1　単純ベイズ分類器 (naive bayes)

本章では観測データ x について、それが所属されるクラスの間に確率分布が仮定される**分類問題**を、**単純ベイズ分類器 (naive bayes)** を中心に説明する。

1.1　導入; 前提知識

単純ベイズ分類器を扱うために前提知識について触れておく。

1.1.1　条件付き確率

事象 A が起きた前提で事象 B が起きる確率を条件付き確率といい、以下の式で定義される。

$$P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)} \tag{1}$$

特に、

$$\begin{aligned} P(B|A) &= \frac{P(A \cap B)}{P(A)} \\ P(A)P(B|A) &= P(A \cap B) \end{aligned} \tag{2}$$

1.1.2　ベイズの定理

事象 A, B について、$P(A|B), P(A), P(B)$ がわかっているとき、$P(B|A)$ を以下の式で求めることができる。

$$P(B|A) = \frac{P(B)P(A|B)}{P(A)} \tag{3}$$

これをベイズの定理とよぶ。導出は以下。

$$\begin{aligned} P(B|A) &= \frac{P(B \cap A)}{P(A)} \\ &\text{ここで、(2) より} \\ P(B \cap A) &= P(B)P(A|B) \\ &\text{から、} \\ P(B|A) &= \frac{P(B)P(A|B)}{P(A)} \end{aligned}$$

1.1.3　尤度

データ $\mathbf{x}$ がクラス C に属する尤もらしさとは、クラス C であるもののうちデータ $\mathbf{x}$ となるものすなわち $p(\mathbf{x}|C)$ を尤度という。

1.1.4　条件付き確率と尤度の違い

条件付き確率（確率）が **真の確率変数** を扱うのに対し、尤度（統計）は **データから算出した値** である。

1.1.5　統計学でのベイズの定理

統計の視点からベイズの定理を考えると、

$$P(B|A) = \frac{P(B)P(A|B)}{P(A)}$$

は、

1. 求める $P(B|A)$ を、A が起きた後の **事後確率** と呼ぶ。
2. $P(B)$ は A を考えない時の生起確率であり、事後確率に対して **事前確率** と呼ぶ。
3. $P(A)$ は独立な B_i に対して $P(A) = \sum P(B_i \cap A)$ であることから、$P(B|A)$ についての **周辺確率** と呼ぶ。

を用いて以下のように解釈できる。

$$P(B|A) = \frac{P(B)P(A|B)}{P(A)}$$
$$P(B|A) = \frac{P(A|B)}{P(A)} \times P(B)$$
$$\text{事後確率} = \frac{\text{尤度}}{\text{周辺確率}} \times \text{事前確率}$$

1.2　単純ベイズ分類器

ある特徴ベクトルがどのクラスに分類されるかを決定する写像を、**分類器** とよぶ。ここでは先ほどのベイズの定理 (3) を用いた**単純ベイズ分類器 (naive bayes)** を紹介する。

「特徴ベクトル $\mathbf{x_j}$ がクラス $C_i(i = 1, 2, \cdots, n)$ に分類される」という学習によって $p(x|C_i), p(\mathbf{x}), p(C_i)$ を知っている時、ある $\mathbf{x}$ がクラス C_i に属する尤度 $p(C_i|\mathbf{x})$ はベイズの定理から、

$$P(C_i|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|C_i)}{p(\mathbf{x})} \times P(C_i)$$

で導くことができる。ここで、C_i と C_j を比較したとき、$\mathbf{x}$ は尤度が高い方のクラスに属する方が尤もらしいといえる。すなわち、

$$p(C_i|\mathbf{x}) = \frac{P(C_i)p(\mathbf{x}|C_i)}{p(\mathbf{x})} \left\{ \begin{array}{c} > \\ < \end{array} \right\} \frac{P(C_j)p(\mathbf{x}|C_j)}{p(\mathbf{x})} = p(C_j|\mathbf{x}) \left\{ \begin{array}{c} \Rightarrow C_i \\ \Rightarrow C_j \end{array} \right\}$$

ここで $\mathbf{x}$ をはらって、

$$P(C_i)p(\mathbf{x}|C_i)\left\{\begin{array}{c} > \\ < \end{array}\right\}P(C_j)p(\mathbf{x}|C_j)\left\{\begin{array}{c} \Rightarrow C_i \\ \Rightarrow C_j \end{array}\right\}$$

を得る。全クラス $C_i(i=1,2,\cdots,n)$ に対して行えばよいので、単純ベイズ分類器は以下の式で分類を行う。

$$\max_i p(x|C_i)P(C_i)$$

また、クラス C_i と C_j についての識別境界は

$$P(C_i|\mathbf{x})=\frac{p(\mathbf{x}|C_i)}{p(\mathbf{x})}\times P(C_i)=\frac{p(\mathbf{x}|C_j)}{p(\mathbf{x})}\times P(C_j)=P(C_j|\mathbf{x})$$

にある。

1.3 誤り率

あるクラス C_i と C_j に同様の特徴が現れた時、分類器は分類を誤る場合がある。誤りが発生する確率を **誤り率 ε** とする。単純ベイズ分類器はクラス C_i の事後確率がクラス C_j の事後確率より大きい時にクラス C_i に分類するため、誤りは

$$\varepsilon(\mathbf{x})=\min[P(C_i|\mathbf{x}),P(C_j|\mathbf{x})]$$

となる。

期待値が最小になる話はちょっとまってください。

1.4 損失

真のクラスが C_i であるデータを C_j と誤ったときの危険性を損失 Lij で表す。K 個のクラスがあるとき Lij を要素とする $K\times K$ の行列が作られる。これを **損失行列** という。

ここから、データ $\mathbf{x}$ をクラス C_i と判断した時に発生する損失は、

$$r(C_i|\mathbf{x})=\sum_{k=1}^{K}L_{ik}P(C_k|\mathbf{x})$$

となる。

1.5 リジェクト

曖昧な部分について誤りを避けるために閾値を設けてリジェクトを行う。

2 ROC 曲線

2.1 ROC 曲線の性質

2.2 ROC 曲線による性能評価