ERATO 合宿 2010
December 1, 2010

機械学習への計算論的アプローチ

杉山 麿人

京都大学情報学研究科
日本学術振興会特別研究員 DC2

1/17

自己紹介

- 杉山麿人（SUGIYAMA Mahito）
- 京都大学 情報学研究科 知能情報学専攻
  知能情報基礎論分野（山本章博研究室）
- 博士後期課程 3 年

2/17

自己紹介

- 杉山麿人（SUGIYAMA Mahito）
- 京都大学 情報学研究科 知能情報学専攻
  知能情報基礎論分野（山本章博研究室）
- 博士後期課程 3 年

- 学部では山本研究室
- 修士の 2 年間は，同専攻の生体情報処理分野で，生命科学（生理学・電気生理学・分子生物学など）に従事
  - 書籍「生命科学研究に成功するための統計法ノート」（小林茂夫，杉山麿人，講談社，2009）を出版
- 博士後期課程から，再び山本研究室

2/17

キーワード

- 離散，連続，位相，距離，計算
- Gold 型学習（極限同定），フラクタル，コンパクト集合，ハウスドルフ距離，ハウスドルフ次元，VC 次元
- 2 進表現，グレイコード，離散化，カントール空間，タイプ 2 マシン，計算可能性解析，クラス分類
- 形式概念分析（FCA），離散・連続混在データ，束構造，ガロア対応，閉集合

3/17

興味のあること

- 機械学習や知識発見，データマイニングへの計算論的・離散的なアプローチ
  - 離散と連続を行ったり来たりしながら，連続的な対象（実数値データなど）のための計算可能な手法を提案したい
  - 特に，位相的・代数的アプローチに興味がある

4/17

興味のあること

- 機械学習や知識発見，データマイニングへの計算論的・離散的なアプローチ
  - 離散と連続を行ったり来たりしながら，連続的な対象（実数値データなど）のための計算可能な手法を提案したい
  - 特に，位相的・代数的アプローチに興味がある

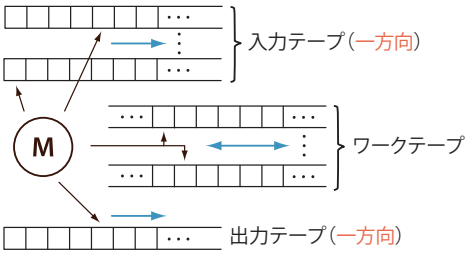
- 連続的な対象が計算可能とは？

4/17

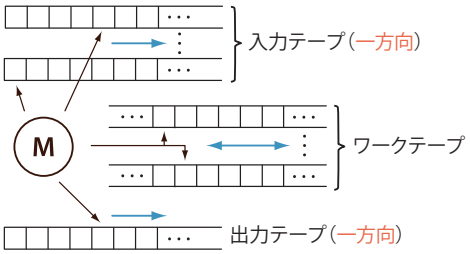
計算のモデル

- 離散の世界での計算モデル：
  チューリングマシン，帰納関数，ラムダ計算
  - 有限時間で入力を読み込み，有限時間で出力して停止
- 連続の世界での計算モデル：
  タイプ 2 マシン，実効的関数，...
  - 無限に入力を読み込み続け，無限に出力し続ける

タイプ 2 マシン

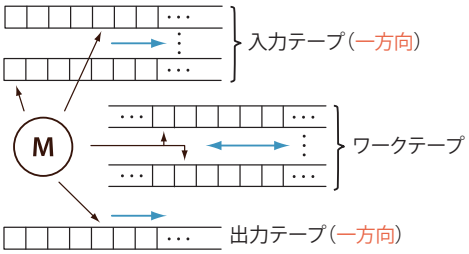


タイプ 2 マシン



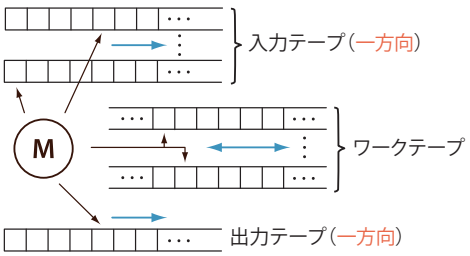
- 計算可能性はコーディングの方法に依存する
  - 例：10 進表現や 2 進表現では $y = 3x$ が計算できない

タイプ 2 マシン



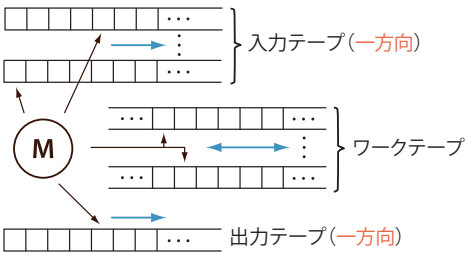
- 0.33333333...

タイプ 2 マシン



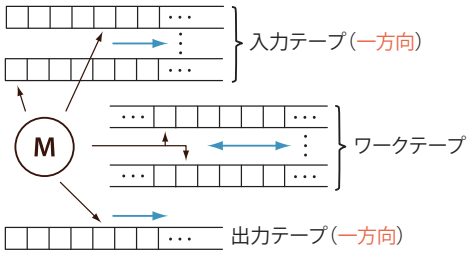
- 0.33333333... → 0.99999999...

タイプ 2 マシン



- 0.33333334... → 0.99999999...

タイプ 2 マシン



- 0.33333334… → 1.00000000…

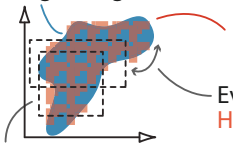
これまで（これから）の研究

1. フラクタルによる図形（ユークリッド空間のコンパクト集合）の計算論的学習 [LLLL2009, ALT2010]
   - 廣渡栄寿先生（北九州大），立木秀樹先生（京都大）との共同研究
2. （グレイ）符号化ダイバージェンスによる 2 つの集合の異なり具合の定量化，それを用いた機械学習 [ACML2010]
3. 離散量と連続量が混在するデータに対する形式概念分析を用いた半教師あり学習 [8othFPAI]

図形の学習の概要

- Constructing a computational learning model for analog data with **discretization**
  1. Gold-style learning model as a base model
  2. Computable Analysis to give theoretical support for discretizing process of analog data
  3. Fractals to represent (and compute) continuous objects

Targets: Figures (non-empty compact sets in $\mathbb{R}^n$)



Hypotheses: Codes (Programs) – representing fractals

Evaluation of hypotheses: Hausdorff metric (generalization errors)

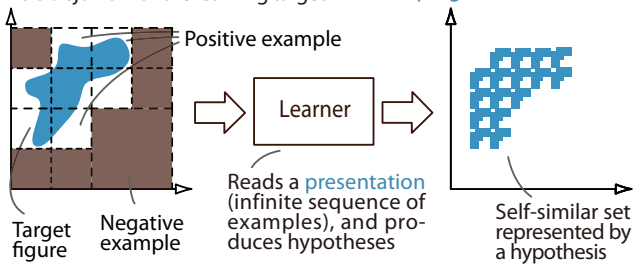
Examples for learning: Rational closed intervals

図形の学習の概要

Positive examples: Rational closed intervals intersecting the learning target

Negative examples: Rational closed intervals disjoint with the learning target

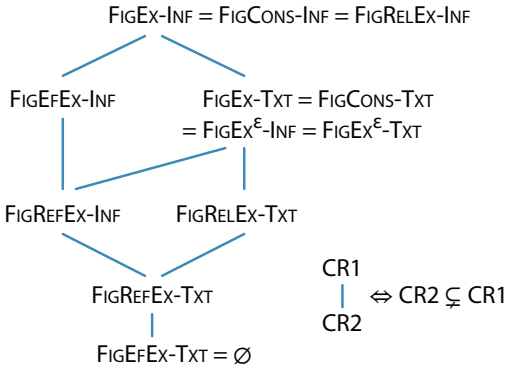
Hypotheses: Codes that represent self-similar sets (self-similar programs)



主な結果

1. We formulated learning of figures with self-similar sets (fractals) using the Gold-style learning model
   - Collage Theorem gives justification for self-similar sets
2. We analyzed the hierarchy of learnabilities (next slide)
3. We revealed the mathematical connection between Fractal Geometry and Computational Learning
   - The complexity of learning (sample size) is measured by using the Hausdorff dimension and the VC dimension
     - The Hausdorff dimension and the VC dimension are key concepts of Fractal Geometry and the Valiant-style learning model, respectively

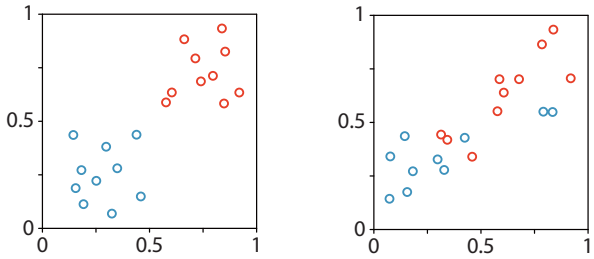
学習基準間の階層



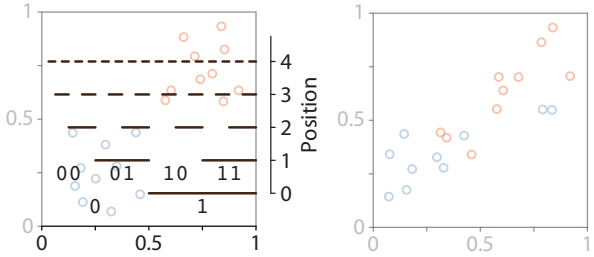
符号化ダイバージェンスの概要

- ***Main results***:
  1. We propose the coding divergence, a novel measure of the similarity between two sets of continuous data
     - Measure the complexity of separating the two sets
  2. We constructed the lazy learner, and showed the competitive performance in classification by experiments
- ***Key processes***:
  1. Embed continuous data in the Euclidean space $\mathbb{R}^d$ into the Cantor space Σ^ω topologically (discretization)
  2. Learn the simplest model (open set) in Σ^ω
  3. Count the length of the code encoding the model

符号化ダイバージェンスの例

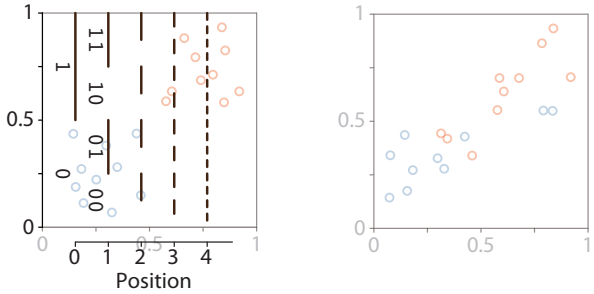


符号化ダイバージェンスの例



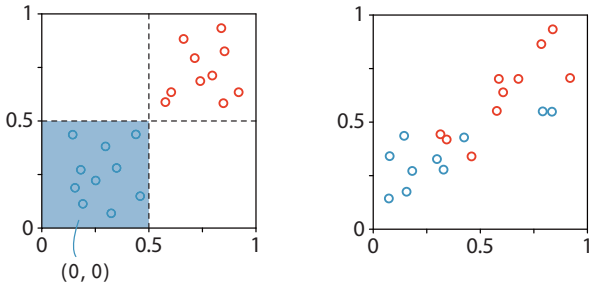
Binary-coding of real numbers in [0, 1]

符号化ダイバージェンスの例

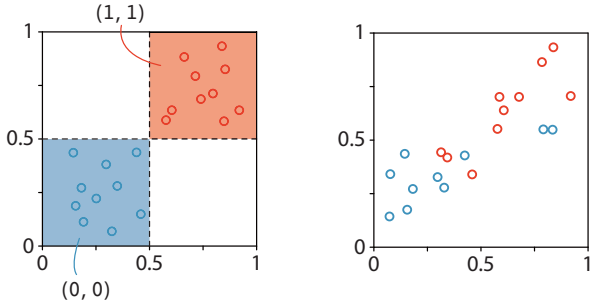


Binary-coding of real numbers in [0, 1]

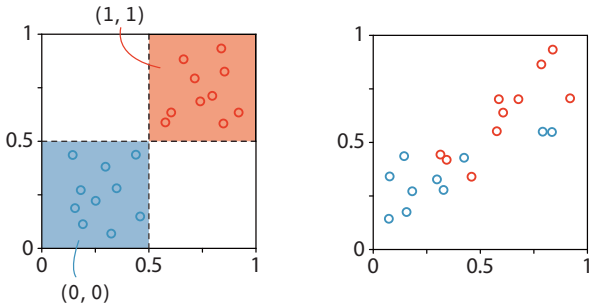
符号化ダイバージェンスの例



符号化ダイバージェンスの例



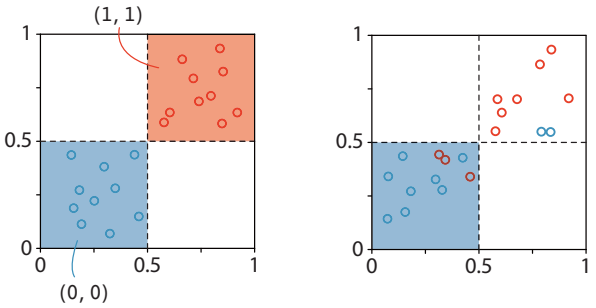
符号化ダイバージェンスの例



The coding divergence:
2/10 + 2/10 = 0.4

13/17

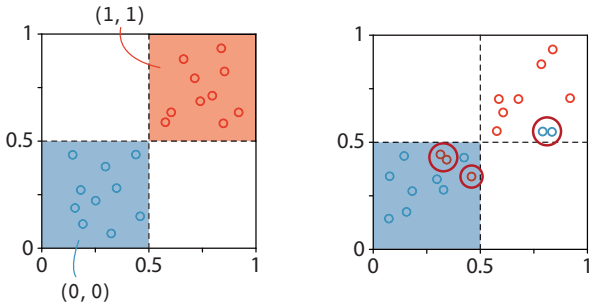
符号化ダイバージェンスの例



The coding divergence:
2/10 + 2/10 = 0.4

13/17

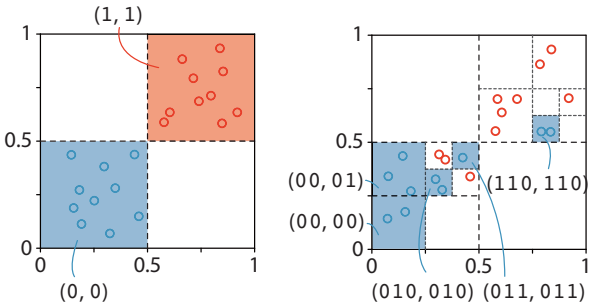
符号化ダイバージェンスの例



The coding divergence:
2/10 + 2/10 = 0.4

13/17

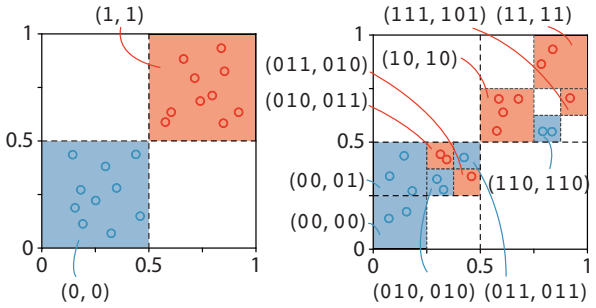
符号化ダイバージェンスの例



The coding divergence:
2/10 + 2/10 = 0.4

13/17

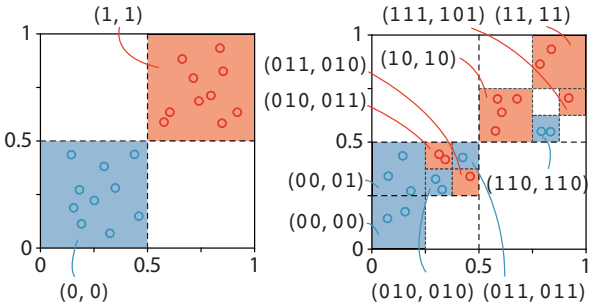
符号化ダイバージェンスの例



The coding divergence:
2/10 + 2/10 = 0.4

13/17

符号化ダイバージェンスの例



The coding divergence:
2/10 + 2/10 = 0.4

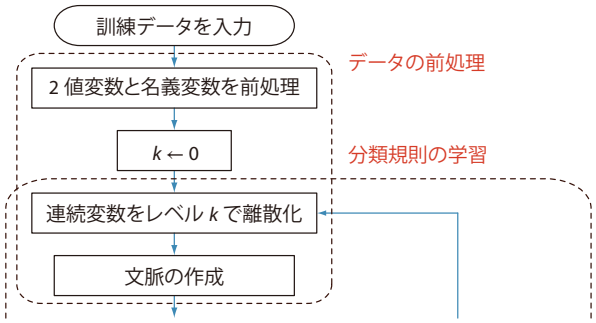
The coding divergence:
26/10 + 26/10 = 5.2

13/17

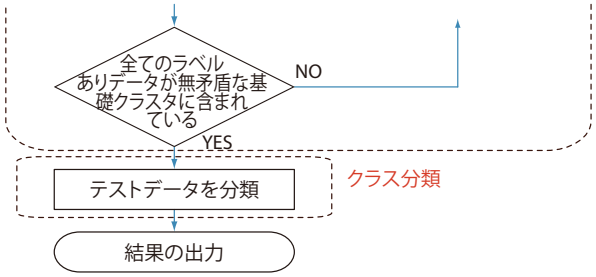
概要

- 離散量と連続量をともに含む混在データに対する新規の半教師あり学習手法 SELF（SEmi-supervised Learning via FCA）を提案する
  - 形式概念分析（FCA）を用いて，概念（基礎クラスタ）からなる空間を構築
  - ラベル情報を用いて分類規則を学習する
- **主な成果**
  - 混在データに対して直接適用可能な，初めての半教師あり学習手法
    - 混在データを扱える機械学習手法はあまりない
  - 不完全なデータセットをそのまま扱うことができる
    - 欠損値・ラベルの欠損・連続量が持つ誤差

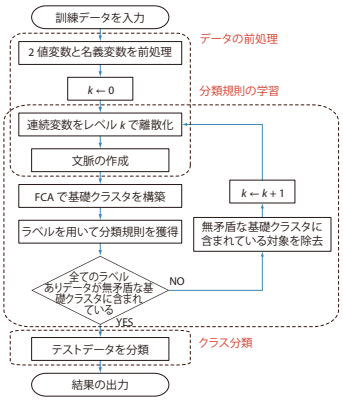
SELF の概要



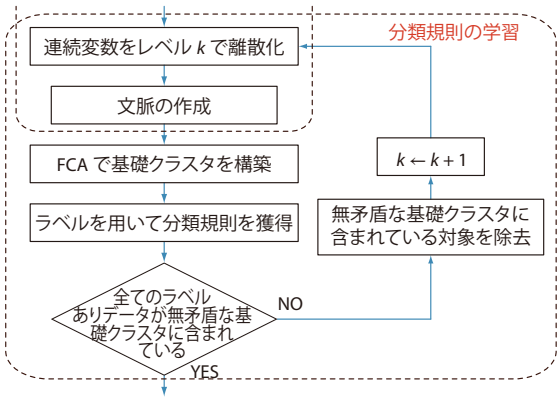
SELF の概要



SELF の概要



SELF の概要



SELF による学習の例

- 以下のデータセットからの学習を考える（⊥ は欠損値）

	属性 1	属性 2	属性 3	ラベル
1	T	C	0.28	1
2	F	A	0.54	1
3	T	B	⊥	⊥
4	F	A	0.79	2
5	T	C	0.81	⊥

SELF による学習の例

- 以下のデータセットからの学習を考える（⊥ は欠損値）

	属性 1	属性 2	属性 3	ラベル
1	**T**	C	0.28	1
2	**F**	A	0.54	1
3	**T**	B	⊥	⊥
4	**F**	A	0.79	2
5	**T**	C	0.81	⊥

- まずデータ前処理で文脈を作成する

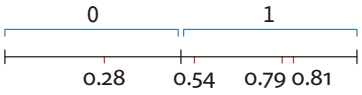
	1.**T**	2.A	2.B	2.C
1	×			×
2		×		
3	×		×	
4		×		
5	×			×

SELF による学習の例

- 以下のデータセットからの学習を考える（⊥ は欠損値）

	属性 1	属性 2	属性 3	ラベル
1	**T**	C	0.28	1
2	**F**	A	0.54	1
3	**T**	B	⊥	⊥
4	**F**	A	0.79	2
5	**T**	C	0.81	⊥

- 連続変数（属性 3）は実数の 2 進表現に基づき離散化する



SELF による学習の例

- 以下のデータセットからの学習を考える（⊥ は欠損値）

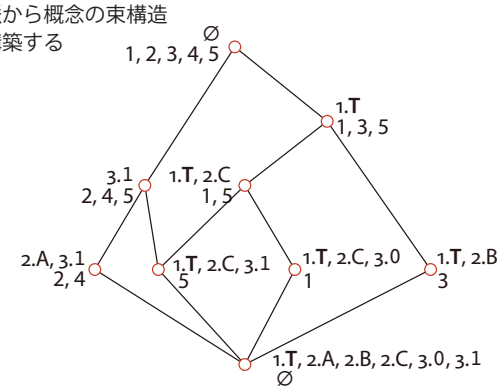
	属性 1	属性 2	属性 3	ラベル
1	**T**	C	0.28	1
2	**F**	A	0.54	1
3	**T**	B	⊥	⊥
4	**F**	A	0.79	2
5	**T**	C	0.81	⊥

- まずデータ前処理で文脈を作成する

	1.**T**	2.A	2.B	2.C	3.0	3.1
1	×			×	×	
2		×				×
3	×		×			
4		×				×
5	×			×		×

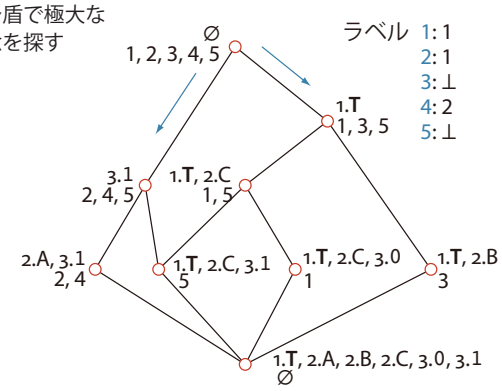
SELF による学習の例

- 文脈から概念の束構造を構築する



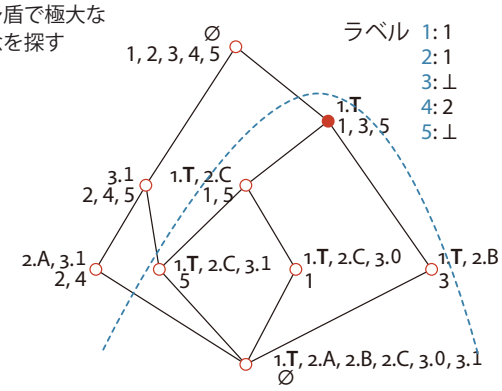
SELF による学習の例

- 無矛盾で極大な概念を探す



SELF による学習の例

- 無矛盾で極大な概念を探す



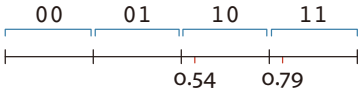
SELF による学習の例

- 残ったデータから学習を進める

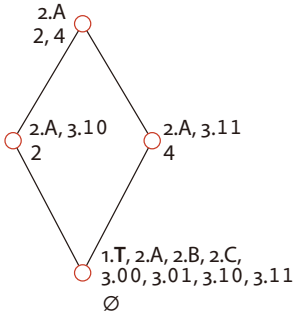
	属性 1	属性 2	属性 3	ラベル
2	**F**	A	0.54	1
4	**F**	A	0.79	2

- 離散化を精密にすることで，以下の文脈を作成する

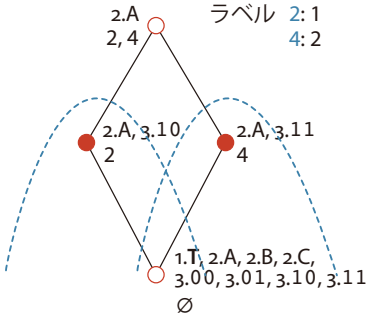
	1.**T**	2.A	2.B	2.C	3.00	3.01	3.10	3.11
2		×					×	
4		×						×



SELF による学習の例



SELF による学習の例



SELF による学習の例

- 獲得される分類規則： $\mathbb{R} = \{\mathbb{R}_1, \mathbb{R}_2\}$
  $\mathbb{R}_1 = \{(\{1.\mathbf{T}\}, 1)\}$
  $\mathbb{R}_2 = \{(\{2.A, 3.10\}, 1), (\{2.A, 3.11\}, 2)\}$
  - 各離散化レベルでの規則の集合が得られる
  - 各 $\mathbb{R}_i$ は，組（極大な概念の属性，分類されるクラス）からなる集合
- 未知データの分類の例
  - データ (**T**, B, 0.45) は，最初の変数が **T** なのでクラス 1
  - データ (**F**, A, 0.64) は，2 つ目の変数が 1 で 3 つ目が 0.5 ~ 0.75 に入っているのでクラス 2

今後の計画

1. フラクタルを用いた図形の学習
   - 形式概念分析の枠組みで再構築
2. 符号化ダイバージェンス
   - クラスタリング
   - オンラインでの異常値検出
   - ノイズデータの扱いや，VC 次元との理論的関係
3. 混在データからの半教師あり学習
   - 理論的解析
   - 特徴選択との関連