

トピックグラフに基づく NMF を用いた転移学習

荻野 広樹^{†1} 吉田 哲也^{†1}

本稿では、Non-negative Matrix Factorization (NMF) が局所表現に対応する特徴ベクトルで張られる特徴空間においてデータを近似して表現することに着目し、近似表現に用いる特徴空間が類似するという転移仮説に基づき、特徴空間を保存することにより転移学習を実現する手法を提案する。提案法では元ドメインにおいて NMF を用いて学習した特徴ベクトルからトピックグラフを構築し、NMF における目的関数に特徴空間の類似性を表現する正則化項を追加した目的関数を定義し、この目的関数の最小化を行うアルゴリズムを適用して転移学習を行う。提案する正則化項が両ドメインでのトピックグラフの類似性の表現に対応し、また、トピックグラフに対するグラフラプリアンに対応することを示す。さらに、提案アルゴリズムの収束性を示す。提案法を文書クラスタリングにおける転移学習に適用し、提案法の効果を示すとともに他手法との比較を通じて有効性を示す。

Topic Graph based NMF for Transfer Learning

HIROKI OGINO ^{†1} and TETSUYA YOSHIDA ^{†1}

We propose a method called Topic Graph based NMF for Transfer Learning (TNT) based on Non-negative Matrix Factorization (NMF). Since NMF learns feature vectors to approximate the given data, the proposed method tries to preserve the feature space which is spanned by the feature vectors to realize transfer learning. Based on the learned feature vectors in the source domain, a graph structure called topic graph is constructed, and the graph is utilized as a regularization term in the framework of NMF. We show that the proposed regularization term represents the similarity between topic graphs in both domains, and that the term corresponds to graph Laplacian of the topic graph. Furthermore, we propose an extended learning algorithm based on the standard multiplicative update rules and prove its convergence. The proposed approach is evaluated over document clustering problem, and the results indicate that the proposed method improves performance via transfer learning.

1. はじめに

利用可能なデータの量や種類の増加に伴い、あるドメインで学習した知識を別のドメインで活用することで性能向上を図りたいというニーズが高まっている。転移学習とは、ある問題を解くために、別の関連した問題のデータや学習結果を再利用する学習の枠組みであり、知識を転移する際に学習を行う側を元ドメイン、転移された知識を活用する側を目標ドメインと呼ぶ^{6),10)}。転移学習には様々な手法が提案されている^{2),9),15)}。たとえば政治、経済、スポーツなど様々なドメインにおける文書が存在するが、ひとつの文書中でもいくつかの話題が混在する場合がある¹²⁾。このため、ドメインが異なっても話題に関する知識を学習しておき、学習した知識を別のドメインにおける文書の処理に活用することが考えられる。

本稿では、NMF では学習した局所表現に対応する特徴ベクトル (本稿ではトピックと呼ぶ) で張られる特徴空間においてデータを近似して表現することに着目し、ドメイン間で近似表現に用いる特徴空間が類似するという転移仮説に基づき、特徴空間を保存することにより転移学習を実現する手法を提案する。提案法では元ドメインにおいて NMF を用いて学習した特徴ベクトルからトピックグラフを構築し、NMF における目的関数に特徴空間の類似性を表現する正則化項を追加した目的関数を定義し、この目的関数の最小化を行うアルゴリズムを適用して転移学習を行う。提案する正則化項が両ドメインでのトピックグラフの類似性の表現に対応し、また、トピックグラフに対するグラフラプリアン¹³⁾ に対応することを示す。さらに、提案アルゴリズムの収束性を示す。

NMF を次元削減を行う表現学習法ととらえた場合、スペクトル学習⁷⁾ と同様に元ドメインでの情報を活用して学習した表現に対して様々な学習アルゴリズムを適用することが可能となる。特に、提案法では他の手法^{9),15)} などと異なり元ドメインとして与えるデータに対するラベルを必要としないという利点があり、適用範囲が広いと考えられる。提案法を文書クラスタリングにおける転移学習に適用して評価し、提案法の効果を示すとともに他手法との比較を通じて有効性を示す。

1.1 準備

本稿では、行列は太字の大文字、ベクトルは太字のイタリック小文字で表記し、 \mathbf{X}_{ij} で行列 \mathbf{X} の第 ij 要素を表す。tr は行列のトレースを表し、 \mathbf{X}^T で \mathbf{X} の転置を表す。与えられ

^{†1} 北海道大学大学院情報科学研究科

Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University

たデータが表現される空間をデータ空間、写像先の空間を特徴空間と呼び、データ空間におけるデータの表現をデータ行列、特徴空間におけるデータの表現を表現行列と呼ぶ。データ空間を構成するベクトルを属性、特徴空間を構成するベクトルを特徴と呼び、ベクトルの各要素は非負と仮定する。記号 \simeq は近似を表し、 \Leftrightarrow は同値を表す。

2. 関連研究

Non-negative Matrix Factorization (NMF)⁸⁾ とは、与えられた p 次元空間における n 個のデータに対する非負のデータ行列 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n] \in \mathbb{R}_+^{p \times n}$ に対して *1 、特徴数 q のもとで非負の行列 $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q] \in \mathbb{R}_+^{p \times q}$ 、 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n] \in \mathbb{R}_+^{q \times n}$ の積により

$$\mathbf{X} \simeq \mathbf{U}\mathbf{V} \quad (1)$$

と近似して分解する行列 \mathbf{U} 、 \mathbf{V} を求める手法である。各データ \mathbf{x}_i は $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q$ の線形結合として近似して表現されることになる。このため、NMF は与えられたデータ行列 \mathbf{X} に対し、行列 \mathbf{U} の列ベクトルで張られる特徴空間における表現 \mathbf{V} を求める手法と見なせる。 \mathbf{U} 、 \mathbf{V} は式 (1) での近似の良さに対応する以下の目的関数を最小化により求める。

$$J_0 = \|\mathbf{X} - \mathbf{U}\mathbf{V}\|^2 \quad (2)$$

ここで $\|\cdot\|$ は行列のノルムであり、フロベニウスノルムと KL 情報量を用いる方法が提案されているが⁸⁾、本稿ではフロベニウスノルムを用いる場合を扱う。

NMF を用いた文書クラスタリングでは、一般には特徴数 q をクラスタ数 k に設定し、各データ \mathbf{x} ごとに構築した表現 \mathbf{v} において最大の値を持つクラスタ c に割り当てる。

$$c = \operatorname{argmax}_c v_c \quad (3)$$

ここで v_c はデータ \mathbf{x} に対する表現 \mathbf{v} における第 c 要素の値を表す。

3. トピックグラフに基づく NMF を用いた転移学習

3.1 トピックグラフ

本稿では、非負性の制約下での学習手法として NMF に着目する。式 (1) では各データ \mathbf{x} は $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q$ 線形結合で近似して表現するためデータ \mathbf{x} を $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q$ の混合されたものと解釈できるため、 \mathbf{U} の列ベクトル $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q$ をトピックとみなす。なお、本稿では $\|\cdot\|$ にはフロベニウスノルムを用いるが、KL 情報量を用いる場合には NMF の確率的な解釈も

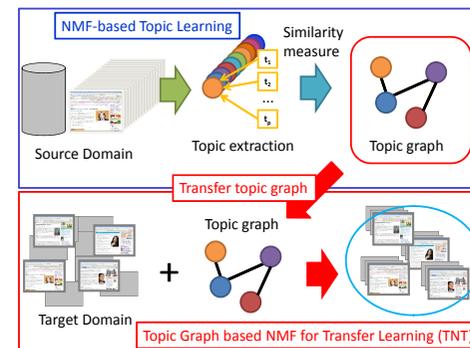


図 1 トピックグラフに基づく NMF を用いた転移学習の概要
Fig. 1 Overview of Topic based NMF for Transfer Learning

図 2 トピックグラフに基づく NMF を用いた転移学習の枠組み
Fig. 2 The Framework of Topic based NMF for Transfer Learning

- | |
|---|
| <p>Step1 元ドメインにおける \mathbf{X}_s に NMF を適用して \mathbf{U}_s を学習</p> <p>Step2 学習した \mathbf{U}_s を目標ドメインに転移し活用</p> <p style="padding-left: 20px;">Step2.1 トピックグラフ \mathbf{W}_s を構築</p> <p style="padding-left: 20px;">Step2.2 \mathbf{W}_s を保存する NMF (図 3 に示すアルゴリズム TNT) を適用して目標ドメインにおける表現 \mathbf{V}_t を学習</p> <p>Step3 学習した \mathbf{V}_t に対して学習アルゴリズムを適用</p> |
|---|

可能である。

提案法では、NMF で学習する局所表現 \mathbf{U} における各トピック (列ベクトル \mathbf{u}) を頂点とし、トピックの対 $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)$ を類似度を重みとする辺で連結したグラフを構築して転移学習に用いる。このグラフをトピックグラフと呼び、辺の重みを行列 \mathbf{W} で表記する。グラフ構築にはテキスト処理で標準的に用いられるコサイン類似度を用いる。

$$\mathbf{W} = \mathbf{U}^T \mathbf{U} \quad \text{where } \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i = 1, \quad \forall i = 1, \dots, q \quad (4)$$

3.2 提案法の概要

提案法の概要を図 1 に示す。NMF では各データを局所表現 $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q]$ で張られる特徴空間である $\text{Span}(\mathbf{U})$ ^{*2} において近似して表現することに着目し、元ドメインと目標ド

*1 本稿では、NMF における記法に従い、 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_+^{p \times n}$ の形式をデータ行列と呼ぶ。

*2 \mathbf{U} の列ベクトルで張られる部分空間を $\text{Span}(\mathbf{U})$ と表記する⁴⁾。

メインとでデータの近似表現に用いる特徴空間が類似すると仮定し、特徴空間を保存することにより転移学習を実現する手法を提案する。提案法では元ドメインにおいて NMF を用いて学習した局所表現から 3.1 節で述べたトピックグラフを構築し、目標ドメインではトピックグラフに基づく正則化を用いた学習を行う。

提案法の枠組みを図 2 に示す。Step1 において元ドメインでのデータ行列 \mathbf{X}_s から学習した \mathbf{U}_s を転移して Step2.1 でトピックグラフを構築し、Step2.2 では提案する学習アルゴリズム (図 3 に示す TNT) を用いて目標ドメインにおける表現 \mathbf{V}_t を学習する。次に、スペクトル学習⁷⁾ と同様に学習した表現 \mathbf{V}_t に対して処理の目的に応じた学習アルゴリズムを適用する。以下では Step2.2 について述べる。

3.3 トピックグラフに基づく NMF を用いた学習

提案法での転移仮説はドメイン間での近似表現に用いる特徴空間の類似性 (保存性) であり、式 (2) に類似性を表現する正則化項を追加した目的関数の最小化として定式化した転移モデルにより実現する。前者は、NMF により各ドメインで学習する \mathbf{U}_s , \mathbf{U}_t を用いて $Span(\mathbf{U}_s) \simeq Span(\mathbf{U}_t)$ という制約に対応する。この制約を式 (2) と同様に $\|\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_t\|^2$ の最小化として定式化し、以下の目的関数の最小化を考える。

$$J_1 = \|\mathbf{X}_t - \mathbf{U}_t \mathbf{V}_t\|_F^2 + \nu \|\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_t\|^2 \quad (5)$$

第一項は式 (2) と同一であり、第二項が転移仮説に対応する正則化項であり、 $\nu \in \mathbb{R}_+$ は正則化係数である。第二項での \mathbf{U}_s は元ドメインで学習済みの定数行列である。

\mathbf{U}_s , \mathbf{U}_t では列ベクトルのノルムが正規化されているという条件のもとで、NMF では各要素が非負であることに基いて第二項を以下の形に書き換えることができる。

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{U}_t} \|\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_t\|^2 \quad (6)$$

$$\Leftrightarrow \operatorname{argmin}_{\mathbf{U}_t} \operatorname{tr}(\mathbf{U}_t \mathbf{L}_s \mathbf{U}_t^T) \quad (7)$$

ここで、 \mathbf{D}_s は元ドメインで学習した \mathbf{U}_s から構成される \mathbf{W}_s に対する次数行列^{*1}であり、 \mathbf{L}_s はトピックグラフ \mathbf{W}_s に対するグラフラプシアン $\mathbf{L}_s = \mathbf{D}_s - \mathbf{W}_s$ である。

上記より、提案法は元ドメインで学習した \mathbf{U}_s に基づき式 (5) の最小化と同値な以下の目的関数を最小化する \mathbf{U}_t , \mathbf{V}_t を求める問題として転移学習を定式化する。

$$J_2 = \|\mathbf{X}_t - \mathbf{U}_t \mathbf{V}_t\|^2 + \nu \operatorname{tr}(\mathbf{U}_t \mathbf{L}_s \mathbf{U}_t^T) \quad (8)$$

*1 行列 \mathbf{W} に対し、 $d_i = \sum_j (\mathbf{W})_{ij}$ とするベクトル \mathbf{d} に基づく対角行列 $\mathbf{D} = \operatorname{diag}(\mathbf{d})$ を次数行列と呼ぶ。

図 3 Topic based NMF for Transfer Learning

Fig.3 Topic based NMF for Transfer Learning

Algorithm TNT(\mathbf{X}_t , \mathbf{U}_s , ν)

Require: \mathbf{X}_t

Require: $\mathbf{U}_s \in \mathbb{R}_+^{p \times q}$ s.t. $\mathbf{u}_l^T \mathbf{u}_l = 1, \forall l = 1, \dots, q$

Require: $\nu \in \mathbb{R}_+$ //正則化係数

1: $\mathbf{U}_t := \mathbf{U}_s$ //元ドメインで学習した \mathbf{U}_s を初期値に設定

2: \mathbf{V}_t を初期化

3: **while** 終了条件が満たされない限り **do**

4: $(\mathbf{U}_t)_{ij} := (\mathbf{U}_t)_{ij} \frac{(\mathbf{X}_t \mathbf{V}_t^T + \nu \mathbf{U}_t \mathbf{W}_s)_{ij}}{(\mathbf{U}_t \mathbf{V}_t \mathbf{V}_t^T + \nu \mathbf{U}_t \mathbf{D}_s)_{ij}}$

5: normalize \mathbf{U}_t s.t. $\mathbf{u}_l^T \mathbf{u}_l = 1, \forall l = 1, \dots, q$

6: $(\mathbf{V}_t)_{ij} := (\mathbf{V}_t)_{ij} \frac{(\mathbf{U}_t^T \mathbf{X}_t)_{ij}}{(\mathbf{U}_t^T \mathbf{U}_t \mathbf{V}_t)_{ij}}$

7: **end while**

8: **return** \mathbf{V}_t

更に、上記と同様な議論により、式 (8) の第 2 項の最小化は以下と同値である。

$$\operatorname{argmax}_{\mathbf{U}_t} \mathbf{W}_s \bullet \mathbf{W}_t \quad (9)$$

ここで \bullet は行列の点内積を表す⁴⁾。このため、式 (8) の第 2 項は両ドメインにおけるトピックグラフ \mathbf{W}_s , \mathbf{W}_t の類似度の最大化と解釈することが可能であり、また式 (7) よりトピックグラフに対するグラフラプシアンに基づいた正則化項とも解釈できる。

3.4 アルゴリズム

式 (8) の最小化により \mathbf{U}_t , \mathbf{V}_t を導出するアルゴリズムを提案する。 \mathbf{U}_t , \mathbf{V}_t の各要素の非負性制約に対応するラグランジュ未定係数 Ψ , Φ を導入して式 (10) を定義する。

$$\mathcal{L} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{U}_t, \mathbf{V}_t} \|\mathbf{X}_t - \mathbf{U}_t \mathbf{V}_t\|^2 + \nu \operatorname{tr}(\mathbf{U}_t \mathbf{L}_s \mathbf{U}_t^T) + \operatorname{tr}(\Psi \mathbf{U}_t^T) + \operatorname{tr}(\Phi \mathbf{V}_t^T) \quad (10)$$

式 (10) を \mathbf{U}_t , \mathbf{V}_t に対して微分して図 3 の 4, 6 行目に示す更新式を得る。

提案アルゴリズム TNT (Topic based NMF for Transfer Learning) を図 3 に示す。1 行目で \mathbf{U}_t の初期値として \mathbf{U}_s を用い、4 行目の更新式において制約項を反映した更新を行う。6 行目の更新式は図 3 に示した NMF と同じ更新式である。

提案アルゴリズムについて以下の性質が成り立つ。

定理 1. アルゴリズム TNT は収束する。

収束性の証明は割愛する。

3.5 目標ドメインのデータ対に基づく正則化

転移学習では目標ドメインでの性能向上を重視される。特にクラスタリングにおいて目標ドメインに特化したデータ表現 \mathbf{V}_t を学習する際には、式 (8) に対してデータ対に基づく正則化項¹⁾ を追加した以下の目的関数を提案する。

$$J_3 = \|\mathbf{X}_t - \mathbf{U}_t \mathbf{V}_t\|^2 + \nu \text{tr}(\mathbf{U}_t \mathbf{L}_s \mathbf{U}_t^T) + \lambda \text{tr}(\mathbf{V}_t^T \mathbf{L}_t \mathbf{V}_t) \quad (11)$$

第3項は文献¹⁾ で提案されたデータ対に基づく正則化項であり、 λ は正則化係数である。文献¹⁾ の手法ではデータ空間において m -近傍グラフを構築し、その隣接行列 \mathbf{A} に対する次数行列 \mathbf{D} に基づくグラフラプラシアン $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{A}$ に基づく正則化を行うが、提案法では m -近傍グラフの重み行列に対するグラフラプラシアン \mathbf{L}_t を用いる。

式 (11) を用いる場合にも、3.4 節と同様な手順で更新式を導出できる。 \mathbf{U}_t による微分と \mathbf{V}_t による微分は独立しているため図 3 の4行目は不変であり、6行目のみ文献¹⁾ の更新式を用いればよいことになる。更に、独立性により式 (11) を用いる場合でも定理 1 と同様に収束性を示すことができる。

4. 評価

4.1 実験設定

4.1.1 対象データ

先行研究⁹⁾ に基づき、提案法を 20 ニュースグループ (以下、20NG と表記) ^{*1} のクラスタリングにおける転移学習に対して評価した。このデータはベクトル空間モデルで表現された文書データであり、トップカテゴリとして4つのトップカテゴリ {comp, rec, sci, talk} があり、その下にサブカテゴリがある (表 1 参照)。転移学習の実験設定としては、両ドメインでトップカテゴリは共通とし、ドメイン同士は異なるサブカテゴリに属すデータセットを作成した。転移学習の目的はデータ量の多い元ドメインから知識を学習してデータ量の少ない目標ドメインでの性能向上を図ることであるため、元ドメインと目標ドメインとのデータ数の比を 4:1 とし、目標ドメインでの各サブカテゴリから 25 個の文書を非復元抽出し、各データセットごとに 10 個ずつサンプルを作成した。データセットを表 2, 表 3 に示す。

各サンプルごとに porter stemmer ^{*2} を用いて stemming を行い、MontyTagger ^{*3} を用いて品詞に分解し、stop word を除去して相互情報量で上位 2,000 語の単語を選択した。

表 1 20 Newsgroup における階層

Table 1 hierarchy in 20 Newsgroup dataset

トップカテゴリ	サブカテゴリ	表記	トップカテゴリ	サブカテゴリ	表記
comp	graphics	comp-1	sci	crypt	sci-1
	os.ms.windows.misc	comp-2		electronics	sci-2
	sys.ibm.pc.hardware	comp-3		med	sci-3
	sys.mac.hardware	comp-4		space	sci-4
	windows.x	comp-5			
rec	autos	rec-1	talk	politics.guns	talk-1
	motorcycles	rec-2		politics.mideast	talk-2
	sport.baseball	rec-3		politics.misc	talk-3
	sport.hockey	rec-4		religion.misc	talk-4

表 2 4 clusters dataset

Table 2 4 clusters dataset

id	Dataset	Clusters				
		Source	comp-1	comp-4	rec-2	rec-4
a	comp vs rec	Target	comp-2	comp-5	rec-1	rec-3
		Source	comp-1	comp-2	sci-1	sci-2
b	comp vs sci	Target	comp-4	comp-5	sci-3	space
		Source	comp-1	comp-5	talk-2	talk-4
c	comp vs talk	Target	comp-2	comp-3	talk-1	talk-3
		Source	rec-1	rec-2	talk-1	talk-3
d	rec vs talk	Target	rec-3	rec-4	talk-2	talk-4
		Source	sci-2	sci-3	talk-3	talk-4
e	sci vs talk	Target	sci-1	sci-4	talk-1	talk-2

表 3 6 clusters dataset

Table 3 6 clusters dataset

id	Dataset	Source Data						
		Source	comp-1	comp-2	rec-1	rec-2	sci-1	sci-2
f	comp vs rec vs sci	Target	comp-3	comp-4	rec-3	rec-4	sci-3	sci-4
		Source	comp-1	comp-2	rec-1	rec-2	talk-1	talk-2
g	comp vs rec vs talk	Target	comp-3	comp-4	rec-3	rec-4	talk-3	talk-4
		Source	comp-1	comp-2	sci-1	sci-2	talk-1	talk-2
h	comp vs sci vs talk	Target	comp-3	comp-4	sci-3	sci-4	talk-3	talk-4
		Source	rec-1	rec-2	sci-1	sci-2	talk-1	talk-2
i	rec vs sci vs talk	Target	rec-3	rec-4	sci-3	sci-4	talk-3	talk-4

4.1.2 評価尺度

上記のデータは、各データ (ここでは文書) ごとに真のクラスタが既知である。各データセットに対して、各データに対する真のクラスタと割り当てられたクラスタに基づいて正規化相互情報量 (NMI) を評価した。真のクラスタと割り当てられたクラスタに対応する確率変数を C, \hat{C} とすると、正規化相互情報量 (NMI) は以下で定義される。

$$NMI = \frac{I(\hat{C}; C)}{(H(\hat{C}) + H(C))/2} \quad (\in [0, 1]) \quad (12)$$

$H(\cdot)$ はシャノン情報量であり、 $I(\cdot; \cdot)$ は相互情報量である。 NMI が大きいほど真のクラスタでのデータ割当てに合致することを示すため、クラスタ割当ての精度に対応する。

*1 <http://people.csail.mit.edu/~jrennie/20Newsgroups/>. 本稿では 20news-18828 を使用した。

*2 <http://www.tartarus.org/~martin/PorterStemmer>

*3 <http://web.media.mit.edu/~hugo/montytagger>

4.1.3 比較手法

代表的な NMF の手法である, 1) NMF⁸⁾, 2) WNMf¹⁴⁾ 3) GNMF¹⁾ に対し, 提案法による転移学習の効果を評価した. また, 他の転移学習法として, 4) SDT⁹⁾, 5) MTrick¹⁵⁾ と比較した. 更に, 目標ドメインのデータに対するベースラインとして, 6) skmeans³⁾, 7) Ncut¹³⁾ を評価した. また, クラスタ数 k は与えられると仮定した.

WNMF とは, グラフラプシアンを用いる Ncut 法における重み付け¹³⁾ を活用してデータ行列を変換し, 変換後のデータ行列に対して NMF を適用する手法である¹⁴⁾.

GNMF¹⁾ とは, 3.5 節で述べたように式 (11) の第 1 項と第 3 項を用いる手法である.

従来法での NMF, WNMf に対しては式 (3) を用いたが, GNMF では式 (3) を用いた結果が非常に悪かったため, 従来法の GNMF では構築した表現行列に skmeans を適用した.

4.1.4 実験パラメータ

データ間の類似度としては, 文書処理で標準的に用いられるコサイン類似度を用いた. SDT, MTrick では元ドメインでラベルが与えられることを仮定しているが, 評価実験ではラベルは用いないため, ラベルに基づく正則化項に対する係数を 0 に設定した.

文献⁹⁾ に従い SDT では目標ドメインに対する重み係数を 0.025 とし, Ncut¹³⁾ と同様に kmeans を適用した. また, 文献¹⁵⁾ に従い MTrick では元ドメインにおけるワードクラスタ数を 50, 目標ドメインにおける重み係数を 1.5 とした. なお, 文献¹⁵⁾ のようにラベルに基づいてロジスティック回帰を用いた初期値設定ができないため, $\mathbf{X} \simeq \mathbf{FSG}^T$ における行列 \mathbf{G} の初期値は skmeans を用い, \mathbf{F} は文献¹⁵⁾ に従い pLSI⁵⁾ を用いて初期値を設定した.

GNMF に対しては各データごとに類似度が上位 10 個の近傍データを用いて m -近傍グラフを構築し, 式 (11) での λ は文献¹⁾ で推奨された値 ($\lambda=100$) とした.

4.1.5 実験手順

提案法により構築した表現行列 \mathbf{V} に対して kmeans 法, skmeans 法を適用してクラスタリングを行った. NMF は局所最適化を行う手法であるため, 得られる結果 (行列 \mathbf{U} , \mathbf{V}) は初期値に依存する. このため, 同一のデータ行列に対して行列の初期化をランダムに 10 回変え, これを各データセットごとの 10 サンプルと繰り返して計 100 回試行の平均を求めた. なお, NMF の終了条件は繰り返し数 30 とした.

4.2 実データに対する評価

本節での図で横軸はパラメータの値, 縦軸は式 (12) の NMI に対応する. 図中の凡例 (図 4 参照) で実線は NMF, 点線は WNMf, 破線は GNMF である. また, +T は図 2 の Step2.2 で上記の各手法を適用して転移学習を行った場合に対応する. 以下では, 一例として表 2 で

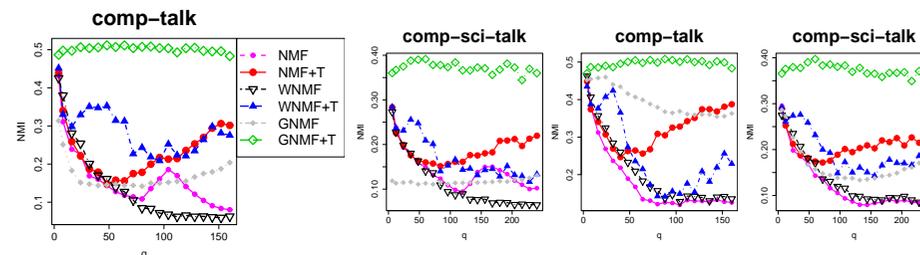


図 4 提案法における特徴数 q の影響 (左側: kmeans, 右側: skmeans)
Fig. 4 Effects of # features q (left: kmeans, right: skmeans)

の comp vs talk (c), 表 3 での comp vs sci vs talk (h) に対する図を示す.

以降の実験では $\nu=0.15$, $\lambda=1.5$ とした.

4.2.1 転移学習の効果

表現学習, 特に自己教師学習では多くの局所表現を学習して活用することが重要となる¹¹⁾. このため, 特徴数 q を増やした場合の転移学習の効果を評価した. 結果を図 4 に示す. 図 4 で, 左側 2 つのグラフは kmeans, 右側 2 つは skmeans に対する結果である.

図 4 より, 特徴数 q の増加に伴い NMF, WNMf, GNMF とも急激に精度が低下した. 他方, 提案法を用いて転移学習を行うことにより, GNMF+T (緑色菱形) では特徴数 q の変化に対して非常にロバストな結果となり, また精度も大きく向上した. NMF+T や WNMf+T では一旦低下したものの, q の増加に伴い精度が向上した. GNMF と同様, これらに対しても特徴数が多い場合における提案法による転移学習の効果を確認した.

4.2.2 他手法との比較

他手法との比較を表 4 に示す. 表 2, 表 3 においてサブカテゴリを Source(元ドメイン), Target(目標ドメイン) と表記しているが, この役割を交換した場合 *1 の実験も行い, 各データセットごとに両者を平均した結果を示す. 4.2.1 節で示したように提案法の結果は特徴数 q に依存するが, 表 4 にはクラスタ数 k に対して 10 倍, 30 倍の特徴数を用いた場合の skmeans の結果を示す *2 (表 4 では $\times 10k$, $\times 30k$ と表記).

表 4 より, 式 (11) に対応する GNMF+T は MTrick や Ncut など他手法を全て上回っ

*1 サブカテゴリの役割のみを交換し, データ数の比などは 4.1.1 節での記述に従ってデータセットを作成した.

*2 q が増加した場合, 構築した表現自体が高次元になるため skmeans の方が kmeans より多少精度が高かった.

表 4 他手法との比較 (NMI, skmeans 使用)
 Table 4 Comparison (NMI, with skmeans)

qRatio	Dataset	a	b	c	d	e	f	g	h	i
×10k	NMF+T	0.228	0.105	0.211	0.159	0.180	0.231	0.250	0.202	0.225
	WNMF+T	0.325	0.123	0.308	0.158	0.187	0.163	0.235	0.291	0.204
	GNMF+T	0.527	0.287	0.447	0.329	0.413	0.428	0.462	0.449	0.423
×30k	NMF+T	0.310	0.148	0.294	0.216	0.245	0.266	0.301	0.263	0.263
	WNMF+T	0.214	0.109	0.152	0.125	0.161	0.152	0.196	0.207	0.164
	GNMF+T	0.516	0.252	0.413	0.295	0.351	0.385	0.431	0.429	0.349
	MTrick	0.441	0.283	0.396	0.284	0.339	0.383	0.409	0.396	0.364
	SDT	0.358	0.118	0.210	0.158	0.154	0.160	0.188	0.254	0.179
×k	NMF	0.435	0.249	0.387	0.281	0.331	0.358	0.386	0.377	0.354
	WNMF	0.315	0.215	0.364	0.235	0.273	0.262	0.356	0.326	0.312
	GNMF	0.393	0.161	0.345	0.243	0.247	0.308	0.332	0.326	0.276
	skmeans	0.208	0.107	0.213	0.143	0.154	0.206	0.224	0.208	0.185
	ncut	0.462	0.267	0.381	0.298	0.371	0.383	0.403	0.402	0.372

た。特に従来法での GNMF (×k の行) と比較しても転移学習による性能向上が確認された。GNMF+T や WNMF+T では ×10k の方が良好な結果となった。NMF+T では q の増加に伴い精度が向上したため (図 4 参照) ×30k の方が良好な結果となり SDT を上回ったが、MTrick には及ばなかった。WNMF+T では q の増加に伴う精度低下が大きく、SDT を上回ったものの、NMF+T を下回った。

精度の観点からは、提案法で式 (11) を用いた場合 (GNMF+T) は他手法と比較して最良となったが、特徴数 q を増加させた際の精度低下に伴い、従来法 (特徴数 q をクラス数 k に設定し、式 (3) を用いた場合) と比較すると NMF+T, WMF+T の精度は下回った。

5. おわりに

本稿では、NMF では局所表現に対応する特徴ベクトル (トピックと呼ぶ) で張られる特徴空間においてデータを近似して表現することに着目し、ドメイン間で近似表現に用いる特徴空間が類似するという転移仮説に基づき、特徴空間の保存性に基づく転移学習法を提案した。提案法では元ドメインにおいて NMF を用いて学習した特徴ベクトルからトピックグラフを構築し、NMF における目的関数に特徴空間の類似性を表現する正則化項を追加した目的関数を定義し、この目的関数の最小化を行うアルゴリズムを適用して転移学習を行う。提案する正則化項が両ドメインでのトピックグラフの類似性の表現に対応し、また、トピックグラフに対するグラフラプリアン¹³⁾に対応することを示した。さらに、提案アルゴリズムの収束性を示した。

提案法では他の手法^{9),15)} などと異なり元ドメインとして与えるデータに対するラベルを

必要としないという利点があるため適用範囲が広いと考えられる。提案法を文書クラスタリングにおける転移学習に適用して評価し、提案法による転移学習の効果を示した。特に、自己教示学習などのように特徴空間の表現に用いる特徴数を増やした場合に効果的であることを確認した。

謝辞 本研究の一部は文部科学省科研費 (No. 20500123) の補助による。

参考文献

- 1) Cai, D., He, X., Wu, X. and Han, J.: Non-negative Matrix Factorization on Manifold, *Proc. of ICDM'08*, pp.63–72 (2008).
- 2) Dai, W., Xue, G.-R., Yang, Q. and Yu, Y.: Co-clustering based classification for out-of-domain documents, *Proc. of KDD'07*, pp.210–219 (2007).
- 3) Dhillon, J. and Modha, D.: Concept decompositions for large sparse text data using clustering, *Machine Learning*, Vol.42, pp.143–175 (2001).
- 4) Harville, D.A.: *Matrix Algebra From a Statistician's Perspective*, Springer (2008).
- 5) Hofmann, T.: Probabilistic Latent Semantic Indexing, *Proc. of SIGIR'99*, pp.50–57 (1999).
- 6) 神畷敏弘: 転移学習のサーベイ, 技術報告 SIG-DMSM-A803-06, 人工知能学会研究会 (2009).
- 7) Kamvar, S.D., Klein, D. and Manning, C.D.: Spectral learning, *Proc. of IJCAI'03*, pp.561–566 (2003).
- 8) Lee, D.D. and Seung, H.S.: Algorithms for Non-negative Matrix Factorization, *Proc. of Neural Information Processing Systems (NIPS)*, pp.556–562 (2001).
- 9) Ling, X., Dai, W., Xue, G., Yang, Q. and Yu, Y.: Spectral Domain-Transfer Learning, *Proc. of KDD '08*, pp.488–496 (2008).
- 10) Pan, S.J. and Yang, Q.: A Survey on Transfer Learning, pp.1345–1359 (2009).
- 11) Raina, R., Battle, A., Lee, H., Packer, B. and Ng, A.: Self-taught learning: transfer learning from unlabeled data, *Proc. of ICML'07*, pp.759–766 (2007).
- 12) 上田修功, 齊藤克巳: 多重トピックテキストの確率モデル - テキストモデル研究の最前線 - (1), 情報処理, Vol.45, No.2, pp.184–190 (2004).
- 13) von Luxburg, U.: A Tutorial on Spectral Clustering, *Statistics and Computing*, Vol.17, No.4, pp.395–416 (2007).
- 14) Xu, W., Liu, X. and Gong, Y.: Document clustering based on non-negative matrix factorization, *Proc. of SIGIR'03*, pp.267–273 (2003).
- 15) Zhuang, F., Luo, P., Xiaong, H., He, Q. and Xiong, Y. and Shi, Z.: Exploiting Associations between Word Clusters and Document Classes for Cross-domain Text Categorization, *Proc. of ICDM '10*, pp.13–24 (2010).