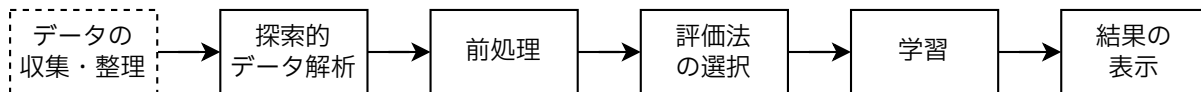


2. 機械学習の基本的な手順



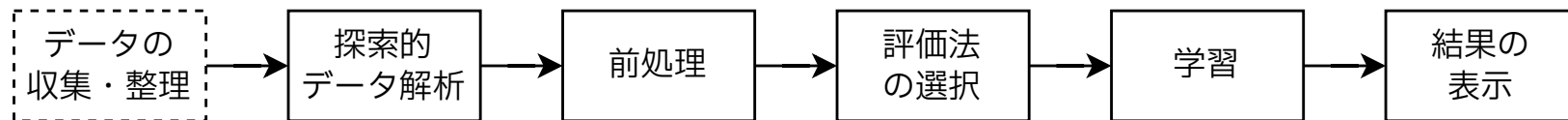
- 2.1. Pythonによる機械学習システムの実装
- 2.2. データ収集, 整理
- 2.3. 探索的データ解析
- 2.4. 前処理
- 2.5. 評価法の選択と学習
- 2.6. 結果の表示



- 荒木雅弘: 『Pythonではじめる機械学習』(森北出版, 2025年)
- スライドとコード

2.1 Pythonによる機械学習システムの実装 (1/5)

- 一般的な機械学習の手順
 - それぞれの手順に適したライブラリによる支援が可能

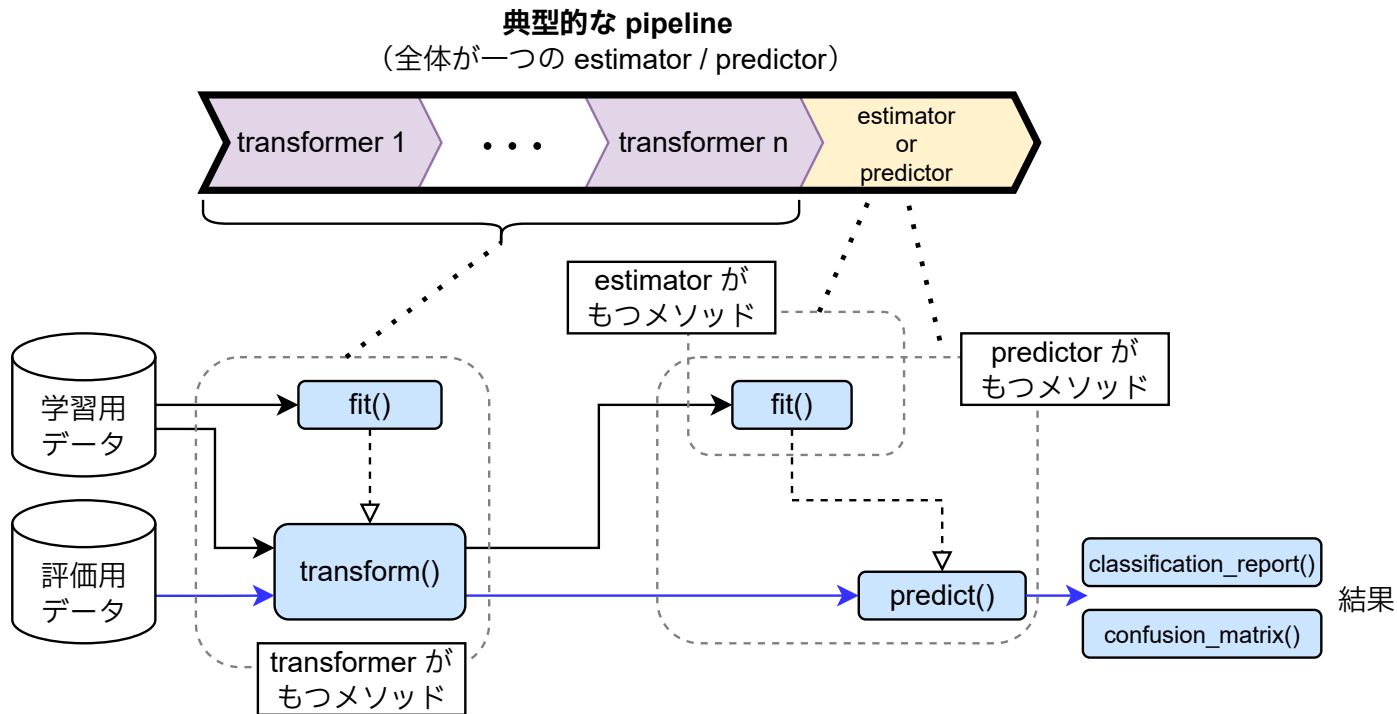


2.1 Pythonによる機械学習システムの実装 (2/5)

- 機械学習システムの開発に Python を使うメリット
 - データ処理や可視化, 機械学習のライブラリが充実
 - numpy : 多次元配列を効率よく扱う
 - pandas : データの読み込み, 解析を支援する
 - matplotlib : グラフを描画する
 - seaborn : 統計データを可視化する
 - scikit-learn : 多くの機械学習アルゴリズムを実装する
 - Jupyter Notebook で実行手順を記録しながらコーディングが可能
 - marimo で生成AIを活用したコーディングや, インタラクティブな notebook の作成が可能

2.1 Pythonによる機械学習システムの実装 (3/5)

- scikit-learn を用いた機械学習の手順



2.1 Pythonによる機械学習システムの実装 (4/5)

- scikit-learn の主要なクラス
 - 推定器 (estimators)
 - データをもとにモデルを学習する中心的なクラス
 - `fit()` メソッドでデータと正解を与えて学習
 - 変換器 (transformers)
 - データを推定器への入力として適したものに変換するクラス
 - `transform()` メソッドでデータ変換
 - パイプライン (pipeline)
 - 変換器と推定器をつないで一つの処理として扱う
 - ハイパーパラメータの最適化に便利

2.1 Pythonによる機械学習システムの実装 (5/5)

- ライブラリの読み込み
 - データの格納や基本的な操作に numpy は必須
 - 入力したデータの分析や前処理を行うには pandas を使う
 - データや結果の可視化を行うには matplotlib.pyplot を使う
 - scikit-learn はパッケージ全体ではなくクラスや関数を個別に指定

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.manifold import TSNE
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.model_selection import train_test_split, cross_val_score
from sklearn.metrics import confusion_matrix, ConfusionMatrixDisplay, classification_report
```

2.2 データ収集, 整理 (1/3)

- サンプルデータ: iris
 - 3種類のアヤメ (setosa, versicolor, virginica) を萼(がく; sepal) の長さ, 幅, 花びら (petal) の長さ, 幅の計4つの特徴から分類する
 - 各クラス50事例ずつで計150事例のデータ数
 - 冒頭の5事例

index	sepal length (cm)	sepal width (cm)	petal length (cm)	petal width (cm)	class
0	5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
1	4.9	3.0	1.4	0.2	setosa
2	4.7	3.2	1.3	0.2	setosa
3	4.6	3.1	1.5	0.2	setosa
4	5.0	3.6	1.4	0.2	setosa

2.2 データ収集, 整理 (2/3)

- scikit-learn でのデータの持ち方
 - パターン行列 : X
 - 全データの特徴ベクトルを列方向に並べたもの
 - iris データの場合は150事例, 4特徴の150行4列の行列
 - 正解 : y
 - 正解ラベルを整数値にしてデータの数だけ並べたもの
 - iris データの場合は150個の数字 (0,1,2のいずれか) が並ぶベクトル

2.2 データ収集, 整理 (3/3)

- numpy の ndarray (n次元テンソル)として読み込む方法
 - load_iris 関数の戻り値は Bunch オブジェクト
 - 特徴ベクトル, 正解データ, 特徴名, データの説明などのさまざまな情報を属性として持つ
- pandas の DataFrame および Series として読み込む方法
 - 実データでは, 異常値, 欠損値, 記述ミス, 不要な特徴の混入などへの対処が必要 → このような用途では numpy では不十分なので, pandas を使う
 - データロード関数の引数: as_frame=True

```
iris = load_iris()  
X = iris.data  
y = iris.target
```

- Xやyはndarrayなので, scikit-learnの学習データとして用いることができる

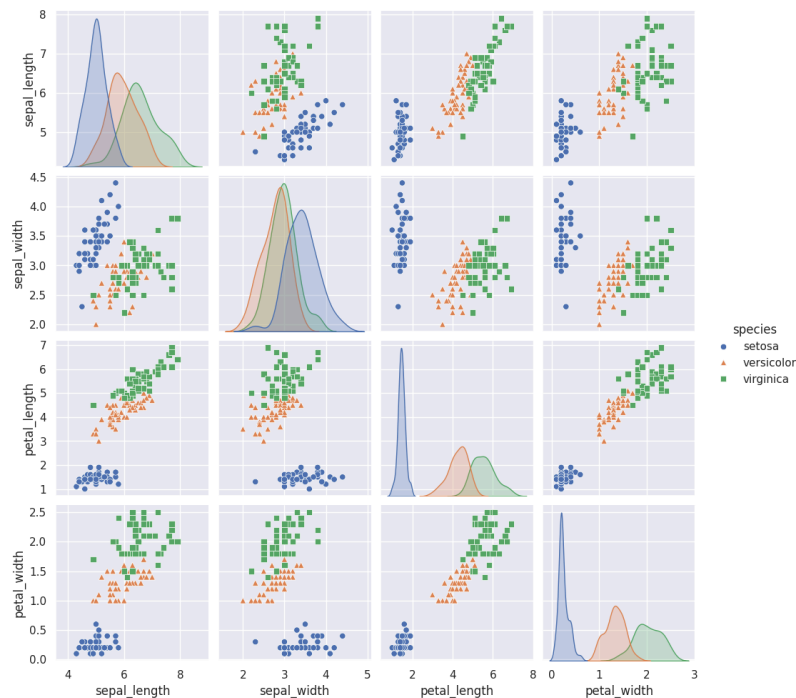
```
iris = load_iris(as_frame=True)
```

2.3 探索的データ解析 (1/2)

- 探索的データ解析 (EDA; Explanatory Data Analysis) とは
 - 設定した問題に対して, 対象としているデータが解決に適したものであるか, また機械学習を適用する前にどの程度の整理が必要かを調べること
 - 手法
 - データの統計的性質を分析
 - データを可視化
- pandas: データ分析, 操作
 - 統計的分析: describe, hist, ...
 - 異常値, 欠損値(NA)処理: query, dropna, fillna, ...
- matplotlib: グラフ表示

2.3 探索的データ解析 (2/2)

- 統計情報の表示
 - seaborn ライブラリを用いると，分析や可視化が容易になる



2.4 前処理

- 特徴のスケーリング
 - 特徴の各次元のスケールが著しく異なると、特徴の扱いが不公平になる
 - 標準化：すべての次元を平均0，分散1に揃える
 - 各次元（軸）に対して平均値を引き，標準偏差で割る

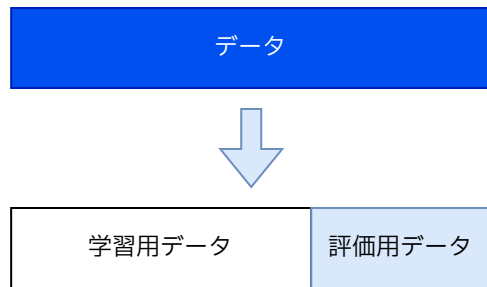
$$x'_i = \frac{x_i - m_i}{\sigma_i} \quad m_i, \sigma_i : \text{軸}i\text{の平均, 標準偏差}$$

```
X_scaled = StandardScaler().fit_transform(X)
```

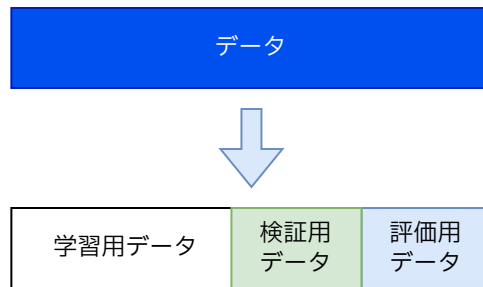
2.5 評価法の選択と学習 (1/6)

- 分割学習法（データ数が多いとき）
 - データを学習用と評価用に適切な割合で分ける
 - ハイパーパラメータを調整する場合は、学習用，検証用，評価用に分ける
 - 実験の再現性を確保するためにはrandom_stateを固定しておく

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_scaled, y, test_size=0.33, random_state=7)
```



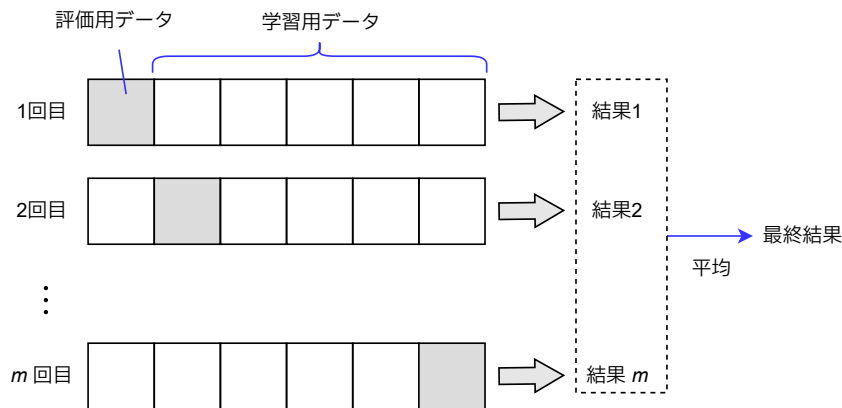
(a) 学習用データと評価用データの分割



(b) 学習用・検証用・評価用データの分割

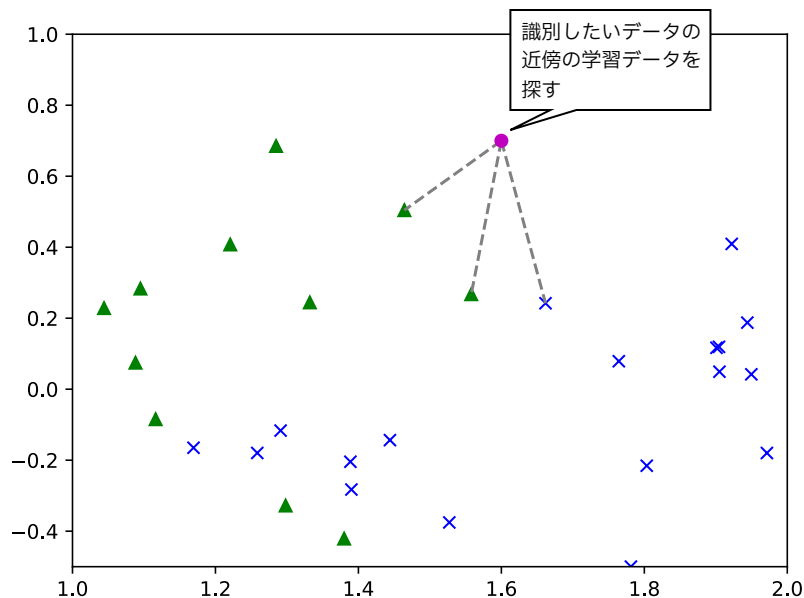
2.5 評価法の選択と学習 (2/6)

- 交差確認法（データ数が少ないとき）
 - データを m 個の集合に分割し, $m - 1$ 個の集合で学習, 残りの1個の集合で評価を行う
 - 評価する集合を入れ替え, 合計 m 回評価を行う
 - 分割数をデータ数とする場合を一つ抜き法とよぶ
 - 学習用データで交差確認法によりハイパーパラメータ調整を行い, 評価用データで評価してもよい



2.5 評価法の選択と学習 (3/6)

- k-NN法
 - 識別したいデータの近傍のk個の学習データを探し，属するクラスの多数決で識別



2.5 評価法の選択と学習 (4/6)

- k-NN法のパラメータ
 - 近傍として探索するデータ数: k
 - k が1の場合にもっとも複雑な境界となり、汎化性能は低くなる傾向がある
 - k が増えるに従って境界は滑らかになるが、大き過ぎると識別性能が低下する
 - 距離尺度
 - 通常はユークリッド距離
 - 値を持つ次元が少ない場合はマンハッタン距離
 - 探索方法
 - 入力と全データとの距離を計算してソート
 - データが多い場合は事前にデータを木構造化

2.5 評価法の選択と学習 (5/6)

- 学習を行うインスタンスの生成
 - モデルの構成に関するパラメータ（ハイパーパラメータ）は、インスタンス生成時に与える
 - 詳しくはAPIドキュメントを参照

```
clf = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
```

アルゴリズムの詳細な説明や、事例が記載されているページへのリンク

インスタンス生成時に指定するパラメータの説明

sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier

```
class sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=5, *, weights='uniform', algorithm='auto', leaf_size=30, p=2, metric='minkowski', metric_params=None, n_jobs=None)
```

Classifier implementing the k-nearest neighbors vote.

Read more in the [User Guide](#).

Parameters:

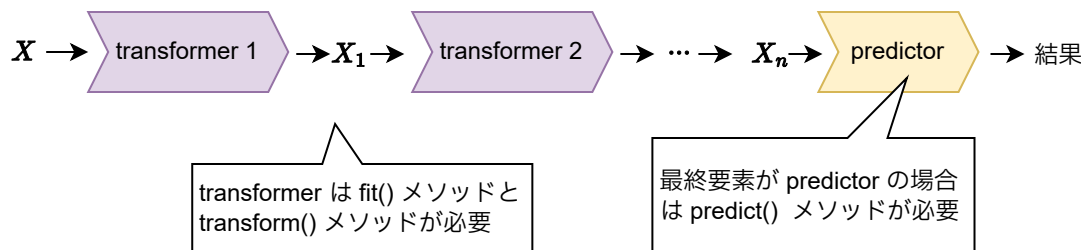
n_neighbors : *int*, **default=5**
Number of neighbors to use by default for `kneighbors` queries.

weights : {'uniform', 'distance'} or callable, **default='uniform'**
Weight function used in prediction. Possible values:

デフォルト引数の値が示されている。*以降は必ずキーワード引数で指定する。

2.5 評価法の選択と学習 (6/6)

- パイプラインとは
 - 複数の前処理と学習モジュールなど、連続した処理をパイプラインとして結合して、ひとつの識別器のインスタンスとみなせる
- パイプラインのメリット
 - 処理をカプセル化して実行を簡単にできる
 - ハイパーパラメータ調整を一度に行える
 - テストデータが混入していないことを保証できる



2.6 結果の表示 (1/3)

- 学習したモデル
 - 式, 木構造, ネットワークの重み, etc.
- 性能
 - 正解率, 適合率, 再現率, F_β 値
 - 多クラスの場合の平均方法
 - マイクロ平均, マクロ平均, 重み付きマクロ平均
- グラフによる可視化
 - パラメータを変えたときの性能の変化
 - 異なるモデルの性能比較

2.6 結果の表示 (2/3)

- 混同行列

	予測+	予測-
正解+	true positive (TP)	false negative (FN)
正解-	false positive (FP)	true negative (TN)

- 正解率
 - 正解の割合. 不均衡データには不適

$$Accuracy = \frac{TP+TN}{TP+FN+FP+TN}$$

- 適合率
 - 正例の予測が正しい割合

$$Precision = \frac{TP}{TP+FP}$$

- 再現率
 - 正しく予測された正例の割合

$$Recall = \frac{TP}{TP+FN}$$

- F値
 - 適合率と再現率の調和平均

$$F_{\beta} = (1 + \beta^2) \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{(\beta^2 \times \text{Precision}) + \text{Recall}}$$

2.6 結果の表示 (3/3)

- 多クラス識別の評価法
 - マイクロ平均
 - クラスごとにTP, FN, FP, TNを求め、それらを足し合わせて評価する
 - マルチラベルの設定以外では適合率, 再現率, F_1 値がすべて正解率に一致する
 - マクロ平均
 - ひとつのクラスを正, 残りのクラスを負とした混同行列を作成し, クラスごとの適合率や再現率を求め, 平均を計算する
 - すべてのクラスを平等に評価している
 - 重み付きマクロ平均
 - クラス毎の正解事例数を評価に反映させる

2.7 まとめ

- 機械学習の基本的な手順
 - 探索的データ解析：統計的分析，可視化
 - 前処理：標準化，次元削減
 - 評価基準の設定：分割法，交差確認法
 - 学習：ハイパーパラメータ調整
 - 結果の可視化
- 推奨資料
 - 喜多 他. プログラミング演習 Python 2023. 京都大学学術情報リポジトリ, 2023. URL: <http://hdl.handle.net/2433/285599>.
 - Geron, A. Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow (3rd ed.). O'Reilly, 2024.