機械学習講習会第六回

- 「ニューラルネットワークの実装」です!

Jupyter / Google Colaboratoryで今回使う新規ファイルを作成して 構えて待機しておいてください

機械学習講習会第六回

- 「ニューラルネットワークの実装」

traP アルゴリズム班 Kaggle部 2023/7/3

振り返り

第一回: 学習

第二回: 勾配降下法

第三回: 自動微分

第四回: ニューラルネットワークの構造

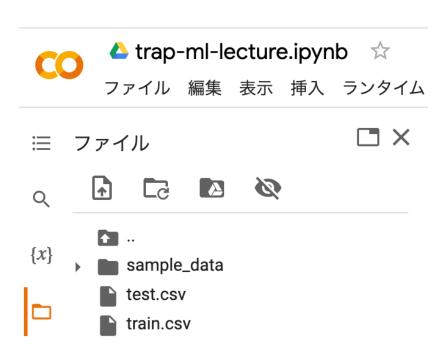
第五回: ニューラルネットワークの学習と評価

第六回: ニューラルネットワークの実装

今回解くタスク

セルに、以下のコマンドを入力:

```
!curl -L https://abap34.com/ml-lecture/train.csv -o train.csv
!curl -L https://abap34.com/ml-lecture/test.csv -o test.csv
```



データ

- train.csv 3211 行 x 17列
- test.csv 803 行 x 16列

														1 to	10 of 3	211 entries Filter
最高気温(°C)	平均気温(°C)	降水量の合計(mm)	日照時間(時間)	平均風速(m/s)	平均雲量(10分比)	平均湿度(%)	子供割合	ice1	ice2	ice3	ice4	ice5	ice6	ice7	ice8	売り上げ
16.7	12.6	0.0	7.7	5.5	5.5	61.0	11.4	250	150	150	300	300	350	250	350	0.5955326509621945
25.9000000000000002	22.59999999999998	21.14597132295255	2.0	2.3	10.0	75.0	12.6	450	300	100	150	200	350	350	350	0.4464158655459068
26.7	20.0	21.75470734052112	13.5	4.7	3.3	45.0	10.9	100	200	400	450	450	150	400	200	0.4530318244158244
31.3	27.09999999999998	0.0	0.9	2.7	9.8	85.0	10.8	350	200	250	450	450	300	150	150	0.6442353972371553
26.2	19.7	0.0	3.3	2.4	10.0	85.0	11.3	150	450	350	150	150	300	250	200	0.6159198470772944
22.4000000000000002	15.2	0.0	11.5	3.1	3.5	44.0	12.6	100	400	150	250	250	200	450	100	0.6001764011884118
37.0	31.4	0.0	9.4	3.4	7.5	71.0	10.8	100	400	250	450	400	400	450	300	0.6813853990468928
24.9000000000000002	23.09999999999998	0.0	0.2	2.0	10.0	93.0	10.8	450	150	200	150	200	450	350	150	0.6190911886951989
34.5	29.0	0.11080070863841747	10.5	3.0	5.8	66.0	11.0	400	300	250	400	200	150	300	450	0.6492066638924047
30.3	24.59999999999998	61.70445455784176	13.0	3.7	2.0	56.0	11.0	100	450	100	350	300	100	450	150	0.4485942908451518

データ

◎ はキッチンカーでアイスを売っています。 なるべく多くの売り上げをあげたいので、売り上げを予測する モデルを構築して、売り上げを予測することにしました。

そこで、ある日に行ったところの気温や降水量などの気象データ、いく地域の人口に占める子供の割合、アイスの値段などなどと、売り上げをまとめたデータを作りました。(train.csv)

そこで、 のために気象データや値段などから、売り上げを予測するモデルを作って、未知のデータ(test.csv)に対して予測してください!

https://dacq.trap.show/

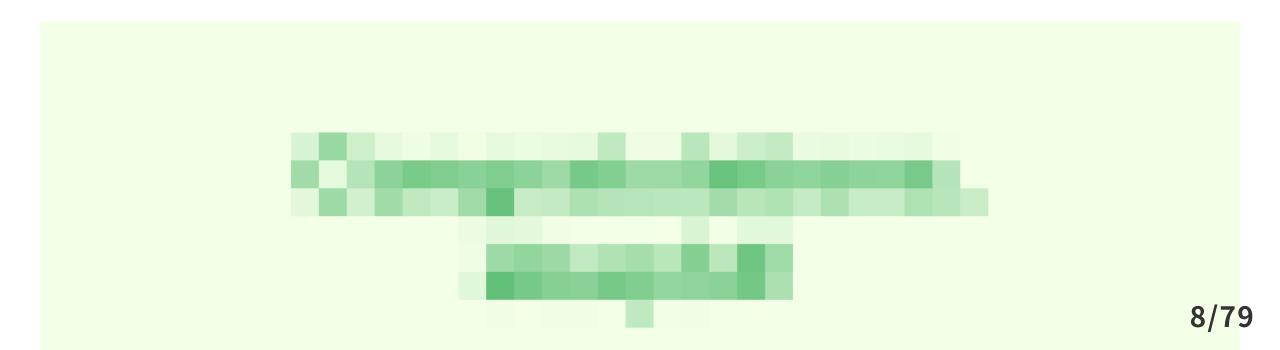
予測結果を投稿して、精度を競えます!!!すごい!!!

		DacQ	
投稿			
ファイル			
ファイルを	選択 選択されていません		
Upload			
Rank	User	Loss	
	abap34	0.003894386693650532	

せっかくなので

https://dacq.trap.show/

最高スコアを更新してtraQに投稿しよう!



全体の流れ

- 1. データの読み込み
- 2. モデルの構築
- 3. モデルの学習
- 4. 新規データに対する予測
- 5. 順位表への提出



1-2. データの前処理



1-2. PyTorchに入力できる形に

```
# pandasパッケージを`pd`という名前をつけてimport
import pandas as pd

# これによって、pandasの関数を`pd.関数名`という形で使えるようになる
train = pd.read_csv("train.csv")
test = pd.read_csv("test.csv")
```

pd.read_csv(path) で、 path にあるcsvファイルを読み込める

パスとは、ファイルの場所を示す文字列のことです。

今回は、train.csvとtest.csvが、ノートブックと同じ場所にあるので、"train.csv"と"test.csv"という文字列をパスとして指定しています。例えば、"/home/abap34/train.csv"というパスを指定すると、"/home/abap34"というフォルダの中にあるtrain.csvというファイルを読み込みます。他にもノートブックの位置からの相対パスを指定することもできます。例えば、"../train.csv"というパスを指定すると、ノートブックの一つ上のフォルダにあるtrain.csvというファイルを読み込みます。

train

とだけセルに入力すると

) 1	t	rain																	
•		最高気温(℃)	平均気温(℃)	降水量の合計(mm)	日照時間(時間)	平均風速(m/s)	平均雲量(10分比)	平均湿度(%)	子供割合	ice1	ice2	ice3	ice4	ice5	ice6	ice7	ice8	売り上げ	
	0	16.7	12.6	0.000000	7.7	5.5	5.5	61.0	11.4	250	150	150	300	300	350	250	350	0.595533	
	1	25.9	22.6	21.145971	2.0	2.3	10.0	75.0	12.6	450	300	100	150	200	350	350	350	0.446416	
	2	26.7	20.0	21.754707	13.5	4.7	3.3	45.0	10.9	100	200	400	450	450	150	400	200	0.453032	
	3	31.3	27.1	0.000000	0.9	2.7	9.8	85.0	10.8	350	200	250	450	450	300	150	150	0.644235	
	4	26.2	19.7	0.000000	3.3	2.4	10.0	85.0	11.3	150	450	350	150	150	300	250	200	0.615920	
32	206	12.9	10.9	4.958982	2.2	2.2	8.3	63.0	11.0	150	100	300	400	450	150	150	250	0.415770	
32	207	32.0	24.9	22.364472	9.0	3.5	8.5	58.0	11.3	100	100	150	450	100	450	250	350	0.448675	
32	208	17.1	10.1	3.278023	10.9	2.0	3.5	46.0	11.0	350	300	250	350	450	100	400	350	0.453402	
32	209	12.1	6.7	42.488025	9.5	2.5	5.0	56.0	11.0	250	150	150	200	250	350	300	400	0.415192	
32	210	15.0	11.3	2.858941	2.2	5.0	7.3	87.0	11.4	200	350	200	250	200	250	200	200	0.428246	

test

とだけセルに入力すると



今までは...

```
x = [1, 2, 3, 4, 5]
y = [2, 4, 6, 8, 10]
def loss(a):
    n = len(x)
    s = 0
    for i in range(n):
        s += (y[i] - a * x[i])**2
    return s / n
```

⇒ 今回のデータも入力と出力(の目標) に分けておく

train['カラム名']

で「カラム名」という名前の列を取り出せる



今回の予測の目標は

train['売り上げ']

セルに、

train_y = train['売り上げ']

と入力して実行

⇒ train_y に売り上げの列が入る

逆に、モデルに入力するデータは、 train から売り上げの列を除いたもの

train.drop(columns=['カラム名'])

を使うと、 train から「カラム名」という名前の列を除いたものを取り出せる



今回は「売り上げ」を除けば良いので、

train.drop(columns=['売り上げ'])

セルに、

train_x = train.drop(columns=['売り上げ'])

と入力して実行

⇒ train_x に売り上げの列を除いたデータが入る

☑ データの読み込みが完了!

今の状況...

- train_x ...モデルに入力するデータ(気温、値段、etc...)
- train_y ...モデルの出力の目標(売り上げ)
- test ...予測対象のデータ(気温、値段、etc...)

が入っている

✓ データをそのままモデルに入れる前に処理をすることで、 学習の安定性や精度を向上可能

今回は、 各列に対して「標準化」と呼ばれる処理を行う

標準化

$$x' = rac{x - \mu}{\sigma}$$

 $(\mu$ は平均、 σ は標準偏差)

- 平均 μ_1 のデータの全ての要素から μ_2 を引くと、平均は $\mu_1-\mu_2$
- 標準偏差 σ_1 のデータの全ての要素を σ_2 で割ると、標準偏差は $\frac{\sigma_1}{\sigma_2}$
- ⇒ 標準化によって、平均を0、標準偏差を1にできる

scikit-learn というライブラリの StandardScaler を使うと、簡単に標準化できる!

```
# sklearn.preprocessingに定義されているStandardScalerを使う
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

# StandardScalerのインスタンスを作成
scaler = StandardScaler()
scaler.fit(train_x)
train_x = scaler.transform(train_x)
test = scaler.transform(test)
```

train_x

test

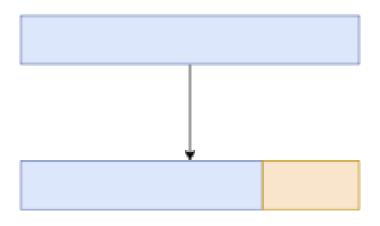
などをセルに入力して実行してみると、 確かに何かしらの変換がされている (ついでに、結果が数字だけになっている)

ので、 train_y も数字だけにしておく

train_y = train_y.values.reshape(-1, 1)

最初のテーブルっぽい情報を持ったまま計算を進めたい場合は、 $train_x[:] = scaler.transform(train_x)$ のようにすると良いです. 23/79

バリデーションのためにデータを分割しておく



1-2. データの前処理 - バリデーション

scikit-learn の train_test_split を使うと、簡単にデータを分割できる!

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
train_x, val_x, train_y, val_y = train_test_split(train_x, train_y, test_size=0.3, random_state=34)
```

```
train_test_split(train_x, train_y, test_size=0.3, random_state=34)
```

● (train_x, train_y)を、学習データ:検証データ = 7:3に分割

```
train_x.shape
```

val_x.shape

を確認すると、確かに7:3に分割されていることがわかる



このあとこれらをPyTorchで扱うので、PyTorchで扱える形にする

数としてTensor型を使って自動微分などを行える

```
>>> x = torch.tensor(2.0, requires_grad=True)
>>> def f(x):
...     return x ** 2 + 4 * x + 3
...
>>> y = f(x)
>>> y.backward()
>>> x.grad
tensor(8.)
```

$$(f(x) = x^2 + 4x + 3$$
の $x = 2$ における微分係数 8)

⇒データをTensor型に直しておく

torch.tensor関数によるTensor型のオブジェクトの作成

torch.tensor(data, requires_grad=False)

- data: 保持するデータ(配列っぽいものならなんでも)
 - リスト、タプル、NumPy配列、スカラ、...
- requires_grad: 勾配を保持するかどうかのフラグ
 - デフォルトはFalse
 - 勾配計算を行う場合はTrueにする

```
import torch

train_x = torch.tensor(train_x)
train_y = torch.tensor(train_y)
val_x = torch.tensor(val_x)
val_y = torch.tensor(val_y)
test = torch.tensor(test)
```

我々が勾配降下法で使うのは、

損失についての各パラメータの勾配

⇒ 入力データに対する勾配は不要なので

requires_grad=True とする必要はない





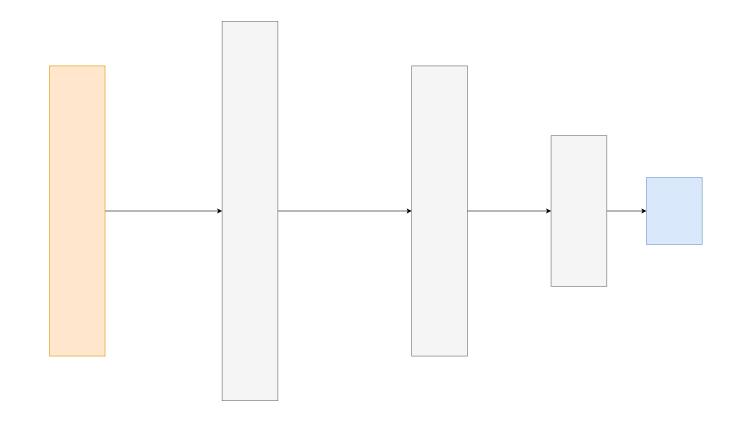
- ✓ 1-2. データの前処理
- 1
- ✓ 1-2. PyTorchに入力できる形に

全体の流れ

- 1. データの読み込み
- 2. モデルの構築
- 3. モデルの学習
- 4. 新規データに対する予測
- 5. 順位表への提出

今からすること...

$$f(oldsymbol{x};oldsymbol{ heta})$$
をつくる



torch.nn.Sequentialによるモデルの構築

入力層は16次元の入力を受け取り、出力が32次元の全結合層 隠れ層は一つあり、32次元の入力を受け取り、出力が64次元の全結合層 出力層は64次元の入力を受け取り、出力が1次元の全結合層

```
import torch.nn as nn

model = nn.Sequential(
    nn.Linear(16, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1)
)
```

```
import torch.nn as nn

model = nn.Sequential(
    nn.Linear(16, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1)
)
```

nn.Sequential は、順番に層をつなげていくモデルを作るためのクラス引数に層を順番に渡すことで、モデルを構築してくれる

⇒すでにこの時点でパラメータの初期化などは終わっている

model.parameters() または model.state_dict() でモデルのパラメータを確認できる

model.state_dict()

を実行すると、モデルが持つパラメータ一覧を確認できる

構築したモデルは、関数のように呼び出すことができる

```
import torch
dummy_input = torch.rand(1, 16)
model(dummy_input)
```

torch.rand で、ダミーのインプットを作成

⇒モデルに入力

(現段階では、初期化されて学習されていない重みによる計算)

2. モデルの構築

 $lacksymbol{v} f(oldsymbol{x};oldsymbol{ heta})$ をつくる

⇒あとはこれを勾配降下法の枠組みで学習させる!

 $\frac{1}{1}$

思い出すシリーズ

確率的勾配降下法

(ミニバッチ学習)

全体の流れ

- 1. データの読み込み
- 2. モデルの構築
- 3. モデルの学習
- 4. 新規データに対する予測
- 5. 順位表への提出



3-2. 確率的勾配降下法の実装

ミニバッチ学習

損失関数は

$$L(oldsymbol{ heta}) = rac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - f(oldsymbol{x}_i; oldsymbol{ heta})
ight)^2$$

- \Rightarrow これを計算するには、N回の計算が必要
- ⇒ データ数が少ない場合はいいが、数GB, TB,となっていく
- ⇒ メモリに乗り切らず実用的な速度で計算することが難しくなる!

✓ データをランダムにいくつか選んで、そのデータだけを使って 損失関数を計算する

例) データ数N=10000からs=100個のデータをランダムに選ぶ

⇒メモリに乗り切って計算できる!

この選んだ小さいデータの集合のことを**ミニバッチ**と呼び、 そのサイズを **バッチサイズ(batch size)** と呼ぶ

そしてこれを使った勾配降下法を「確率的勾配降下法」という

つまり...

我々がやらなきゃいけないこと

• データをいい感じにランダムに選んで供給する仕組みを作る

• • •

• •

○<私がやろう

✓ torch.utils.data.Dataset と torch.utils.data.DataLoader を

使うと、簡単に実装できる!

● 現状確認...

train_x, train_y, val_x, val_y, test をTensor型で保持している

DatasetとDataLoaderの作成

```
# データセットの作成
train_dataset = TensorDataset(train_x, train_y)
val_dataset = TensorDataset(val_x, val_y)

# データローダの作成
batch_size = 32
train_dataloader = DataLoader(train_dataset, batch_size=batch_size, shuffle=True, drop_last=True)
val_dataloader = DataLoader(val_dataset, batch_size=batch_size, shuffle=False)
```



1. Datasetの作成(Dataset型)

● データセット(データの入出力のペア)を表すオブジェクト

TensorDataset に

- モデルの入力データ(train_x)と
- 出力の目標データ(train_y)を渡すことで Dataset 型のオブジェクトが 作られる

実際は torch.utils.data.Dataset を継承したクラスを作ることでも Dataset型 (のサブクラス)のオブジェクトを作ることができます。この方法だと非常に柔軟な処理が行えるためこの方法が主流流です。(今回は簡単のために TensorDataset を使いました。) 45/79

```
from torch.utils.data import TensorDataset

# データセットの作成

# 学習データのデータセット

train_dataset = TensorDataset(train_x, train_y)

# 検証データのデータセット

val_dataset = TensorDataset(val_x, val_y)
```

1. DataLoaderの作成(DataLoader型)

● Dataset からミニバッチを取り出して供給してくれるオブジェクト

つまり....

• データをいい感じにランダムに選んで供給する仕組みを作る

をやってくれる

1. DataLoaderの作成(DataLoader型)

● Dataset からミニバッチを取り出して供給してくれるオブジェクト

DataLoader(dataset, batch_size=batch_size, shuffle=shuffle)

```
from torch.utils.data import DataLoader

batch_size = 32
train_dataloader = DataLoader(train_dataset, batch_size=batch_size, shuffle=True, drop_last=True)
val_dataloader = DataLoader(val_dataset, batch_size=batch_size, shuffle=False)
```

⇒ これをfor文で回すことでデータを取り出すことができる

1. DataLoaderの作成(DataLoader型)

```
for inputs, targets in train_dataloader:
    print('inputs.shape', inputs.shape)
    print('targets.shape', targets.shape)
    print('-----')
```

 $\hat{\Box}$

```
inputs.shape torch.Size([32, 16])
targets.shape torch.Size([32, 1])
-----
inputs.shape torch.Size([32, 16])
targets.shape torch.Size([32, 1])
...
```

我々がやらなきゃいけないこと

• データをいい感じにランダムに選んで供給する仕組みを作る

をやってくれる





✓ データは回るようになった

⇒あとは学習を実装しよう!

TODOリスト

- 1. 損失関数を設定する
- 2. 勾配の計算を行う
- 3. パラメータの更新を行う

1. 損失関数を設定する

今回は、平均二乗和誤差(Mean Squared Error)を使う

⇒ これもPyTorchには用意されている

```
criterion = nn.MSELoss()
```

とすれば、

```
criterion(torch.tensor([1.0., 2.0, 4.0]), torch.tensor([2.0, 3.0, 4.0]))
```

と計算してくれる!

TODOリスト

- ✓ 1. 損失関数を設定する
- 2. 勾配の計算を行う
- 3. パラメータの更新を行う

2. 勾配の計算を行う

やりかたは....?

定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backw 定義→計算→backward(),定義→計算→backward(),定義→計算→ba**ckw**9

```
# ここから
import torch.nn as nn
model = nn.Sequential(
    nn.Linear(16, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1)
# ここまではすでに入力したやつ
dummy_input = torch.rand(1, 16)
dummy_target = torch.rand(1, 1)
# 計算
pred = model(dummy_input)
loss = criterion(pred, dummy_target)
# backward
loss.backward()
```

チェックポイント

1. lossに対する勾配を計算している

```
# backward
loss.backward()
```

2. 勾配はパラメータに対して計算される

```
for param in model.parameters():
    print(param.grad)
```

```
(dummy_input, dummy_target は requires_grad=False なので勾配は計算されない)
```

TODOリスト

- ✓ 1. 損失関数を設定する
- ✓ 2. 勾配の計算を行う
- 3. パラメータの更新を行う

```
for epoch in range(epochs):
   for inputs, targets in train_dataloader:
       # 計算
       outputs = model(inputs)
       loss = criterion(outputs, targets)
       # backward
       loss.backward()
       # ....
       # ここにパラメータの更新を書く
       # ....
```

これまでは、我々が手動(?)で更新するコードを書いていた



✓ torch.optimのオプティマイザを使うことで、 簡単にいろいろな最適化アルゴリズムを使える

(完成版ではないです!)

```
optimizer = optim.SGD(model.parameters(), lr=lr)
# 学習ループ
for epoch in range(epochs):
   for inputs, targets in train_dataloader:
       # 勾配の初期化
       optimizer.zero_grad()
       # 計算
       outputs = model(inputs)
       loss = criterion(outputs, targets)
       # backward
       loss.backward()
       # パラメータの更新
       optimizer.step()
```

optimizer = optim.SGD(params, lr=lr)

のようにすることで、 params を更新の対象とするオプティマイザを作成できる(lr は学習率)

他にも、 optim.Adam が使いたければ

optimizer = optim.Adam(params, lr=lr)

とするだけでOK!

⇒ 勾配を計算したあと、 optimizer.step() によってパラメータを 更新できる!

▲ 注意点

optimizer.step() で一回パラメータを更新するたびに optimizer.zero_grad() で勾配を初期化する必要がある! (これをしないと前回の backward の結果が残っておかしくなる)

⇩ 次のページ...

学習の全体像を貼ります!!!

```
n_{epoch} = 10
for epoch in range(n_epoch):
    running_loss = 0.0
    for inputs, targets in train_dataloader:
        # 前の勾配を消す
        optimizer.zero_grad()
        # 計算
        outputs = model(inputs)
        loss = criterion(outputs, targets)
        # backwardで勾配を計算
        loss.backward()
        # optimizerを使ってパラメータを更新
        optimizer.step()
        running_loss += loss.item()
    val_loss = 0.0
    with torch.no_grad():
        for inputs, targets in val_dataloader:
            outputs = model(inputs)
            loss = criterion(outputs, targets)
            val_loss += loss.item()
    # エポックごとの損失の表示
    train_loss = running_loss / len(train_dataloader)
    val_loss = val_loss / len(val_dataloader)
    print(f'Epoch {epoch + 1} - Train Loss: {train_loss:.4f} - Val Loss: {val_loss:.10f}')
```

各行の解説...

- 1行目. for epoch in range(n_epoch) n_epoch 回分の学習をする
- 2行目. running_loss = 0.0 1エポックごとの訓練データの損失を計算するための変数
- 4行目. for inputs, targets in train_dataloader 訓練データを1バッチずつ取り出す(DataLoader の項を参照してください!)
- 6行目. optimizer.zero_grad() 勾配を初期化する。二つ前のページのスライドです!
- 9,10行目. outputs = ... 損失の計算をします。

- 13行目. loss.backward() 勾配の計算です。これによって model のパラメータに損失に対する勾配が記録されます
- 16行目. optimizer.step() optimizer が記録された勾配に基づいて パラメータを更新します。
- 18行目. running_loss += loss.item() 1バッチ分の損失をrunning_loss に足しておきます。
- 20行目~25行目.1エポック分の学習が終わったら、検証データでの損失を計算します。検証用データの内容は、学習に影響させないので勾配を計算する必要がありません。したがって、 torch.no_grad() の中で計算します.

- 28行目~30行目.1エポック分の学習が終わったら、訓練データと検証データの損失を表示します。 len(train_dataloader) は訓練データが何個のミニバッチに分割されたかを表す数、 len(val_dataloader) は検証データが何個のミニバッチに分割されたかを表す数です。
- 32行目. 損失を出力します。

TODOリスト

- ✓ 1. 損失関数を設定する
- ✓ 2. 勾配の計算を行う
- ✓ 3. パラメータの更新を行う

3. 学習が完了!!!

+オプション 学習曲線を書いておこう

1. 各エポックの損失を記録する配列を作っておく

```
train_losses = []
val_losses = []
```

1. 先ほどの学習のコードの中に、損失を記録するコードを追加する

```
train_loss = running_loss / len(train_dataloader)
val_loss = val_loss / len(val_dataloader)
train_losses.append(train_loss) # これが追加された
val_losses.append(val_loss) # これが追加された
print(f'Epoch {epoch + 1} - Train Loss: {train_loss:.4f} - Val Loss: {val_loss:.10f}')
```

3. 学習が完了!!!

+オプション 学習曲線を書いておこう

matplotlib というパッケージを使うことでグラフが書ける

```
# matplotlib.pyplot を pltという名前でimport
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
plt.plot(train_losses, label='train')
plt.plot(val_losses, label='val')
plt.legend()
plt.xlabel('epoch')
plt.ylabel('loss')
plt.show()
```

⇒ いい感じのプロットを見よう!

全体の流れ

- 1. データの読み込み
- 2. モデルの構築
- 3. モデルの学習
- 4. 新規データに対する予測
- 5. 順位表への提出

4. 新規データに対する予測

思い出すシリーズ...

test に予測したい未知のデータが入っている

model(test)

⇒予測結果が出る

5. 順位表への提出

```
import csv

def write_pred(predictions, filename='submit.csv'):
    pred = predictions.squeeze().tolist()
    with open(filename, 'w', newline='') as f:
        writer = csv.writer(f)
        writer.writerows([[x] for x in pred])
```

をコピペ

5. 順位表への提出

write_pred(predictions) を実行すると、 submit.csv というファイルが作成されて、予測結果が出力される!! ⇒ これを提出しよう!

https://dacq.trap.show/

		DacQ	
投稿			
ファイル			
ファイルを選択	マ 選択されていません		
Upload			
Rank	User	Loss	
1	abap34	0.003894386693650532	

5. 順位表への提出

めざせ No.1!

できること

- モデルの構造を変えてみる
- オプティマイザーを変えてみる
- 精度が出やすいようにデータを加工する
- 任意に決めた値(batch_size , lr , n_epochs など)を変えてみる

次回:

「ニューラルネットワークの発展」

「ニューラルネットワークの発展」

- MLP以外のニューラルネットワークのアーキテクチャ
- 最近アツい話
- 今後機械学習を勉強していくにあたって

etc...

部内データ分析コンペを開始します!!!!!

- 昨年度も行った部内でのコンペを今年もやります
- 今年は、(ここだけに話) ちょっと豪華になりそうです
- 乞うご期待!!