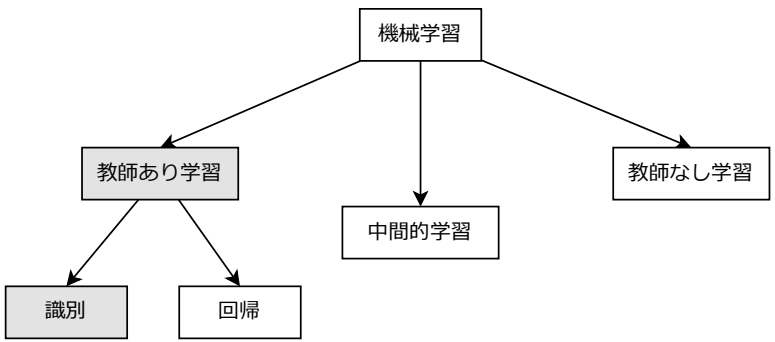
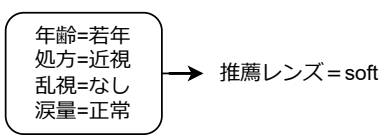
識別 ー概念学習ー

- カテゴリ特徴に対する「教師あり・識別」問題の定義
  - 問題設定
    - 教師あり学習: $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\} \quad i = 1, \ldots, N$
    - カテゴリ入力 → カテゴリ出力
    - クラスの概念を得ることが目的



・カテゴリ特徴



contact-lensesデータ

id	age	spectacle-prescrip	astigmatism	tear-prod-rate	contact-lenses
1	young	myope	no	reduced	none
2	young	myope	no	normal	soft
3	young	myope	yes	reduced	none
4	young	myope	yes	normal	hard
5	young	hypermetrope	no	reduced	none
	…				

- age ('young', 'pre-presbyopic', 'presbyopic')
- spectacle-prescrip ('myope', 'hypermetrope')
- astigmatism ('no', 'yes')
- tear-prod-rate ('reduced', 'normal')
- contact-lenses ('soft', 'hard', 'none') [class]

3.2 概念学習とバイアス

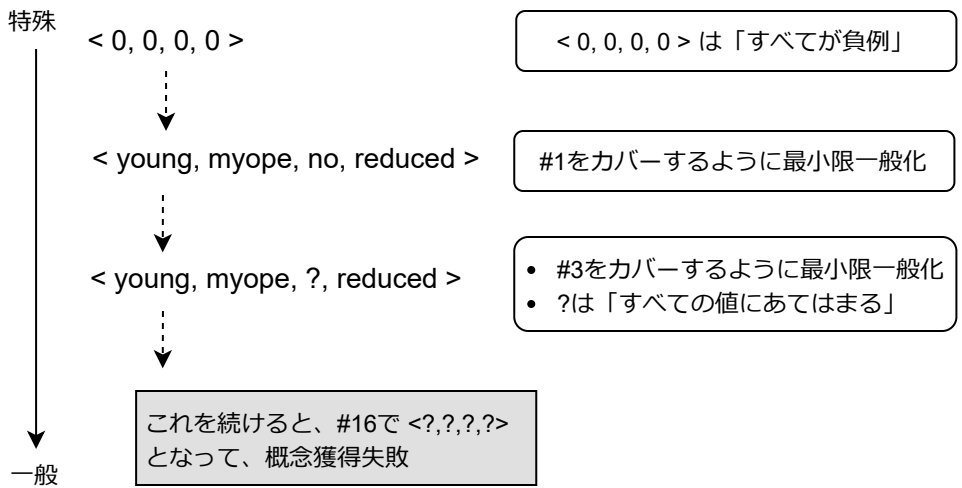
- 概念学習とは
  - 正解の概念を説明する特徴ベクトルの性質(論理式)を求めること
  - 「softレンズを勧める」という概念の例
    - (乱視=あり) and (ドライアイ=なし) ⇒ soft
- 学習の方法
  - 初期の概念学習:学習対象の概念にバイアス(偏見)をかけて候補を絞り込む
    - FIND-Sアルゴリズム
    - 候補削除アルゴリズム
  - 決定木学習:探索方法にバイアスをかけて準最適解を探す

初期の概念学習

- FIND-Sアルゴリズム
  - 最も特殊な概念から始めて、正例を使って順次一般化する
    - 求める論理式を「リテラル（特徴名＝値）のAND結合（∧）」に限定
    - すべての正例をカバーする論理式が得られれば終了
    - 正解概念の候補（仮説空間）：$4 \times 3 \times 3 \times 3 + 1 = 109$

初期の概念学習

- FIND-Sアルゴリズム
  - 例:「コンタクトレンズの使用を勧めない」(none) の概念獲得

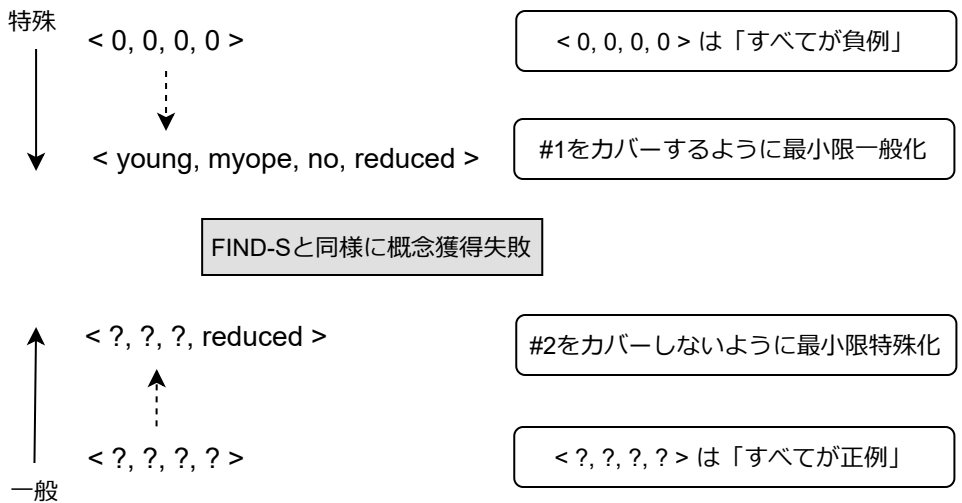


初期の概念学習

- 候補削除アルゴリズム
  - FIND-Sに加えて、もっとも一般的な概念 $<?,?,?,?>$を負例をカバーしないように順次特殊化
  - すべてのデータの処理が終わって、残った論理式集合が正解候補

初期の概念学習

- 候補削除アルゴリズム
  - 例:「コンタクトレンズの使用を勧めない」(none) の概念獲得



概念学習のバイアスを考える

- 初期の概念学習の問題点
  - リテラルのOR結合（∨）が表現できないので、正解概念が仮説空間内に存在しないことが多い
  - 例)(年齢=若年 ∨ 年齢=老眼前期) が表現できない

概念学習のバイアスを考える

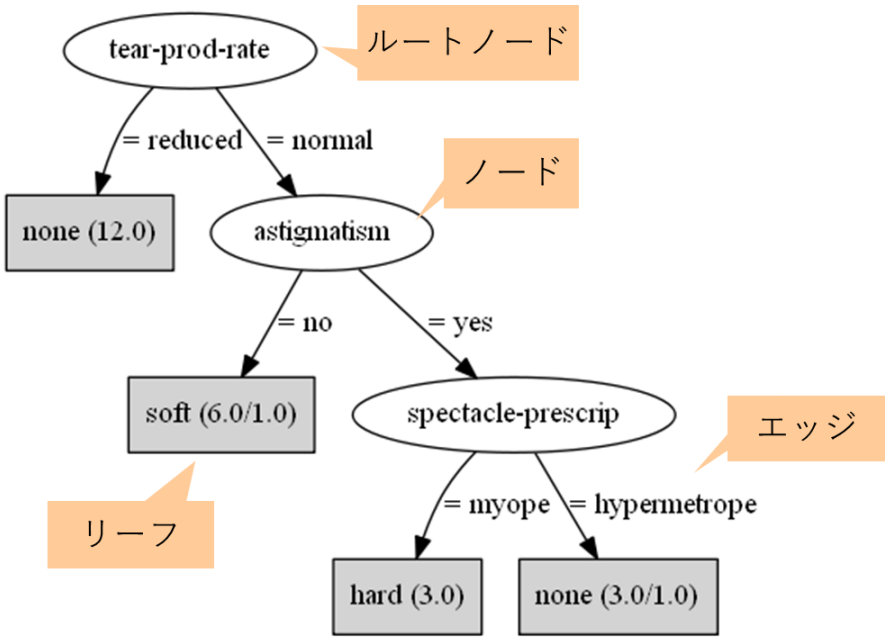
- 単純にOR結合を許す場合
  - 正解概念の候補数が増大する
    - 候補数: 2の「可能なすべての事例数」乗　　$2^{24} = 16777216$
  - 正例のOR結合が自明な解となり、未知事例に対して判定する根拠を持たない
- 解決策
  - 仮説空間はOR結合を許し、探索方法にバイアスをかけて候補を限定
  - 新たな問題設定
    - 上記の方法で見つかった候補が未知データに対しても適用可能な概念であるようなバイアスとは何か

決定木の学習

- 概念を決定木で表す
  - ルートノードから始めて、特徴の値によって事例を分類する
  - リーフに至れば分類は終了
- 決定木の要素と意味
  - ノード（節）：特徴
  - エッジ（枝）：値
  - リーフ（葉）：出力
- 決定木の論理表現
  - エッジをたどることがAND結合
  - 同じ値のリーフが複数あることがORを表現

決定木の学習

- 決定木の例



決定木とは

- 決定木の作り方
  1. ルートノードとする特徴を決める
  2. 分割後のデータができるだけ同一クラスが偏るように特徴を選択する
     - 特徴の値に基づいてデータを分割する
  3. すべてのデータが単一のクラスになればリーフとする
  4. そうでなければ、分割後のデータ集合に対して同様の操作を行う
     - ただし、これまでに使用した特徴は選択しない

ID3アルゴリズム

- 分類能力の高い属性を決定する方法
  - その属性を使った分類によって、なるべくきれいにクラスが分かれるように
  - エントロピー: データ集合 D の乱雑さを表現

$$E(D) = -P_+ \log_2 P_+ - P_- \log_2 P_-$$

    - 正例の割合:P_+ , 負例の割合: P_-

ID3アルゴリズム

- 情報獲得量
  - 特徴 a を用いた分割後のエントロピーの減少量

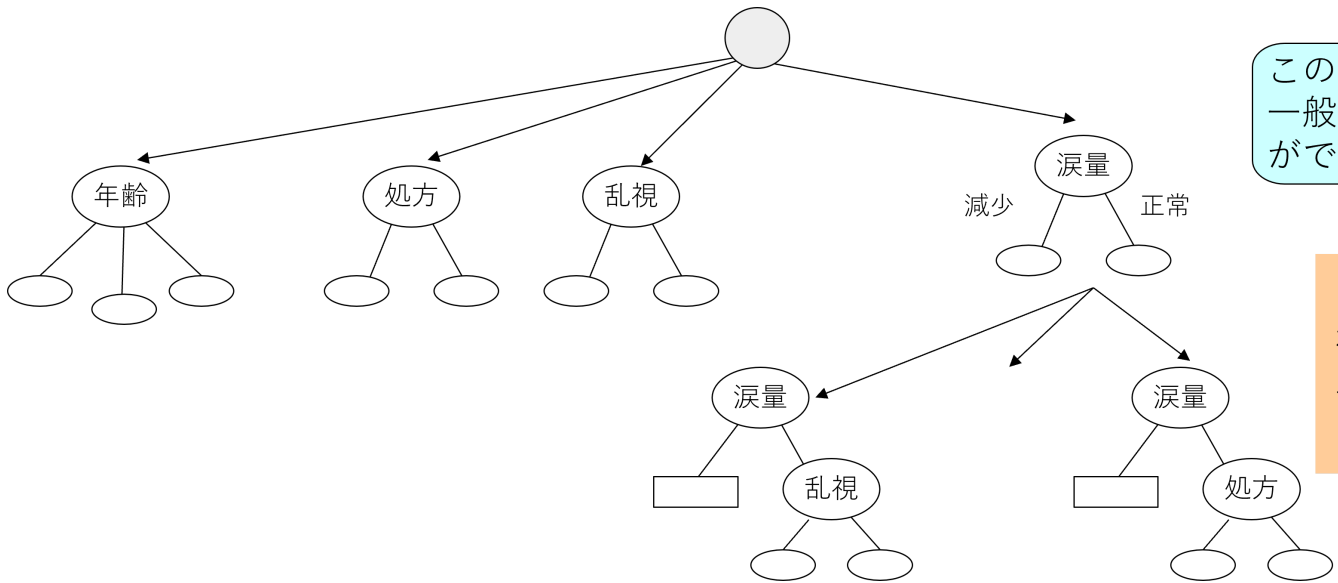
$$Gain(D, a) = E(D) - \sum_{Values(a)} \frac{|D_v|}{|D|} E(D_v)$$

    - 特徴 a が値 v を取るデータの集合: Dv
    - Dv の要素数: |Dv|
  - 情報獲得量の計算例
    - tear-prod(涙量): reduced(減少)12事例で全てnone、normal(正常)12事例でsoft5, hard4, none3

$$Gain(D, tear-prod) = E(D) - \frac{12}{24}(-\frac{5}{12}\log\frac{5}{12} - \frac{4}{12}\log\frac{4}{12} - \frac{3}{12}\log\frac{3}{12}) = 0.22$$

ID3アルゴリズム

- ID3アルゴリズムのバイアス
  - 分類能力の高いノードをなるべく根の近くにもつ
  - 欲張り法で探索を行い，すべてのリーフが単一クラスの集合になれば終了



この手順に従うと、一般には小さな木ができる

バイアス
複雑な説明よりも単純な説明の方が汎用性が高い

ID3アルゴリズム

- なぜ小さな木の方がよいか
  - オッカムの剃刀:「データに適合する最も単純な仮説を選べ」
  - 複雑な仮説

    → 表現能力が高い

    → データを説明できる木が作れる確率も高い
  - 単純な仮説

    → 表現能力が低い

    → 偶然にデータを説明できる木が作れる確率は著しく低い

    → でも説明できた！

    → 必然!

過学習を避ける

- 決定木学習における過学習の避け方
  - 学習過程で木の成長を止める
    - リーフに所属することができる最小データ数(または割合)を多くする
    - 木の段階の最大数を小さくする
  - 十分に成長させた後に枝刈り
    - Reduced error pruning
      - 学習用データを用いてできるだけ成長した木を作成する
      - 各枝について検証用データを用いて分類能力を測定し、多数決より性能が劣る枝を刈り取る
    - Minimal cost-complexity pruning
      - $R_\alpha(T)$ (誤分類率とリーフ数の重み付き和)が最小となる木を探索

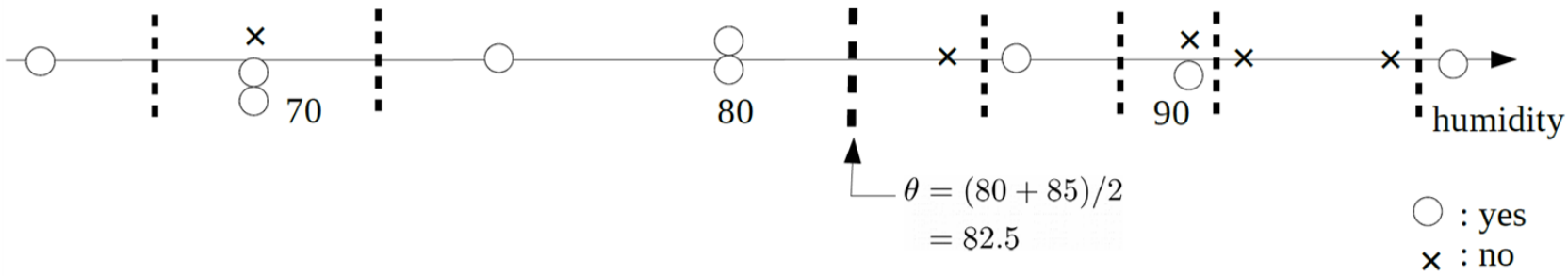
$$R_\alpha(T) = R(T) + \alpha|T|$$

数値特徴に対する決定木

- CART（Classification and Regression Trees）
  - 必ず2つの子ノードを持つ2分木構造
  - 数値特徴はノードとして何度でも出現可能
  - 識別と回帰のいずれにも使える
  - scikit-learnでは、DecisionTreeClassifier, DecisionTreeRegressor として実装されている

数値特徴に対する決定木

- ノードにおけるデータ分割
  - カテゴリ特徴：特徴の値で分割
  - 数値特徴：閾値との比較で分割
- 閾値θの決め方



$$\begin{aligned}\mathrm{Gain}(D, \mathrm{humidity}_{82.5}) &= 0.94 - \frac{7}{14}\mathrm{Entropy}(D, < 82.5) - \frac{7}{14}\mathrm{Entropy}(D, \geq 82.5) \\ &= 0.152\end{aligned}$$

数値特徴に対する決定木

- sklearn.tree.DecisionTreeClassifier の主なパラメータ
  - criterion：情報獲得量の計算法
    - ジニ不純度
    - エントロピー
    - ジニ不純度のほうが最頻クラスの分離に少し偏る
  - max_depth：木の最大の深さ
  - min_samples_split：ノードが分割可能な事例数の最小値
  - ccp_alpha: 枝刈り後の木の複雑さを表すパラメータ

まとめ

- 初期の概念学習
  - 論理式の形式を制限することでバイアスを実現
  - 制限が強すぎてしばしば概念獲得に失敗する
- 決定木
  - 論理式の形式は自由にして、探索でバイアスを実現
  - 学習データの少しの変動で、得られる木がまったく異なることがある
  - 原理的には学習データに対して誤りのない識別器を実現できるので、過学習への対処が必要になる