

灰色理論に基づく K -means 法の提案

山口 大輔[†] 李 国棟[‡] 水谷 晃三[‡]
赤羽根 隆広[‡] 永井 正武[§] 北岡 正敏[§]

灰色理論に基づくクラスタリングアルゴリズムはすでに多数報告されている。事前に求めるクラスター数が決まっている場合、これまでの手法ではパラメータ値を直接変えてクラスター数を調節しなければならない。本論文は灰色 K -means 法と呼ばれる、 K -means 法およびファジー c -means 法と同様に所望のクラスター数が必ず得られるクラスタリング手法を提案する。本手法は所望のクラスター数が得られるパラメータの範囲を推定し、区間灰数で表す。さらに最も入力データを分類できるパラメータの値を白化値とする。灰色関連マトリクスから近傍を探すクラスタリング手法も提案し、本手法の性質について議論する。

A K -means Clustering Approach Based on Grey Theory

Daisuke YAMAGUCHI[†] Guo-Dong LI[‡] Kozo MIZUTANI[‡]
Takahiro AKABANE[‡] Masatake NAGAI[§] Masatoshi KITAOKA[§]

A lot of clustering algorithms based on grey theory, especially based on the grey relational matrix, have been already reported, which finds out a prototype of each class by moving given instances as a vector. We developed new clustering procedure called grey K -means, which is able to obtain the number of required clusters beforehand, such as the hard K -means or the fuzzy c -means. Assuming the number of found clusters by the proposed procedure is between 1 and the number of given instances, a required threshold value is exist in $[0, 1]$. We defined a value range of the threshold as the interval grey number, and the range is searched automatically until obtaining the required clusters. In addition a new clustering method which analyzes the grey relational matrix closely instead of moving vectors is suggested. Several well-known data sets in the classification problem are applied, and we discuss its performance and the optimal threshold value in that range.

1. はじめに

クラスタリングは与えられたデータの整理を行い、データの性質の違いや共通点の考察、また構造化を行うことができる。そのためシステム工学やデータマイニングで最も重要かつ伝統的な手法である。クラスタリング手法についてはすでに多数の報告がある(例えば, [1-3])。データ分析の際、事前にいくつかのグループにデータを分類したい場合、 K -means 法 [4, 7] やファジー c -means 法 [5-7] がよく使われる。これらの二つの手法は、プロトタイプと呼ばれるクラスターを代表するベクトルがクラスタリング処理前に与えられるためである。

灰色理論 [8-11] によるクラスタリング手法は、灰色関連マトリクス(類似行列)に依存する。この行列の分析処理かまたは行列を獲得する方法を修正することで様々なクラスタリングアルゴリズムが開発可能である。実際に、灰色理論によるクラスタリング手法は Lu [12], Wong [13, 14], Yeh [15, 16],

Hu [17], 山口 [18-20], Chang [21] らによって提案されている。各手法にはパラメータが与えられている。ただし、所望のクラスター数を得るにはパラメータの値を直接変更しなければならない。

本論文では灰色 K -means 法と呼ぶクラスタリング手法を提案する。本手法は所望のクラスター数が得られるパラメータの範囲を推定する。本手法で得られたパラメータの範囲を区間灰数で表し、最も入力データが分類できるパラメータの値を白化値とする。これは灰数と白化の工学適用例の一つである。また、本論文ではダイレクトクラスタリング法と呼ぶクラスタリング手法を提案する。四つのサンプルデータに本手法を適用し、シミュレーション結果とクラスタリング結果について考察する。

2. 灰色関連マトリクス

灰色関連マトリクスは類似行列の一つで、灰色分析 [8-10] によって得られる灰色関連度(類似度)による類似行列である。本論文ではミンコフスキー距離型灰色分析 [22] を用いる。適用事例に応じて他の手法も適用可能である。

定義 1. クラスタリング対象となる m 個体を x_1, x_2, \dots, x_m とする。個体 $x_i, (i = 1, 2, \dots, m)$

[†]神奈川大学大学院工学研究科, Graduate School of Engineering, Kanagawa University

[‡]帝京大学大学院理工学研究科, Graduate School of Science and Engineering, Teikyo University

[§]神奈川大学工学部, Faculty of Engineering, Kanagawa University

が n 個の属性を持つとき、 x_i を比較ベクトルと定義し以下に表す。

$$x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})^T \quad (1)$$

定義 2. 灰色理論によるデータ前処理技法である灰色生成法を適用した結果を x_{ik}^* とすると、属性 k における前処理前のデータ x_{ik} の処理を以下に定義する。

1. 望大 [23]

$$x_{ik}^* = \frac{x_{ik} - \min_{v_i} \{x_{ik}\}}{\max_{v_i} \{x_{ik}\} - \min_{v_i} \{x_{ik}\}} \quad (2)$$

2. 望小 [23]

$$x_{ik}^* = \frac{\max_{v_i} \{x_{ik}\} - x_{ik}}{\max_{v_i} \{x_{ik}\} - \min_{v_i} \{x_{ik}\}} \quad (3)$$

3. 望目

$$x_{ik}^* = \frac{\max_{v_i} \{e_{ik}\} - e_{ik}}{\max_{v_i} \{e_{ik}\} - \min_{v_i} \{e_{ik}\}} \quad (4)$$

$$e_{ik} = \frac{|OB - x_{ik}|}{|OB|} \quad (5)$$

ただし、 $OB \neq 0$ は目標値とする。

定義 3. 灰色関連マトリクス Γ は全体型灰色分析の結果として以下に得られる。

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \gamma_G(x_1, x_1) & \gamma_G(x_1, x_2) & \dots & \gamma_G(x_1, x_m) \\ \gamma_G(x_2, x_1) & \gamma_G(x_2, x_2) & \dots & \gamma_G(x_2, x_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_G(x_m, x_1) & \gamma_G(x_m, x_2) & \dots & \gamma_G(x_m, x_m) \end{bmatrix} \quad (6)$$

ただし、 $i, j = 1, 2, \dots, m$;

$$\gamma_G(x_i, x_j) = 1 - \frac{\|x_i - x_j\|_\zeta}{\max_{v_i} \max_{v_j} \|x_i - x_j\|_\zeta} \quad (7)$$

$$\|x_i - x_j\|_\zeta = \sqrt[\zeta]{\sum_{k=1}^n |x_{ik} - x_{jk}|^\zeta}, \zeta \geq 1 \quad (8)$$

3. ダイレクトクラスタリング法の提案

定義 4. 一つ以上の個体を持つクラスターを C とする。ダイレクトクラスタリングは与えられた個体を灰色関連マトリクスに従って以下に分類する。

$$C = \{x_i, x_j | \gamma_G(x_i, x_j) \geq \psi\} \quad (9)$$

ただし、 $0 \leq \psi \leq 1$ は閾値とする。そして、

$$(\gamma_G(x_i, x_j) \geq \psi) \wedge (\gamma_G(x_j, x_k) \geq \psi) \Rightarrow x_i, x_j, x_k \in C; i \neq j \neq k \quad (10)$$

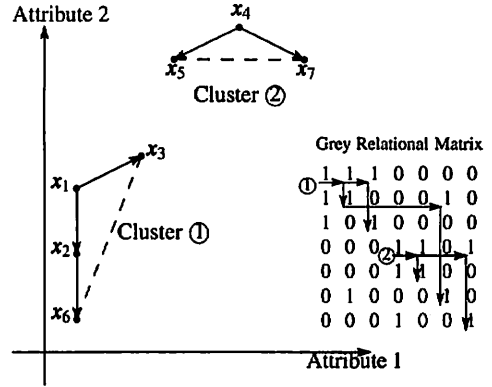


図 1 ダイレクトクラスタリング法 ($n = 2$ の例)

本提案手法の処理を図 1 に示す。条件 $\gamma_G(x_i, x_j) \geq \psi$ は個体 x_i, x_j が互いに近傍であることを意味する。提案手法は灰色関連マトリクスにおいて全ての近傍を辿ることでクラスターを構成する。図上では点線を補うことでクラスターを表現する。

図 2 は、ダイレクトクラスタリング法の二つのアルゴリズムを擬似言語で示している。全近傍を追跡する処理は再帰処理によって実現している。このアルゴリズムでは二つの長さ m の配列を定義している。

fig 個体 x_i がすでに分類されているか判定する

class 個体 x_i が属するクラスターの番号を管理する

アルゴリズム中では灰色関連マトリクスの要素 $\gamma(x_i, x_j)$ は閾値により 0 または 1 に置き換えられる。

4. 灰色 K -means 法

4.1 パラメータ存在範囲の区間灰数による推定

定義 5. あるデータ集合に対して要求するクラスターの数を $K (1 \leq K < m)$ とする。ただし、 m はそのデータ集合に含まれる個体の総数である。

定義 6. 閾値 ψ のときに灰色クラスター分析が与えるクラスター数を $U(\psi)$ とする。

定義 7. あるデータ集合を K クラスターに分類できる閾値を ψ^* とする。

定義 8. 閾値 ψ^* が存在する範囲を区間灰数 [20] により $\otimes\psi \equiv [\underline{\psi}, \bar{\psi}]$ と定義する。

定義 9. 三つの区間灰数 $\otimes P_t \equiv [p_t, \bar{p}_t]$, $\otimes L_t \equiv [l_t, \bar{l}_t]$ および $\otimes R_t \equiv [r_t, \bar{r}_t]$ を定義する。各区間灰数は $\otimes\psi$ を探すため以下の繰り返し処理を行う。

$$p_{t+1} = \text{mid}(\otimes P_t) \quad \text{if } U(\text{mid}(\otimes P_t)) > K \quad (11)$$

$$\bar{p}_{t+1} = \text{mid}(\otimes P_t) \quad \text{if } U(\text{mid}(\otimes P_t)) < K \quad (12)$$

$$\otimes P_n \equiv [p_t, \bar{p}_t] \quad \text{if } U(\text{mid}(\otimes P_t)) = K \quad (13)$$

```

ALGORITHM DIRECTCLUSTERING
% fig(i) = TRUE ⇔ xi is classified.
% fig(i) = FALSE ⇔ xi is NOT classified yet.
Γ := Globalized GRA (x1, x2, ..., xm, ζ);
Elements of Γ is separated into 0 or 1 with ψ;
% Analyzing Γ to find clusters
FOR i := 1 TO m
  FOR j := 1 TO m
    IF fig(j) ≠ TRUE
      % Pursuing xi's neighbor
      (Γ, class, fig) := PURSUINGNEIGHBOR(i, Γ, class, fig, cluster No.);
      Add 1 to the amount of clusters (same with cluster No.);
    END
  END
END
ALGORITHM PURSUINGNEIGHBOR(target, Γ, class, fig, cluster No.)
FOR j := 1 TO m
  IF (γ(xtarget, xj) = 1) ∧ (target = j)
    class(j) := class No.;
    % Found oneself
    fig(j) := TRUE;
    FOR t := 1 TO m
      γ(xt, xj) := 0;
    END
  ELSE IF (γ(xtarget, xj) = 1) ∧ (target ≠ j)
    % Found next neighbor
    class(j) := class No.;
    fig(j) := TRUE;
    γ(xtarget, xj) := 0;
    (Γ, class, fig) := PURSUINGNEIGHBOR(j, Γ, class, fig, cluster No.);
  END
END
RETURN Γ, class, fig;

```

図2 ダイレクトクラスタリング法のアルゴリズム

ただし, $\otimes P_1 \doteq [0, 1]$; $\text{mid}(\otimes P_t) = (\underline{p}_t + \bar{p}_t)/2$; $t = 1, 2, \dots, n$;

$$\left. \begin{aligned} \underline{l}_{t+1} &= \text{mid}(\otimes L_t) && \text{if } U(\text{mid}(\otimes L_t)) < K \\ \bar{l}_{t+1} &= \text{mid}(\otimes L_t) && \text{else} \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{r}_{t+1} &= \text{mid}(\otimes R_t) && \text{if } U(\text{mid}(\otimes R_t)) > K \\ \underline{r}_{t+1} &= \text{mid}(\otimes R_t) && \text{else} \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

$$\otimes \psi \doteq [\tilde{\otimes} L_t, \tilde{\otimes} R_t] \quad (16)$$

ただし,

$$\otimes L_1 \doteq [\underline{p}_n, \text{mid}(\otimes P_n)] \quad (17)$$

$$\otimes R_1 \doteq [\text{mid}(\otimes P_n), \bar{p}_n] \quad (18)$$

本提案手法を図3に示す。与えられたデータ集合の個体数を m としたとき $1 \leq K \leq m$ とすれば, $0 \leq \psi^* \leq 1$ と思われる。なぜならば, 通常灰色クラスタリングでは $U(0) = 1, U(1) < m$ となることが知られている。 $\otimes P$ は ψ^* を探すため, 二分探索のように仮の閾値 $\text{mid}(\otimes P_t)$ を更新しながら閾値の範囲を狭めていく。閾値 ψ^* を最初に見つけたときのクラスタリング試行を n 回目とすると, 残り二つの区間灰数 $\otimes L_1, \otimes R_1$ はそれぞれ $\underline{p}_n, \bar{p}_n$ および $\text{mid}(\otimes P_n)$ により初期化される。

$\otimes L_t, \otimes R_t$ はそれぞれ $\otimes \psi$ の左右の境界値を求めするため, $\otimes P$ と同じようにそれらの範囲を狭めていく。限りなく範囲が狭くなると $\underline{l}_t = \bar{r}_t$ となるような値が見つかる。これは灰色理論では白数または白化値 [8] に相当する, 従って上記の手続きにより白

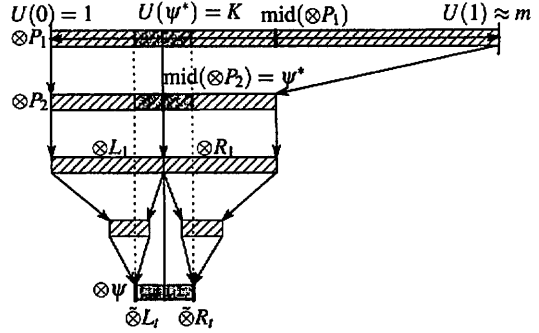


図3 灰色 K -means 法

化された二つの区間灰数 $\otimes L, \otimes R$ を最終的に $\otimes \psi$ の境界とする。本手法のフローチャートを図4に示す。

4.2 最適閾値の推定

定義 10. 最も高いクラスタリング精度を提供する閾値 $\otimes \psi$ を最適閾値と定義する。

K クラスタを提供する閾値は ψ^* により既に得られている。ただし, ψ^* が上記の条件に当てはまるとは限らない。クラスタリングでは分類の正確さも求められるので, 区間灰数 $\otimes \psi$ から最適閾値 $\otimes \psi$ を見つけなければならない。本論文では灰色理論における区間灰数と白化問題を上記のように適用している。 $\otimes \psi$ についてはシミュレーションにて議論する。

図5は, $\otimes \psi, \psi^*$ および $\tilde{\otimes} \psi$ の違いを示している。 ψ^* は $\otimes \psi$ の推定処理中に K クラスタが得られた最初の値である。 $\tilde{\otimes} \psi$ は K クラスタの中で最もよくデータを分類できる値であり, $\otimes \psi$ を白化する問題の解である。

5. シミュレーション

5.1 実験内容

ダイレクトクラスタリング法および灰色分類ネットワーク (GCN [19]; 付録参照) の二手法を表1に示す4つのサンプルデータセットに適用する。各データは GLASS[†], IONOSPHERE, IRIS[‡] および WINE であり, UCI Machine Learning Repository [24] のデータを利用している。

本実験は以下の三つのシミュレーションを行う。

1. 閾値を $0 \leq \psi \leq 1$ としたときに得られるクラスタ数の推移
2. 灰色 K -means 法を二つのクラスタリング法に適用し, 4つのサンプルデータにおける $\otimes \psi$ を推定
3. 各サンプルデータの $\tilde{\otimes} \psi$ が存在するところを見つける

[†]USI Repository のデータは6クラスの個体しかないため, 本実験では $K = 6$ とする。

[‡]3つのクラスの2つは互いに線形に分離されない。

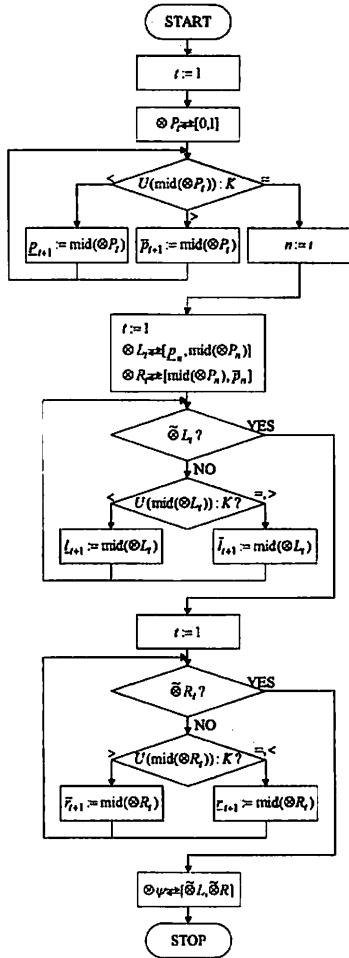


図4 灰色 K-means 法のフローチャート

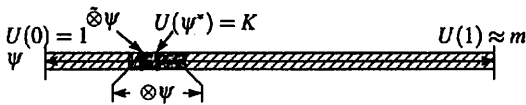


図5 $\otimes \psi$, ψ^* および $\tilde{\otimes} \psi$ の違い

これらのシミュレーションは MATLAB 7.1 (図6) によって行われる。また、弁別係数は $\zeta = 2, 10, 15$ および 25 として、実験結果を考察する。

5.2 ダイレクトクラスタリング法の性質

シミュレーション1のダイレクトクラスタリングの結果を図7に、同様に GCN の結果を図8に示す。GCN と比較したとき、ダイレクトクラスタリング法は以下の性質を持つ。

表1 本実験で使用したサンプルデータ [24]

Name	Nr. of Class	Table Size
GLASS	7	214 × 9
IONOSPHERE	2	351 × 34
IRIS	3	150 × 4
WINE	3	178 × 13

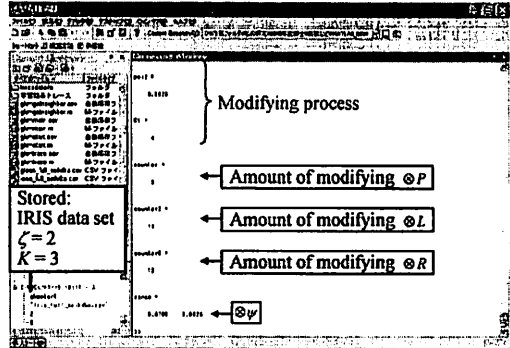


図6 開発した灰色 K-means 法の動作例

1. 閾値 ψ が大きくなるにつれて、GCN より多くのクラスターが得られる。
2. 弁別係数 $\zeta = 10, 15, 25$ のときのグラフは $\zeta = 2$ のグラフと比較して互いに類似している。

ダイレクトクラスタリングおよび GCN のシミュレーション2結果を表2に示す。表中の“Nr. of Running”は、区間灰数 $\otimes P$, $\otimes L$ および $\otimes R$ が $\otimes \psi$ を見つけるまでに値を更新した回数を表す。このシミュレーションの結果、以下の性質を確認した。

1. ダイレクトクラスタリング法は、IONOSPHERE について、15桁の精度で $\otimes \psi$ を見つけることができなかった。
2. K クラスターが得られる閾値 ψ の範囲は二つのクラスタリング法で類似している。
3. 27回以内の更新により本適用例では $\otimes \psi$ を求めることができる。

5.3 クラスタリング精度と最適閾値の関係

シミュレーション3の結果得られた最適閾値 $\tilde{\otimes} \psi$ およびクラスタリング精度を表3に示す。閾値は $\otimes \psi$ の範囲内で0.001ずつ変化させてクラスタリング精度を調べた。その結果以下に示す特徴が得られた。

1. ダイレクトクラスタリング法は3サンプルデータにおいて $\otimes \psi = \psi^*$ となった。

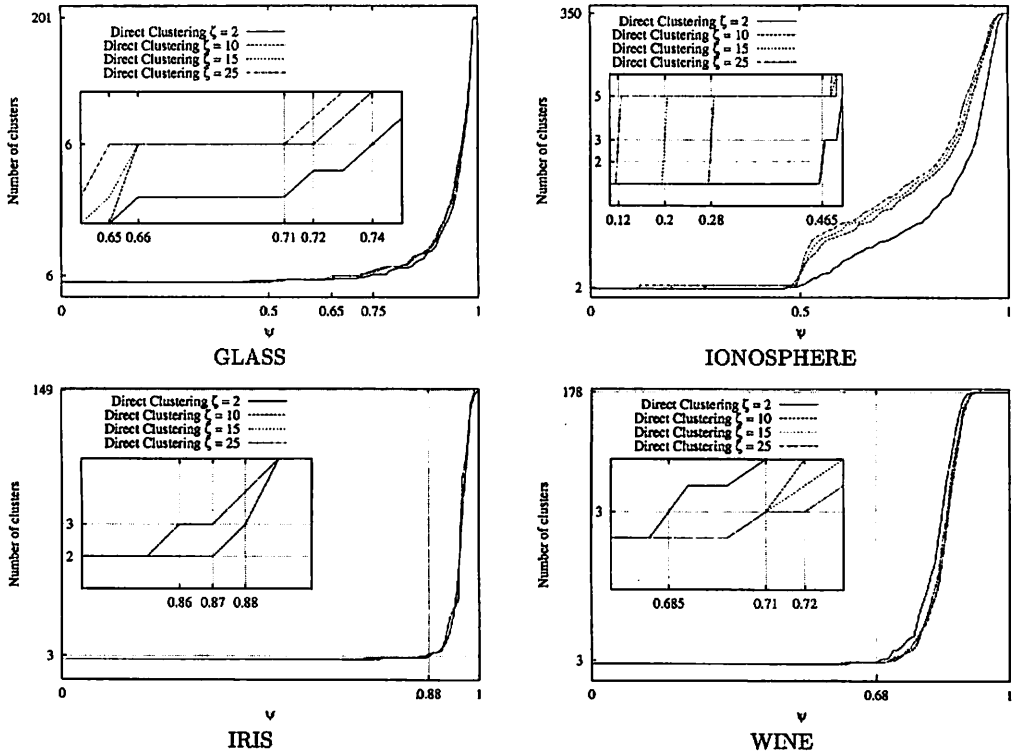


図 7 ダイレクトクラスタリング法のシミュレーション 1 の結果

2. GCN はダイレクトクラスタリング法よりも精度が高い。
 3. GCN による IRIS での最適閾値は ψ 中の任意の値 ψ で得られる。
 4. GCN による GLASS および WINE での最適閾値は ψ の左境界線近くで得られる。
 5. GCN による IONOSPHERE での最適閾値は ψ の右境界線近くで得られる。
 6. ダイレクトクラスタリングでは IRIS を除く 3 種類のサンプルデータが $\zeta = 10, 15, 25$ のとき良い精度を与えている。
 7. GCN では IRIS を除く 3 種類のサンプルデータが $\zeta = 2$ のとき良い精度を与えている。
6. まとめ

本論文では灰色理論に基づく K -means 法を提案した。ダイレクトクラスタリング法と灰色分類ネットワークの二つのクラスタリングアルゴリズムに本手法を適用し、以下の結論が得られた。

1. 灰色 K -means はパラメータを自動的に調節する方法である。従って、灰色理論に基づく他のクラスタリングアルゴリズムにも本提案手法が可能である。
2. K クラスタかつ最も良いクラスタリング精度を与えるパラメータの値 ψ を求める問題に、区間灰数の白化問題の工学適用した。
3. 最適閾値は K クラスタを与える閾値の範囲 ψ のうち、左右どちらかの境界線近く存在することをシミュレーションにより確認した。
4. ψ が狭いならば、 ψ は左右両境界線の近くに存在すると考えることができる。
5. 最適閾値を与える弁別係数 ζ の値は与えられたデータ集合により異なることをシミュレーションで確認した。

参考文献

- [1] L. Kaufman and P. J. Rousseeuw, *Finding Groups in Data An Introduction to Cluster Analysis*, John Wiley & Sons, 1990.

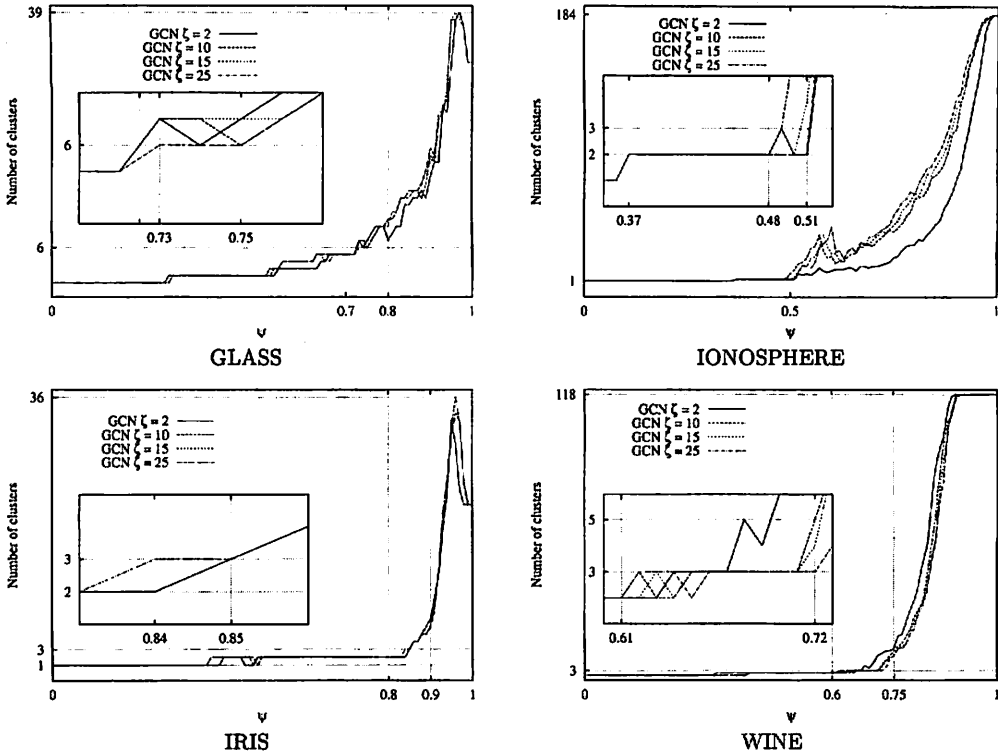


図 8 GCN のシミュレーション 1 の結果

- [2] R. Xu and D.C. Wunsch II, Survey of clustering algorithms, *IEEE Trans. on Neural Networks*, vol.16, no.3, 2005, pp.645-678.
- [3] R.N. Davé and R. Krishnapuram, "Robust clustering methods: a unified view," *IEEE Trans. on Fuzzy Systems*, vol.5, no.2, pp.270-293, 1997.
- [4] Y. Linde, A. Buzo and R.M. Gray, "An algorithm for vector quantizer design," *IEEE Trans. Communications*, vol.COM-28, no.1, pp.84-95, 1980.
- [5] N.R. Pal and J.C. Bezdek, "On cluster validity for the fuzzy c-means model," *IEEE Trans. on Fuzzy Systems*, vol.3, no.3, pp.370-379, 1995.
- [6] N.R. Pal, J.C. Bezdek and R.J. Hathaway, "Sequential competitive learning and the fuzzy c-means clustering algorithms," *Neural Networks*, vol.9, no.5, pp.787-796, 1996.
- [7] 宮本定明, クラスタ分析入門 ファジィクラスタリングの理論と応用, 森北出版, 1999.
- [8] J.L. Deng, *Grey Systems*, China Ocean Press, 1988.
- [9] M. Nagai and D. Yamaguchi, *Elements on Grey System Theory and Applications*, Kyoritsu Shuppan, 2004 (in Japanese).
- [10] K.L. Wen, *Grey Systems: Modeling and Prediction*, Yang's Scientific Research Institute, 2004.
- [11] S.F. Liu and Y. Lin, *Grey Information*, Springer, London, 2006.
- [12] H.C. Lu, T.H. Hung and M.F. Yeh, Approximated clustering via modified grey relational analysis, *The Journal of Grey System*, vol.10, no.2, 1998, pp.87-104.
- [13] C.C. Wong and C.C. Chen, Data clustering by grey relational analysis, *The Journal of Grey System*, vol.10, no.4, 1998, pp.281-288.
- [14] C.C. Wong and H.R. Rai, The grey clustering algorithm, *Proc. 5th National Conf. on Grey System Theory and Applications*, 2000, pp.277-283 (in Chinese).
- [15] M.F. Yeh, Data clustering via grey relational pattern analysis, *The Journal of Grey System*, vol.14, no.3, 2002, pp.259-264.

表 2 灰色 K-means 法による閾値 $\otimes\psi$ の推定結果

		Direct Clustering					
ζ	Data Set	ψ^*	Range of $\otimes\psi$	Nr. of Running			Sum
				$\otimes P_n$	$\otimes L_t$	$\otimes R_t$	
2	GLASS	0.734	[0.7308,0.7482]	6	8	9	23
	IONOSPHERE	—	—	—	—	—	—
	IRIS	0.875	[0.8706,0.8820]	3	11	12	26
	WINE	0.688	[0.6849,0.6890]	4	10	11	25
10	GLASS	0.688	[0.6588,0.7275]	4	10	11	25
	IONOSPHERE	—	—	—	—	—	—
	IRIS	0.875	[0.8588,0.8752]	3	11	12	26
	WINE	0.711	[0.7042,0.7140]	7	7	8	22
15	GLASS	0.688	[0.6509,0.7211]	4	10	11	25
	IONOSPHERE	—	—	—	—	—	—
	IRIS	0.875	[0.8580,0.8751]	3	11	12	26
	WINE	0.711	[0.7069,0.7184]	7	7	8	22
25	GLASS	0.688	[0.6491,0.7159]	4	10	11	25
	IONOSPHERE	—	—	—	—	—	—
	IRIS	0.875	[0.8579,0.8751]	3	11	12	26
	WINE	0.719	[0.7076,0.7209]	5	9	10	24
		Grey Classification Network					
ζ	Data Set	ψ^*	Range of $\otimes\psi$	Nr. of Running			Sum
				$\otimes P_n$	$\otimes L_t$	$\otimes R_t$	
2	GLASS	0.734	[0.7249,0.7409]	6	8	8	22
	IONOSPHERE	0.5	[0.3651,0.5132]	1	13	13	27
	IRIS	0.859	[0.8500,0.8607]	6	6	6	18
	WINE	0.656	[0.6385,0.6718]	5	9	9	23
10	GLASS	0.75	[0.7277,0.7519]	2	12	12	26
	IONOSPHERE	0.375	[0.3630,0.4824]	3	11	11	25
	IRIS	0.844	[0.8403,0.8588]	5	9	9	23
	WINE	0.688	[0.6547,0.7139]	4	10	10	24
15	GLASS	0.727	[0.7264,0.7273]	7	7	7	21
	IONOSPHERE	0.5	[0.3701,0.5106]	1	13	13	27
	IRIS	0.844	[0.8401,0.8581]	5	9	9	23
	WINE	0.625	[0.6207,0.7185]	3	11	11	25
25	GLASS	0.75	[0.7258,0.7510]	2	12	12	26
	IONOSPHERE	0.5	[0.3764,0.5086]	1	13	13	27
	IRIS	0.844	[0.8399,0.8580]	5	9	9	23
	WINE	0.625	[0.6185,0.7209]	3	11	11	25

- [16] M.F. Yeh, J.C. Chang and H.C. Lu, Unsupervised clustering algorithm via grey relational pattern analysis, *Journal of The Chinese Grey System Association*, vol.5, no.1, 2002, pp.17-22.
- [17] Y.C. Hu, R.S. Chen, Y.T. Hsu and G.H. Tzang, Grey self-organizing feature maps, *Neuro Computing*, vol.48, no.4, 2002, pp.863-877.
- [18] D. Yamaguchi, T. Kobayashi, K. Mizutani and M. Nagai, Proposal of cluster analysis based on grey theory, *IPSJ SIG Technical Report*, vol.2004, no.10, AL-93-11, 2004, pp.75-92 (in Japanese).
- [19] D. Yamaguchi, G.D. Li, K. Mizutani and M. Nagai, Grey classification network based on self-organizing feature map, *IPSJ SIG Technical Report*, vol.2005, no.26, AL-100-2, 2005, pp.9-16 (in Japanese).
- [20] D. Yamaguchi, G.D. Li, K. Mizutani, T. Akabane, M. Nagai and M. Kitaoka, Decision Rule Extraction and Reduction Based on Grey Lattice Classification, *Proc. Fourth Int. Conf. Machine Learning and Applications*, 2005, pp.31-36.
- [21] K.C. Chang and M.F. Yeh, Grey relational analysis based approach for data clustering, *IEE Proc. Vis. Image Signal Process.*, vol.152, no.2, 2005, pp.165-172.
- [22] D. Yamaguchi, G.D. Li and M. Nagai, New Grey Relational Analysis for Finding the Invariable Structure and its Applications, *Journal of Grey System*, vol.8, no.2, 2005, pp.167-178.
- [23] K.H. Hsia and J.H. Wu, A Study on the Data Preprocessing in Grey Relational Analysis, *Journal of Chinese Grey System Association*, vol.1, no.1, pp.47-53, 1998.
- [24] C.J. Merz and P.M. Murphy, *UCI Repository of machine learning databases* [http://www.ics.uci.edu/~mllearn/MLRepository.html]. Irvine, CA: University of Cal-

表 3 最適閾値 $\hat{\psi}$ とクラスタリング精度の関係

ζ	Data Set	Direct Clustering		Grey Classification Network	
		Best (%)	$\hat{\psi}$	Best (%)	$\hat{\psi}$
2	GLASS	34.1	ψ^*	40.2	$0.7249 \leq \hat{\psi} \leq 0.7259$
	IONOSPHERE	—	—	63.8	$0.4251 \leq \hat{\psi} \leq 0.5131$
	IRIS	68	ψ^*	96	$0.851 \leq \hat{\psi} \leq 0.86$
	WINE	33.7	ψ^*	41.01	$0.6405 \leq \hat{\psi} \leq 0.6425$
10	GLASS	34.6	$0.6588 \leq \hat{\psi} \leq 0.7275$	36	$0.7277, 0.7487 \leq \hat{\psi} \leq 0.7557$
	IONOSPHERE	—	—	56.1	$0.414 \leq \hat{\psi} \leq 0.482$
	IRIS	66	$0.8588 \leq \hat{\psi} \leq 0.8748$	96.7	$0.8403 \leq \hat{\psi} \leq 0.8493$
	WINE	33.7	$0.7042 \leq \hat{\psi} \leq 0.7132$	36.5	$0.6547 \leq \hat{\psi} \leq 0.6577$
15	GLASS	34.6	$0.6519 \leq \hat{\psi} \leq 0.7209$	36.9	$0.7265 \leq \hat{\psi} \leq 0.7273$
	IONOSPHERE	—	—	56.1	$0.4201 \leq \hat{\psi} \leq 0.5081$
	IRIS	66	$0.8590 \leq \hat{\psi} \leq 0.8750$	96.7	$0.8401 \leq \hat{\psi} \leq 0.8521$
	WINE	33.7	$0.7079 \leq \hat{\psi} \leq 0.7179$	36.5	$0.6207 \leq \hat{\psi} \leq 0.6287$
25	GLASS	34.6	$0.6501 \leq \hat{\psi} \leq 0.6941$	36.9	0.7268
	IONOSPHERE	—	—	56.1	$0.4034 \leq \hat{\psi} \leq 0.5064$
	IRIS	66	$0.8589 \leq \hat{\psi} \leq 0.8749$	96.7	$0.8399 \leq \hat{\psi} \leq 0.8529$
	WINE	33.7	$0.7086 \leq \hat{\psi} \leq 0.7206$	38.2	0.6195

ifornia, Department of Information and Computer Science, 1996.

付録 : Grey Classification Network

GCN [19] は教師なし学習・教師あり学習を含む、灰色理論に基づくクラスタリングアルゴリズムの一つである。本論文では以下に示す教師なし学習をシミュレーションにて適用した。この方法は灰色関連マトリクス、サーチベクトルと閾値 ψ によりプロトタイプを見つける。

サーチベクトルは以下に定義される。

$$c_i^{(t)} = (c_{i1}^{(t)}, c_{i2}^{(t)}, \dots, c_{in}^{(t)})^T, \quad (19)$$

ただし, $i = 1, 2, \dots, m$ 。各ベクトルは

$$c_i^{(1)} = x_i, \quad (20)$$

により初期化される。ベクトル x_i は定義 1 と同じである。

サーチベクトルは定義 3 にて得られる灰色関連マトリクスにより各自の近傍を探し、近傍の中心点に移動する。プロトタイプはこれらの近傍の中心を意味する。サーチベクトルは以下の式により移動する。

$$c_{ik}^{(t+1)} = c_{ik}^{(t)} + \frac{\sum_{j=1}^m e_{ij} [c_{jk}^{(t)} - c_{ik}^{(t)}]}{\sum_{j=1}^m e_{ij}} \quad (21)$$

ただし, $k = 1, 2, \dots, n$;

$$E = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1m} \\ e_{21} & e_{22} & \dots & e_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{m1} & e_{m2} & \dots & e_{mm} \end{bmatrix} \quad (22)$$

$$e_{ij} = \begin{cases} 1 & \gamma_G(c_i, c_j) \geq \psi \\ 0 & \gamma_G(c_i, c_j) < \psi \end{cases} \quad (23)$$

灰色関連度 $\gamma(c_i, c_j)$ は式 (7) に従い、式 (19) に示す個体を用いて計算する。上記の処理は

$c_i^{(1)} \neq c_i^{(2)} \neq \dots \neq c_i^{(t-1)} = c_i^{(t)}$,
を満たすまで繰り返す。ただし

$$c_i^{(t-1)} = c_i^{(t)} \Leftrightarrow c_{ik}^{(t-1)} = c_{ik}^{(t)} \quad \forall k$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sum_{j=1}^m e_{ij} [c_{jk}^{(t)} - c_{ik}^{(t)}]}{\sum_{j=1}^m e_{ij}} = 0 \quad \forall k$$

サーチベクトルの移動が止まったとき、残ったサーチベクトルをプロトタイプとして以下に獲得する。

$$w_j = (w_{j1}, w_{j2}, \dots, w_{jn})^T \quad (24)$$

ただし, $w_j \in C_j, j = 1, 2, \dots, g \leq m$ 。

集合 C_j をクラスターとしたとき、各個体はプロトタイプにより

$$C_j = \left\{ x_i \mid \max_{1 \leq g \leq g} \{ \gamma_L(x_i, w_j) \} \right\}. \quad (25)$$

を満たすクラスターに分類する。