RITSUMEIKAN

機械学習 第６回 回帰

立命館大学 情報理工学部

福森 隆寛

Beyond Borders

講義スケジュール

■ 担当教員１：福森（第1回～第15回）

1	機械学習とは、機械学習の分類
2	機械学習の基本的な手順
3	識別（１）
4	識別（２）
5	識別（３）
6	**回帰**
7	サポートベクトルマシン
8	ニューラルネットワーク
9	深層学習
10	アンサンブル学習
11	モデル推定
12	パターンマイニング
13	系列データの識別
14	半教師あり学習
15	強化学習

■ 担当教員２：叶昕辰先生（第16回の講義を担当）

今回の講義内容

- 取り扱う問題の定義
- 線形回帰　最も単純な入力も出力もスカラーである場合の 回帰問題を考える
- 回帰モデルの評価　回帰式が未知データに対して正しく出力値を予測 するかを評価
- せいそくか
正則化
- バイアスと分散のトレードオフ
- かいきぎ
回帰木　回帰木のリーフの値を線形回帰式とした木
- 演習問題

取り扱う問題の定義：教師あり・回帰

- **数値**データからなる特徴ベクトルを入力して、**数値**を出力する関数を作る

※ 教師あり学習の回帰問題での学習データは、以下のペアで構成される

入力データの特徴ベクトル（数値データ） ← $\{\boldsymbol{x}_i, y_i\}, \quad i = 1,2,\ldots,N$ → 学習データの総数

数値形式の正解情報→「ターゲット」と呼ぶ

機械学習

教師あり学習

中間的学習

教師なし学習

識別

回帰

数値特徴

- CPU＝5.0
- Memory＝64
- Disk＝4

性能＝360.5

取り扱う問題の定義 ： 教師あり・回帰

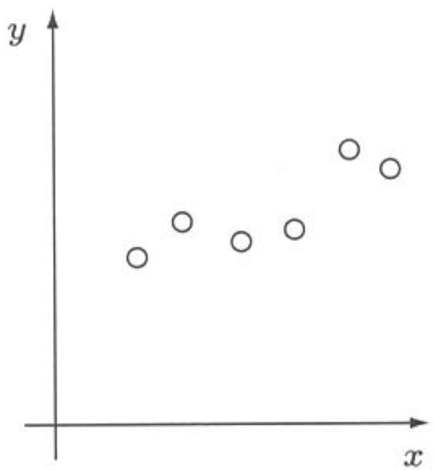
- 識別と回帰の境界は、それほど明確(めいかく)ではない
  - 識別 ： 数値特徴を入力として**クラス**を出力
  - 回帰 ： 数値特徴を入力として**数値**を出力

- クラスによって異なる値をとるクラス変数を導入(どうにゅう)し
  入力からクラス変数の値を予測する問題を考えると
  識別問題を回帰問題として考えることもできる

線形回帰　輸入输出都是标量

- 最も単純な入力も出力もスカラーである場合の回帰問題を考える
  - 学習データから入力xを出力yに写像する関数$\hat{c}(x)$を推定

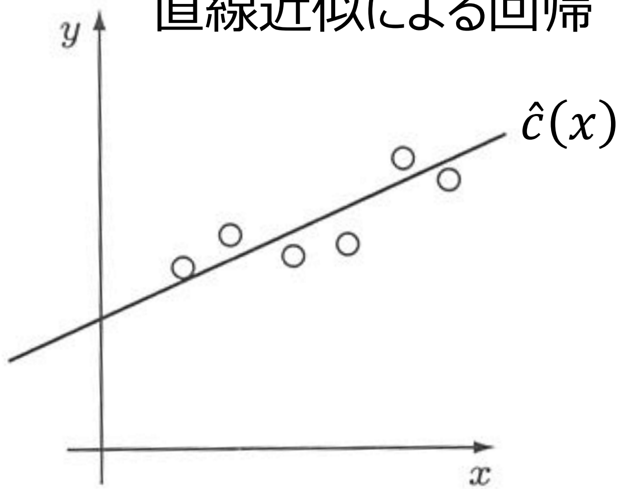
学習データ



入力xが大きくなると
出力yも大きい値になる
傾向がみられる

この傾向を直線で表して
入力xと出力yを関係づける

直線近似による回帰



最小二乗法と同様の方法で
なるべく誤差の少ない直線を求める

線形回帰

- 最小二乗法から回帰式を求める
  - 回帰式を $\hat{c}(x) = w_1 x + w_0$ とする
  - 誤差の二乗和は

$$E(\boldsymbol{w}) = \sum_{i=1}^{N} \{y_i - \hat{c}(x_i)\}^2 = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})$$

    - $\boldsymbol{X}$：1列目の全要素が1、2列目i行の要素がx_iのパターン行列
    - $\boldsymbol{w}$：重みベクトル ※ $\boldsymbol{w} = (w_0, w_1)^T$
  - $\boldsymbol{w}$で微分したものを0とすると、線形回帰式の重みは下式で計算できる

$$\boxed{\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}}$$

  - 入力$\boldsymbol{x}$がd次元の場合も、同様の方法で計算できる

回帰モデルの評価

- 回帰式が未知データに対して正しく出力値を予測するかを評価

- 評価指標
  - R ■ 相関係数：正解と予測が、どの程度似（に）ているのか
  - R^2 ■ 決定係数
    - 「正解との離（はな）れ具合」と「平均との離れ具合」の比を1から引く
    - $\tilde{y}$： y_iの平均値

予測

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}\{y_i - \hat{c}(x_i)\}^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{y})^2}$$

式変形（へんけい）により相関係数の二乗と一致するのでR^2と表記する

演習問題6-1（10分間）

- 右表のような身長と体重のデータが与えられた
- 身長xから体重$\hat{c}(x)$を予測する線形回帰式が
  $$\hat{c}(x) = 0.625x - 48.604$$
  であるときの決定係数と相関係数を計算せよ

身長と体重データ

番号	身長 [cm]	体重 [kg]
1	147.9	41.7
2	163.5	60.2
3	159.8	47.0
4	155.1	53.2
5	163.3	48.3
6	158.7	55.2
7	172.0	58.5
8	161.2	49.0
9	153.9	46.7
10	161.6	52.5

演習問題6-1（10分間）解答例

番号	身長 x_i	体重 y_i	$\hat{c}(x)$	$\left(y_i - \hat{c}(x_i)\right)^2$	$(y_i - \tilde{y})^2$
1	147.9	41.7	43.8	4.6	90.8
2	163.5	60.2	53.6	43.8	80.5
3	159.8	47.0	51.3	18.2	17.9
4	155.1	53.2	48.3	23.7	3.9
5	163.3	48.3	53.5	26.6	8.6
6	158.7	55.2	50.6	21.3	15.8
7	172.0	58.5	58.9	0.2	52.9
8	161.2	49.0	52.1	9.9	5.0
9	153.9	46.7	47.6	0.8	20.5
10	161.6	52.5	52.4	0.0	1.6

平均体重 $\tilde{y} \cong 51.2$　　合計：149.0　合計：297.4

決定係数

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}\{y_i - \hat{c}(x_i)\}^2}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{y})^2} = 1 - \frac{149.0}{297.4} \cong \mathbf{0.5}$$

相関係数

$$R = \sqrt{R^2} = \sqrt{0.5} \cong \mathbf{0.706}$$

正則化

对于泛化能力强的线性回归方程来说，输入变化小，输出变化也小；
如果权重过大，就会导致输入变化小但输出变化大
所以要让尽可能多的系数为零，并最小化非零系数
这时候就需要正则化

□ 望ましい線形回帰式

- 汎化能力という点では、入力が<u>**少し**</u>変化したときに、出力も<u>**少し**</u>変化する回帰式が良い
  - 重みが大きいと、入力が<u>**少し**</u>変化するだけで出力が<u>**大きく**</u>変化
  - そのような回帰式は、たまたま学習データの近くを通っても、未知データに対する出力は信用(しんよう)できない
- 線形回帰の重みは、<u>値が0となる次元を多くすれば良い</u>
  - 回帰式の係数wに関して、「大きな値の重みが、なるべく少なくなる」あるいは「0となる重みが多くなる」ような方法が必要
- このような工夫(くふう)が**正則化** 在误差函数中加入正则化项
  - 誤差関数の式に正則化項を追加(ついか)する

正則化：Ridge回帰

Ridge回帰

- パラメータ$\boldsymbol{w}$の二乗を正則化項とする
- パラメータの値が小さくなるように正則化させる

$$E(\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) + \boxed{\underbrace{\lambda\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}}_{\text{正則化項}}}$$

λ：正則化項の重み（重みが大きければ、性能よりも正則化の結果を重視）

权重越大越重视正则化

- 最小二乗法でパラメータを求めたときと同様に、$\boldsymbol{w}$で微分した値が0となる$\boldsymbol{w}$の値を求めると…

$$\boxed{\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} + \lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}}$$

※$\boldsymbol{I}$：単位（たんい）行列

正則化：Lasso回帰

- **Lasso回帰**
  - パラメータ$\boldsymbol{w}$の絶対値を正則化項とする
  - 値を0とするパラメータが多くなるように正則化される

$$E(\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) + \boxed{\lambda \sum_{j=1}^{d} |w_j|}$$

权重越大为零的系数越多

λ：正則化項の重み（大きければ、値を0とする重みが多くなる）

w_0 ：回帰式の切片は汎化能力に影響なし（通常は正則化の対象としない）

せっぺん　えいきょう

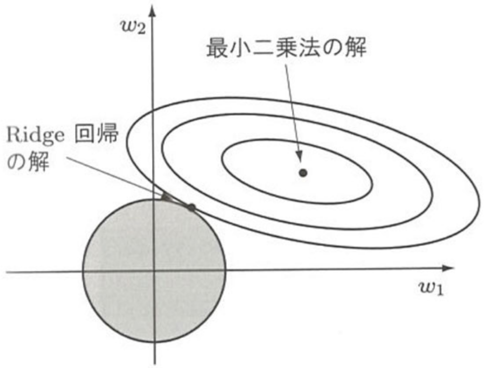
不影响泛化能力，一般不作为正則化对象

  - Lasso回帰の解は、解析的に求められない
    - 原点で微分不可能な絶対値を含むため
    - 正則化項の上限を微分可能な2次関数で押さえ、その関数のパラメータを誤差が小さくなるように逐次更新する方法が提案

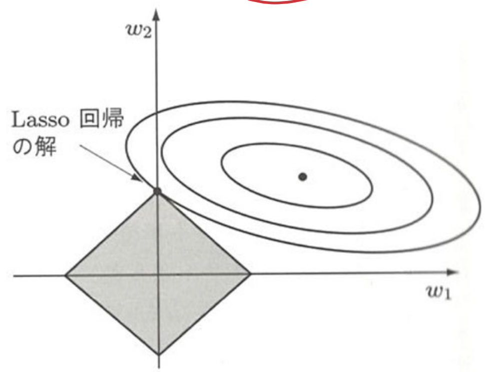
じょうげん　お　ちくじ　ていあん

正則化：正則化の振る舞い

- **Ridge回帰** 系数被限制在一个超球中
  - パラメータの存在する範囲を円（d次元では超球）の中に限定して、それぞれの重みが大きな値をとれないようにする
    - 重み：誤差関数の等位線との接点（＝円周上の点）
- **Lasso回帰** 限定系数和一定
  - パラメータの和が一定という条件なので、それぞれの軸で角をもつ領域に値が制限
    - 角で誤差関数の等位線と接する（多くのパラメータが0になる）



Ridge回帰における
正則化



Lasso回帰における
正則化

バイアスと分散のトレードオフ

- 回帰式を高次方程式に置き換えて適用（てきよう）できる
  - 特徴ベクトル$\boldsymbol{x}$に対して、基底（きてい）関数ベクトル$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})$を考える

$$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = \left(\phi_1(\boldsymbol{x}), \dots, \phi_b(\boldsymbol{x})\right)^T$$

    - 例：1次元ベクトルxに対して $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = \left(1, x, x^2, \dots, x^b\right)^T$となる

  - 以下のように回帰式を定義すれば、係数が線形という条件のもとで最小二乗法が適用可能

$$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=0}^{b} w_j\, \phi_j(\boldsymbol{x})$$

- 複雑な関数を用いることで、真のモデルに近い形を表現できるのか？

バイアスと分散のトレードオフ

- バイアスと分散はトレードオフの関係 trade off
  - bias バイアス：真のモデルとの距離　与真实模型的距离
  - 分散：学習結果の散らばり具合　学习结果的分散情况

方差越小，当输入变化时输出变化越小

- 単純なモデル → バイアス：大、分散：小
  - 個別(こべつ)のデータに対する誤差が大きくなりやすいが、学習データが少し変動しても結果として得られるパラメータは大きく変動(へんどう)しない
- 複雑なモデル → バイアス：小、分散：大
  - 個別のデータに対する誤差を小さくしやすいが、学習データの値が少し変動すると、結果が大きく異なることがある

バイアスと分散のトレードオフ

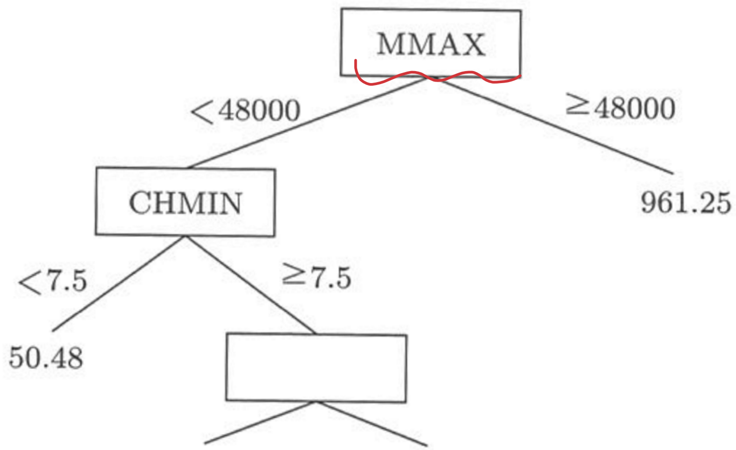
- 回帰問題におけるバイアスと分散
  - 線形回帰式の場合
    - 求まった超平面は、学習データ内の点をほとんど通らないので、バイアスが大きい
  - 「学習データの個数－１」次の高次回帰式の場合
    - 求まった回帰式は、全学習データを通る（学習データと一致する関数が求まる）ので、バイアスが小さい
    - データが少し動いただけで、この高次式は大きく変動するので、結果の分散は大きい
- 機械学習では、バイアスー分散のトレードオフを常に意識（いしき）しなければならない 正则化能够有效降低方差
  - 正則化：緩（ゆる）いバイアスで分散を減（へ）らすのに有効

回帰木

- **回帰木** 回归树：节点为特征，叶子为输出值
  - 識別における決定木の考え方を回帰問題に適用する方法

- 決定木による識別問題の学習
  - 特徴の値によって学習データを同じクラスの集合になるように分割する

- 回帰木による回帰問題の学習
  - 出力値の近いデータが集まるように、特徴の値によって学習データを分割
  - 特徴をノードとし、出力値をリーフとする回帰木が得られる



回帰木の例

回帰木：CART

- **CART (classification and regression tree)**
  - 木の構造を二分木(にぶんぎ)に限定した決定木 限定为二叉树
  - 分類基準：ジニ不純度(ふじゅんど)（Gini impurity）分类标准

- CARTによる**識別問題** 选择G变化值最大的分类
  - 分類前後の集合のジニ不純度Gを求めて、改善度ΔGが最大のものをノードに選ぶことを再帰的(さいきてき)に繰り返す

1 2

$$\boxed{G = 1 - \sum_{j=1}^{c} N(j)^2}$$

1

$$\Delta G(D) = G(D) - P_L \cdot G(D_L) - P_R \cdot G(D_R)$$

2

D：あるノードに属するデータの全体
$N(j)$：データ中のクラスjの割合

D_L：左の部分木（D_Rは右の部分木）
P_L：D_Lに属するデータの割合（P_RはD_Rに属する）

回帰木：CART

CARTによる回帰問題 选择SS减少量最大的分类

- 分類基準として、データの散らばりSSの減り方ΔSSが最大になるものを選択 实际上就是寻找方差最小的划分

$$\boxed{SS(D) = \sum_{y_{i \in D}} (y_i - \tilde{y})^2}$$

$$\Delta SS(D) = SS(D) - P_L \cdot SS(D_L) - P_R \cdot SS(D_R)$$

$\tilde{y}$： Dに属するデータの平均値
D：あるノードに属するデータの全体
D_L：左の部分木（D_Rは右の部分木）
P_L：D_Lに属するデータの割合（P_RはD_Rに属する）

$SS(D)$では、データDの分散を求めているので、
この基準は分割後の分散が最小となるような分割を求めている

回帰木：モデル木

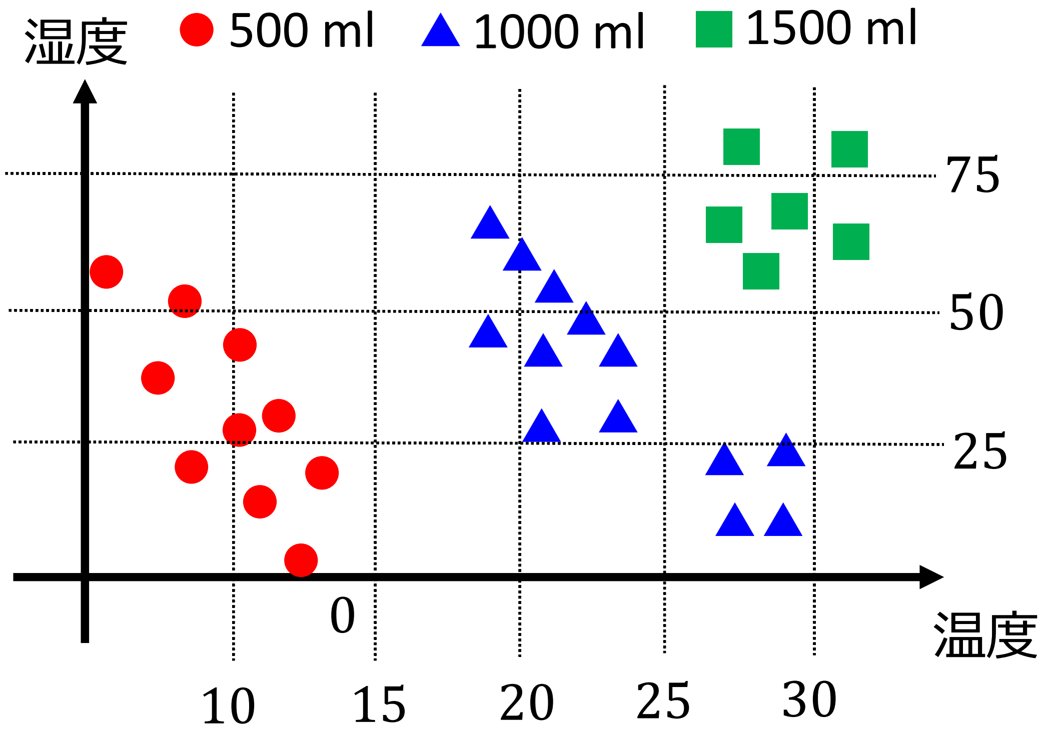
1. 选取特征划分相似数据
2. 对叶子中数据计算线性回归方程

□ モデル木　叶子节点为线性回归方程

- 回帰木のリーフの値を線形回帰式とした木
  - 回帰木と線形回帰の双方(そうほう)の利点(りてん)を活(い)かした方法
- モデル木の生成手順
  1. 出力値が近い区間を切り出せる特徴を選んでデータ分割
  2. 分割後のデータに対して線形回帰式を計算
- 特定の要因(よういん)によって振る舞いが異なるデータを分割し、それぞれに対応する規則性を見つけ、かつ、その分割の要因を木構造によって説明できる
  - 例えば、季節(きせつ)によって出力に影響を及(およ)ぼす要因が異なるデータなどに有効

演習問題6-2（10分間）

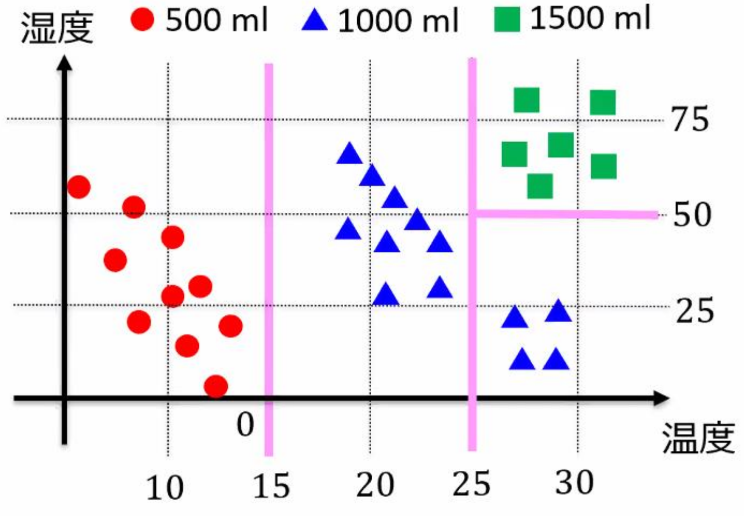
- 以下の学習データが与えられたとき、温度と湿度から1日あたりのビールの消費量を予測する回帰木を作成せよ



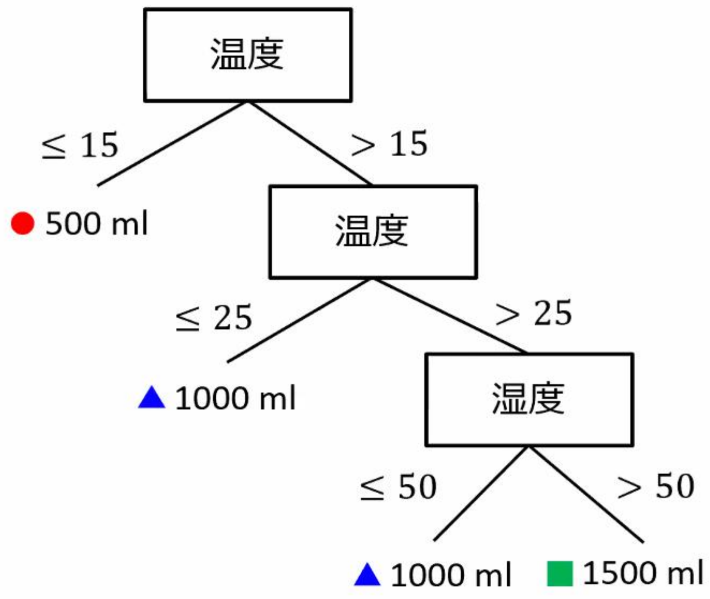
温度・湿度・1日あたりのビールの消費量の関係

演習問題6-2（10分間）解答例

出力値の近いデータが集まるように、
特徴の値によって学習データを分割するのがポイント



温度・湿度・1日あたりのビールの消費量の関係



回帰木には3つのノードがあります：
1.温度が15より大きいかどうかに応じて分割します；
2．温度が25を超えるかどうかに応じて分割します；
3.湿度が50より大きいかどうかに応じて分割します。