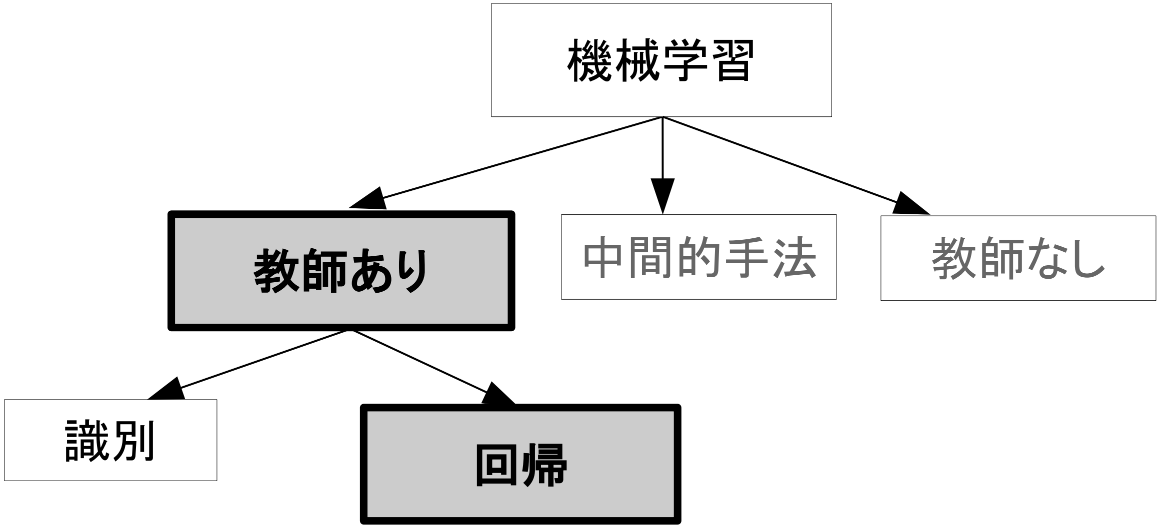
6. 回帰

- 問題設定
  - 教師あり学習
  - 数値入力 → 数値出力



主記憶 =256
キャッシュ =64
チャネル =16

性能 = 360.5

6.1 数値特徴に対する「教師あり・回帰」問題の定義

- 回帰のデータ
  - 特徴ベクトル $\boldsymbol{x}$ と正解情報 y のペア

$$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}, \quad i = 1 \ldots N$$

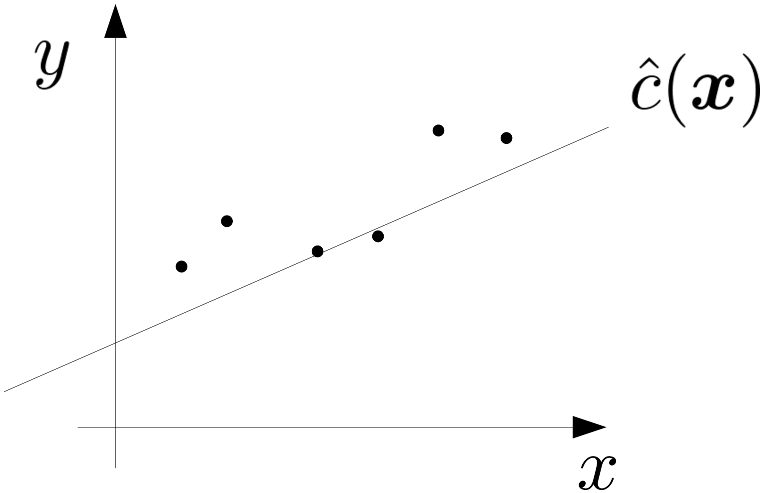
  - $\boldsymbol{x}$ は次元数 d の固定長ベクトル、 y は数値

$$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \ldots, x_{id})^T$$

  - 関数 $y = f(\boldsymbol{x})$ を求める問題と見なせる
    - 未知データに対して、予測精度の高い関数を求めたい
    - どの特徴が出力値に対して大きな影響を及ぼしているかを知りたい

6.2 線形回帰

- 目標：なるべく誤差の少ない直線を求める



- 問題の定義
  - 入力 $\boldsymbol{x}$ から出力 y を求める回帰式を 1 次式に限定
  - 学習データから係数 $\boldsymbol{w}$ を求める

$$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{d} w_i x_i$$

$\boldsymbol{x}$ が 1 次元の場合
$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = w_1 x + w_0$

6.2 線形回帰

- 最小二乗法による係数の推定
  - 推定の基準：誤差の二乗和 $E(\boldsymbol{w})$ を最小化

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

$\boldsymbol{X}$：全学習データを並べた行列（パターン行列）

$\boldsymbol{w}$：係数の列ベクトル表現

  - $\boldsymbol{w}$ で偏微分した値が 0 となるのは

$$\boldsymbol{X}^T (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) = 0$$
$$\Leftrightarrow \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}$$
$$\Leftrightarrow \boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$\boldsymbol{w}$ が解析的に求まる

6.2 線形回帰

- 線形回帰の精度向上（p.93）

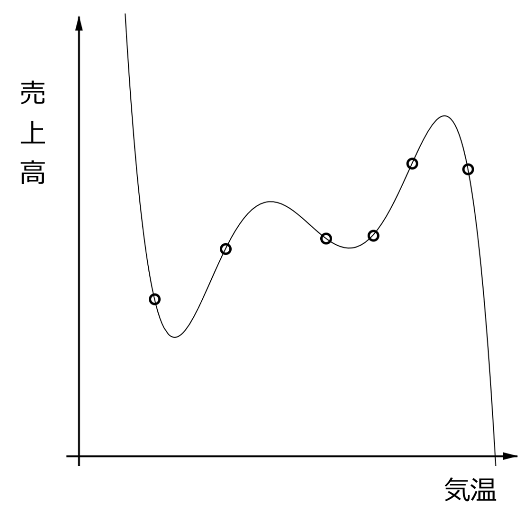
例　$\phi(x) = (1, x, x^2, \ldots, x^b)$

  - 基底関数 $\phi(x) = (\phi_0(x), \ldots, \phi_b(x))$ を考える

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

  - 係数が線形であれば、最小二乗法が適用可能

- 問題点
  - 汎化性能の低下



6.3　回帰モデルの評価

- 回帰モデルの評価法
  - 誤差の二乗和の平均
    - 手法間の評価に有効
  - 相関係数
    - 出力と正解とがどの程度似ているか
  - 決定係数
    - 正解との離れ具合の二乗と分散との比を 1 から引いたもの
    - 相関係数の 2 乗と等しい

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

$\tilde{y}$：y の平均

6.4　正則化

- 正則化の考え方
  - 正則化項の導入

    → 複雑なパラメータ $\boldsymbol{w}$ （過学習）の回避
    - L1 ノルム $|\boldsymbol{w}|$ ： 0 となるパラメータが多くなる　Lasso
    - L2 ノルム $\|\boldsymbol{w}\|^2$ ： パラメータを 0 に近づける　Ridge
- リッジ回帰
  - 誤差の二乗和に L2 ノルム正則化項を加える

$$E(\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) + \underline{\alpha\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w}}$$

α ：誤差の二乗和と正則化項とのバランス

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

$\boldsymbol{w}$ が解析的に求まる

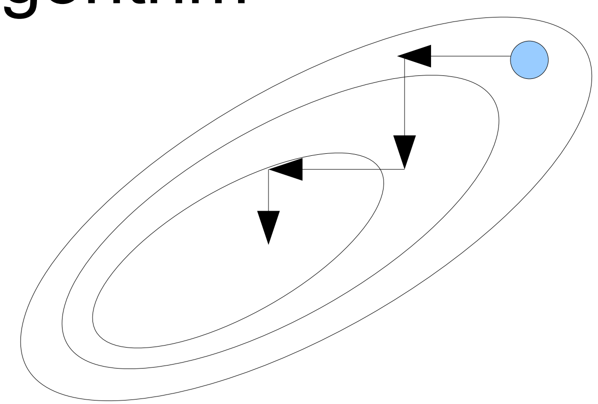
6.4 正則化

- ラッソ回帰
  - 誤差の二乗和に L1 ノルム正則化項を加える

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

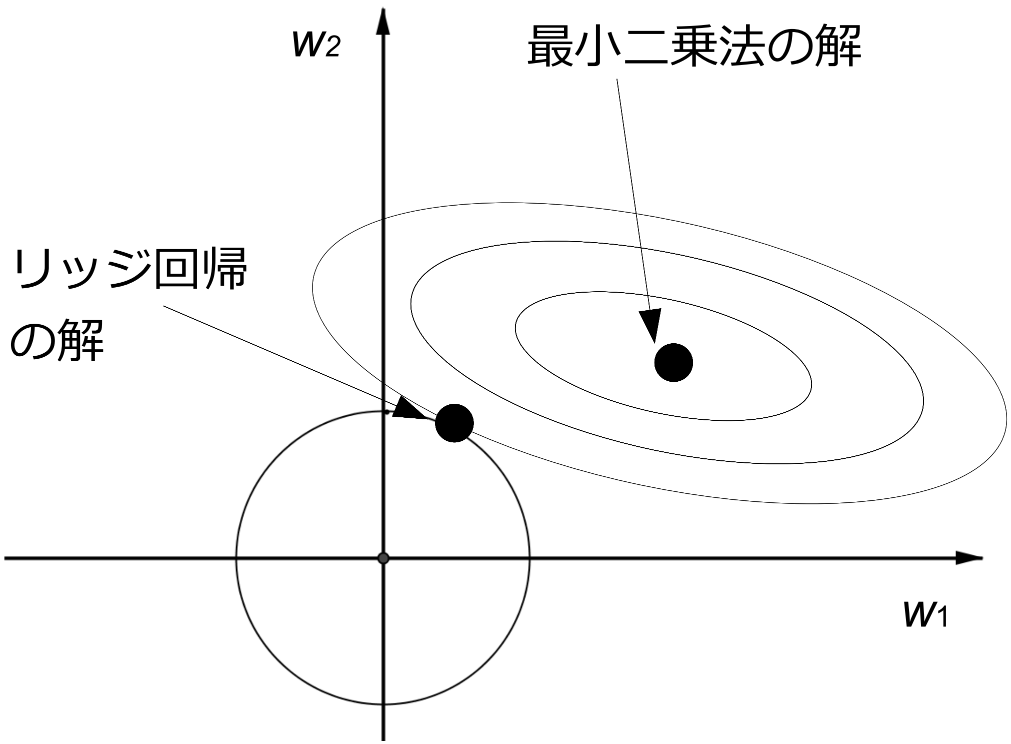
  - 微分不可能な点があるため、解析的に解を求めることができない
  - 解法： coordinate descent algorithm

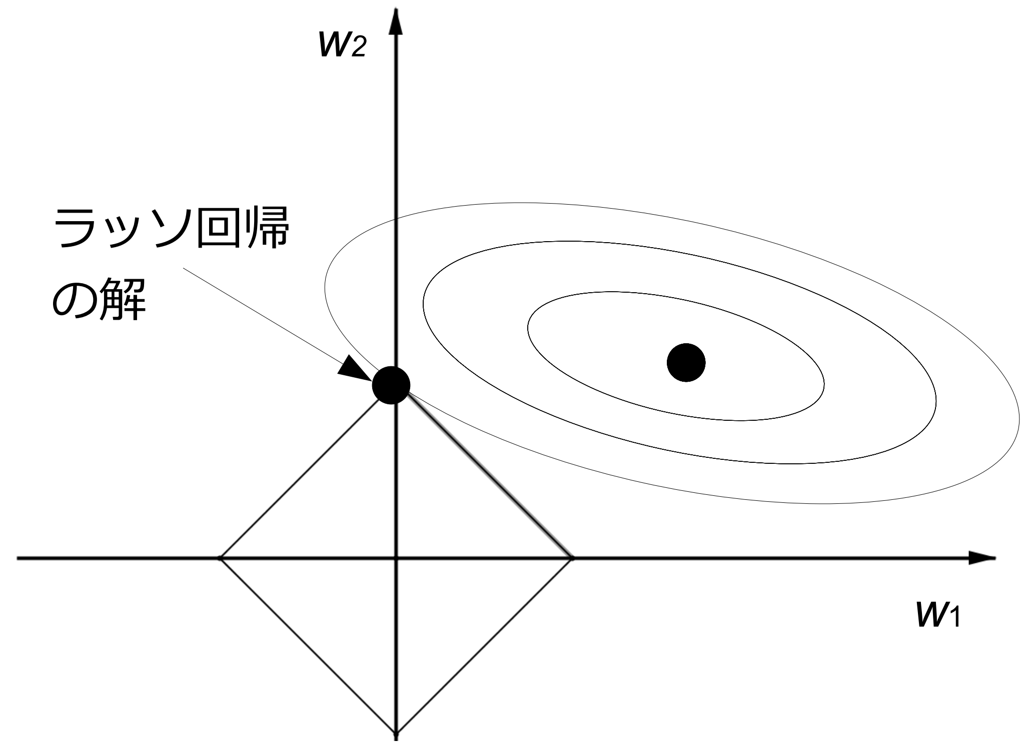
1 つの変数（軸）の値だけを誤差が減る方向に変更することを繰り返す



6.4 正則化

- リッジ回帰とラッソ回帰



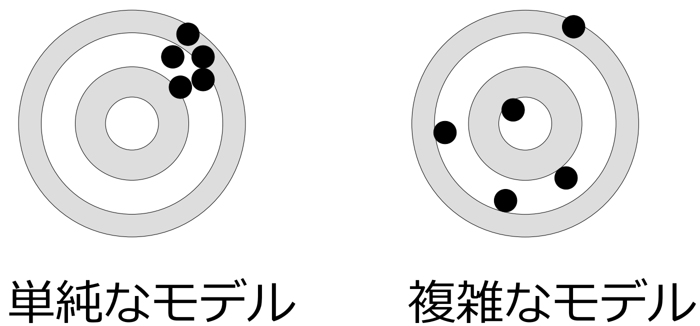


パラメータを 0 に
近づけている

0 となるパラメータを
多くしている

6.5 バイアスー分散のトレードオフ

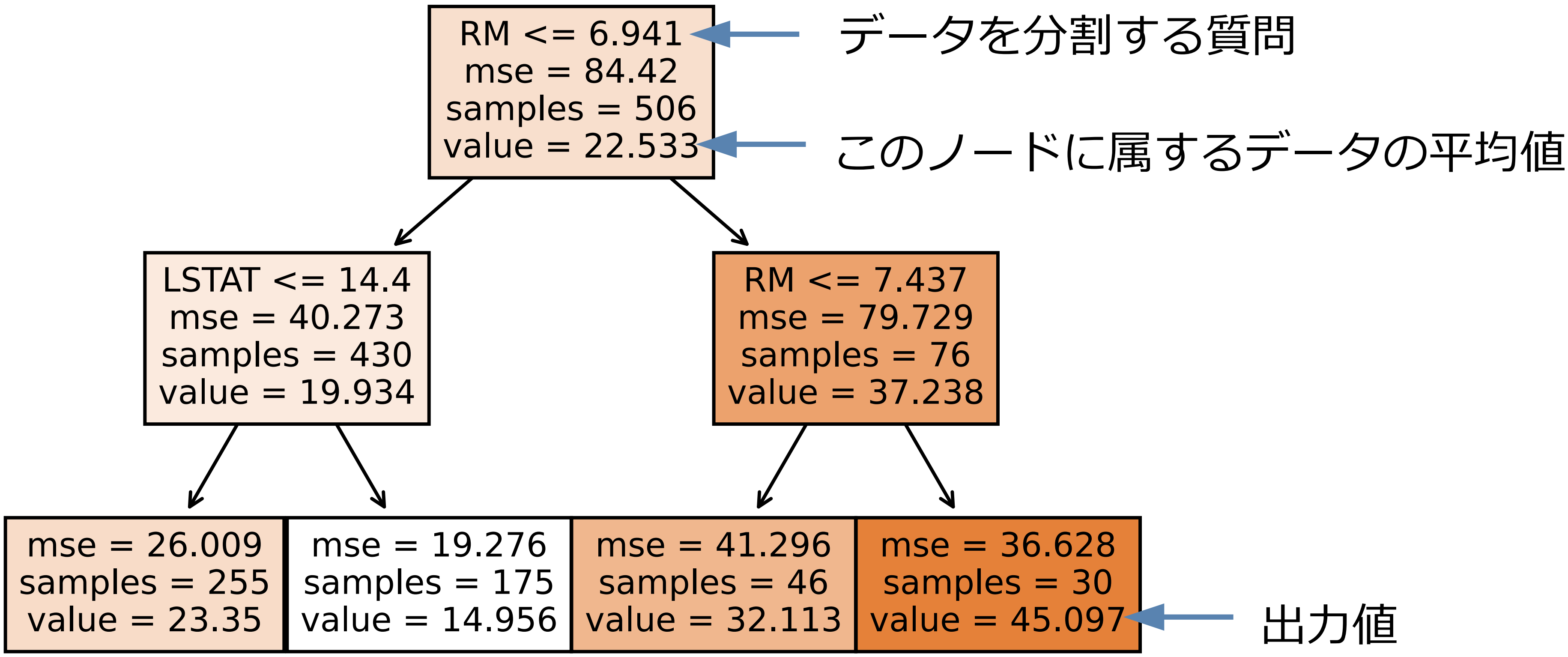
- バイアスと分散
  - バイアス：正解からのズレ
  - 分散：求まる解の安定性



- 単純なモデル
  - 正解からはずれているかもしれない→バイアス**大**
  - データが多少ぶれても結果は似ている→分散**小**
- 複雑なモデル
  - 正解をカバーしている可能性が高い→バイアス**小**
  - データが少し違えば結果が大きく異なる→分散**大**

6.6 回帰木

- 回帰木とは
  - 識別における決定木の考え方を回帰問題に適用
  - ターゲット値の分散が小さくなるように分割



6.6 回帰木

- CART (classification and regression tree)
  - 木の構造を二分木に限定
  - データの分類基準はジニ不純度
    - 2 クラスの場合のジニ不純度　$I_G(p) = 2p(1-p)$
    - クラスの出現が等確率のとき最大
  - 回帰に用いるときのデータの分類基準はターゲット値の分散
    - 子ノードの重み付き分散和が最小となる特徴を選ぶ

6.6 回帰木

- CART (classification and regression tree)
  - 分散の計算
    - Y: あるノードに属するデータのターゲット値の集合

$$Var(Y) = \frac{1}{|Y|} \sum_{y_i \in Y} (y_i - \bar{y})^2$$

$\bar{y}$: Yの平均

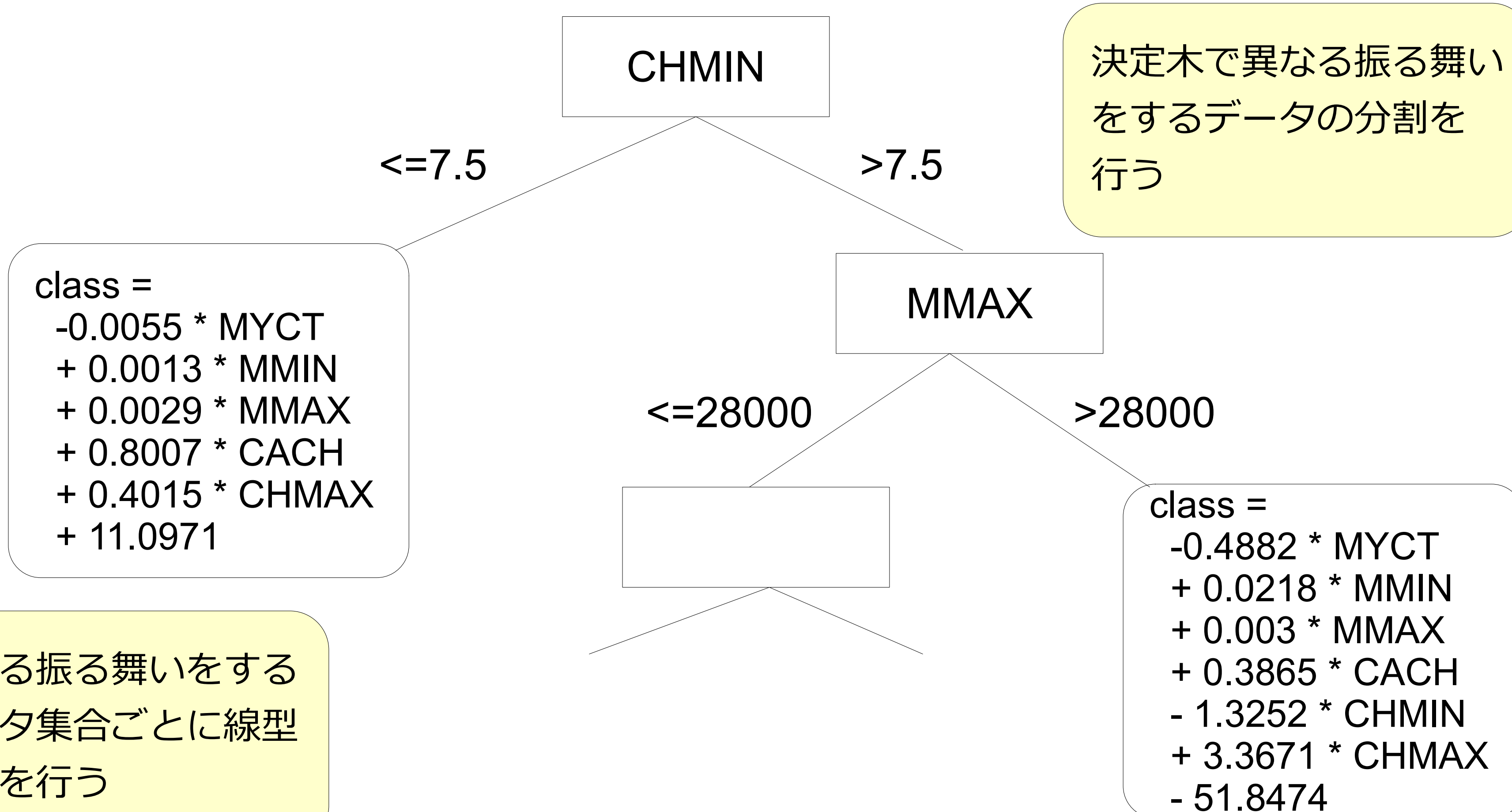
$$Var(\{Y_1, \dots, Y_l\}) = \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} Var(Y_j)$$

$$= \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} \left(\frac{1}{|Y_j|} \sum_{y \in Y_j} y^2 - \bar{y}_j^2\right)$$

$$= \frac{1}{|Y|} \sum_{y \in Y} y^2 - \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} \bar{y}_j^2$$

6.7 モデル木

- モデル木とは
  - リーフを線形回帰式にした回帰木



決定木で異なる振る舞いをするデータの分割を行う

異なる振る舞いをするデータ集合ごとに線型回帰を行う