PRML輪講

３章：線形回帰モデル

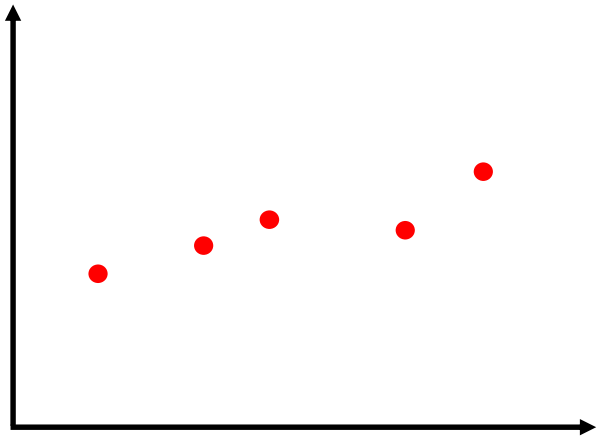
担当：大木

この章でやること

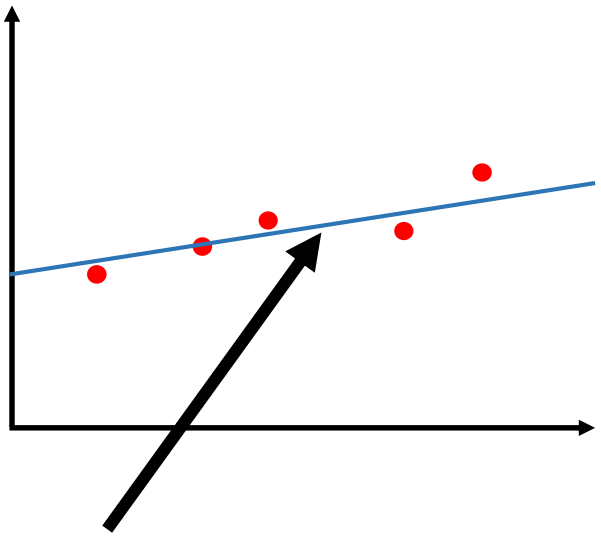
- 線形回帰を理解する(前半)
- ベイズ+線形回帰を理解する(後半)

線形回帰とは

データを取得



データの従う関数をプロット



青線の傾き・切片を求めたい

回帰問題→入力(説明)変数xから
目的変数tを予測する

線形回帰→基底関数とパラメータの
線形結合でもって目的変数を表す

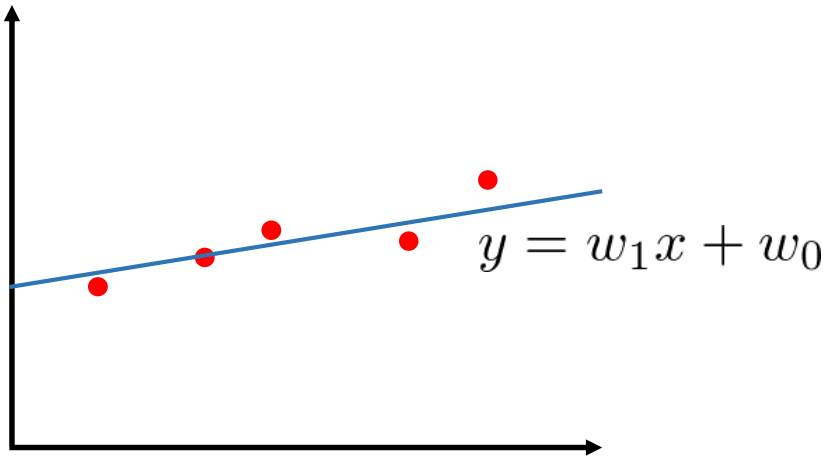
$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \phi(\mathbf{x})$$

基底関数は
非線形OK

線形回帰の例

基底関数：多項式関数

$$\phi(\mathbf{x}) = (1\ x\ x^2 \cdots x^{M-1})^{\mathrm{T}}$$

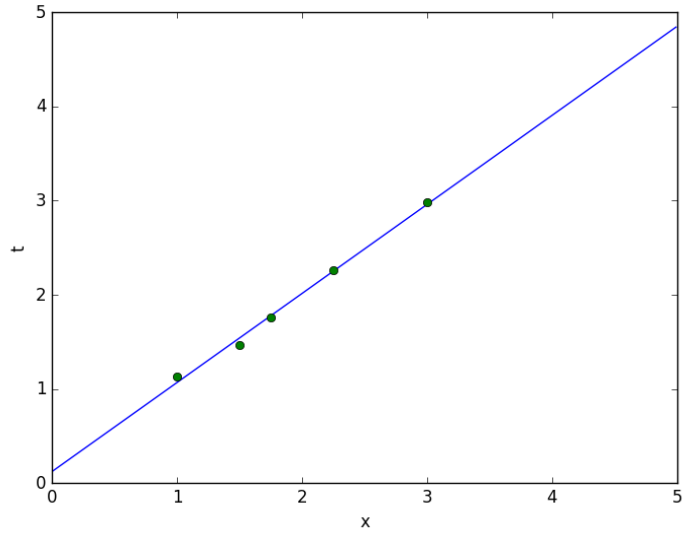


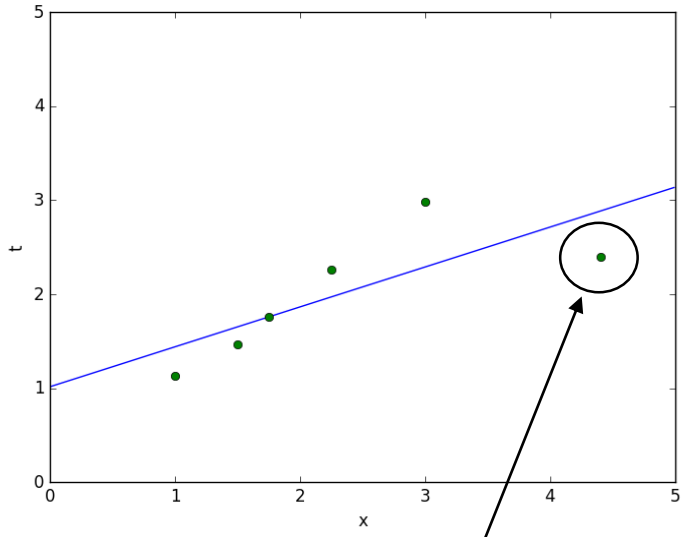
データから最小二乗法などでパラメータを決定

二乗和誤差を最小化

その他シグモイド関数(ロジット関数の逆関数)(3.6)やフーリエ関数を用いた基底がある

最小二乗法の注意点





外れ値検出

外れ値に敏感

・外れ値を除いて統計処理を行う
・最小二乗法よりも外れ値に対して
ロバストな手法を用いる

RANSAC
絶対誤差

目的変数が１次元の場合(多次元の場合も同様)

データセット $(\mathbf{x}_1, t_1), (\mathbf{x}_2, t_2), ..., (\mathbf{x}_N, t_N)$

測定に際し、ガウスノイズϵが混入

$$t_i = y(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) + \epsilon_i \ \ (i = 1, 2, ..., N)$$

→*i*番目のデータに対する尤度関数

βは精度(分散の逆数)
尤度関数はwの関数

$$p(t_i|\mathbf{x}_i, \mathbf{w}, \beta) = \mathcal{N}(t_i|y(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}), \beta^{-1})$$

以上から、データ集合に対する尤度関数が得られる

$$p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}(t_n|y(\mathbf{x}_n, \mathbf{w}), \beta^{-1})$$

(復習)MLEは、尤度関数が最大となるパラメータを推定量とする

計算の簡略化のため、
対数尤度関数を最大化することを考える

$$\ln p(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = -\beta E_D(\mathbf{w}) + const$$

ただし $E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\{t_n - \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\phi(\mathbf{x}_n)\}^2$

→(復習)ガウスノイズの下で、MLE=LSM

実際に最尤推定量を計算してみる(計算ノート)

最小二乗法の幾何学的な解釈を考える(N>M)

ベクトルデータt:座標 $\xi = (\xi_1, \ldots, \xi_N)^{\mathrm{T}}$ の張る
N次元空間の点

※ $\Phi^{\mathrm{T}}\Phi$ が非正則に近いとき
→SVDによって擬似逆行列を表現し、特異性を解消

逐次学習(オンライン学習)

バッチ学習：MLEのように訓練データを すべて使って学習を行う

最急降下法(反復法によるアルゴリズム)

$$\mathbf{w}^{(\tau+1)} = \mathbf{w}^{(\tau)} - \eta \sum_{n=1}^{N} \nabla E_n(\mathbf{w}^{(\tau)})$$

学習率(正の小さな数)

バッチ学習は大規模なデータに対しては
計算時間が膨大になる
→パラメータ更新の際にデータの一つだけを
用いて学習を行うオンライン学習が効率的

確率的勾配降下法(SGD)の更新則

$$\mathbf{w}^{(\tau+1)} = \mathbf{w}^{(\tau)} - \eta \nabla E_n(\mathbf{w}^{(\tau)})$$

・最小二乗法では過学習がしばしば起こる(図1.9参照)
・多くの場合データが従うモデルが全く分からない

→目的関数に正則化項を付加

L_qノルム正則化 $\frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{M}|w_j|^q$

→不必要なパラメータは減衰して0になる

$q=2$の正則化項を機械学習の分野では
荷重減衰と呼び、最もよく使用する

※$q=1$のときをlassoといい、適切なλの範囲で
スパースなパラメータ推定が可能(→計算ノート)

バイアスーバリアンス分解

MLEの過学習の問題を解消するために…

- 基底の数を制限→モデルの表現能力が低下
- 正則化項の追加→係数λをどう決めるか

誤差の最小化と適切なモデル選択を両立させたい

1.5.5節の議論から、期待(二乗)損失

$$\mathrm{E}[L] = \int \{y(\mathbf{x}) - h(\mathbf{x})\}^2 p(\mathbf{x}) \mathrm{d}\mathbf{x} + \int \int \{h(\mathbf{x}) - t)\}^2 p(\mathbf{x}, t) \mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{t}$$

学習ではこの項を動かして期待損失を最小化する

※データ集合が有限であることから、
第一項は厳密に0にすることはできない

(3.37)式のデータ集合の取り方に
対する期待値をとれば

期待損失＝(バイアス)^2+バリアンス+ノイズ

バイアス：モデルの自由度が不十分であるために
真の回帰関数から生じてしまうずれ

バリアンス：ランダムなサンプルに基づく
推定量の確率的なゆらぎ

期待損失の最小化
＝(二乗バイアス＋バリアンス)の最小化

モデルの複雑度高：バイアス小,バリアンス大

モデルの複雑度低：バイアス大,バリアンス小

→ちょうどよいモデルを選ぶ必要

正則化項の利用

正則化係数大＝モデルの複雑度低
正則化係数小＝モデルの複雑度高

図3.5,図3.6参照

ベイズ線形回帰(後半)

過学習を避けるために、
データを訓練データ、テストデータに分ける

→データがもったいない

ベイズの枠組みで線形回帰を考える

1.2.5,1.2.6節の議論を再考(復習)する

MAP推定を行うことを考える
→パラメータの事前分布を(3.48)と与える

事後分布は(3.49)式のように書ける
(計算ノート)

※事前分布がガウス分布であるため、
事後分布もガウス分布となる

MAP推定について

対数事後確率の最大化(MAP推定)
＝二乗和誤差＋二次の正則化項の最小化(復習)

パラメータ空間全域を一様に分布しているような分布を事前分布とした場合
→MAP推定量＝最尤推定量

事後確率の逐次学習におけるふるまいを確認
(図2.3,図3.7参照)

確率の乗法・加法定理より、予測分布

$$p(t|\mathbf{t},\alpha,\beta) = \int p(t|\mathbf{w},\beta)p(\mathbf{w}|\mathbf{t},\alpha,\beta)d\mathbf{w}$$

$$\left.\begin{array}{l} p(t|\mathbf{w},\beta) \\ p(\mathbf{w}|\mathbf{t},\alpha,\beta) \end{array}\right\}$$ (3.8),(3.49)参照

(2.115)から、予測分布は
以下のように書ける(計算ノート)

$$p(t|\mathbf{x},\mathbf{t},\alpha,\beta) = \mathcal{N}(t|\mathbf{m}_N^{\mathrm{T}}\phi(\mathbf{x}), \sigma_N^2(\mathbf{x}))$$

(3.59)で定義

等価カーネル

線形基底モデルに対する事後分布の平均解(3.53)は、ガウス過程(cf. 6章)を含むカーネル法を導入する下で異なった解釈を与える

(3.53)に(3.3)代入

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{m}_N) = \sum_{n=1}^{N} \beta \phi(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_N \phi(\mathbf{x}_n) t_n \quad \textbf{(3.60)}$$

等価カーネルを次のように定義

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \beta\phi(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_N\phi(\mathbf{x}') \quad (3.62)$$

この式を用いれば、(3.60)は

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{m}_N) = \sum_{n=1}^{N} k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')t_n \quad (3.61)$$

と書ける

※このように、訓練データの目標変数の線形結合で与えられる回帰関数を線形平滑器という

図(3.10)からカーネルはxに近いデータ点ほど大きい

→カーネルによって、遠くの情報より近傍の情報を強く重みづけ

(3.63)より、近傍での予測平均は強い相関を持ち、離れた点では相関は小さくなる

※この性質はガウス基底に限らず、局所性を持たない基底についても成り立つ

以上より、カーネルを用いることで
これまでの線形回帰問題を異なった
形式で定式化できる

・基底関数の集合をあらかじめ定義しない
・カーネルを定義
→データが与えられた時に
カーネルを用いて予測値を計算

MLEの過学習の問題→パラメータについて
周辺化で回避可能

テストデータいらず

ベイズ線形回帰の強み

ベイズにおけるモデル選択とは？

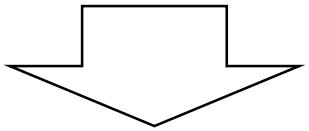
→ベイズモデル比較

問題設定

L個のモデル候補の中からモデルの事後分布

$$p(\mathcal{M}_i|\mathcal{D}) \propto p(\mathcal{M}_i)p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_i) \quad (3.66)$$

を評価し、モデルを１つ決める(モデル選択)



モデルエビデンス項 $p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_i)$ を比較

(事前分布は簡単のため等しいとする)

モデルエビデンス = データから見た
モデルの好み

モデルの事後分布がわかれば、
予測分布が得られる(3.67)
このときの予測分布は混合分布となっている