

データマイニングツール KINO

月本 洋、森田 千絵
(株) 東芝 研究開発センター

本稿ではデータマイニングツール KINO(Knowledge INference by Observation) について述べる。このツールはニューラルネットワークモジュール NNE(Neural Networks with Explanations)、決定木モジュール IDF(Induction of Decision trees with Fuzziness)、概念階層モジュール MCH(Multiple Classified concept Hierarchies) から構成されている。ニューラルネットワークモジュール NNE はニューラルネットワーク学習部とルール抽出部 NEX(Neural network EXplainer) から構成されている。このルール抽出部 NEX は学習後のニューラルネットワークから簡単に精度の良いルールを短時間で抽出するもので、学習後のニューラルネットワークがブラックボックスであるという欠点を解決するものである。これにより、精度良く学習されたニューラルネットに裏付けられたルール(仮説)を利用者に提示することによって、データに伏在する関連性、規則性等を発見することが可能になる。特にクラスが連続の時は決定木で学習ができないので、この場合の学習後のニューラルネットワークから抽出されたルール(仮説)の有効性は大きい。

Data Mining Tool KINO

Hiroshi Tsukimoto, Chie Morita
Research & Development Center, Toshiba Corporation

This paper describes Data Mining Tool KINO(Knowledge INference by Observation). The tool consists of three modules: NNE(Neural Networks with Explanations), IDF(Induction of Decision trees with Fuzziness), and MCH(Multiple Classified concept Hierarchies). NNE consists of neural network learning submodule and rule extraction submodule NEX(Neural network EXplainer). NEX extracts simple and accurate rules in a short time from trained neural networks. NEX can solve the problem that trained neural networks are black boxes. NEX discovers rules (hypotheses) based on well trained neural networks. When classes are continuous, decision tree learning cannot work, so rules (hypotheses) extracted from trained neural networks are significant.

1 はじめに

近年、データマイニングに関する研究が盛んに行われている。データマイニングとは、KDD (Knowledge Discovery in Databases) とも言われ、データベースから知識を発見することである。すなわち、表面的には見えない規則やルール等を生成することを指している。

最近データマイニングの研究開発が盛んになって来た技術的背景はいくつかある。その主なものは、データベースの大規模化、それを支える大規模ハードウェアの開発、関連した AI 技術の実用化などである。

また、膨大なデータは多くの所に存在するが、そのままではその膨大さのために使いものにならないことが多い。更に、大規模のデータを物理的にかなりの速度で処理することは可能であり、そこから何らかの情報を抽出した場合の潜在的な利益は大きい。例えば、膨大な顧客のデータからの市場分析や将来商品の企画、クレジットカードにおける与信審査、医学的データに基づいた診断分析、交通や通信網のデータ解析、気象や地震予測、等非常に多くの分野での応用の可能性がある。

データマイニングに用いられる技術は、従来の機械学習や統計、データベース技術、知識表現、等多くの領域にまたがる。我々は機械学習の技術を生かしたデータマイニングツール KINO (Knowledge Inference by Observation) の開発に取り組んでおり、その一部を完成させたのでここに報告する。

データマイニングツール KINO は学習アルゴリズムを複数備えたモジュール群である。そのうち今回はニューラルネットワークモジュール NNE (Neural Networks with Explanations)、決定木モジュール IDF (Induction of Decision trees with Fuzziness) を完成させた。概念階層モジュール MCH (Multiple Classified concept Hierarchies) は現在開発中である。ニューラルネットワークモジュール NNE はニューラルネットワーク学習部とルール抽出部 NEX (Neural network EXplainer) から構成されている。このルール抽出部 NEX は学習後のニューラルネットワークから簡単に精度の良いルールを短時間で抽出するもので、学習後のニューラルネットワークがブラックボックスであるという欠点を解決するものである。これにより、精度良く学習されたニューラルネットワークに裏付けられたルール (仮説) を利用者に提示することによって、データに伏在する関連性、規則性等を発見することが可能になる。特にクラスが連続の時は決定木で学習ができないので、この場合の学習後のニューラルネットワークから抽出されたルール (仮説) の有効性は大きい。IDF はファジーメンバーシップ関数を用いた決定木学習である。MCH は多重分類を可能にした概念階層生成モジュールである。

本稿では NEX を中心に説明する。以下、第 2 節でデータマイニング一般について説明し、第 3 節で KINO について簡単に述べ、第 4 節で NNE/NEX を説明する。

2 データマイニングについて

2.1 データマイニング技術について

データマイニングとは、データから知識を発見することであるが、ここでの知識とは具体的にはデータに含まれる規則性やルール等のことであり、大きく以下のように分類できる。

1. 事実、特性などの記述 (description)。
2. クラスタリング (clustering) なども含めて、分類 (classification) や識別 (discrimination)。
3. 予測 (prediction)

また、一般的に言って、知識の表現方法として広く使われているのは規則の集合である。例えば「If ..., then ...」のような形で表される。機械学習で用いられる決定木や判別木等も多く使われている。決定木や判別木は「If ..., then ...」の形の規則に書き換えることもできる。

データマイニングに用いられる技術は機械学習や統計、データベース技術等がある。特に、機械学習の一種である帰納学習は深い関係がある。本稿では、以下「学習」と言った場合、帰納学習、統計の多変量解析やニューラルネットワークの学習等を指すこととする。

データマイニングで知識の発見のために使われる学習のアルゴリズムは大きく表 1 のように分類できる。表 1 において、「教師あり」とは、学習の過程で望ましい出力、すなわち正しい答え (クラ

表 1: 学習のアルゴリズムの分類

	教師あり	教師なし
時間なし	決定木 ニューラルネットワーク 回帰分析	決定木 多重分類
時間あり	リカレントニューラルネットワ ーク 自己回帰分析	—

スと呼ばれる)を外から与えられることであり、「教師なし」とはそれが与えられない場合を意味する。また、もう一方の軸である時間に関しては、時系列データを扱うかどうかを表している。

多くの学習のアルゴリズムは「時間なし」の「教師あり」学習に属する。例えば C4.5[6] はそのようなシステムの1つで、決定木を使った有名な学習システムである。また、教師なしの学習とは概念形成に相当し、COBWEB[3] 等があるが、教師ありの場合に比べてアルゴリズムの数は少ない。一方、時間に関しては、統計の分野では自己回帰分析等によって時系列を扱うアルゴリズムがある。また、リカレントニューラルネットワークは時系列を扱うことのできるニューラルネットワークである。

2.2 データマイニングツールについて

既に多くのデータマイニングツールが存在する。WWW 上にもデータマイニングに関するページが作られており、多くのソフトウェアが日々登録されている [8][5]。そのようなページの1つである “KD Mine: Data Mining and Knowledge Discovery Resources Home” [8] では、フリーソフトやシェアウェア、研究用プロトタイプ、商用システムを多数掲載している。ここに掲載されているソフトウェアを概観すると、商用システムが約7割、フリーあるいはシェアウェアが約2割、研究用プロトタイプが約1割であった。

それらを学習のアルゴリズムによって分類すると、

1. 決定木を用いるもの
2. ニューラルネットワークを用いるもの
3. 多変量解析等の統計分析を用いるもの
4. その他…Rough set、多次元分析、GA (Genetic Algorithm) など
5. 複数の戦略を併せ持つもの

と大きく分けることができる。決定木は C4.5 や COBWEB をはじめ、これまでに AI の分野で盛んに研究されてきた学習アルゴリズムであり、それらを利用したツールも多いようである。

また、ツールの目的に着目すると、主に

1. 分類 (classification) …教師あり学習に相当する。
2. クラスタリング (clustering) …教師なし学習に相当する。
3. 依存性解析 (dependency) …Bayesian Networks 等を使って依存性を導出する。
4. 視覚化 (visualization) …データをうまく表現することによって知識を発見する。

がある。このうち、分類 (classification) のタイプが最も多い。決定木、ニューラルネットワーク、統計等を組み合わせて利用するものも多く見受けられる。

2.3 データマイニング技術の問題点

今まで、データマイニング技術、ツールを簡単に概観してきたが、主要なデータマイニング技術である、決定木、ニューラルネットワーク、多変量解析に関しては以下のような問題がある。

決定木：クラスが連続の場合には基本的に使えない。

ニューロ：学習結果が人間にわかるような知識になっていない。

多変量解析：学習結果が人間にわかるような知識になっていない。

表 2: データマイニングの問題の分類と各技術の関係

タイプ	1	2	3	4
クラス	離散	離散	連続	連続
属性	離散	連続	離散	連続
決定木	○	○ (1のタイプに帰着)	×	×
ニューロ	△	△	△	△
多変量解析	△ (数量化Ⅱ類)	△ (判別分析)	△ (数量化Ⅰ類)	△ (重回帰分析)

クラスが離散で属性が連続の場合の決定木は通常、属性を離散化して処理する。即ちタイプ2の問題をタイプ1の問題に帰着させる。実際のデータではクラスが連続である場合が多いが、この場合には決定木学習は基本的に使えないので、決定木学習はクラスが離散の場合にのみ限定された技術と言える。これに対し、ニューロ、多変量解析はクラスが連続、離散いずれでも使えるが、それらで得られるのは予測モデルであり、学習結果が人間にわかるような知識になっていないので、「知識を発見する」というデータマイニングの定義からすると、これらはデータマイニングではないことになる[7]。従って表2では△とした。言い方を変えれば、これらの技術は不完全なデータマイニング技術である。このように見てくると、現在のところ、完全なデータマイニング技術、より正確に言えば、離散連続いずれの定義域でも知識を生成する教師あり学習の技術は存在しないことになる。この「離散連続いずれの定義域でも」というのは、離散と連続が一つのデータに混在している場合も含む。現実のデータは、その全ての属性が全て離散であるとか、全て連続であると言う場合よりは、ある属性は連続で、ある属性は離散であると言う場合の方が普通である。

そこで、完全なデータマイニング技術を獲得するには

1. 決定木学習をクラスが連続の場合に拡張する。
2. ニューロ、多変量解析で得られた予測モデルから人間に理解可能な命題、ルール等の知識を抽出する。

の二つが考えられるが、クラスが連続の場合に決定木学習を拡張することは、その連続クラスを離散化してある程度までは対応できるかも知れないが、他の方法と同程度の正解率を得るのは困難である[6]。そこで、ニューロ、多変量解析で得られた予測モデルから人間に理解可能な命題、ルール等の知識を抽出する技術が完全なデータマイニングには必須となるのである。次節以降で説明するNNE/NEXはこれに答えるものであり、ニューラルネットワークからのルールの抽出を行う。なお、この技術はそのまま重回帰分析にも適用できる[10]。

3 KINO

本節ではデータマイニングツール KINO について簡単に説明する。図1は KINO の構成を示している。KINO は

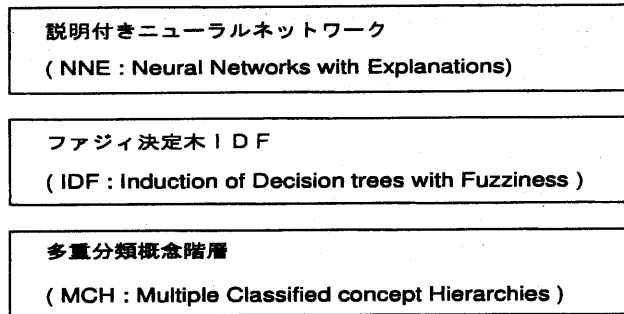


図 1: KINO の構成

- 説明付きニューラルネットワーク… NNE : Neural Networks with Explanations
(ルール抽出部 NEX:Neural network EXplainer)
- ファジィ決定木… IDF : Induction of Decision trees with Fuzziness
- 多重分類概念階層… MCH : Multiple Classified concept Hierarchies

の3つの学習アルゴリズムを含むモジュール群である。このうち、現在はNNEとIDFを実装した。NNEに関しては次節で詳細に述べるので説明を省略する。

図1における2つめのモジュールIDFは決定木による学習の一種で、ファジィ集合の考え方を導入したものである。IDFでは、「暑い」「寒い」と言ったあいまいな表現を扱うことができる。

図1における3つめのモジュールのMCHは多重分類の概念階層を生成する。概念階層生成のアルゴリズムで多重分類が可能なのはほとんどない。このMCHはデータを多重に分類することによって自然な概念階層を形成することができる。

4 NNE/NEX

4.1 特徴について

NNEはニューラルネットワーク学習部とルール抽出部NEXから構成されている。ニューラルネットワーク学習部は中間素子数自動決定と過学習防止機能を有している。NEXは多重線形関数空間に基づいたアルゴリズムで学習後のニューラルネットワークからルールを抽出する。アルゴリズムの詳細については文献[9][11]を参照していただきたい。

従来、ニューラルネットワークは学習の結果がユーザにとってわかりにくく、ブラックボックスになるという欠点があったが、ルールを抽出する機能によってその問題が解消される。前節でデータマイニングツールについて簡単に分類したが、ニューラルネットワークを用いたデータマイニングツールは、主に予測を行うのみであり、KINOのNNE/NEXのようにニューラルネットワークの結果から知識を抽出することによってユーザへ説明を行う機能を備えたツールはない。

決定木を用いた学習は、全てが数値のデータを扱うことができない。即ち、クラスが数値であるようなデータは扱うことができない。これに対して、ニューラルネットワークではクラスが数値であるデータを処理することが可能である。

使用状況に関しては、データのみ存在する場合は、NNEを用いることによってニューラルネットワーク学習とルールが得られる。データとニューラルネットワークツールがある場合には学習後のニューラルネットワークの重み係数(と学習データ)をNEXに入力すればルールが得られる。即ち、ニューラルネットワークツールを持っていない利用者に対してはNNEを提供し、ニューラルネットワークツールを持っている利用者に対してはNEXを提供できる。

なお、KINOには重回帰分析等の統計的な処理は含んでいないが、市販の統計パッケージ等を用いて重回帰分析を行った結果からルールを抽出するアルゴリズムが既に開発済みである[4][10]。したがって重回帰式からルールを得ることも可能である。

4.2 他のルール抽出アルゴリズムとの比較

ニューラルネットワークから系統的に知識を抽出するアルゴリズムは多くの研究者が研究開発している[1][2]。ニューラルネットワークから知識を抽出する方法は大きく分けて二通りあり、一つは各素子から知識を抽出して、それを合成することによって知識を抽出する方法であり、これは分解法(decompositional method)と呼ばれる。もう一つは学習後のニューラルネットワークに適当な入力を入れてそのニューラルネットワークの出力を得ることによって学習用のデータを得て、そのデータから帰納学習する方法である。この方法は再学習法(pedagogical method)と呼ばれる。分解法では各素子が学習した知識が分かるのに対し、再学習法ではニューラルネットワーク全体が学習した知識が分かるのみで、各素子が学習した知識は分からない。したがって内部構造の理解性という観点から言えば、分解法の方が再学習法より優れている。しかし多くの分解法のアルゴリズムは、ニューラルネットワークの構成、学習方式に制約がある。再学習法は学習方式に制約がないという特徴があるが、その再学習サンプルの生成法、計算時間(サンプル数)等の問題がある。ちなみにNEXは分解法である。

データマイニングの観点すると、その知識抽出方法は以下のような点が問題になる。

1. どのようなニューロにも適用できる。
2. どのような学習アルゴリズムにも適用できる。
3. 連続値にも適用できる。

現在のところ上記の3項ともを満たすものはNEX以外にない。特に連続値に適用できるものはNEX以外にない。しかしNEXにも一つだけ制約がある。それはニューラルネットワークの素子の出力関数が広義単調であるということである。また、精度に関しては、NEXはニューラルネットワークとルールの誤差が最小になるようにルールを生成しているので、ある意味でNEXで得られるルールが最もニューラルネットワークを良く近似していると言える。

4.3 結果表示

図2,3,4は学習結果の表示画面である。クラスごとに

- ニューラルネットワークの学習精度
- 各重み係数
- ニューラルネットワークから求めたルール
- ニューラルネットワークから求めたルールの精度

が表示される。図2ではクラスが2つのデータの場合の、学習したニューラルネットワークを表している。また、図3では、ニューラルネットワークの学習結果である重み係数を表示している。さらに、学習後のニューラルネットワークから求めたルールを表示しているのが図4である。

4.4 ルールの利用について

学習後のニューロから得られたルールの利用に関してまとめると以下の通りである。

1. 学習後のニューラルネットワークの学習結果がわかる。
2. したがって、ニューラルネットワークの予測結果を基本的に説明できる。

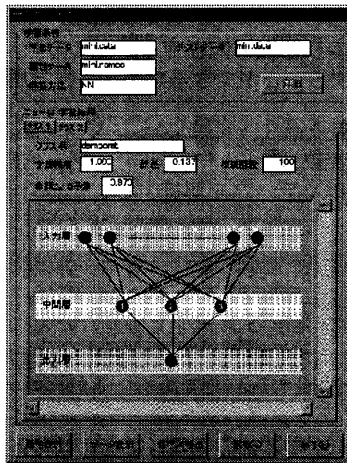


図 2: 出力ウィンドウ

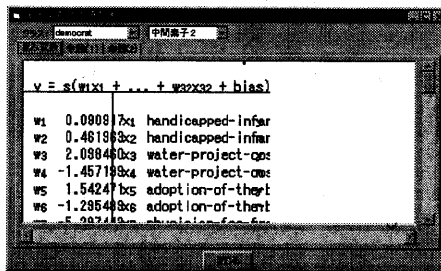


図 3: 出力ウィンドウ (重み係数表示)

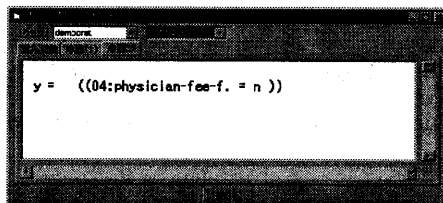


図 4: 出力ウィンドウ (ルール表示)

3. 同じデータを用いたいくつかのニューラルネットワークの学習結果は、学習データでの誤差が小さいという点では同じでも、学習データの定義域以外での挙動は異なる。そしてこの挙動の違いは基本的には重み係数の初期値に依存する。そこでいくつかの初期値で学習させ、その結果をルールに変換し、比較することができるので、妥当と思われる結果を用いることができる。
4. 得られたルールから、関連ある属性（変数）、もしくは関連ある属性（変数）の組み合わせが分かるので、これらの属性（変数）を用いて、元データを見直すことができる。たとえばそれらの属性（変数）で多次元 DB でデータを解析することができる。

5 おわりに

KINO は、データから知識を発見するツールであり、いくつかの学習アルゴリズムを備えたモジュール群である。そのうちのニューラルネットワークモジュール NNE の特長は、ニューラルネットワークの学習結果からルールを抽出することである。これはユーザへの説明や理解のため有効であり、ニューラルネットワークがブラックボックスであるという問題を解消するものである。

今後は、ニューラルネットワーク学習部の充実（たとえば時系列データを扱うアルゴリズム）、概念階層モジュール MCH、データの前処理（欠損値、離散化等）等の開発を行う。さらに OLAP ツール等と結合することも考えている。

参考文献

- [1] R. Andrews, J. Diederich and A.B. Tickle: Survey and critique of techniques for extracting rules from trained artificial neural networks, *Knowledge-Based Systems*, Vol.8, No. 6, pp.373-189, 1995.
- [2] R. Andrews and J. Diederich eds: *Rules and Networks, Proceedings of the Rule Extraction from Trained Artificial Neural Networks Workshop, AISB'96*, Queensland University of Technology, 1996.
- [3] D.H. Fisher: Knowledge acquisition via incremental conceptual clustering, *Machine Learning* 2, pp.139-172, 1987.
- [4] C. Morita and H. Tsukimoto : Knowledge discovery from numerical data, *Proc. of PAKDD '97, KDD: Techniques and Applications* , pp.124-137, 1996.
- [5] A. Pryke (editor): The Data Mine <<http://www.cs.bham.ac.uk/~anp/TheDataMine.html>>
- [6] J.R. Quinlan : C4.5: *Programming for Machine Learning*, Morgan Kaufmann, 1993.
- [7] G.P. Shapiro: Knowledge Discovery FAQ, <http://www.kdnuggets.com/FAQ.html>.
- [8] G. P. Shapiro (editor): Knowledge Discovery Mine site <<http://www.kdnuggets.com/>>.
- [9] H. Tsukimoto: Extracting Propositions from Trained Neural Networks, *Proceedings of IJCAI-97*, 1997 (To appear).
- [10] 月本 洋、森田 千絵、下郡 信宏：重回帰分析に基づいた帰納学習アルゴリズム，電子情報通信学会論文誌，Vol.J79-D-II No.7, pp.1244-1251, 1996.
- [11] 月本 洋、下郡 信宏、高島 文次郎：多重線形関数を用いたニューラルネットワークの構造分析，電子情報通信学会論文誌，Vol.J79-D-II No.7, pp.1271-1279, 1996.