決定木

7月17日(日)WSL勉強会

宗政一舟

もくじ

1. 決定木とは

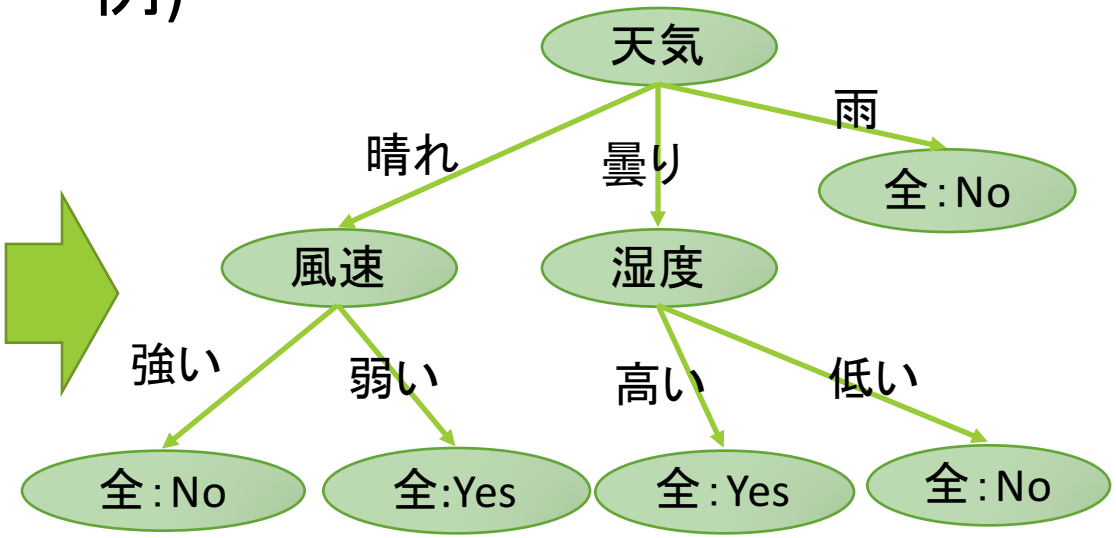
決定木とは

- 木構造をした決定を行うためのグラフ
- 与えられたデータから適切な決定木を作成することを決定木学習という

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

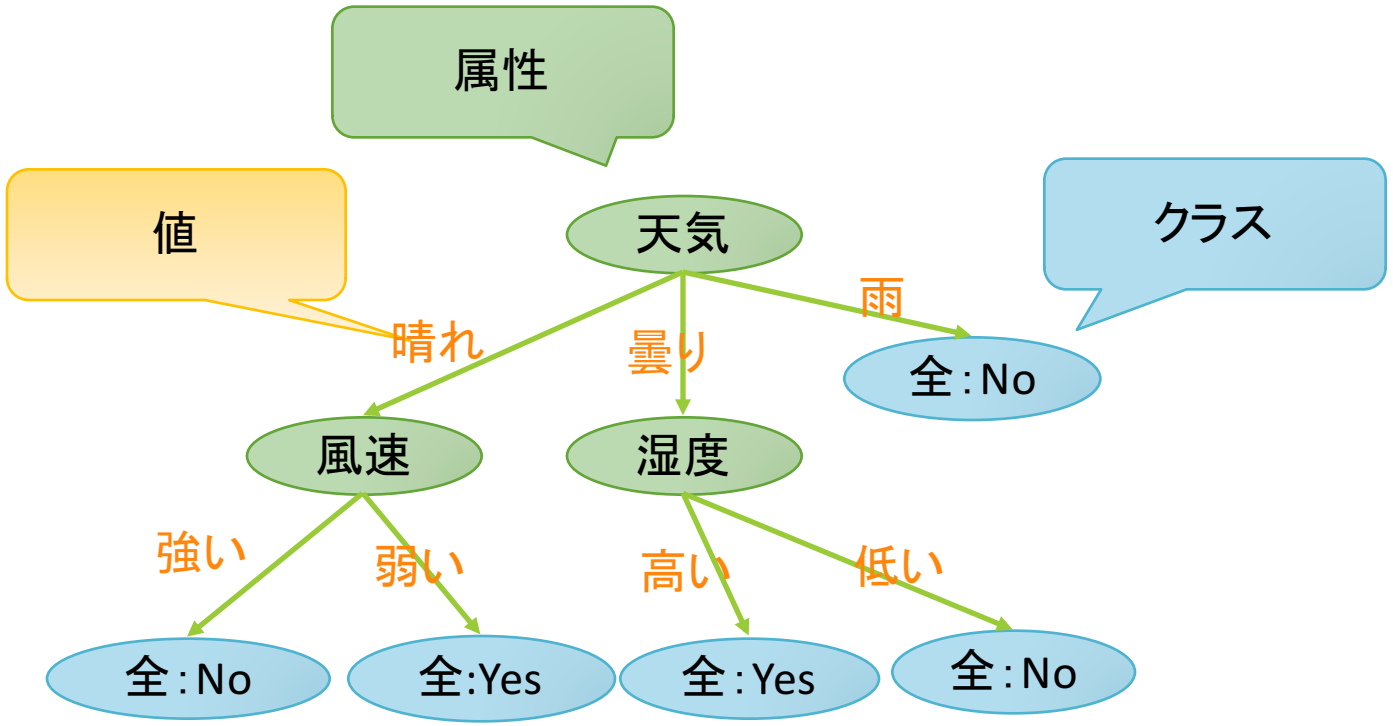
学習アルゴリズム

例)



決定木とは

- 属性：”根”を含む”葉”以外のノード
- 値：エッジ
- クラス：葉

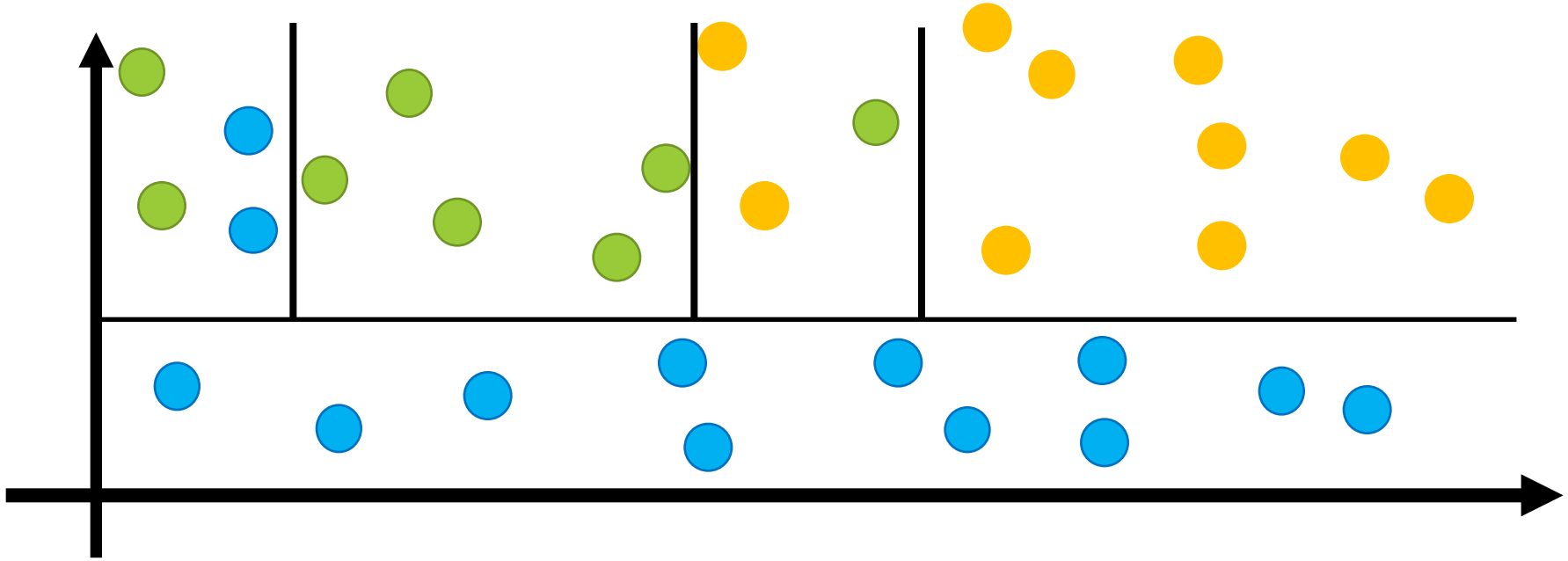


決定木の特徴

- 特定の結果をもたらす可能性の高いセグメントを見つける
  - 新しいデータに対して分類、予測を行う
- 特定の結果をもたらす要因・ルールを見つける
  - 決定木の構築

決定木の特徴

- 決定木による分類例



2.決定木学習アルゴリズム

決定木学習アルゴリズム

複数の属性とクラスを持つ事例を考え、その事例の集合をTとする。Tを学習事例と呼ぶ。

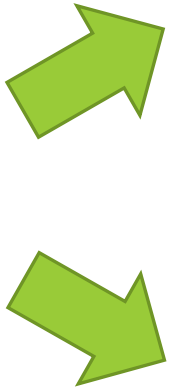
この時、事例の持つクラスは$\{C_1, C_2, \dots C_j, \dots, C_n\}$とする。$n$はクラスの個数である。

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

決定木学習アルゴリズム：*Step1*

Tがすべて同一のクラスC_jであるならば、Tに対する決定木は葉であり、そのクラスはC_jとする

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No



天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	高い	Yes
晴れ	弱い	高い	Yes

C_{Yes} となる

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	強い	低い	No
雨	弱い	高い	No

C_{No}となる

決定木学習アルゴリズム：*Step2*

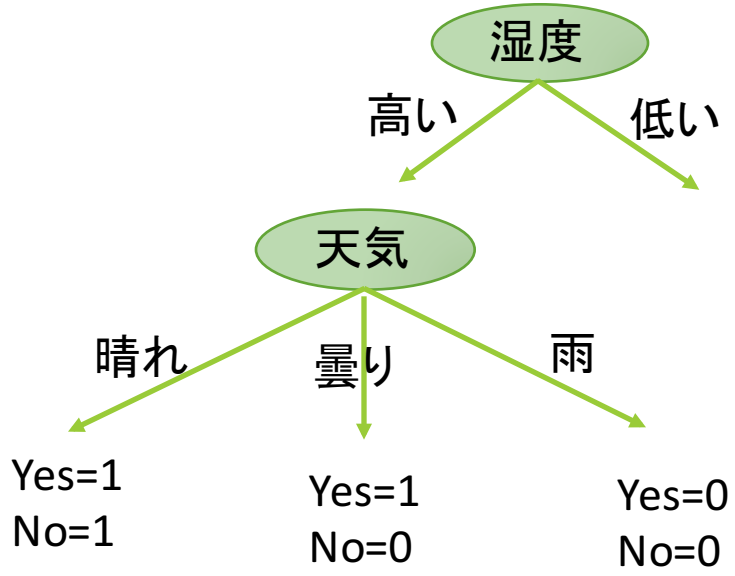
Tが対象の属性を含まない場合、***Step1*** と同様に葉とするが、そのクラスは事例からは決められない

ものによって処理が変わる

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	低い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

湿度：「高い」で分割後

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No



例えば親ノードの多数決でクラスを決める

決定木学習アルゴリズム：*Step3*

Tが複数のクラスを有する場合には、ある属性を選択して、その属性が持ちうる属性値により、事例Tを分割する。

そして分割された事例集合の各々について***Step1~ Step3***を再帰的に実行

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

YesとNoの2種類のクラスがあるので分割させる必要がある

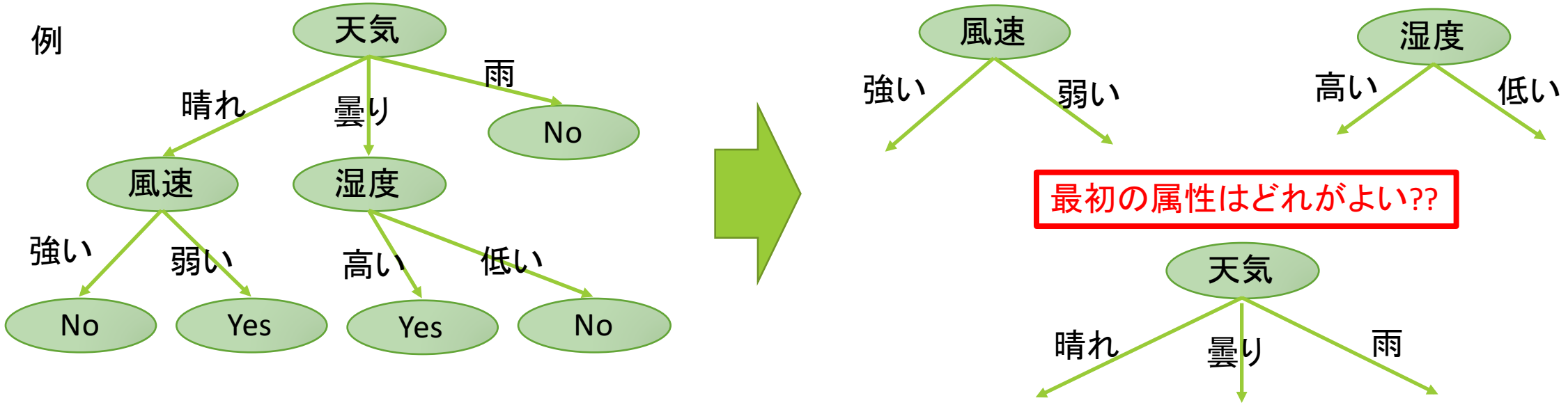
今日紹介する学習アルゴリズム

- 決定木学習で、分岐させる属性の決定方法が問題になる
- 生成された決定木の性能に大きな影響を与える
- 代表的な決定木作成アルゴリズム
  - ID3アルゴリズム
  - CARTアルゴリズム

3.分割の良さを表す指標

分割の良さを表す指標

- 実際のどのようにして属性を決め、分割していくのがよいのか?
- 例では最初の属性は”天気”であったが、実際はもっと良い属性があるかもしれない



分割の良さを表す指標

- 情報ゲイン ⟵ こっちを扱う
- ジニ不純度(* appendix)

情報ゲイン

- 事例Tの分割前と分割後のエントロピーの差を利用
- 事例Tを$\{B_1, B_2, \ldots B_N\}$に分割するときの情報ゲイン$G(T)$

エントロピー

$$E(T) = -\sum_{c \in C} p(c) \log p(c) \cdots (1)$$

$p(c)$: 全体のクラスCに対するクラスcの割合

情報ゲイン

$$G(T) = E(T) - \sum_{b \in B} p(B_b) E(B_b) \cdots (2)$$

情報ゲインが大きい方が良い分割になる

例)「天気」の情報ゲイン

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

T

$$E(T) = -\frac{2}{5}\log\frac{2}{5} - \frac{3}{5}\log\frac{3}{5} = 0.972$$

晴れ	強い	高い	No
晴れ	弱い	高い	Yes

$$E\left(B_{\text{晴れ}}\right) = -\frac{1}{2}\log\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log\frac{1}{2} = 1$$

曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No

$$E\left(B_{\text{曇り}}\right) = -\frac{1}{2}\log\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\log\frac{1}{2} = 1$$

雨	弱い	高い	No

$$E\left(B_{\text{雨}}\right) = -\frac{1}{1}\log\frac{1}{1} = 0$$

$$G(T) = E(T) - \sum_{b\in B} p(B_b)E(B_b)$$

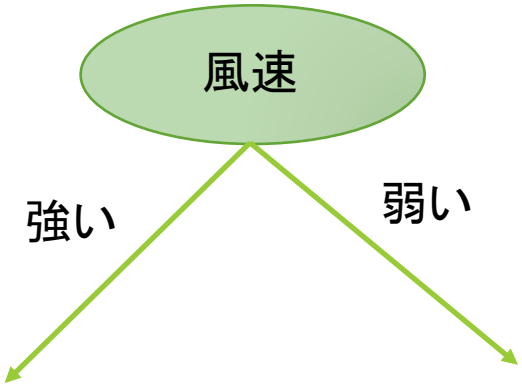
$$= 0.972 - \left(\frac{2}{5}\cdot 1\right) + \left(\frac{2}{5}\cdot 1\right) + \left(\frac{1}{5}\cdot 0\right)$$

$$= 0.172$$

風速、湿度についても
情報ゲインを算出
最大値が属性となる

情報ゲイン

- 天気で分割した時
  - 情報ゲイン：0.172
- 風速で分割した時
  - 情報ゲイン：0.423
- 湿度で分割した時
  - 情報ゲイン：0.172



最初の属性は”風速”が最適となる

4.ID3アルゴリズム

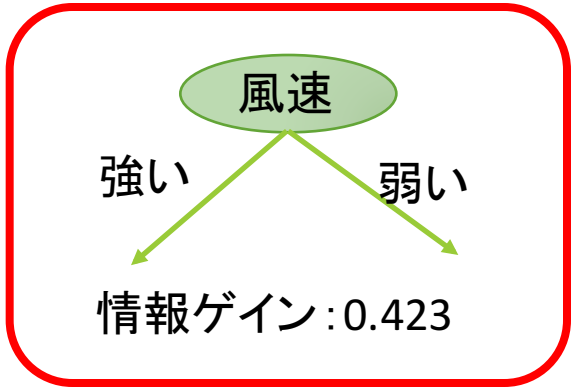
ID3アルゴリズム

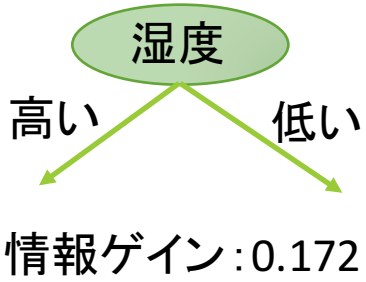
- Iterative Dichotomiser 3 Algorithm のこと
- 属性値の種類が3種類以上あっても問題がない
- 属性値はカテゴリである必要がある

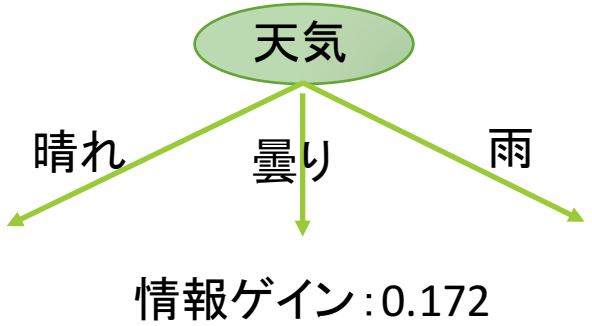
IDアルゴリズム

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

情報ゲイン最大





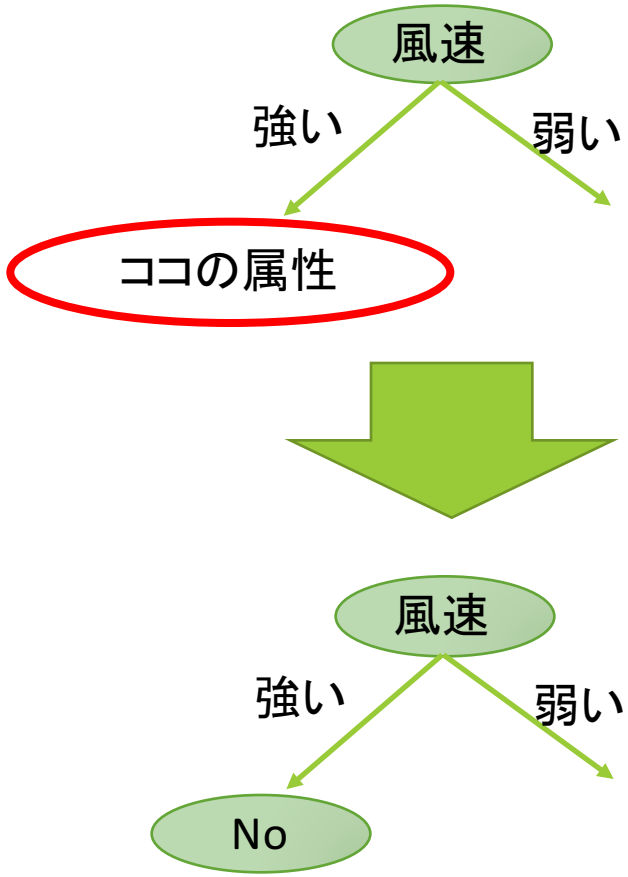


IDアルゴリズム

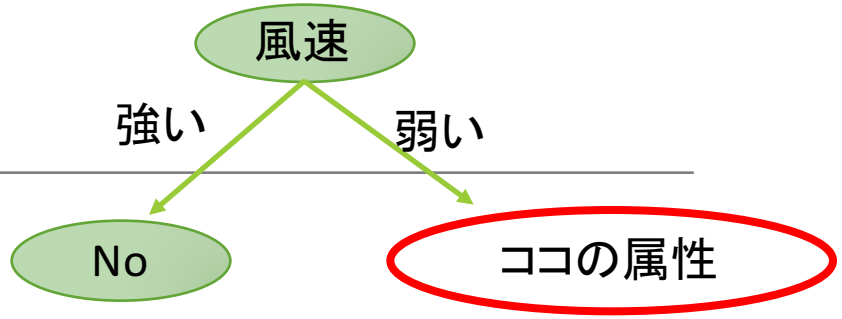
・風速：「強い」で分割後

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	強い	低い	No

クラスの値がNoになったので
こちら側の分岐は終了



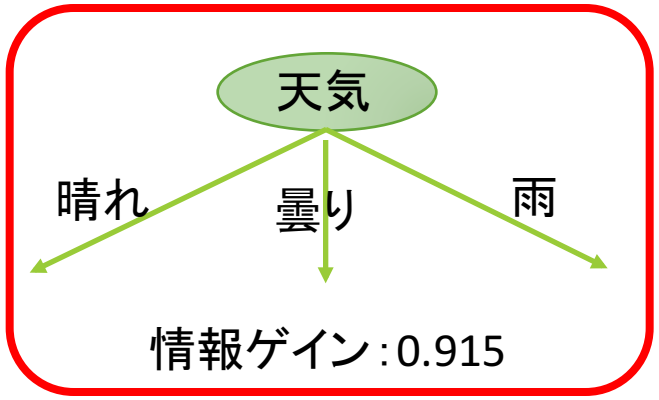
IDアルゴリズム

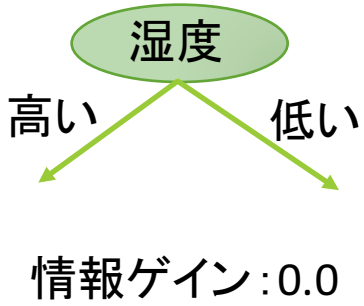


・風速:「弱い」で分割後

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	高い	Yes
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

情報ゲイン最大



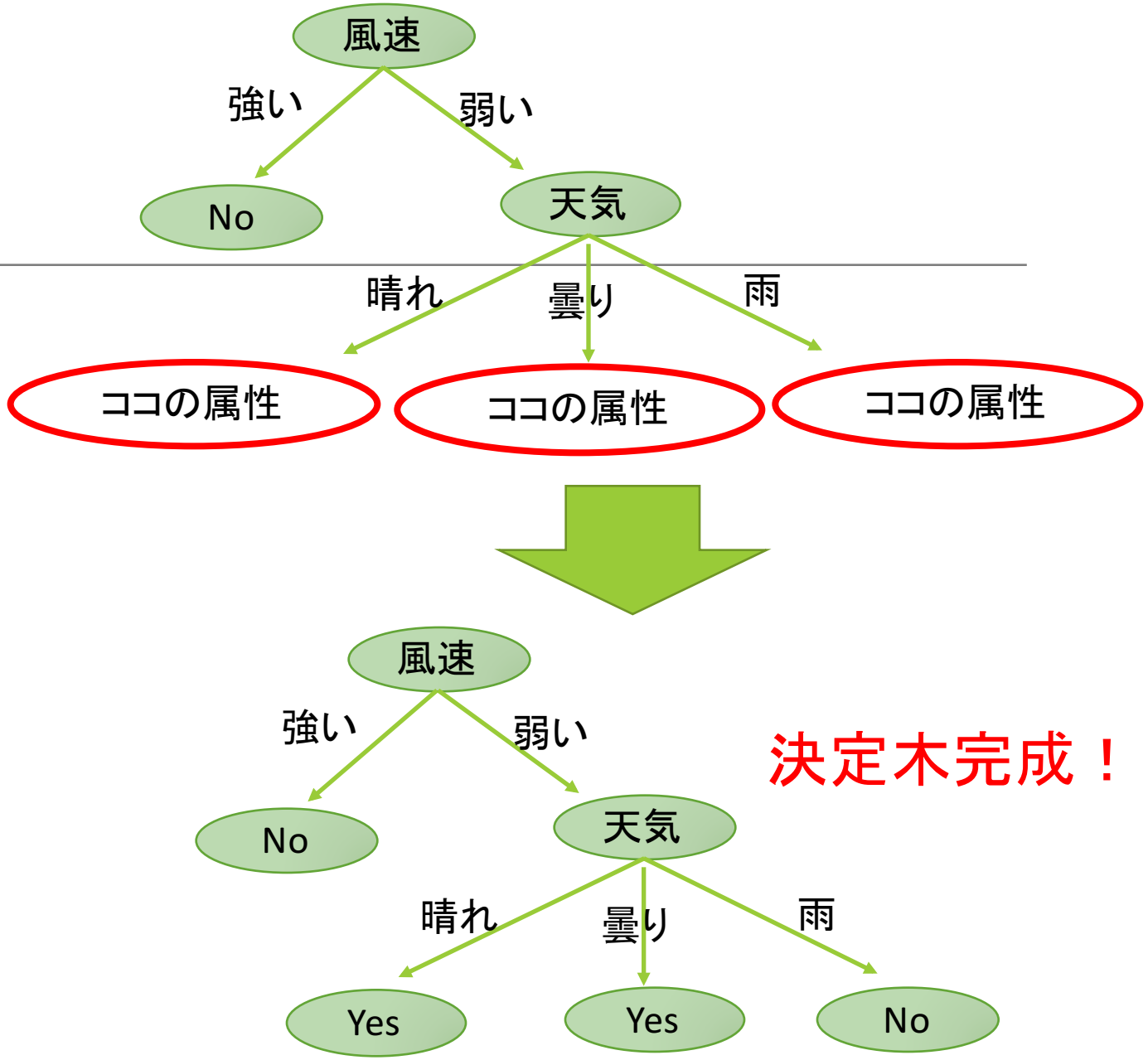


IDアルゴリズム

・風速：「弱い」で分割後

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	高い	Yes
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

それぞれの属性に対して
クラスが同一になるので
終了



5. CARTアルゴリズム

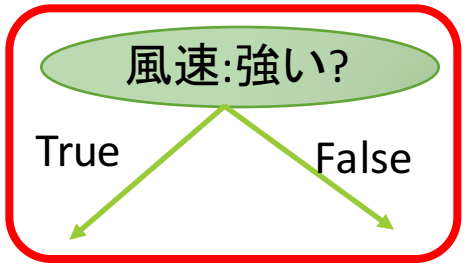
CARTアルゴリズム

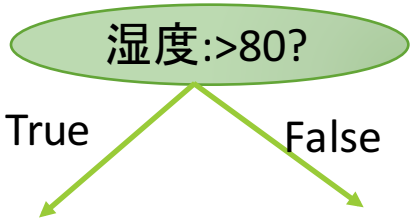
- Classification And Regression Tree Algorithmのこと
- 2分岐でしか考えていない
- 属性値はカテゴリでも、数値でも対応

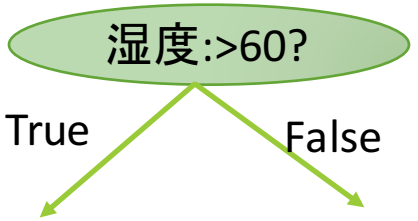
CARTアルゴリズム

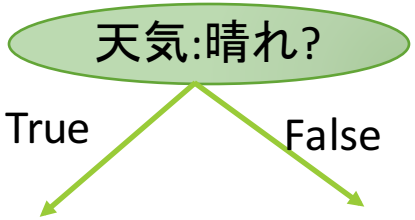
天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	60	No
曇り	弱い	40	Yes
曇り	強い	70	No
晴れ	弱い	30	Yes
雨	弱い	80	No

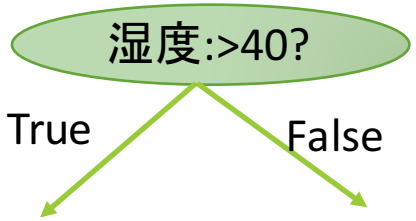
情報ゲイン最大

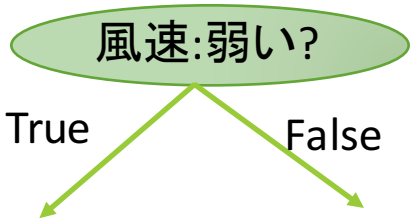


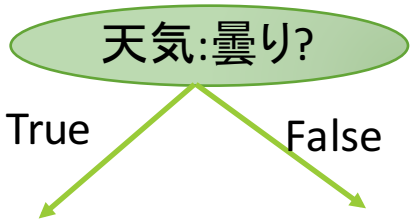


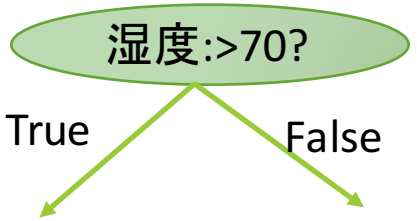




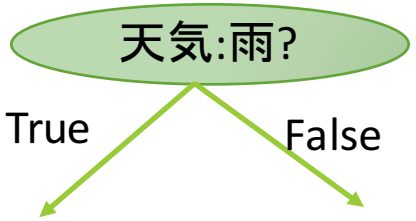


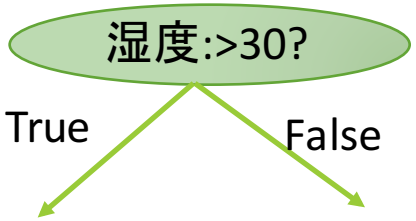






この中から、情報ゲインが最も高いものを最初の属性にする。

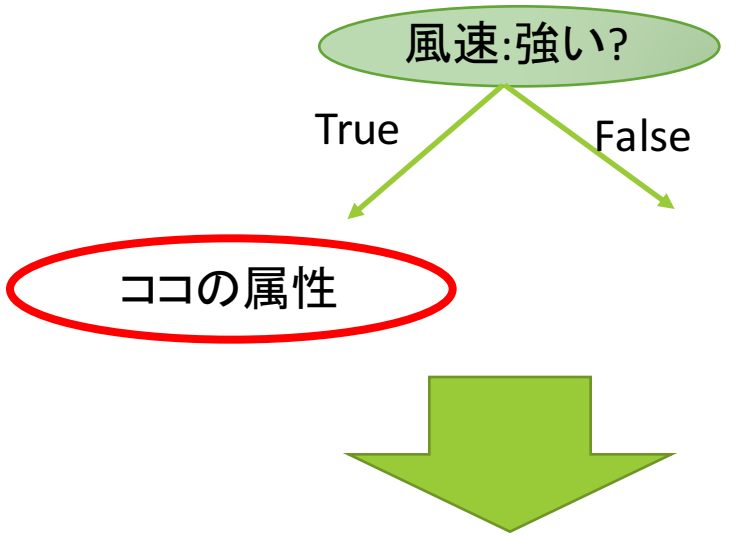




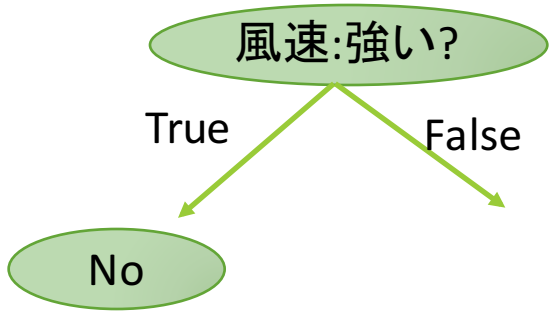
CARTアルゴリズム

・風速:「強い?」 True で分割後

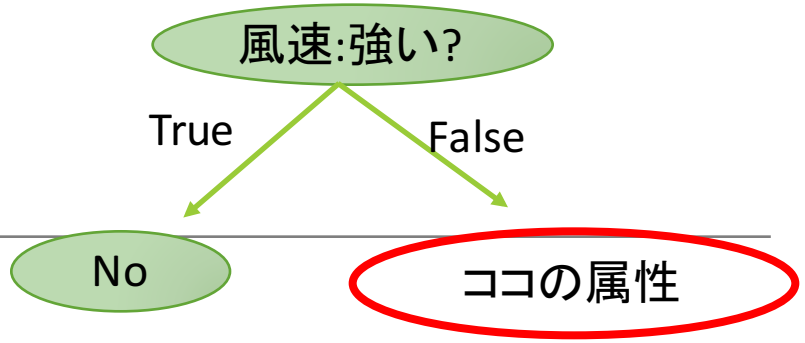
天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	60	No
曇り	強い	70	No



クラスの値がすべてNo になったので
こちら側は終了

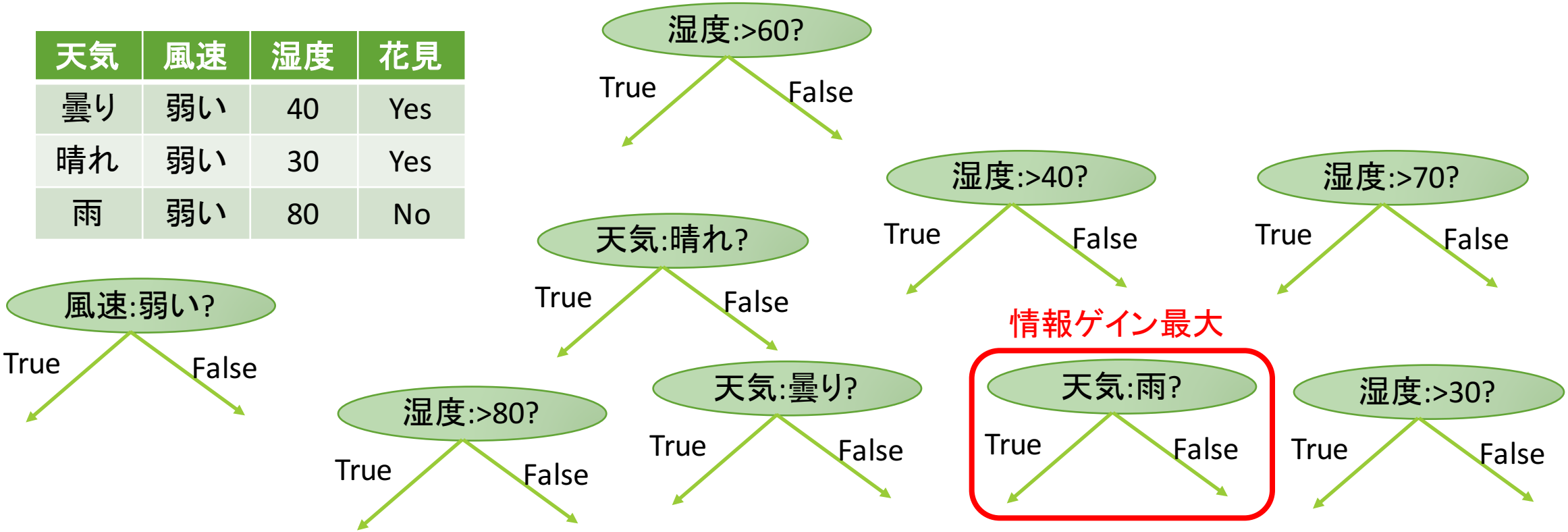


CARTアルゴリズム



・風速:「強い?」 True で分割後

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	40	Yes
晴れ	弱い	30	Yes
雨	弱い	80	No

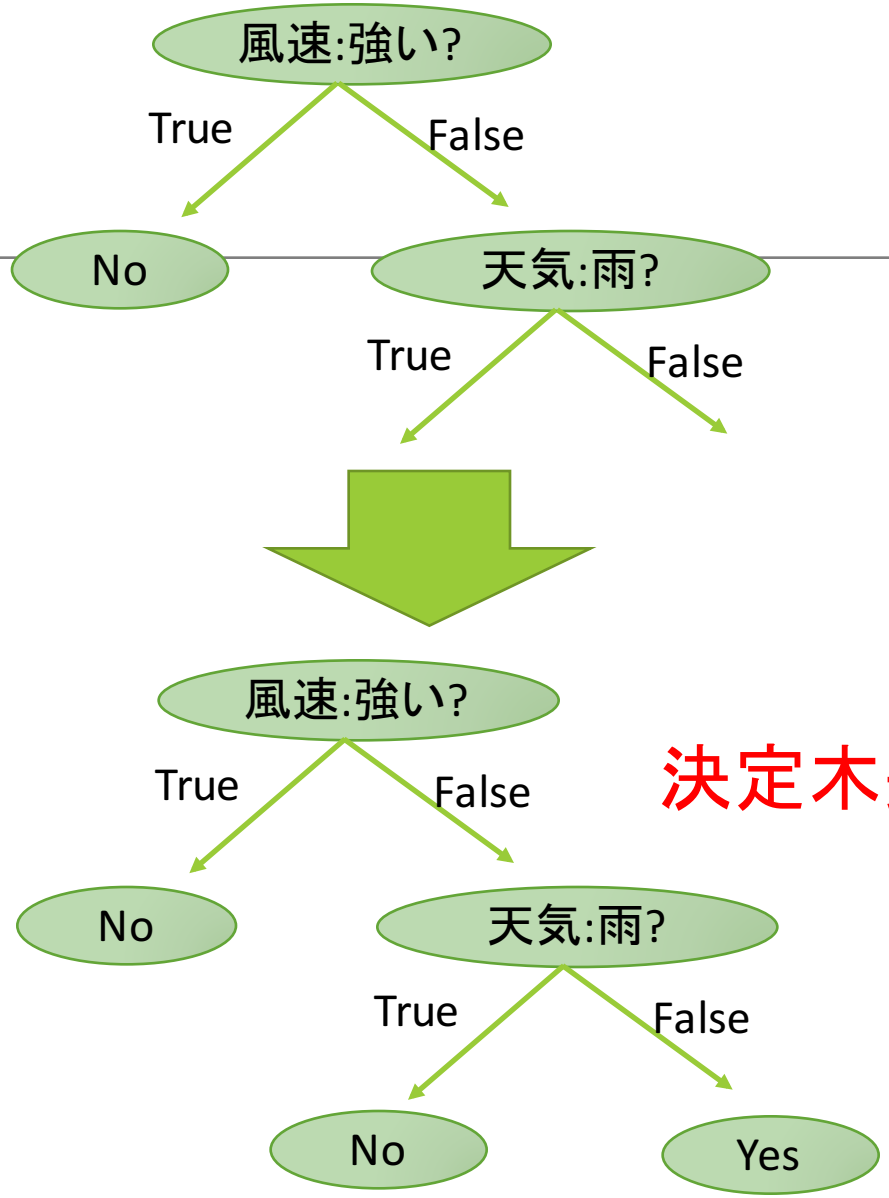


CARTアルゴリズム

・風速:「強い?」 True で分割後

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	40	Yes
晴れ	弱い	30	Yes
雨	弱い	80	No

クラスの値が
雨であった時 : すべてYes
雨でなかった時:すべてNo
になったので終了



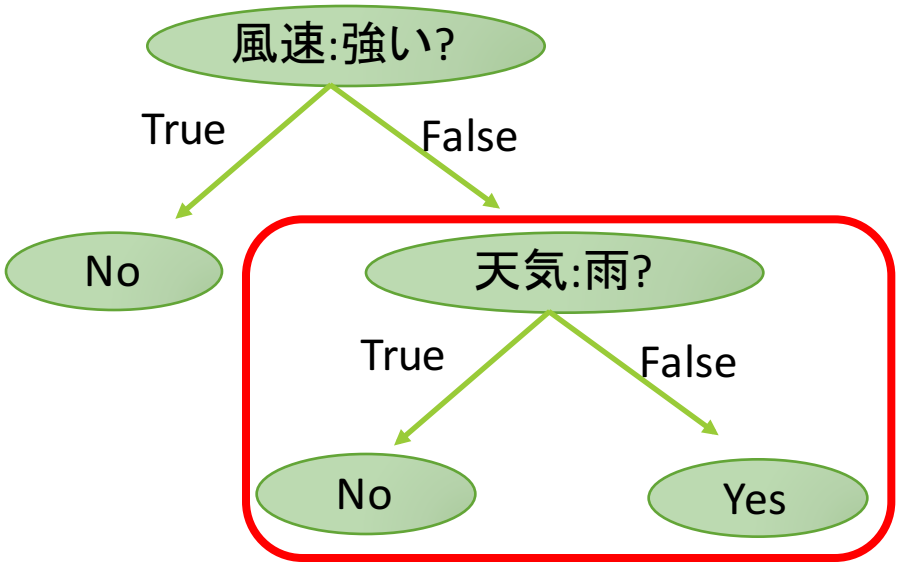
決定木完成！

6.枝刈り

枝刈り

- 決定木学習の問題の中に過学習がある
- 紹介したアルゴリズム(ID3,CART)はクラスを唯一にするまで分割する
- 最後まで分割を行えば、少しずつエントロピーは減少するが学習データに対して厳密になりすぎ汎化性が失われる可能性がある
- 枝刈りでは親ノードを共有するノード群について、合成した時(平均値)のエントロピーの上昇が指定の未満かチェックする

枝刈り



閾値:1.0

親ノード(分割前)のエントロピー

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	40	Yes
晴れ	弱い	30	Yes
雨	弱い	80	No

$$-\frac{2}{3}\log\frac{2}{3}-\frac{1}{3}\log\frac{1}{3}=0.918$$

子ノード(分割後)のエントロピー

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	40	Yes
晴れ	弱い	30	Yes

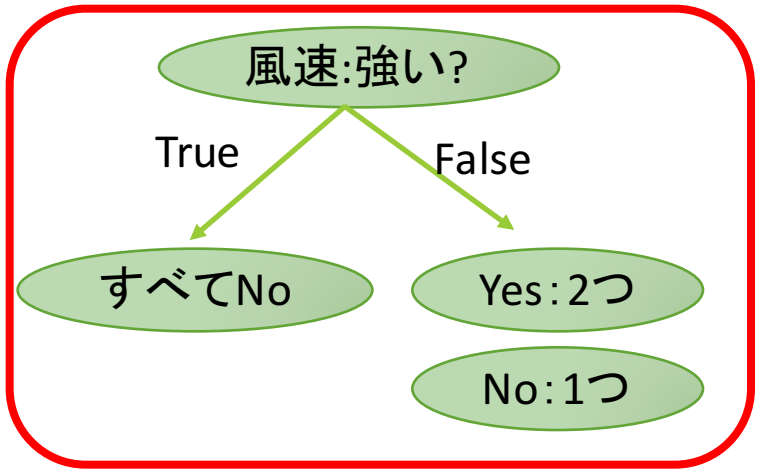
$$-\frac{2}{2}\log\frac{2}{2}=0.0$$

天気	風速	湿度	花見
雨	弱い	80	No

$$-\frac{1}{1}\log\frac{1}{1}=0.0$$

$$0.918-\frac{(0.0+0.0)}{2.0}=0.918<1.0$$ 枝刈り確定!!

枝刈り



閾値:1.0

親ノード(分割前)のエントロピー

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	60	No
曇り	弱い	40	Yes
曇り	強い	70	No
晴れ	弱い	30	Yes
雨	弱い	80	No

$$-\frac{2}{5}\log\frac{2}{5}-\frac{3}{5}\log\frac{3}{5}=0.970$$

子ノード(分割後)のエントロピー

天気	風速	湿度	花見
曇り	弱い	40	Yes
晴れ	弱い	30	Yes
雨	弱い	80	No

$$-\frac{2}{3}\log\frac{2}{3}-\frac{1}{3}\log\frac{1}{3}=0.918$$

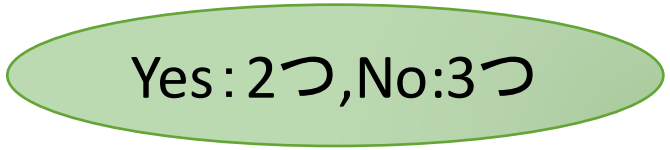
天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	60	No
曇り	強い	70	No

$$-\frac{2}{2}\log\frac{2}{2}=0.0$$

$$0.970-\frac{(0.918+0.0)}{2.0}=0.511<1.0$$ 枝刈り確定!!

枝刈り

- 閾値を1.0に設定した時、分割しないほうがいいらしいです



ご清聴ありがとうございました。

appendix

ジニ不純度

- 集合をある属性で分割し、属性値の中でランダムにひとつを当てはめる場合の期待誤差率
- 値が高いほど集合の要素はバラついている

$$GINI = \sum_{c \in C} \{p(c) \cdot p(\bar{c})\} \cdots (3)$$

$c \in C$: ある属性で分割した時のクラスの集合
$p(c)$: クラス集合C内の要素cが選ばれる確率
$p(\bar{c})$: 要素cに対して誤った属性の値あ当てはめられる場合

例)「天気」のジニ不純度

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
曇り	弱い	高い	Yes
曇り	強い	低い	No
晴れ	弱い	高い	Yes
雨	弱い	高い	No

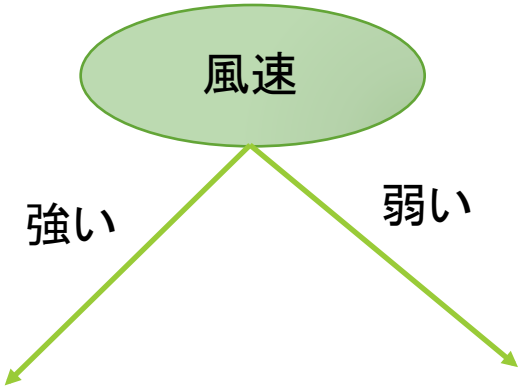
属性：天気
ランダムに選んだ属性値：晴れ

天気	風速	湿度	花見
晴れ	強い	高い	No
晴れ	弱い	高い	Yes

$$GINI$$
$$= \sum_{c \in C} \{p(c) \cdot p(\bar{c})\}$$
$$= \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\right) + \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\right)$$
$$= 0.5$$

ジニ不純度

- 天気で分割した時
  - ランダムな属性値「晴れ」
  - ジニ不純度：0.5
- 風速で分割した時
  - ランダムな属性値「弱い」
  - ジニ不純度：0.44
- 湿度で分割した時
  - ランダムな属性値「高い」
  - ジニ不純度：0.5



最初の属性は”風速”が最適となる