優れた結果が得られた.また, 訓練データに対する誤識別率,すなわち再代入誤識別 率を最小化する場合も高い汎化性能が得られた.パラ メータ数を増やすと最適化は煩雑になるが, PSO はラ

### 表 8: *m*, *γ*, *ν* のみをパラメータとする FCMC の 10-CV での誤識別率 (%)

	Trained by 10-CV					
	Validation er	ror	Test error			
	FCMC	k	FCMC	k		
Iris	$2.26 \pm 0.09$	0	$2.67\pm0.54$	0		
Breast	$2.90\pm0.00$	0	$2.79\pm0.00$	0		
Iono	$4.04\pm0.08$	0	$4.86\pm0.52$	0		
Glass	$27.36 \pm 0.23$	0	$30.29 \pm 1.29$	۰		
Liver	$26.33 \pm 0.19$	0	$28.38\pm0.66$	0		
Pima	$23.46 \pm 0.04$	0	$25.24\pm0.39$	۰		
Sonar	$13.64 \pm 0.13$	۵	$15.75\pm0.72$	-		
Wine	$0.31\pm0.05$	0	$0.18 \pm 0.28$	0		

#### 表 9: 10-CV での FCMC( $\alpha_{qi}$ )の誤識別率 (%)

	15/						
		Trained by 10-CV					
	Validation	error		Test erre	or		
	$\operatorname{FCMC}(\alpha_{qj})$	k	F	$FCMC(\alpha_{qj})$	k	F	
Iris	$2.00\pm0.10$	0	0	$3.27\pm0.66$	0	٨	
Breast	$2.50\pm0.01$	0	0	$3.15\pm0.21$	-	٨	
Iono	$3.61 \pm 0.14$	0	0	$\textbf{4.17} \pm 0.39$	0	0	
Glass	$26.98 \pm 0.23$	0	0	$29.81 \pm 1.06$		-	
Liver	$25.50\pm0.16$	0	0	$28.71 \pm 1.14$	0	-	
Pima	$22.98\pm0.05$	0	0	$24.64\pm0.52$	-	0	
Sonar	$11.07 \pm 0.13$	0	0	$14.40 \pm 1.39$	0	0	
Wine	$0.04 \pm 0.04$	0	0	$\textbf{0.06} \pm 0.19$	0	-	

表 10: 10-CV での FCMC( $||v_{qj}||$ )の誤識別率 (%)

	Trained by 10-CV					
	Validation	error		Test error		
	$\operatorname{FCMC}(  v_{qj}  )$	k	F	$\operatorname{FCMC}(  v_{qj}  )$	k	F
Iris	$1.65\pm0.10$	0	0	$4.07\pm0.86$	0	٨
Breast	$2.37\pm0.02$	0	0	$2.56 \pm 0.10$	0	0
Iono	$3.64\pm0.09$	0	0	$4.57\pm0.43$	0	-
Glass	$26.36\pm0.31$	0	0	$30.71 \pm 1.25$	۰	-
Liver	$23.21\pm0.23$	0	0	$26.03 \pm 1.14$	0	0
Pima	$22.36\pm0.05$	0	$\bigcirc$	$23.59\pm0.37$	0	0
Sonar	$12.26 \pm 0.17$	0	0	$16.80 \pm 1.48$	۰	-
Wine	$0.06 \pm 0.03$	0	0	$0.53 \pm 0.59$	0	-

ンダム探索に似て簡便であり,識別器をパラメータ化 して性能を向上させる際に実装が容易である.

### 参考文献

- J. C. Bezdek, Pattern Recognition with Fuzzy Objective Function Algorithms, Plenum Press, 1981.
- [2] S. Miyamoto, H. Ichihashi, and K. Honda, Algorithms for Fuzzy Clustering, Methods in c-Means Clustering with Applications, Springer-Verlag, Berlin, 2008.

表 11: *m*, *γ*, *ν* のみをパラメータとする FCMC の再代 入法での誤識別率 (%)

	Trained by resubstitution (1-CV)					
	Training error	Test error				
			10-CV			
	FCMC	FCMC	k			
Iris	$0.71\pm0.04$	$3.27\pm0.50$	0			
Breast	$2.78\pm0.00$	$2.96\pm0.15$	0			
Iono	$3.31 \pm 0.10$	$4.71 \pm 0.41$	0			
Glass	$8.58\pm0.15$	$27.71\pm0.63$	-			
Liver	$22.40\pm0.10$	$28.50\pm0.59$	0			
Pima	$21.28\pm0.06$	$25.13 \pm 0.59$	٨			
Sonar	$2.60\pm0.05$	$16.35\pm0.47$	۴			
Wine	$0.00\pm 0.0$	$0.41\pm0.40$	0			

表 12: 再代入法での  $FCMC(\alpha_{qj})$  の誤識別率 (%)

	Trained by resubstitution (1-CV)						
	Training error		Tes				
						10-	CV
	$\text{FCMC}(\alpha_{qj})$	F	$\text{FCMC}(\alpha_{qj})$	k	F	k	F
Iris	$0.67\pm0.0$	-	$3.07\pm0.56$	0	-	0	-
Breast	$2.49\pm0.01$	0	$3.09\pm0.17$	0	-	0	٨
Iono	$2.94\pm0.16$	0	$4.34\pm0.44$	0	-	0	0
Glass	$8.18\pm0.18$	0	$28.90 \pm 0.92$	0	٨	۰	0
Liver	$21.83\pm0.09$	0	$28.11 \pm 1.01$	0	-	0	-
Pima	$20.81 \pm 0.05$	0	$24.79 \pm 0.55$	0	-	-	0
Sonar	$2.11\pm0.13$	0	$14.40 \pm 0.88$	-	0	0	0
Wine	$0.0 \pm 0.0$	-	$0.89 \pm 0.42$	0	٨	0	٨

表 13: 再代入法での FCMC(||v<sub>qj</sub>||) の誤識別率 (%)

	Trained by resubstitution (1-CV)							
	Training error		Test error					
						10-	CV	
	$\text{FCMC}(  v_{qj}  )$	F	$\text{FCMC}(  v_{qj}  )$	k	F	k	F	
Iris	$0.67\pm0.00$	0	$2.80 \pm 0.82$	0	-	0	-	
Breast	$2.34 \pm 0.01$	0	$2.71 \pm 0.17$	0	0	0	-	
Iono	$3.00\pm0.07$	0	$4.40\pm0.31$	0	-	0	0	
Glass	$8.71 \pm 0.24$	-	$29.24 \pm 1.91$	-	۰	-	-	
Liver	$21.14 \pm 0.12$	0	$26.82 \pm 1.10$	0	0	0	0	
Pima	$20.47\pm0.07$	0	$23.54 \pm 0.69$	0	0	0	0	
Sonar	$1.95 \pm 0.06$	0	$15.50 \pm 0.97$	٨	0	-	-	
Wine	$0.00 \pm 0.0$	-	$1.18 \pm 0.62$	0	٨	0	٨	

- [3] H. Ichihashi, K. Honda, A. Notsu and K. Ohta, "Fuzzy c-means classifier with particle swarm optimization," Proc. of the IEEE International Conference on Fuzzy System, World Congress on Computational Intelligence, Hong Kong, China, pp. 207-215, 2008.
- [4] R. O. Duda and P. E. Hart, Pattern Classification and Scene Analysis, Wiley, New York, 1973.
- [5] P. W. Holland and R. E. Welsch, "Robust regres-

表	14:	$\operatorname{FCMC}(\alpha_{qj}),$	k-NN,	SVM	の誤識別率	(%)
---	-----	-------------------------------------	-------	-----	-------	-----

	Test set error rate trained by 10-CV						
	$FCMC(\alpha_{qj})$			<i>k</i> -NN	SVM-RBF		
	100 runs	k	S	100 runs	10 runs		
Iris	$3.98\pm2.52$	0	-	$5.68\pm2.91$	$3.4\pm3.4$		
Breast	$3.06\pm0.86$	0	-	$3.37\pm0.10$	$3.6\pm1.0$		
Iono	$4.64 \pm 1.79$	$\odot$	-	$14.86 \pm 3.59$	$4.6\pm1.7$		
Liver	$30.47 \pm 3.68$	$\odot$	-	$37.94 \pm 4.37$	$29.6\pm3.2$		
Pima	$24.36 \pm 2.47$	0	٨	$25.77 \pm 2.60$	$22.7\pm2.2$		
Sonar	$17.46 \pm 4.30$	۰	$\odot$	$15.80 \pm 4.17$	$25.0\pm6.6$		
Wine	$1.97\pm2.05$	$\odot$	-	$4.36 \pm 2.89$	$2.2\pm2.1$		
Australia	$14.34 \pm 2.03$	-	-	$14.39 \pm 2.00$	$13.7 \pm 1.8$		
German	$24.17 \pm 2.02$	0	-	$27.83 \pm 2.12$	$24.1\pm1.4$		
Heart	$16.39 \pm 3.66$	-	-	$17.31 \pm 3.57$	$15.3 \pm 4.8$		

表 15: FCMC( $||v_{qj}||$ ), k-NN, SVM の誤識別率 (%)

	Test set error rate trained by 10-CV							
	$FCMC(  v_i  )$			<i>k</i> -NN	SVM-RBF			
	100 runs	k	S	100 runs	10 runs			
Iris	$3.84 \pm 2.44$	0	-	$5.68 \pm 2.91$	$3.4\pm3.4$			
Breast	$3.03 \pm 1.12$	0	-	$3.37\pm0.10$	$3.6\pm1.0$			
Iono	$5.06 \pm 2.11$	$\odot$	-	$14.86 \pm 3.59$	$4.6\pm1.7$			
Liver	$29.11 \pm 3.85$	$\odot$	-	$37.94 \pm 4.37$	$29.6\pm3.2$			
Pima	$23.96 \pm 2.55$	0	-	$25.77 \pm 2.60$	$22.7\pm2.2$			
Sonar	$18.16 \pm 4.84$	۰	$\odot$	$15.80 \pm 4.17$	$25.0\pm6.6$			
Wine	$2.31 \pm 2.49$	0	-	$4.36 \pm 2.89$	$2.2\pm2.1$			
Australia	$13.78 \pm 1.96$	0	-	$14.39 \pm 2.00$	$13.7 \pm 1.8$			
German	$24.12 \pm 2.37$	0	-	$27.83 \pm 2.12$	$24.1 \pm 1.4$			
Heart	$16.78 \pm 3.26$	-	-	$17.31 \pm 3.57$	$15.3\pm4.8$			

sion using iteratively reweighted least-squares," *Communications in Statistics*, vol. A6, no. 9, pp. 813-827, 1977.

- [6] P. J. Huber. *Robust Statistics*. New York:Wiley, first edition, 1981.
- [7] R. C. Eberhart and J. Kennedy, "A new optimizer using particle swarm theory," *Proc. of the* 6th International Symposium on Micro Machine and Human Science, Nagoya, Japan, pp. 39-43, 1995.
- [8] J. Kennedy and R. C. Eberhart, "Particle swarm optimization," Proc of the IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ, vol. 4, pp. 1942-1948, 1995.
- [9] M. Clerc, Particle Swarm Optimization, Wiley, 2006.

- [10] H. Ichihashi, K. Honda, A. Notsu and E. Miyamoto, "FCM classifier for high-dimensional data," Proc. of 2008 IEEE International Conference on Fuzzy System, World Congress on Computational Intelligence, Hong Kong, China, pp. 200-206, 2008.
- [11] H. Ichihashi, A. Notsu and K. Honda, "Triplet of FCM classifiers," *Proc. of 2009 IEEE International Conference on Fuzzy System*, Jeju, Korea, Aug. 20-24, 2009.
- [12] V.N. Vapnik, Estimation of Dependences Based on Empirical Data. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [13] C. Cortes and V. Vapnik, "Support-vector network." *Machine Learning*, vol.20, pp. 273-297, 1995.
- [14] D. E. Gustafson and W. C. Kessel, "Fuzzy clustering with a fuzzy covariance matrix," *Proc. IEEE CDC*, vol.2, pp. 761-766, 1979.
- [15] M. E. Tipping and C. M. Bishop, "Mixtures of probabilistic principal component analyzers," *Neural Computation*, vol.11, pp. 443-482, 1999.
- [16] F. Sun, S. Omachi, and H. Aso, "Precise selection of candidates for hand written character recognition," *IEICE Trans. Information and Systems*, vol.E79-D, no.3, pp. 510-515, 1996.
- [17] A. Asuncion and D.J. Newman, UCI Repository of machine learning databases [http://www.ics. uci.edu/~ mlearn/MLRepository.html]. Irvine, CA: University of California, Dept. of Information and Computer Science, 2007.
- [18] C. J. Veenman and M.J.T. Reinders, "The nearest sub-class classifier: a compromise between the nearest mean and nearest neighbor classifier," *IEEE Transactions on PAMI*, vol.27, no.9, pp. 1417-1429, 2005.
- [19] T. V. Gestel et al., "Benchmarking least squares support vector machine classifiers," *Machine Learning*, vol. 54, pp. 5-32, 2004.

[問い合わせ先]

〒 599-8531 堺市中区学園町 1-1

大阪府立大学大学院工学研究科 電気・情報系専攻 知能情報工学分野 市橋秀友 TEL 072-254-9352 E-mail: ichi@cs.osakafu-u.ac.jp

#### 著者略歴

市橋 秀友 (いちはし ひでとも)[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,2000年同大学院工学研究科教授,現在,知 能情報工学分野に所属.工学博士.ファジィクラスタリ ングに基づく識別器とその知能情報システムへの応用 研究に従事.IEEE,日本知能情報ファジィ学会の会員.

長浦 一哉 (ながうら かずや)[非会員] 2009年大阪府立大学工学部知能情報工学科卒業,同大 学院工学研究科知能情報工学分野在学中,ファジィク ラスタリングに基づく識別器とその知能情報システム への応用研究に従事

#### 野津 亮 (のつ あきら)[非会員]

2005年3月京都大学大学院情報学研究科システム科学 専攻博士後期課程修了.同年4月より大阪府立大学大 学院工学研究科助手,2007年同助教,現在に至る.博 士(情報学).認知モデル,マルチエージェントシステ ムの研究に従事.計測自動制御学会,ヒューマンイン タフェース学会の会員.

本多 克宏 (ほんだ かつひろ)[正会員] 1999年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.同年日本電信電話(株)入社,同 年大阪府立大学工学部経営工学科助手,2000年同大学 院工学研究科助手,2007年同助教,2009年同准教授, 現在に至る.博士(工学).ファジィクラスタリング によるデータマイニングやニューラルネットワークの 研究に従事.IEEE,日本知能情報ファジィ学会,シス テム制御情報学会,日本経営工学会の会員.

### Benchmarking Parameterized Fuzzy *c*-Means Classifier by

### Hidetomo ICHIHASHI, Kazuya NAGAURA, Akira NOTSU and Katsuhiro HONDA

Abstract: This paper reports on the performance of the fuzzy c-means based classifier (FCMC) adopting the length of cluster centers and mixing proportions of clusters as the free parameters. The FCMC consists of two phases. The first phase is an unsupervised clustering. The clustering is done on a per class basis and is implemented by using the data from one class at a time. The second phase of FCMC is a supervised classification where the free parameters of the classifier are chosen by particle swarm optimization (PSO). High performance classifiers usually have parameters to be selected. For example, the support vector machine (SVM) has the regularization and kernel parameters. These hyperparameters are chosen by an optimization procedure to improve the generalization ability of the classifiers in terms of cross validation test. The grid search is the popular approach for SVM. Since the FCM classifier has many hyperparameters and the validation set error rate is not a unimodal function of the parameters, for the parameter search, we apply PSO inspired by social behavior of bird flocking or fish schooling. PSO is based on a simple random search and easy-toimplement. UCI benchmark datasets are used to evaluate the performance. FCM classifier in combination with the standard 10-CV procedure for parameter selection achieves better test set performance compared to k-nearest neighbor classifier. The remarkable finding is that the resubstitution (i.e., 1-CV) procedure for parameter selection also shows good test set performance. Randomized test sets performance of the classifier is comparable to that of the support vector machine (SVM) reported in the literature. Keywords: Fuzzy c-means clustering, Classifier, Particle swarm optimization

Contact Address: Hidetomo ICHIHASHI Department of Computer Science and Intelligent Systems, Osaka Prefecture University 1-1 Gakuen-cho, Naka, Sakai, Osaka, 599-8531, Japan TEL : 072-254-9352 E-mail : ichi@cs.osakafu-u.ac.jp