情報意味論 (4) 決定木と過学習

櫻井彰人
慶應義塾大学理工学部

本日の目標

- **過剰適合** (overfitting) , **過学習** (overlearning)

オッカムの剃刀と決定木: 選好バイアス

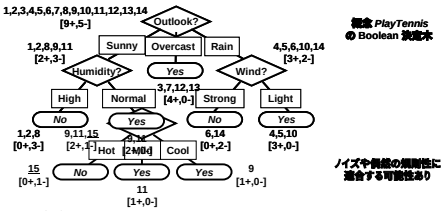
- **選好バイアス** preference biases **と言語バイアス** language biases
  - **選好バイアス**
    - ***学習アルゴリズム*に含まれる** ("**コード化している** encoded")
    - **比較**: **探索のヒューリスティック**
  - **言語バイアス**
    - ***知識 (仮説) の表現*に含まれる** ("**コード化している** encoded")
    - **比較**: **探索空間の制限**
    - ***別名* 制限バイアス**
- **オッカムの剃刀** Occam's Razor: **賛成討論**
  - **短い仮説の方が, 長い仮説に比べ, 個数が少ない**
    - e.g., **ビット列で考えれば, 長さ** n **のものは** $n+1$ **のものに比べ半数**, $n \geq 0$.
    - **短い仮説が, もしデータにぴったり合ったとしたら, 偶然とは考えい難い**
      - **短い仮説はそれぞれの差異が大きい**
    - **長い仮説** (e.g., 200 **個の節を持つ木**, **かつ** $|D| = 100$) **は偶然の可能性高い**
  - **これからわかる正当化** / tradeoff
    - "All other things being equal", **複雑なモデルが同様に汎化することは少なかろう**
    - **のちほどもっと特殊な(柔軟な)モデルが必要になることはないと仮定**

オッカムの剃刀と決定木: 二つの問題

- **オッカムの剃刀** Occam's Razor: **反対討論**
  - **仮説空間** H **がないと** $size(h)$ **が決まらない – 循環的ではないか**?
  - **選好バイアスへの反対**: "**少ない**" **ことは正当化にならない**
- **オッカムの剃刀** Occam's Razor **は** Well Defined **か**?
  - **内部の知識表現** knowledge representation (KR) **によってどの** h **が** "**短い**" **かがきまる- 恣意的**?
  - e.g., **単一テスト** "($Sunny \wedge Normal\text{-}Humidity$) $\vee$ $Overcast$ $\vee$ ($Rain \wedge Light\text{-}Wind$)"
  - **答**: **表現言語を固定**; **十分長いところでは, 長い仮説は, 内部表現によらず, やっぱり長い**
    - **反論**:**答えになっていない。実際には「短い仮説」に関する議論が重要**
- **短い仮説の方が, 小さい仮説空間** H **よりよいのか**?
  - **小さい仮説集合を定義する方法はたくさんある → どれを選ぶにせよ恣意的**
  - **選好バイアスで用いる, 大きさの限界が何であっても, ある基準** S **により** $size(h)$ **をその限界内に制限することができる** (i.e., "S **に合致する木のみ受理する**")
    - e.g., **節の個数が素数であって, 文字** "Z" **で始まる属性を用いている木**
    - **なぜ「小さな木であって, (例えば)** $A_1, A_2, \ldots, A_{11}$ **を順番にテストするもの」ではないのか**?
    - $size(h)$ **に基づいて小さな仮説集合を定義することに, 特別の意味があるのか**?
  - **参考**: Chapter 6, Mitchell's Machine Learning

決定木における過学習: 例

- **既出例**: **帰納した木**



概念 *PlayTennis* **の Boolean 決定木**

ノイズや例題の偶然性に適合する可能性あり

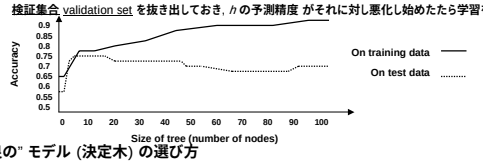
- **訓練事例にノイズがあると**
  - **事例** 15: <*Sunny, Hot, Normal, Strong, ->*
    - **この例は** noisy **である. 正しいラベルは** +
    - **それ以前に作成した木は, これを, 誤分類する**
  - **決定木はどのように更新すべきか** (incremental learning)?
  - **新しい仮説** $h' = T$ **の性能は** $h = T$ **より悪く なると期待される**

帰納学習における過学習

- **定義**
  - **仮説** h **が訓練データ集合** D **を過学習する (～に**overfits **する) というのは, もし他の仮説** h' **で** $error_D(h) < error_D(h')$ **であるが** $error_{test}(h) > error_{test}(h')$ **となるものがあること**
  - **原因**: **訓練事例が少なすぎる (あまりにも少ないデータに基づく決断)**; **ノイズ**; **偶然の一致**
- **過学習に対応するには**?
  - **コンピュータウィルスの感染やプロセスがデッドロックになることへの対策と類似**
  - **予防策**
    - **過学習が発生する前に対応する**
    - ***関連する relevant* 属性**(i.e., **モデルにとって有用そうなもの**)**のみを用いる**
      - ***注意***: **鶏と卵の問題**; **関連性** relevance **を予測する尺度が必要**
  - **回避策**
    - **問題が起こりそうなときに, 脇をすりぬける**
    - **テスト集合を確保しておき, 仮説** h **がその上で悪くなりそうなときに, 学習を停止する**
  - **泳がせ策**
    - **問題は発生するにまかせ, 発生を検出し, その後回復する**
    - **モデルを作ってみて, 過学習に寄与する要素を発見・除去する** (刈る prune)

決定木学習: 過学習の予防と回避

- 過学習にどう立ち向かうか?
  - 予防策
    - *関連する relevant* 属性を選択 (i.e., 決定木では有用)
    - 関連性 relevant の予測方法: 属性 filter または 部分集合選択 wrapper
  - 回避策
    - 検証集合 validation set を抜き出しておき, *h* の予測精度 がそれに対し悪化し始めたたら学習を停止

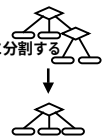


- "最良の" モデル (決定木) の選び方
  - 上述: 性能を測定するにあたって, 訓練データとそれとは別の検証データを用いる
  - 別法: 最小記述長 Minimum Description Length (MDL):
    最小化せよ: $size(h \equiv T) + size(\text{誤分類 } misclassifications\ (h \equiv T))$

決定木学習: 過学習の予防と回避

- 基本的なアプローチが2つある
  - Pre-pruning (回避): *木を作成する途中で木の生長を止める*. 信頼性ある選択をするにたる十分なデータはないと判断されたとき
  - Post-pruning (回復): *木を一杯まで構築し節を削除する*. 削除するのは, 十分な証拠がないとみなされるもの
- 枝刈りすべき部分木を評価する方法
  - Cross-validation: *T* の有用性を評価するために, 予めデータをとりおく (Mitchell 第4章)
  - 統計的検定: 観測された規則性が偶然起こったものとして捨ててよいかどうかをテストする (Mitchell 第5章)
  - 最小記述長 Minimum Description Length (MDL)
    - 仮説 *T* の増加する複雑度は, 単に(説明しようとしているデータの) *例外* を記憶するに必要な複雑度の増加分より大きいか/小さいか?
    - Tradeoff: *モデル* を記述する versus *残余誤差* を記述する

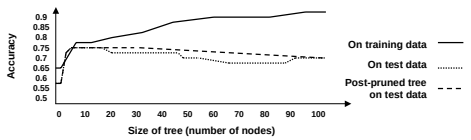
Reduced-Error Pruning



- Post-Pruning, Cross-Validation Approach
- 所与のデータを 訓練データ training set と 検証データ Validation set に分割する
- 関数 *Prune*(*T, node*)
  - 引数 *node* を根節とする部分木を除去
  - 引数 *node* を葉節とする (そこにある事例には多数派のラベルを付与)
- アルゴリズム *Reduced-Error-Pruning* (*D*)
  - *D* を分割する. D_{train} (訓練 training / "growing"), $D_{validation}$ (検証 validation / "pruning")
  - D_{train} に *ID3* を適用して, 完全な木 *T* を作る
  - UNTIL $D_{validation}$ で計測した精度が減少する DO
    FOR *T* 中のそれぞれの内節 *candidate*
    Temp[candidate] ← **Prune (T, candidate)**
    Accuracy[candidate] ← **Test (Temp[candidate], $D_{validation}$)**
    T ← *T* ∈ *Temp* 中で *Accuracy* が最良のもの
  - RETURN (pruneしおえた) *T*

Reduced-Error Pruning の効果

- Reduced-Error Pruning によるテスト誤差の減少



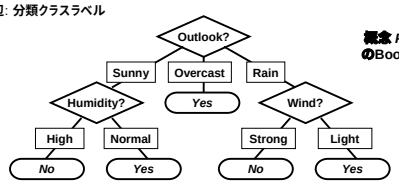
  - 節を刈ることによってテスト誤差が減少する
  - *注*: $D_{validation}$ は D_{train} と D_{test} のどちらとも異なる
- 賛成論 と 批判論
  - 賛成: 最も正確な *T* (*T* の部分木) のうちで最小のものが生成できる
  - 批判: *T* を作るのにわざわざデータ量を減らしている
    - $D_{validation}$ をとりおくだけの余裕があるか?
    - データ量が十分でなければ, 誤差をなおさら大きくする (D_{train} が不十分)

Rule Post-Pruning

- しばしば用いられる方法
  - これもよく知られたoverfitting 対応策
  - *C4.5* でその亜種が用いられた. *C4.5* は *ID3* の派生・後継.
- アルゴリズム *Rule-Post-Pruning* (*D*)
  - *D* から *T* を生成 (*ID3* を使用) – 可能な限り *D* に適合するまで成長させる (過学習も許す)
  - *T* を等価な規則集合に変換 (根節から葉節へ道一つにつき1規則)
  - それぞれの規則を, *独立に*, 条件をどれでも, 推定精度が改善する限り, 除去することにより刈り込む(一般化する)
  - 刈り込んだ規則をソートする
    - 推定精度に従ってソートする
    - 列に並べて, D_{test} に適用する

決定木を規則に変換する

- 規則の構文
  - 左辺: 条件 (属性の等式テスト上の連言標準形 conjunctive formula)
  - 右辺: 分類クラスラベル



概念 *PlayTennis* のBoolean決定木

- 例
  - IF (*Outlook* = *Sunny*) ∧ (*Humidity* = *High*) THEN *PlayTennis* = *No*
  - IF (*Outlook* = *Sunny*) ∧ (*Humidity* = *Normal*) THEN *PlayTennis* = *Yes*
  - …

連続値属性

- **連続値属性を扱う2つの方法**
  - **離散化**
    - **実数値属性を，予め，いくつかの範囲に分ける**
    - e.g., {*high* = *Temp* > 35º C, *med* = 10º C < *Temp* ≤ 35º C, *low* = *Temp* ≤ 10º C}
  - **内節を分けるのに，閾値を用いる**
    - e.g., $A \le a$ によって二つの部分集合 $A \le a$ と $A > a$ ができる
    - **この離散化に際して，情報増分が同様に計算される**
- **情報増分を最大にする分割はどうやって得るか**?
  - FOR **連続値属性** *A* **のそれぞれ**
    事例 $\{x \in D\}$ **を** *x.A* **に従って，分割する**
    FOR **異なったラベルを持つ** *A* **の値の順序対** (l, u) **それぞれ**
    閾値の候補として，中点 mid-point **の情報増分を評価**, i.e., $D_{A \le (l+u)/2}$, $D_{A > (l+u)/2}$
  - **例**

A = *Length*:	10	15	21	28	32	40	50
Class:	-	+	+	-	+	+	-
閾値のチェック: *Length* ≤ 12.5?	≤ 24.5?	≤ 30?	≤ 45?				

多値属性に伴う問題

- **問題**
  - **もしある属性が多値であると，** *Gain*(•) **はそれを選びやすい (なぜ?)**
  - *Date* (2004/11/01**等**) **を属性として用いることを想像してみればわかる!**
- **一つのアプローチ**: *GainRatio* **を** *Gain* **の代わりに使用**

$$Gain(D, A) \equiv -H(D) - \sum_{v \in values(A)} \left[\frac{|D_v|}{|D|} \bullet H(D_v) \right]$$

$$GainRatio(D, A) \equiv \frac{Gain(D, A)}{SplitInformation(D, A)}$$

$$SplitInformation(D, A) \equiv -\sum_{v \in values(A)} \left[\frac{|D_v|}{|D|} \log \frac{|D_v|}{|D|} \right]$$

  - *SplitInformation*: *c* = | *values*(*A*) | **に直接に比例**
  - i.e., **多くの値をもつ属性にハンディを負わせる**
    - e.g., **仮定**: $c_1 = c_{Date} = n$ **そして** $c_2 = 2$
    - *SplitInformation* (A_1) = log(*n*), *SplitInformation* (A_2) = 1
    - **もし** *Gain*(*D*, A_1) = *Gain*(*D*, A_2) **とすると**, *GainRatio* (*D*, A_1) << *GainRatio* (*D*, A_2)
  - **こうして，(分岐数が少ない方への)選択バイアスが** *GainRatio*(•) **を用いて表現される**

コスト付き属性

- **応用分野毎**
  - **医療**: ***体温検査*** **のコストは** 1000**円**; ***血液検査*** 1500**円**; ***生検*** 50000**円**
    - **また検査の侵襲性・無侵襲性も考慮する必要あり**
    - **患者へのリスクも** (e.g.,**羊水検査**)
  - **他のコスト**
    - **サンプリング時間**: e.g., **ロボットのソナー** (**レンジファインダー**, etc.)
    - **人工物**, **生体へのリスク** (**どんな情報を収集するか**)
    - **関連する分野** (e.g., **断層装置**): **非破壊検査**
- **低い期待コストでいかに** consistent **な木を作るか**?
  - **一つのアプローチ**: **情報増分** gain **を** **コスト正規化増分** *Cost-Normalized-Gain* **で置き換える**
  - **正規化関数の例**
    - [Nunez, 1988]:

$$Cost\text{-}Normalized\text{-}Gain(D, A) = \frac{Gain^2(D, A)}{Cost(D, A)}$$

    - [Tan and Schlimmer, 1990]:

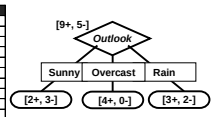
$$Cost\text{-}Normalized\text{-}Gain(D, A) = \frac{2^{Gain(D,A)} - 1}{(Cost(D, A) + 1)^w} \quad w \in [0,1]$$

    但し w **はコストの重要性を定める**

欠測値: 属性値が不明

- **問題**: **属性** *A* **の値がない事例があるとどうなるか**?
  - **しばしば**, **訓練時やテスト時に**, **必ずしも全ての属性値が入手できるとは限らない**
  - **例**: **医療診断**
    - <*Fever* = *true*, *Blood-Pressure* = *normal*, …, *Blood-Test* = *?*, …>
    - **時には値は全く未知であったり**, **また時には優先度が低かったりする** (**非常にコスト高のことも**)
  - **欠測値**: **学習時** versus **分類時**
    - **訓練時**:**ある** $x \in D$ **について** *A* **の値が与えられていないとき** *Gain* (*D*, *A*) **を評価する**
    - **テスト時**: *A* **の値を知らずに**, **新しい事例** *x* **を分類する**
- **解**: *Gain*(*D*, *A*) **の計算の中に推測を入れる**

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis?
1	Sunny	Hot	High	Light	No
2	Sunny	Hot	High	Strong	No
3	Overcast	Hot	High	Light	Yes
4	Rain	Mild	High	Light	Yes
5	Rain	Cool	Normal	Light	Yes
6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
8	Sunny	Mild	???	Light	No
9	Sunny	Cool	Normal	Light	Yes
10	Rain	Mild	Normal	Light	Yes
11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
13	Overcast	Hot	Normal	Light	Yes
14	Rain	Mild	High	Strong	No



欠測値: 対応策

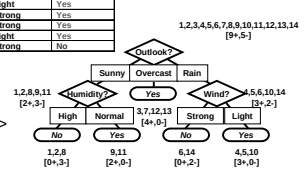
- **訓練事例はとにかく使用する**, **木を(根節から)辿る・作ってくるとき**
  - **考慮すべき属性のどれについても**, **事例中でもし値が知られていないなら**, **それを推測する**
  - **その推測は**, **今いる節に割当てられた事例の知られている値に基づく**
- *x.A* **の最もありそうな値を推測する**
  - **第一案**: **節** *n* **で属性** *A* **をテストするなら**, *n* **を通る事例の** *A* **の値でもっとも多いものを用いる**
  - **第二案** [Mingers, 1989]:**節** *n* **で属性** *A* **をテストするなら**, *n* **を通る事例で** *x* **と同じクラスラベルをもつものの** *A* **の値でもっとも多いものを用いる**
- **推測値を分散させる**
  - **両賭け**: **値の分布に従い**,**推測値を分散させる**
  - *x.A* **の可能な値** v_i **の分布に比例して確率** p_i **を割当てる**[Quinlan, 1993]
    - **木の子孫に**, *x* **の内の** p_i**分を割当てる**
    - **これを用いて** *Gain* (*D*, *A*) or *Cost-Normalized-Gain* (*D*, *A*) **を計算する**
- **どのアプローチにおいても**, **新事例も同様に分類する**

欠測値: 例

- *x.A* **の最もありそうな値を予測する**
  - **第一案**: *Humidity* = *High* or *Normal* (*High*: *Gain* = 0.97, *Normal*: < 0.97)
  - **第二案**: *Humidity* = *High* (*No* **事例はすべて** *High*)

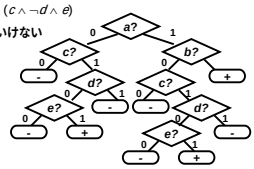
Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis?
1	Sunny	Hot	High	Light	No
2	Sunny	Hot	High	Strong	No
3	Overcast	Hot	High	Light	Yes
4	Rain	Mild	High	Light	Yes
5	Rain	Cool	Normal	Light	Yes
6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
8	Sunny	Mild	???	Light	No
9	Sunny	Cool	Normal	Light	Yes
10	Rain	Mild	Normal	Light	Yes
11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
13	Overcast	Hot	Normal	Light	Yes
14	Rain	Mild	High	Strong	No

- **確率で重み付けする**
  - Guess *0.5 High, 0.5 Normal*
  - *Gain* < 0.97
- **テスト事例**: <*?*, *Hot*, *Normal*, *Strong*>
  - 1/3 *Yes* + 1/3 *Yes* + 1/3 *No* = *Yes*



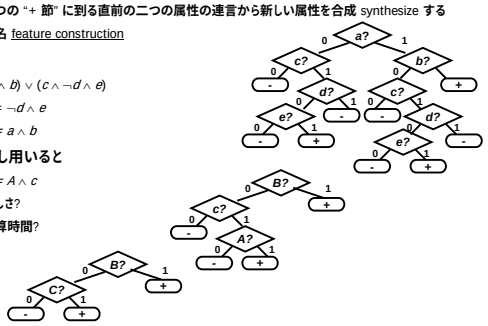
決定木における重複

- **決定木**: **表現上の短所**
  - **決定木は**, **一番簡単な表現というわけではない**
  - **ポイント**: **属性を重複** replication **させる必要がある場合がある**
- **属性重複の例**
  - e.g., Disjunctive Normal Form (DNF): $(a \wedge b) \vee (c \wedge \neg d \wedge e)$
  - **(どちらかの) 連言は部分木として重複させないといけない**
- **部分解**
  - ***新しい属性*** **を作る**
  - **別名** constructive induction (CI)
  - Mitchell **の第10章参照**



少しだけ: 決定木の構成的帰納法

- **新しい属性の合成**
  - **一つの "+ 節" に到る直前の二つの属性の連言から新しい属性を合成** synthesize **する**
  - **別名** feature construction
- **例**
  - $(a \wedge b) \vee (c \wedge \neg d \wedge e)$
  - $A = \neg d \wedge e$
  - $B = a \wedge b$
- **繰り返し用いると**
  - $C = A \wedge c$
  - **正しさ**?
  - **計算時間**?



他の問題、未解決問題

- **含めなかったこと**
  - **目的は何であったか**? **予測器の作成**? **評価基準は**?
  - ***何時停止する***? **良い汎化能力を保証するにはどうするか**?
  - **うまくできたのか**?
    - **正しさ**
    - **複雑さ**
- **偏った決定木** Oblique Decision Tree
  - "**軸平行**" **に限定しない決定木**
- **漸進的な** Incremental **決定木の帰納**
  - **新しい事例が説明できるように**, **既存の決定木を**, **漸進的に** incrementally **更新する**
  - consistency **の問題あり**
  - **最小性の問題**

決定木研究の歴史

- 1960 **年代**
  - 1966: Hunt (**心理学**) **が人間の概念学習をモデル化するため決定木を使用**
- 1970 **年代**
  - 1977: Breiman, Friedman, (**統計学**) Classification And Regression Trees (*CART*) **を開発**
  - 1979: Quinlan **の最初の仕事** proto-*ID3*
- 1980 **年代**
  - 1984: *CART* **ソフトの一般配布** (**今では様々に**)
  - 1986: Quinlan **の** *ID3* **に関する代表的論文**
  - **様々な改良**: **ノイズ対応**, **連続値属性**, **欠測値**, **偏った決定木**, etc.
- 1990 **年以降**
  - 1993: Quinlan **の新しいアルゴリズム** *C4.5*
  - **枝刈り**, **過学習を制御するヒューリスティック** (*C5.0*, etc.); **複数決定木の使用**,,,,

術語

- **オッカムの剃刀** Occam's Razor **と決定木**
  - **選択バイアス** preference biases: **仮説空間の*探索アルゴリズム*に込められている**
  - **言語バイアス** language biases : **仮説記述言語 (仮説空間の定義) に込められている**
- **過学習**
  - **過学習** overfitting: *h* **は** *h'* **に比べ**, **訓練データでは良好であるが**, **テストデータでは不良**
  - **予防** prevention, **回避** avoidance, **回復** recovery **技術**
    - **予防**: **属性部分集合の選択** attribute subset selection
    - **回避**: **停止判定条件**, cross-validation, pre-pruning
    - **発見と回復**: post-pruning (reduced-error, rule)
- **決定木をよりロバストにする他の方法**
  - **不等式でテスト**: **連続値属性を取扱う方法**
  - **情報増分比**: **多値属性への偏向を防ぐための正規化の一つ**
  - Cost-normalized gain: **コストや有用性を加味する方法**
  - **欠測値** missing data: **未知の属性値**
  - **属性構築** feature construction: **構成的帰納** constructive induction**の一つ**; **新属性の生成**
  - **重複** replication: **部分木を繰返す**

まとめ

- **オッカムの剃刀** Occam's Razor **と決定木**
  - **選好バイアス** preference biases versus **言語バイアス** language biases
  - **オッカム アルゴリズムに関する2つの問題**
    - **何故小さい木がを選ぶのか**? (**偶然の一致が少ない**)
    - **オッカムの剃刀は** well-defined **か**? (*yes*, **適当な条件のもと**)
  - MDL **原理とオッカムの剃刀**: **後ほど**
- **過学習**
  - **問題**: **訓練データに近づきすぎ**
    - **過学習の形式的定義**
    - **なぜ起こるのか**
  - **過学習の** 予防 prevention, **回避** avoidance, **回復** recovery **技術**
- **決定木帰納をロバストに行う方法**