

パラメトリック埋め込み法を用いた分類器の視覚的解析

岩 田 具 治[†] 齊 藤 和 巳[†]

パラメトリック埋め込み法 (PE) を用いた分類器を視覚的に解析するための手法を提案する。PE は事後確率をできるだけ近似するようにクラスとサンプルを低次元空間へ埋め込む可視化手法であるが、複数のサンプルが重なるという問題がある。提案法では、この問題を解決するため PE を拡張し、どのクラス対が分離可能か、どのサンプルがどのクラスに分類されるかなどを直感的に理解することができるように、分類器を可視化する。提案法は線形分類器に限らず、生成モデルやロジスティック回帰やニューラルネットなど事後確率を出力する任意の分類器を可視化することが可能である。また、得られた可視化結果が分類器の特徴を忠実に再現しているかを定量的に評価する新たな評価尺度を提案する。人工データおよび文書分類、音声認識問題における実データを用い本手法の有効性を示す。

Visual Classifier Analysis using Parametric Embedding

TOMO HARU IWATA[†] and KAZUMI SAITO[†]

We present a method for analyzing classifiers by visualization using Parametric Embedding (PE). PE is a visualization method that embeds samples and classes so as to approximate posterior probabilities. PE has a disadvantage that it is difficult to distinguish samples when samples are located too closely in the visualization space. We extend PE to overcome this disadvantage so that the visualization provides an intuitive understanding of such classifier characteristics as separability and generalization ability. Our method can visualize classifiers that output posterior probabilities such as generative models, logistic regressions, or neural net as well as linear classifiers. We also propose a measure to evaluate a classifier visualization how well the result show the characteristics of the classifier. We show the validity of our method by visualizing classifiers for an artificial data set and real data sets in document classification and speech recognition problems.

1. ま え が き

分類問題とは学習データとしてクラスが既知のサンプル集合が与えられたとき、クラスが未知のサンプルのクラスを推定する問題である。分類問題は機械学習における主要な研究テーマの1つであり、文書分類¹³⁾、情報検索¹⁾ 音声認識⁹⁾、文字認識¹⁷⁾ など多様な分野で応用されている。より精度の高い分類器を設計するためには、分類器の特徴、例えば、各クラスがどれだけ分離できているか、どのサンプルの分類が困難か、などを理解することが必要である。しかしながら、サンプル数やクラス数が多い場合など、これらの特徴を理解することは困難である。

可視化は大規模で複雑なデータを直感的に理解するための方法として近年注目されており、分類問題の解析のためにも使われている。可視化による分類器解

析は視覚的判別分析⁵⁾ と呼ばれ、Fisher 線形判別法 (FLDA)⁶⁾ による可視化が提案されている。FLDA による可視化結果から、どのクラス対が線形分離可能か、線形識別器によりどのサンプルがどのクラスに分類されるかなどを視覚的に理解することができる。しかしながら、高い分類性能を持つ非線形分類器が数多く提案されているが、FLDA では非線形分類器で分離可能かどうかを見とることはできないという問題がある。

本稿では、非線形分類器を視覚的に解析するための手法を提案する。ここで、事後確率が最大になるクラスに分類する分類器を可視化の対象とする。このタイプの分類器には、クラスとサンプルの同時生成確率をモデル化しベイズ則で事後確率を推定する手法³⁾ や、事後確率をある関数で近似する手法 (例えばロジスティック回帰⁷⁾ やニューラルネット⁴⁾) などが含まれ、分類問題において基本的なアプローチとなっている。提案法では、事後確率をできるだけ近似するようにクラスとサンプルを低次元空間へ埋め込むパラメトリック埋め込み法 (PE)⁸⁾ を拡張し、どのクラス対が

[†] 日本電信電話株式会社 NTT コミュニケーション科学基礎研究所
NTT Communication Science Laboratories

分離可能か、どのサンプルがどのクラスに分類されるかなどを直感的に理解することができるように分類器を可視化する。また、分類器を可視化したものが得られたとしても、それが分類器の設計に有用な情報を与えるかどうかを評価することは難しい。得られた可視化結果が分類器の特徴を忠実に再現しているかを定量的に評価するための新たな尺度を提案する。

以下の本文では、まず2章で、分類器解析に関する既存手法について述べる。3章では、パラメトリック埋め込み法を拡張した分類器可視化法、および、分類器可視化の定量的評価法について述べる。4章では、人工データを用い異なる分類器を可視化し、本手法の有効性を示す。5章では、実データを用い文書分類器および音声認識器を可視化する。最後に6章で、結論と今後の課題を述べる。

2. 関連研究

分類器の特徴を表す指標として最も使われるのは正答率である。正答率は推定クラスが正解クラスと一致する割合を表し、分類器の全体的な性能が分かる。多クラス分類の場合、分類が容易なクラスもあれば困難なクラスもあり、どのクラスの分類が精度よく実現できているかを知ることは分類器設計において重要な情報となる。クラス毎の分類精度を見るためには、混同行列 (Confusion Matrix)¹⁰⁾ が使われる。しかし、クラス数が多い場合、分類器がどのような誤分類の傾向があるかを直感的に理解することは難しい。また、正答率、混同行列ともに、各サンプルの状況を知ることができず、例えば、どのサンプルの分類が困難で、どのサンプルの分類が容易であるかなどは分からない。各サンプルの状況は、学習データを増やして分類器の精度を上げる際にどのようなサンプルを収集すればよいかについての情報となり、また、特徴選択を行う際にも有益な示唆が得られると考えられる。

分類器の特徴を視覚的に理解する手法として Fisher 線形判別法 (FLDA)⁶⁾ による可視化が提案されている。FLDA は、クラス間分散が最大かつクラス内分散が最小になるようにデータ集合を線形射影する手法である。図1は Fisher アヤメデータを FLDA により可視化した結果である。分類クラスは Setosa, Versicolor, Virginica の3つであり、各サンプルは4次元ベクトルで表され、各クラス50サンプルずつある。可視化結果より Setosa は他のクラスと線形分離可能であること、Versicolor と Virginica は線形分類器ではいくつかのサンプルが誤分類されてしまうこと、サンプル A は確実に正解クラスに分類され、サンプル B は

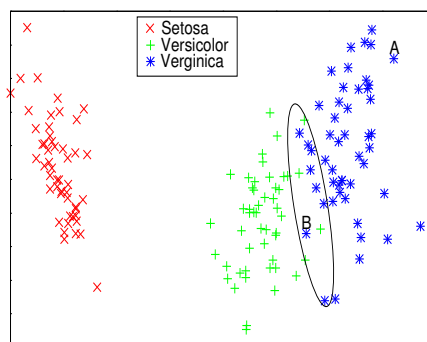


図1 Fisher の Iris データの FLDA による可視化

誤分類されること、また、円に囲まれた部分のサンプルは誤分類される可能性があること、などが分かる。このように可視化することにより、クラスやサンプルに関する情報を直感的に得ることができる。しかし、FLDA は線形分類器を用いた場合の情報を与えてくれるが、非線形分類器を用いた場合の分離可能性や誤分類されるサンプルに関する情報を与えてくれない。

カーネル判別法 (KDA)²⁾¹⁴⁾ は、カーネルトリックを用いて FLDA を非線形可視化法に拡張した手法である。KDA により、あるカーネル関数を利用し高次元の特徴空間に写像したとき線形分離かを見てとることができる。分類器が出力した事後確率が最大である推定クラスをそのサンプルのクラスと考えることにより、FLDA や KDA を用いて各サンプルの入力と分類器の出力を反映した可視化を得ることができる。しかしながら、FLDA や KDA では事後確率に含まれる情報を扱うことができない。そのため、例えば、あるクラスの事後確率がほぼ1であるサンプルと複数のクラスに対する事後確率が高いサンプルとの違いが、両サンプルともに推定クラスが同じ場合、可視化結果に反映させることができないという問題点がある。

筆者らは文献8)において、与えられたデータのクラス構造を可視化するための手法としてパラメトリック埋め込み法 (PE) を提案し、学習サンプル数を変化させたときの分類器を可視化している。しかしながら、異なる分類器の特徴が可視化に反映されるかの実験を行っておらず、また、分類器解析法としての評価を行っていない。さらに、複数のサンプルが重なり、分類器の特徴を表現する上で重要となる各サンプルの状態が分かりにくいという問題点がある。

本論文では PE を拡張し、上記の問題点を解決する。また、得られた可視化結果が分類器の特徴を忠実に再現しているかを定量的に評価するための新たな尺度を提案する。以下で本研究のベースとなるパラメトリック

ク埋め込み法について説明する。

2.1 パラメトリック埋め込み法

ある分類器によって推定された事後確率の集合を $\{P(c_1|\mathbf{x}_n), \dots, P(c_K|\mathbf{x}_n)\}_{n=1}^N$ とし, $P(c_k|\mathbf{x}_n)$ を原空間における事後確率と呼ぶ。ここで, $\mathbf{x}_n$ はサンプル, c_k はクラス, N はサンプル数, K はクラス数を表す。 $\mathbf{x}_n$ はベクトルに限らず, 系列やグラフでもよい。

可視化空間におけるサンプル $\mathbf{x}_n$ の座標を $\mathbf{r}_n$, クラス c_k の座標を ϕ_k とする。PE では可視化空間において共分散行列が単位行列の混合正規分布を仮定する。そのとき可視化空間における事後確率は

$$P(c_k|\mathbf{r}_n) = \frac{P(c_k) \exp(-\frac{1}{2} \|\mathbf{r}_n - \phi_k\|^2)}{\sum_{l=1}^K P(c_l) \exp(-\frac{1}{2} \|\mathbf{r}_n - \phi_l\|^2)}, \quad (1)$$

となる。ここで $\|\cdot\|$ はユークリッドノルムを表す。可視化空間における事後確率が, 原空間における事後確率のよい近似となっているような, サンプルとクラスの可視化空間における座標 $\{\mathbf{r}_n\}, \{\phi_k\}$ を求めればよい。これは KL ダイバージェンス

$$E(\{\mathbf{r}_n\}, \{\phi_k\}) = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K P(c_k|\mathbf{x}_n) \log \frac{P(c_k|\mathbf{x}_n)}{P(c_k|\mathbf{r}_n)}, \quad (2)$$

を準ニュートン法¹²⁾などの最適化手法を用い最小化することにより求めることができる。

可視化空間において混合正規分布を仮定することにより, 事後確率がサンプルとクラス間のユークリッド距離の関数となる。もし事後確率が高ければそのサンプルとクラスは近くに配置され, もし低ければそのサンプルとクラスは遠くに配置される。したがって, 可視化結果から事後確率に関する情報を直感的に理解することができる。例えば, あるクラス間にサンプルがほとんど配置されていなければそのクラス間の識別は容易であることが分かり, 多くのサンプルが配置されていれば識別が困難であることが分かる。また, どのサンプルが誤分類されているか, どのクラスのサンプルがどのクラスに誤分類されやすいかなどが分かる。また, 学習データとテストデータの配置の違いより分類器の汎化性能を知ることでもある。

3. 提案法

分類器の視覚的解析は, 学習データ, テストデータ, 分類器を入力とし, 以下の手順で行われる。

- (1) 学習データを用い, 分類器を学習する
- (2) 学習済分類器を用い, 学習データおよびテストデータの事後確率を推定する

- (3) 事後確率を入力とし, PE によりクラスおよびサンプルを 2 次元空間へ埋め込む

- (4) 可視化空間で重なっているサンプルを分離する
提案法では, 事後確率集合をできるだけ近似するように PE によってサンプルとクラスの集合を 2 次元空間へ埋め込むことにより, 分類器を可視化する。PE を単純に適用した場合, 複数のサンプルが重なるという問題点がある。そこで Step4 の重複サンプルの分離により, この問題点を解決する。以下で, 本研究で新たに提案する Step4 の重複サンプルの分離, および, 分類器の可視化を定量的に評価するための尺度について詳述する。

3.1 重複サンプルの分離

可視化空間において極めて近くの座標に複数のサンプルが存在する場合, 出力結果においてサンプルが重複してしまう。このとき各サンプルを識別することは困難であり, 分類器の特徴を表すために必要な帰属クラスなどの情報を得ることができない。また, クリックすることによりそのサンプルの詳細情報を得られるようなシステムを考えたとき, 重複サンプルがあることは問題である。この問題は, PE だけでなく多次元尺度法¹⁶⁾や FLDA など他の可視化手法にも共通するものである。サンプルが重複しない, より見やすい可視化のため, サンプルの新しい座標 $\tilde{\mathbf{r}}_n$ を求める。新座標 $\tilde{\mathbf{r}}_n$ は他のサンプルと重ならないという制約の下で, できるだけ PE で求めた座標 $\mathbf{r}_n$ に近くなっていればよい。これは以下の目的関数を最小化することにより実現できる。

$$J(\{\tilde{\mathbf{r}}_n\}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \|\tilde{\mathbf{r}}_n - \mathbf{r}_n\|^2 + \eta \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=n+1}^N \exp(-\frac{1}{2\sigma^2} \|\tilde{\mathbf{r}}_n - \tilde{\mathbf{r}}_m\|^2), \quad (3)$$

ここで $\eta > 0$, $\sigma^2 > 0$ である。第 1 項は新座標と PE が出力した座標の距離を表し, 第 2 項は新座標が他のサンプルの新座標と重なっている大きさを表している。 η は重複をどれほど禁止するかを決める。 η が小さい場合, 多少の重複は許されるようになる。また, σ^2 は近傍にあるサンプルをどれほど離すかを決める。 σ^2 が小さい場合, 近傍サンプルまでの距離は短くなる。 η および σ^2 を調節することにより, 様々な表示法 (サイズ, 解像度など) やアプリケーションに対応することができる。

PE で座標を求めた後に分離するのではなく, PE の目的関数に重複サンプル分離のための項を加えても,

同様の結果を得ることができる。そのとき目的関数は

$$\begin{aligned} J_2(\{\tilde{\mathbf{r}}_n\}, \{\phi_k\}) \\ = E(\{\tilde{\mathbf{r}}_n\}, \{\phi_k\}) \\ + \eta \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=n+1}^N \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|\tilde{\mathbf{r}}_n - \tilde{\mathbf{r}}_m\|^2\right), \quad (4) \end{aligned}$$

となる。実験では PE で座標を求めた後に分離する方法によって可視化する。このことにより表示法の変更にもともなうパラメータ η , σ^2 の調節の際に、PE に関する再計算は必要なくなる。また、重複サンプルの分離は、他の可視化法の後処理としても実行可能であり、他の可視化法と条件を同じにするため、重複サンプルの分離を別のステップとした。

3.2 定量評価尺度

分類器可視化結果を評価するための尺度を考える。分類器が出力した事後確率が、可視化結果から容易に推測できれば、よりよい分類器可視化であると言える。2 クラス分類の場合、各サンプルの事後確率の自由度は 1 であるため、1 つの線分上に事後確率に従いサンプルを配置することができる。例えばクラス c_1 , c_2 の 2 クラス分類問題において、サンプル $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$ の事後確率がそれぞれ $P(c_1|\mathbf{x}_1) = 1$, $P(c_1|\mathbf{x}_2) = 0.25$ であったとする。このとき ϕ_1 の位置を 1, ϕ_2 の位置を 0 とした線分上に事後確率に従いサンプルを配置すると図 2 のようになり、可視化結果から事後確率が容易に推測できる。

この考え方を K クラス分類の場合にも対応できるように拡張する。まず K クラスのなかの 2 クラス (c_k と c_l) を考える。この 2 クラスに限ったとき、事後確率 $P(c_k|\mathbf{x}_n)$ は次のように変更される。

$$P_{kl}(c_k|\mathbf{x}_n) = \frac{P(c_k|\mathbf{x}_n)}{P(c_k|\mathbf{x}_n) + P(c_l|\mathbf{x}_n)}. \quad (5)$$

また、可視化空間においてクラス c_k , c_l に注目したとき、サンプルを ϕ_k と ϕ_l を結ぶ直線上に射影したときの位置

$$s_{kln} = \frac{(\mathbf{r}_n - \phi_l)^T(\phi_k - \phi_l)}{\|\phi_k - \phi_l\|^2}, \quad (6)$$

が、そのサンプルのクラス c_k , c_l に関する事後確率を表していると言える (図 3)。このとき可視化空間における事後確率は

$$P_{kl}(c_k|\mathbf{r}_n) = \begin{cases} s_{kln} & \text{if } 0 \leq s_{kln} \leq 1, \\ 0 & \text{if } s_{kln} < 0, \\ 1 & \text{if } 1 < s_{kln}, \end{cases} \quad (7)$$

となる。ここで確率として扱えるように 0 から 1 までの値となるようにした。2 クラスに限ったときの原空間における事後確率 $P_{kl}(c_k|\mathbf{x}_n)$ と可視化空間における事後確率 $P_{kl}(c_k|\mathbf{r}_n)$ の絶対値誤差が小さければ、よ

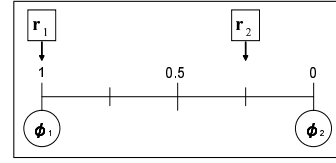


図 2 2 クラス分類における事後確率が容易に推測できる可視化 ($P(c_1|\mathbf{x}_1) = 1$, $P(c_1|\mathbf{x}_2) = 0.25$).

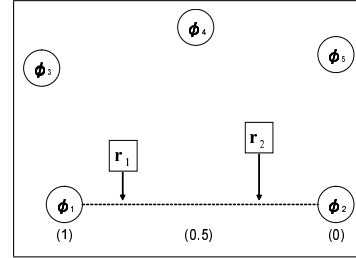


図 3 2 クラス (c_1 , c_2) に注目したときの可視化空間における事後確率 ($P_{12}(c_1|\mathbf{r}_1) = 0.8$, $P_{12}(c_1|\mathbf{r}_2) = 0.3$).

りよい分類器可視化であると言える。そこで、以下の絶対値誤差を分類器可視化の評価尺度として用いる。

$$F = \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=k+1}^K \sum_{n \in \mathbf{N}_{kl}} |P_{kl}(c_k|\mathbf{x}_n) - P_{kl}(c_k|\mathbf{r}_n)| \quad (8)$$

ここで $\mathbf{N}_{kl} = \{n | P(c_k|\mathbf{x}_n) > \alpha \wedge P(c_l|\mathbf{x}_n) > \alpha\}$ であり、対象とするクラスの事後確率が低いサンプルは重要度が低いと省いた。実験では $\alpha = 0.1$ とした。

4. 人工データによる評価

4.1 実験設定

人工データを用い、4 つの分類器を可視化することにより、提案法の評価を行った。原データは、6 クラスの混合 3 次元正規分布を用い各クラス 100 サンプル生成した。平均は区間 [0,1] 上の一様分布から生成したもの、共分散行列の対角要素は区間 [0,5] 上の一様分布から生成したもので、非対角要素は 0 とした。また、各クラスのサンプルのうち、10 サンプルを学習データ、90 サンプルをテストデータとした。図 4(a) は原データの 3 次元プロット図である。ここで、塗潰し点は学習サンプル、中抜き点はテストサンプル、点の色形はクラスを表す。原データを見ても、どのクラスの分離が容易か、また、どのような分類器で適切に分類可能か、を直感的に理解することは困難である。また原データが 4 次元以上のことは多々あるが、今回のようにプロットすることは不可能であり、直感的理解のためには、2 次元もしくは 3 次元空間に埋め込むことが必要である。

分類器として、混合正規モデル、等分散混合正規モデル、確率的近傍法、2 次ロジスティック回帰⁷⁾ の 4

つを用いた。(等分散)混合正規モデルは、(等分散)混合正規分布を仮定しクラスとサンプルの同時生成確率をモデル化しベイズ則で事後確率を推定する生成モデルである。また、確率的近傍法はノンパラメトリックモデル、ロジスティック回帰は識別モデルである。なお、等分散混合正規モデルのみ線形分類器である。

4.2 可視化結果

提案法で可視化した結果を図4(c)~(f)に示す。図4(b)は、式3の最小化をしない場合の混合正規モデルの可視化結果である。多くのサンプルが重なっており、各点が学習サンプルかテストサンプルかの判別が困難である。また、何個のサンプルが重なっているかわからない。式3の最小化の結果、図4(c)のようになり、重なりがなく、それぞれのサンプルが識別することができる。なお $\eta = 1, \sigma^2 = 0.005$ を用いた。図4(c)では、同じクラスのサンプルがクラスタを形成しており、混合正規モデルは適切にサンプルを分類できていることを示唆している。クラス c_1 と c_3 の間にいくつかのサンプルが配置されているのは、それらの間の識別が難しいことを反映している。また逆に、クラス c_2 のサンプルは他からよく分離されており、クラス c_2 の識別は容易であることを反映している。図4(d)では、サンプルが分散しており明確なクラスタがない。これは等分散の仮定が適切ではなく、分類がうまくいっていないことを表している。図4(e)では、クラス c_5 のクラスタに他クラスのサンプルが配置されており、これらのサンプルはクラス c_5 に誤分類されやすいことを示唆している。図4(f)では6つのクラスタが明確に分離されている。学習サンプルは1つのクラスタにまとまっているが、テストサンプルは他クラスのクラスタに配置されており、ロジスティック回帰が過学習している可能性を示唆している。一方、図4(c)では、学習およびテストサンプルともに各クラス内でばらついており、混合正規モデルの汎化性能が高いことが分かる。

表1に正当率と混同行列を示す。正当率や混同行列は可視化よりも定量的であるが、特に多数のクラスがある場合、一目で理解することは困難である。さらに可視化は混同行列から得られない情報を持っている。例えば、ロジスティック回帰が出力する事後確率の多くは0もしくは1でありサンプルを明確に分離しており、一方、等分散混合正規モデルはサンプルを明確に分離していない(図5)。この特徴は可視化結果(図4(d)(f))から明白であるが、混同行列(表1(b)(c))からは見てとることができない。

4.3 比較

比較のため、混合正規モデル、等分散混合正規モデル、ロジスティック回帰の3分類器をFLDAおよびKDAにより可視化した。FLDAはクラス間分散が最大かつクラス内分散が最小になるようにサンプルを線形射影する可視化法である。分類器により出力された推定クラスをサンプルのクラスとみなしFLDAを適用することにより、分類器の出力傾向を反映させた可視化が得られる。また、KDAはカーネルトリックを用いてFLDAを非線形可視化法に拡張した手法である。FLDAと同様に分類器による推定クラスをサンプルのクラスとみなしKDAを適用した。なお、カーネルとしてガウシアンカーネルを採用した。図6に可視化結果を示す。FLDAおよびKDAでサンプルの座標集合が得られた後、式3を最小化することで重複サンプルを分離した。FLDAおよびKDAの入力は原データおよび推定クラスであり、事後確率を入力とすることができない。そのため、提案法に比べ各分類器の特徴の違いが可視化結果に表現されていない。図6(a)~(c)では、FLDAは線形手法のためクラスタが重なりあってしまっている。また、図6(d)~(f)では、分類器は明確に分離できていないにも関わらず、クラスタが分離されている。また、FLDAおよびKDAは提案法に比べ多く計算量を必要とするという問題点がある。なお、等分散混合正規モデルは線形識別器であるため、線形分離可能性を表現可能なFLDAの結果(図6(b))と、提案法の結果(図4(d))が似たものとなっている。

4つの分類器(混合正規モデル、等分散混合正規モデル、確率的近傍法、ロジスティック回帰)を提案法、FLDA、KDAで可視化したときの絶対値誤差 F は図7のようになった。全分類器において提案法の誤差が小さくなっていることが分かる。KDAはロジスティック回帰の場合は誤差が小さいが、等分散混合正規モデルの場合には誤差が大きい。これは図6(e)にあるように、KDAは識別できていないものも明確に区別してしまうためと考えられる。また、重複サンプル分離によりロジスティック回帰の誤差は高くなっている。これは、重複サンプル数が多いためであると考えられる。一方、重複サンプル数が少ない等分散混合正規モデルでは、分離前後でほとんど誤差は変化しない。

提案法による重複サンプルの分離の有効性を調べるため、乱数によって分離した場合との比較を行った。混合正規モデル可視化(図4(b))を一樣乱数により分離した結果、図8のようになった。重なりは減っているものの、提案法による分離(図4(c))に比べ重複サンプルが残っている。また、分離前後でサンプル間の

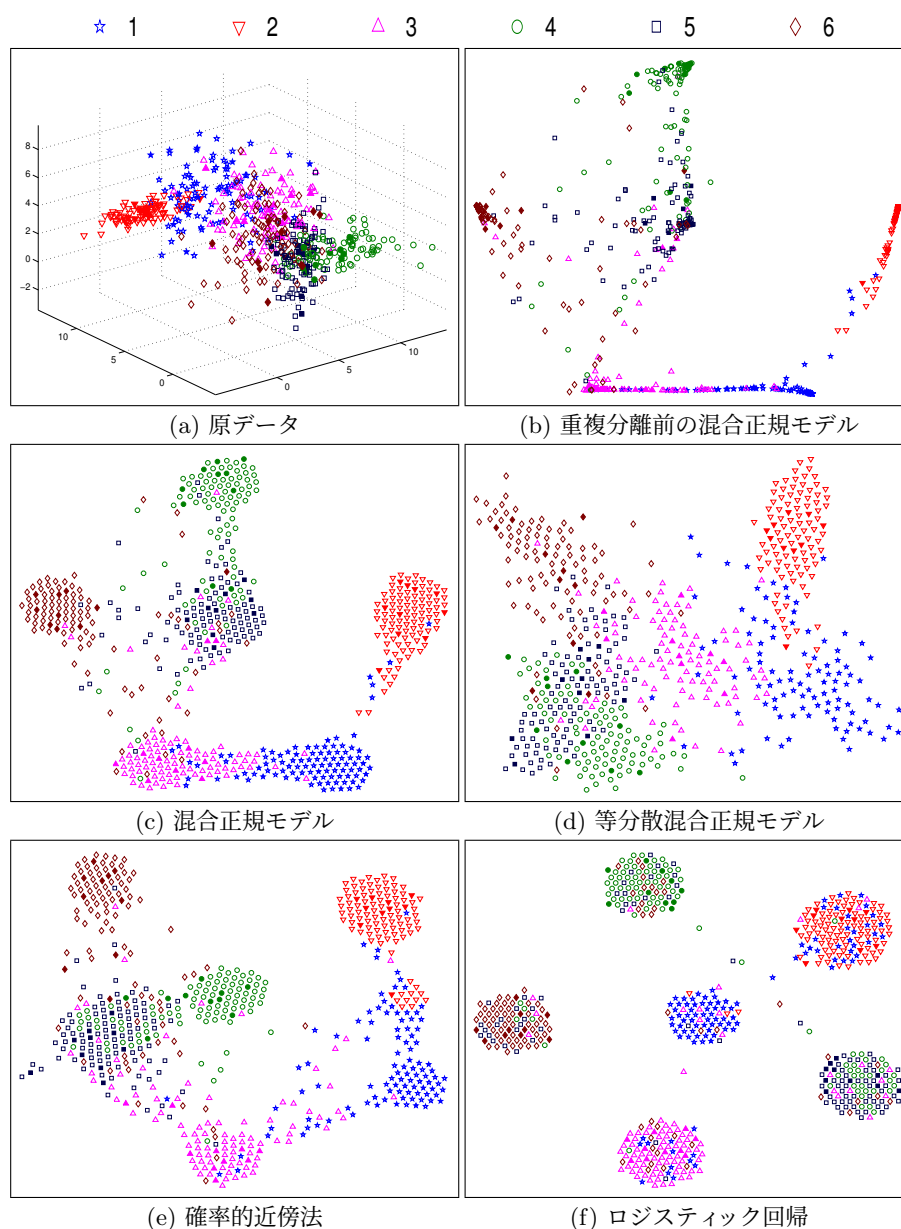


図4 3次元原データ (a), 重複サンプルの分離前の混合正規モデルの2次元可視化 (b), 提案法による2次元可視化 (b)~(f). 塗潰し点は学習サンプル, 中抜き点はテストサンプル, 点の色形はその真のクラスを表す.

順序関係が保存されているかを, スピアマンの順位相関係数により測った. 分離前後で式6により射影したときの順位が変化していなければ, 順序関係が保存されていると言える. その結果, 表2のようになった. 乱数による分離に比べ, 提案法による分離の順位相関係数が高く, 順序関係がより保存されていることが分かる.

5. 実データによる実験

5.1 文書分類器可視化

提案法は, 学習データを増やすことにより分類器の性能がどのように向上していくかを視覚的に表現することもできる. 例えば, 音声認識の話者適応問題¹¹⁾において, ユーザに学習データを作成してもらう必要があるが, ユーザのデータ作成に対するモチベーショ

表 1 (a) 正答率, (b) 等分散混合正規モデルの混同行列, (c) ロジスティック回帰の混同行列. 括弧外はテストデータ, 括弧内は学習データについての値である. 混同行列の各行は真のクラス, 各列は推定されたクラスを表す.

(a) 正答率						
混合正規モデル	等分散混合正規モデル	確率的近傍法	ロジスティック回帰			
0.794(0.917)	0.746(0.733)	0.769(0.933)	0.669(1.000)			

(b) 等分散混合正規モデル						
	c ₁	c ₂	c ₃	c ₄	c ₅	c ₆
c ₁	66(7)	13(2)	8(1)	0(0)	3(0)	0(0)
c ₂	6(1)	84(9)	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
c ₃	6(1)	4(0)	55(7)	8(1)	12(0)	5(1)
c ₄	1(0)	0(0)	0(0)	75(6)	14(4)	0(0)
c ₅	0(0)	0(0)	14(0)	20(2)	48(8)	8(0)
c ₆	0(0)	1(0)	5(0)	2(0)	7(3)	75(7)

(c) ロジスティック回帰						
	c ₁	c ₂	c ₃	c ₄	c ₅	c ₆
c ₁	51(10)	26(0)	13(0)	0(0)	0(0)	0(0)
c ₂	3(0)	87(10)	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)
c ₃	7(0)	3(0)	67(10)	1(0)	9(0)	3(0)
c ₄	0(0)	1(0)	1(0)	54(10)	29(0)	5(0)
c ₅	2(0)	0(0)	2(0)	16(0)	51(10)	19(0)
c ₆	3(0)	0(0)	13(0)	15(0)	8(0)	51(10)

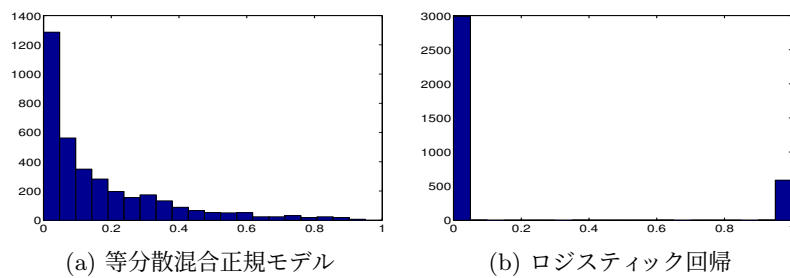


図 5 事後確率のヒストグラム.

表 2 重複サンプル分離前後のスピアマンの順位相関係数.

	混合正規モデル	等分散混合正規モデル	確率的近傍法	ロジスティック回帰
提案法	0.977	0.991	0.986	0.835
乱数	0.967	0.984	0.969	0.805

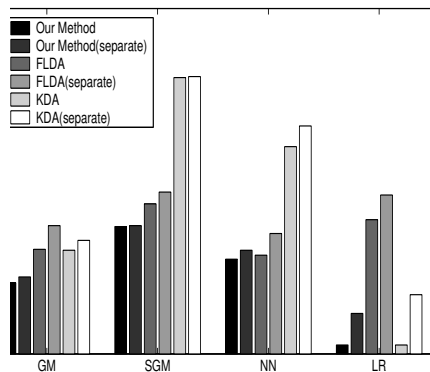


図 7 提案法 (Our Method), FLDA, KDA による分類器可視化の絶対値誤差. GM は混合正規モデル, SGM は等分散混合正規モデル, NN は確率的近傍法, LR はロジスティック回帰を示す.

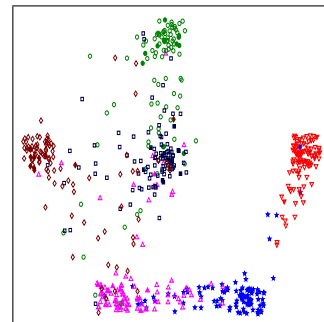


図 8 混合正規モデル可視化の乱数による重複サンプルの分離.

ンを与えることは重要な課題である. 分類器の性能向上が視覚的に分かることにより, モチベーションを上げる効果が期待できる. また, 学習の過程でどのクラスの分類性能が悪いかなどが視覚的に分かれば, そのクラスのデータを重点的に収集するなど能動学習にも

応用できると考えられる. そこで, 学習サンプル数の増やしていったときの文書分類器の性能の変化を可視化した. データはディレクトリ型検索エンジンによって分類された Web ページ集合である. 各クラスのサンプル数は異なっており, 5つのクラスは 500 サンプル, 3つのクラスは 200 サンプル, 2つのクラスは 50 サンプルを持つ, 全 10 クラス, 3200 サンプルである. 各ページを単語出現頻度ベクトルで表現し, 分類器としてナイーブベイズモデルを用いた. 学習サンプル数

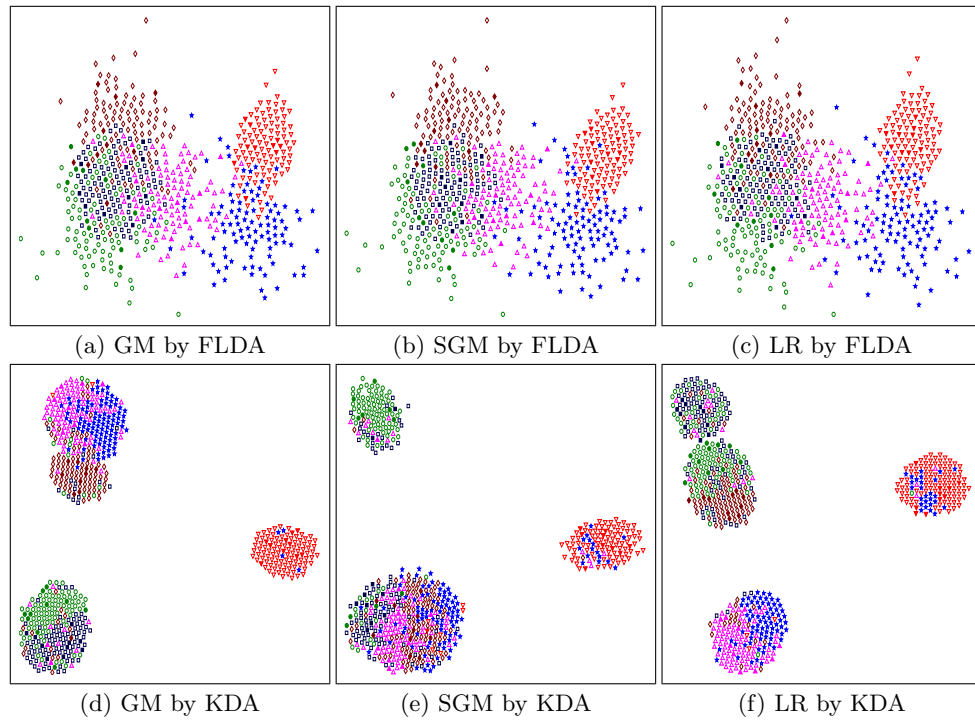


図 6 混合正規モデル (GM), 等分散混合正規モデル (SGM), ロジスティック回帰 (LR) の FLDA(a)~(c) および KDA(d)~(f) による 2 次元可視化.

の比率を各クラス 0.05, 0.3, 1.0 に増やしていったときの分類器を可視化した結果, 図 9(a)~(c) のようになった. なお $\eta = 10^{-3}$, $\sigma^2 = 10^{-5}$ を用いた. 学習サンプル数の増加に従い, 各クラスの分離が進んでいっていることが分かる. また, 学習サンプル比率が 0.05 の時点で分離がうまくいっているクラスもあればうまくいっていないクラスもあり, このような情報が能動学習の際に有用になると考えられる. 図 9(d)~(f), (g)~(i) はそれぞれ FLDA を用いた可視化結果, KDA を用いた可視化結果を表す. 提案法と比べ, 各クラスの分類器が学習されている様子が見にくい. また, 図 9(j)~(l) に分離前の可視化結果を表す. 複数の点が 1 点に重なってしまっており, サンプル数がどれほど集まっているか見て取ることができない. 一方, 分離することにより図 9(c)(g)(i) のようになり, クラスタ内のサンプル数の多さが一目瞭然となる.

異なる学習サンプル数の分類器を提案法, FLDA, KDA で可視化したときの絶対値誤差 F は図 10 のようになった. ほとんどの場合において, 提案法の誤差が最も小さくなっている. 学習サンプル比率 0.05 の分離前の KDA の場合のみ誤差が小さくなっているが, 図 9(k) にあるように多くのサンプルが一点に重なっており, 各クラスの状態を見て取ることができない.

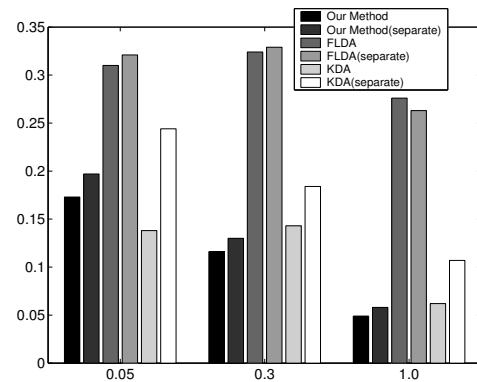


図 10 分類器可視化の絶対値誤差. 横軸は学習サンプル比率を表す.

5.2 音声認識器可視化

分類器はパラメータの調節によって性能に大きく変わることがしばしばある. そのため, パラメータを変化させることによって分類器の性能がどのように変化するかを知ることは重要である. そこで, パラメータ変化に伴う母音分類器の変化を可視化した. 音声認識問題では, 各状態が混合正規モデルで表現される, 隠れマルコフモデル (HMM) を用いるのが一般的である⁹⁾. 実験では, 混合正規分布の混合数を変化させるパラメータとした. 混合数がそれぞれ 1, 2, 4 の

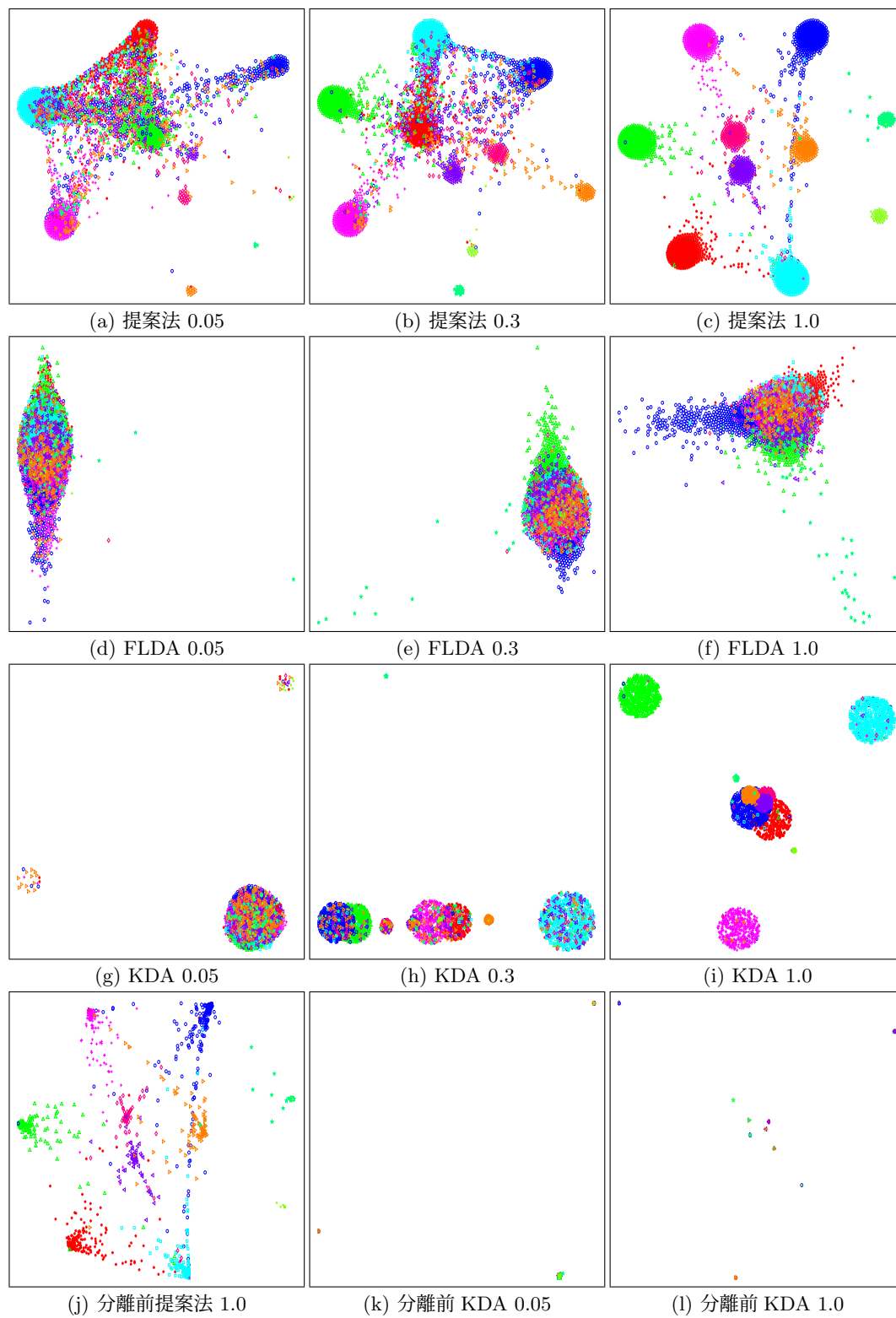


図 9 文書分類器の可視化. 数値は学習サンプル比率を表す.

モデルを、100 学習サンプル、14417 テストサンプルで可視化した結果、図 11 のようになった。このとき $\eta = 10^{-3}$, $\sigma^2 = 10^{-5}$ とした。特徴量はメル周波数ケプストラム係数 (MFCC) を用いた。なお、音声データは時系列データであるため、各サンプルのサイズが固定されたベクトルで表現されている必要がある FLDA や、音声時系列データの特徴を採り入れたカーネルを設計する必要がある KDA を直接用いて可視化することはできない。一方 PE では、分類器が出力した事後確率さえあれば、入力データの形式によらず可視化することができる。

混合数を変えることによって、分離可能なクラスが変化していることが可視化結果から分かる。例えば混合数 1 の場合は i と u の間にサンプルが少なく分離がうまくいっているが (図 11(a)), 混合数 4 の場合は i と u の間に多くのサンプルが配置されており、分離ができていないことが分かる (図 11(c))。また、母音の配置に注目すると、調音 (顎の開閉, 舌の位置) と整合しており (図 11(b))¹⁵⁾, 可視化結果が母音の関係を適切に表現できていることを示している。

6. 結 論

本稿ではパラメトリック埋め込み法を拡張し、分類器の特徴を直感的に理解することを目的とした視覚的解析法を提案した。人工データおよび実データを用い可視化することにより、分離性能や汎化性能など分類器の特徴を直感的に理解できることを確認した。また、分類器可視化結果を評価するための定量的尺度を提案し、提案可視化法は従来法に比べ分類器の特徴を表していることを示した。今後は、インタラクティブなユーザインターフェイスを構築し、より分類器設計に有用なツールとして発展させていきたい。

謝辞 5.2 節の母音分類器可視化実験は NTT コミュニケーション科学基礎研究所の石塚健太郎氏の協力によるものである。

参 考 文 献

- 1) Baeza-Yates, R. and Ribeiro-Neto, B.: Modern Information Retrieval, ACM Press, Addison-Wesley (1999).
- 2) Baudat, G. and Anouar, F.: Generalized discriminant analysis using a kernel approach, *Neural Computation* vol.12, pp.2385–2404 (2000).
- 3) Bernardo, J. and Smith, A.: Bayesian Theory, John Wiley, Chichester (1994).
- 4) Bishop, C.: Neural networks for pattern recog-

- inition, Clarendon Press, Oxford, (1995).
- 5) Dhillon, I., Modha, D. and Spangler, W.: Class visualization of high-dimensional data with applications, *Computational Statistics and Data Analysis*, vol.41, pp.59–90 (2002).
- 6) Fisher, R.: The use of multiple measurements in taxonomic problems, *Annals of Eugenics*, vol.7, pp.179–188 (1950).
- 7) Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J.: *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction*, Springer, New York (2001).
- 8) 岩田具治, 齊藤和巳, 上田修功: パラメトリック埋め込み法によるクラス構造の可視化, 情報処理学会論文誌, Vol.46, No.9, pp.2337–2346 (2005).
- 9) Jelinek, F.: Statistical methods for speech recognition, MIT Press Cambridge, MA, USA (1998).
- 10) Kohavi, R. and Provost, F.: Glossary of terms, *Machine Learning*, vol.30, pp.271–274 (1998).
- 11) Leggetter, C. and Woodland, P.: Maximum likelihood linear regression for speaker adaptation of continuous density hidden Markov models, *Computer Speech and Language*, vol.9, No.2, pp.171–185 (1995).
- 12) Liu, D. and Nocedal, J.: On the limited memory BFGS method for large scale optimization, *Math. Programming*, vol.45, No.3, pp.503–528 (1989).
- 13) McCallum, A. and Nigam, K.: A comparison of event models for naive Bayes text classification, *proceedings of AAAI-98 Workshop on Learning for Text Categorization*, AAAI press, pp.41–48 (1998).
- 14) Mika, S., Ratsch, G., Weston, J., Scholkopf, B. and Muller, K.: Fisher discriminant analysis with kernels, *Neural Networks for Signal Processing IX*, IEEE, pp.41–48 (1999).
- 15) 中田和男: 音声, コロナ社 (1995).
- 16) Torgerson, W.: Theory and methods of scaling, Wiley, New York (1958).
- 17) Xu, L., Krzyzak, A. and Suen, C. Y.: Methods of combining multiple classifiers and their applications to handwriting recognition, *IEEE Transactions on Systems Man and Cybernetics* (1992).

(平成 18 年 12 月 1 日受付)

(平成 19 年 9 月 3 日採録)

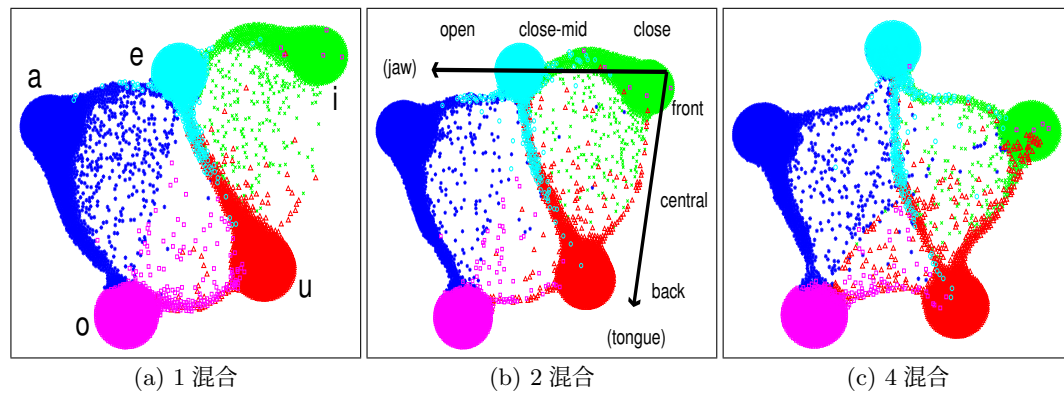


図 11 母音分類器の可視化. 混合数はそれぞれ 1(a), 2(b), 4(c).

岩田 具治 (正会員)

1979 年生. 2001 年慶応義塾大学環境情報学部環境情報学科卒業. 2003 年東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻修了. 同年 NTT 入社. 機械学習, 異常値検出, 可視化の研究に従事. 現在, NTT コミュニケーション科学基礎研究所 社員. 船井ベストペーパー賞 (2004 年), FIT ヤングリサーチ賞 (2007 年) 受賞. 電子情報通信学会会員.

斉藤 和巳 (正会員)

1963 年生. 1985 年慶応義塾大学理工学部数理科学科卒業. 工学博士. 同年 NTT 入社. 1991 年より 1 年間オタワ大学客員研究員. 神経回路網, 機械学習, 複雑ネットワーク等の研究に従事. 2007 年より, 静岡県立大学経営情報学部教授. 情報処理学会論文賞 (1997 年), 人工知能学会論文賞 (1999 年) 等受賞. 電子情報通信学会, 人工知能学会, 日本神経回路学会, IEEE 各会員.