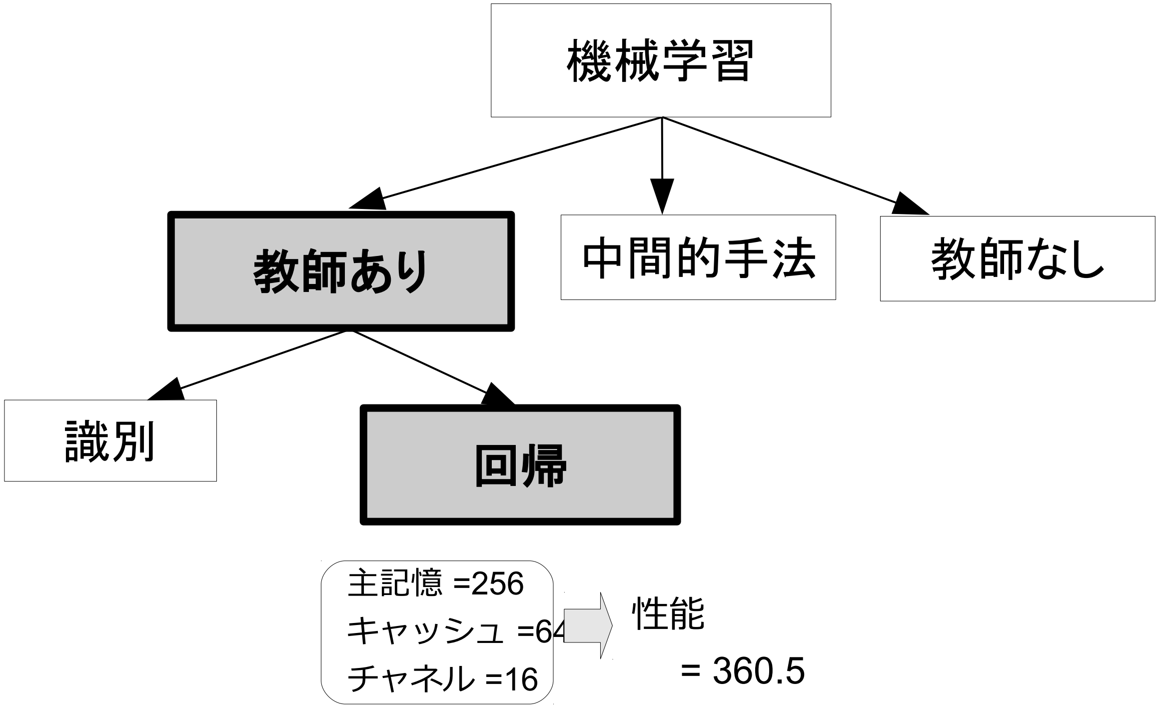
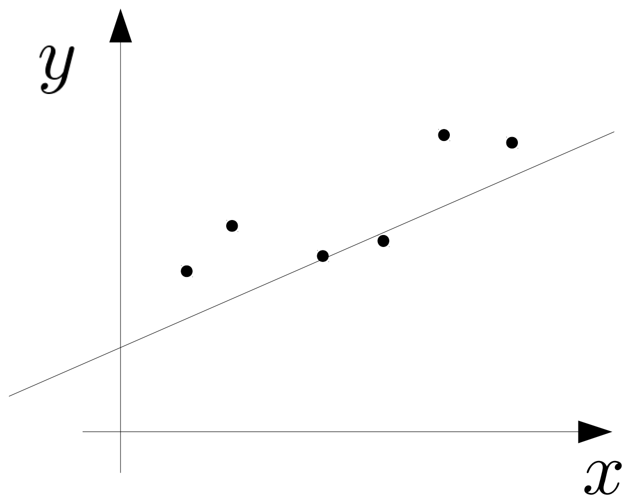
6. 回帰

- 問題設定
  - 教師あり学習
  - 数値入力　→　数値出力



6.2 線形回帰

- 目標：なるべく誤差の少ない直線を求める



- 線形回帰の定義
  - 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

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

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 を最小化

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

X: 全学習データを並べた行列

w: 係数のベクトル表現

  - $\boldsymbol{w}$ で微分した値が 0 となるのは

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

w が解析的に求まる

6.2 線形回帰

- 最小二乗法の精度向上

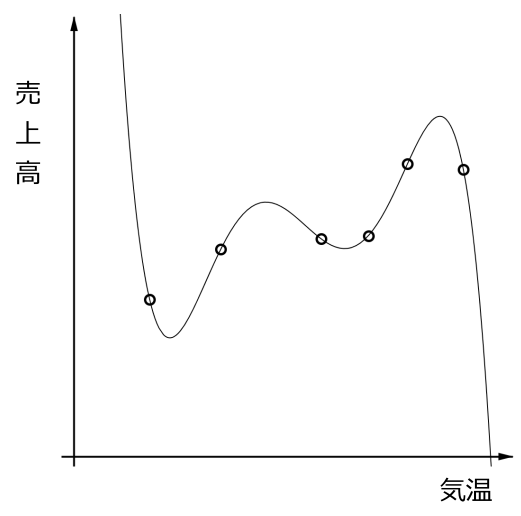
例　$\phi(x) = (1, x, x^2, \ldots, x^b)$

  - 基底関数 $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = (\phi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \phi_b(\boldsymbol{x}))$ 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：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：相関係数の２乗

Wekaの結果表示例

```
=== Cross-validation ===
=== Summary ===

Correlation coefficient          0.9012
Mean absolute error             41.0886
Root mean squared error         69.556
Relative absolute error         42.6943 %
Root relative squared error     43.2421 %
Total Number of Instances      209
```

決定係数の式

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

$\tilde{y}$：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

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

λ：誤差の二乗和と正則化項とのバランス

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

w が解析的に求まる

6.4 正則化

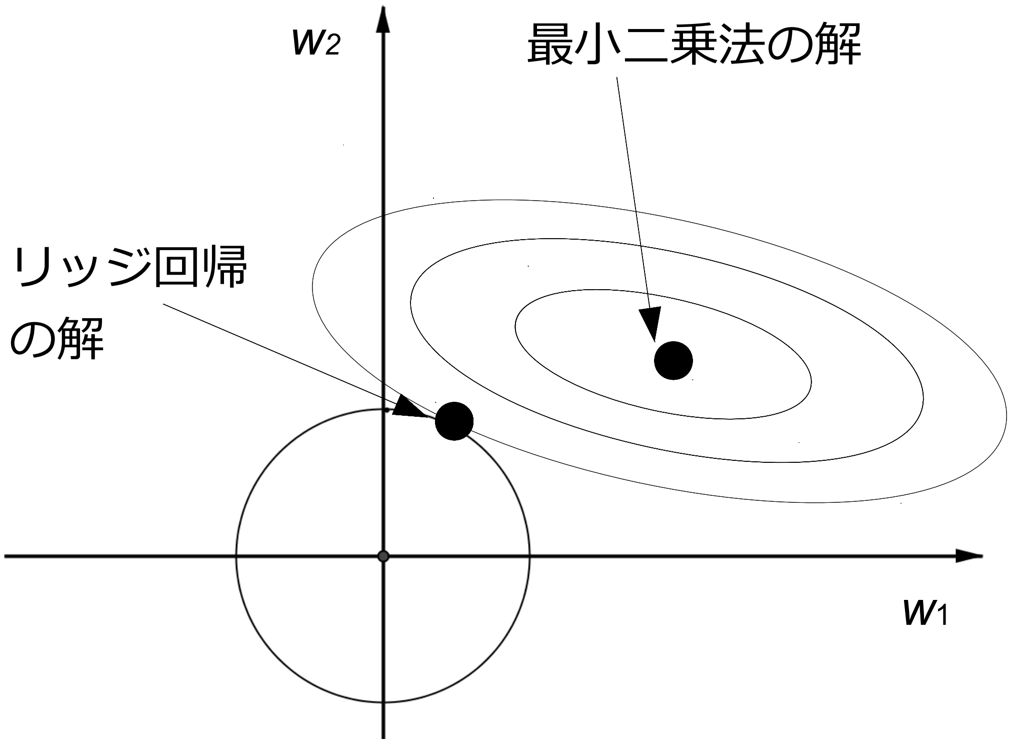
- ラッソ回帰
  - 誤差の二乗和に L1 ノルム正則化項を加える

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

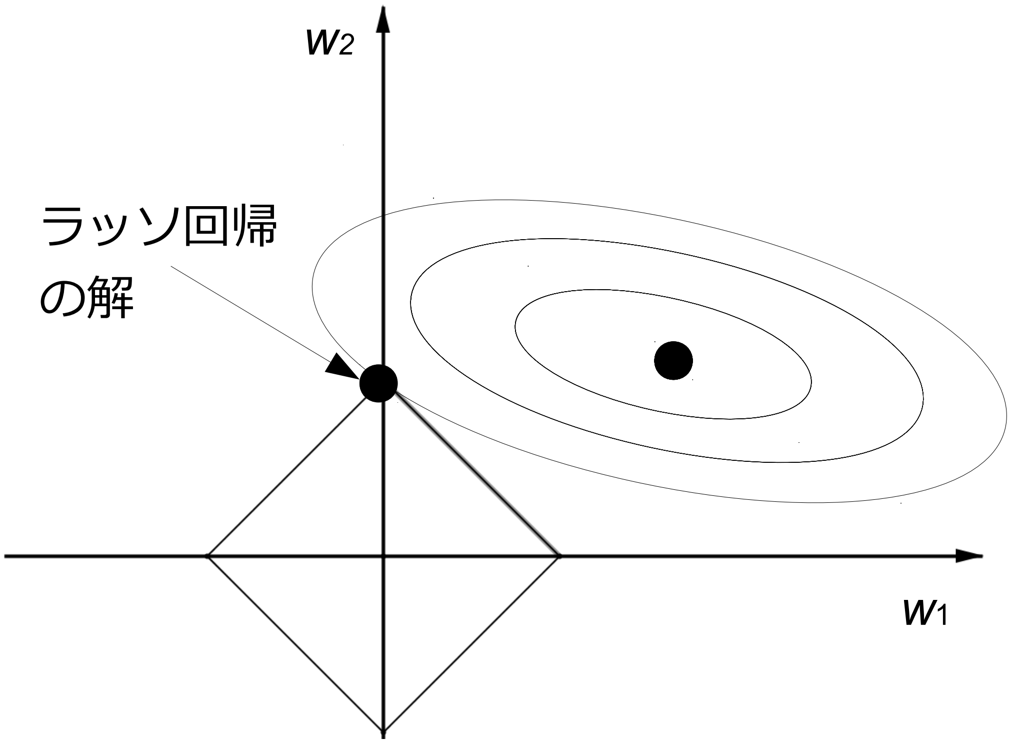
  - 微分不可能な点があるため、解析的に解を求めることができない
    - 適当な初期重みから始め、リッジ回帰で上界を押さえる逐次更新アルゴリズムを用いる

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

カーネル回帰

- 基底関数にカーネルを用いる

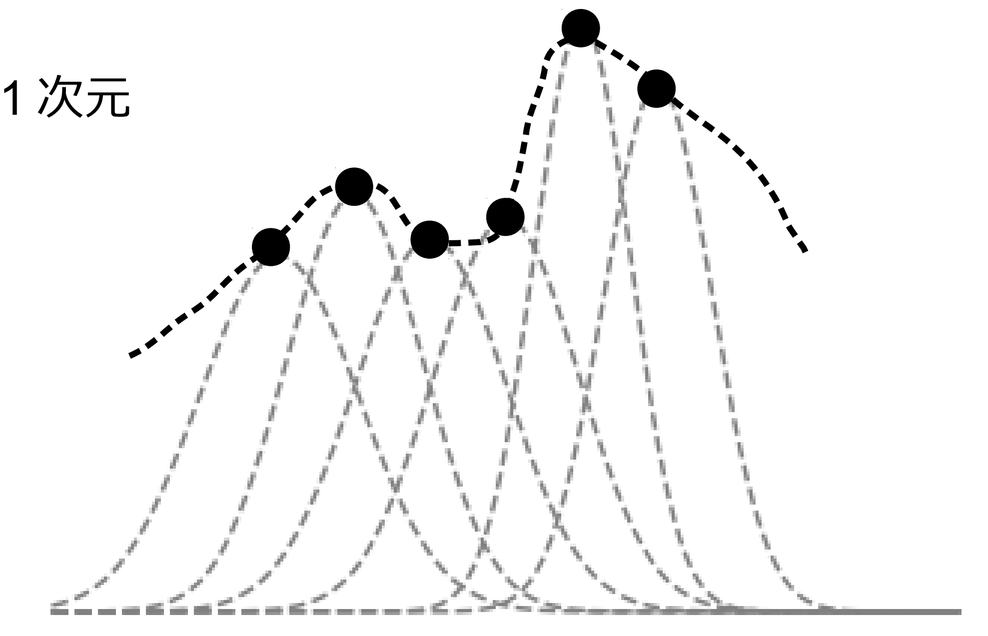
$$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$$

  - RBF カーネルを用いた場合

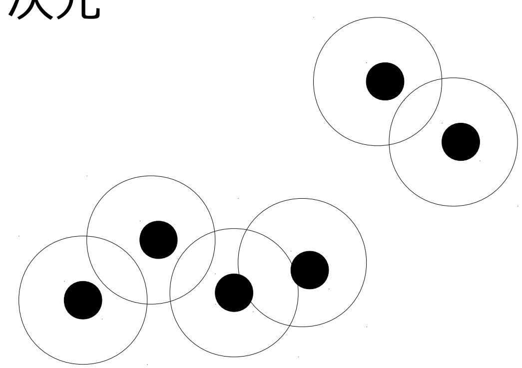
$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp(-\gamma ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'||^2)$$

近くにある学習データとのカーネル関数の値の重み付き和
＝学習データの近傍でのみ関数を近似

1 次元

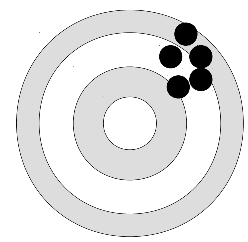


2 次元

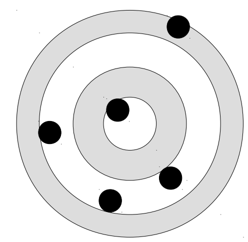


6.5 バイアスー分散のトレードオフ

- 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

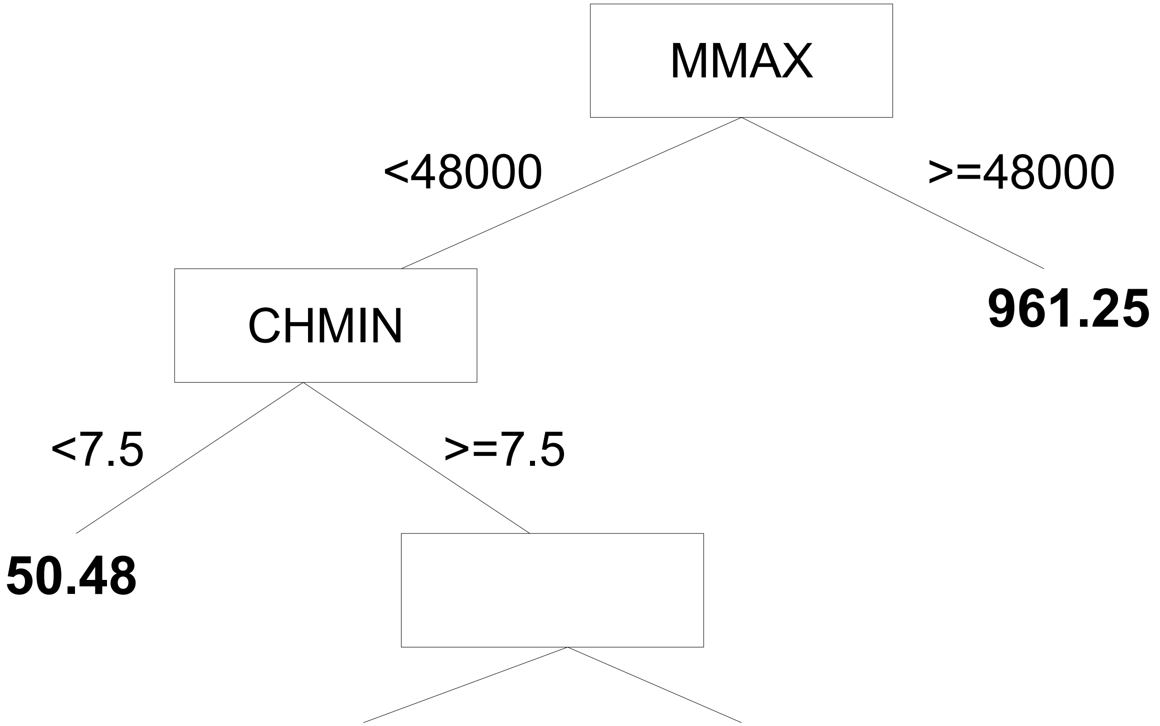


複雑なモデル

- 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

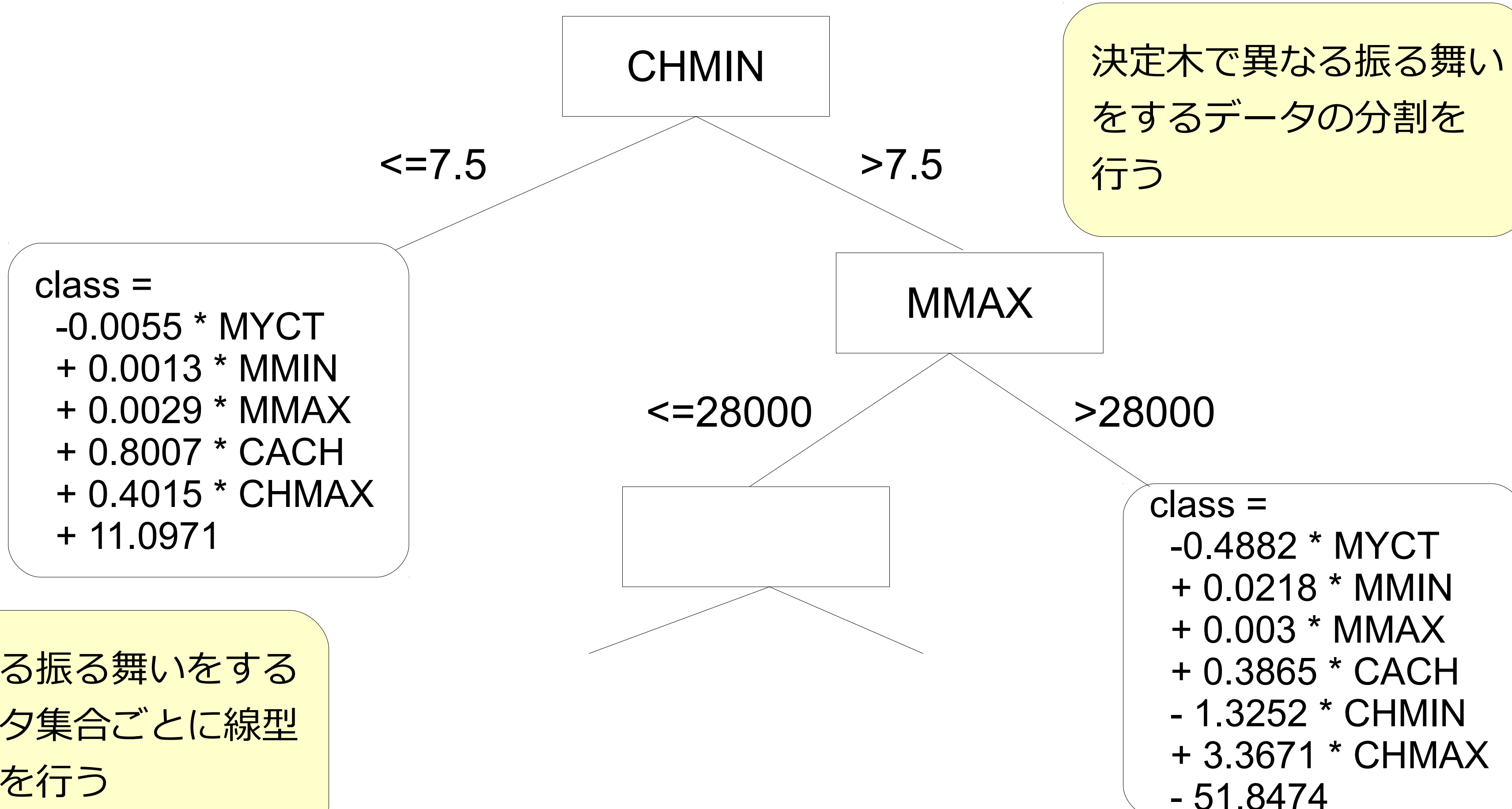
$$Var(Y) = \frac{1}{|Y|}\sum_{y_i \in Y}(y_i - \bar{y})^2 \qquad \bar{y}\ :\ Y\text{の平均}$$

$$\begin{aligned} Var(\{Y_1, \ldots, Y_l\}) &= \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} Var(Y_j) \\ &= \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} \left(\frac{1}{|Y_j|}\sum_{y \in Y_j} y^2 - \bar{y}_j^2\right) \\ &= \frac{1}{|Y|}\sum_{y \in Y} y^2 - \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|}\bar{y}_j^2 \end{aligned}$$

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