

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 Kaggle班

2024/07/10

今日すること

.....

- PyTorch を使って実際にある情報を予測するニューラルネットワークを実装します
- データの読み込みからモデルの構築, 学習, 予測までを一通りやってみます
- **お題として今日から始めるコンペのデータを使います.**
 - **1 Sub まで一気にいきます！！**

はじめに

先に、コンペのルールなどの話をします

<https://abap34.github.io/ml-lecture/supplement/competetion.pdf>

(※ あとからこの資料を読んでいる人は飛ばしても大丈夫です)

今回のコンペのお題 ~ あらすじ ~

機械学習講習会用のオンラインジャッジを作った @abap34 は困っていました。

攻撃はやめてくださいと書いてあるのにひっきりなしに攻撃が仕掛けられるからです。

部員の個人情報とサーバとモラルが心配になった @abap34 は、飛んでくる通信を機械学習を使って攻撃かを判定することで攻撃を未然に防ぐことにしました。

あなたの仕事はこれを高い精度でおこなえる機械学習モデルを作成することです。

データ

通信ログから必要そうな情報を抽出したもの (**詳細は Data タブから**)

- 接続時間
 - ログイン失敗回数
 - 過去2秒間の接続回数
 - 特別なユーザ名 (`root`, `admin` `guest` とか) でログインしようとしたか?
- ⋮

データ

.....

- train.csv
 - 学習に使うデータ
- train_tiny.csv (👉 **時間と説明の都合上 今日はこちらを使います**)
 - 学習に使うデータの一部を取り出し,一部を削除
- test.csv
 - 予測対象のデータ
- test_tiny.csv (👉 **時間と説明の都合上 今日はこちらを使います**)
 - 予測対象のデータの欠損値を埋めて,一部のカラムを削除
- sample_suboldsymbolission.csv
 - 予測の提出方式のサンプル (値はでたらめ)

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

全体の流れ1 ~モデルに入力するまで

1-0. データのダウンロード



1-1. データの読み込み



1-2. データの前処理



1-2. PyTorchに入力できる形に

1-0. データのダウンロード

✓ セルに以下をコピーして実行

```
!curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/train_tiny.csv -o train.csv
!curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/test_tiny.csv -o test.csv
!curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/sample_submission.csv -o sample_submission.csv
```

```
秒 ▶ 1 !curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/train_tiny.csv -o train.csv
2 !curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/test_tiny.csv -o test.csv
3 !curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/sample_submission.csv -o sample_submission.csv
```

```
↔ % Total    % Received % Xferd  Average Speed   Time    Time     Time  Current
   % Total    % Received % Xferd  Average Speed   Time    Time     Time  Current
  Dload  Upload  Total    Spent    Left    Speed
100  583k    100  583k    0      0  1900k      0 --:--:-- --:--:-- --:--:-- 1900k
   % Total    % Received % Xferd  Average Speed   Time    Time     Time  Current
  Dload  Upload  Total    Spent    Left    Speed
100 5799k    100 5799k    0      0  16.6M      0 --:--:-- --:--:-- --:--:-- 16.7M
   % Total    % Received % Xferd  Average Speed   Time    Time     Time  Current
  Dload  Upload  Total    Spent    Left    Speed
100  484k    100  484k    0      0  2053k      0 --:--:-- --:--:-- --:--:-- 2060k
```

Jupyter Notebook では、先頭に **!** をつけることで、シェルコマンドを実行できます。

1-0. データのダウンロード

✓ 左の 📁 > train.csv, test.csv, sample_submission.csv で表が見えるようになっていたら OK !

The screenshot shows a Jupyter Notebook environment. On the left, a file explorer displays a folder named 'sample_data' containing three files: 'sample_submission.csv', 'test.csv', and 'train.csv'. The main notebook area contains three code cells. The first cell, labeled '[1]', contains three curl commands to download data from 'www.abap34.com'. The second cell, labeled '[2]', contains Python code to load the downloaded CSV files into pandas DataFrames. The third cell, labeled '[3]', contains a line of code to map the 'class' column of the 'train' DataFrame. On the right side of the notebook, a preview of the 'train.csv' file is shown as a table.

```
1 !curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/train_tiny.csv -o train.csv
2 !curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/test_tiny.csv -o test.csv
3 !curl https://www.abap34.com/trap_ml_lecture/public-data/sample_submission.csv -o sample_submission.csv
```

id	duration	src_bytes	ds
98643	0.0	0.0	0.0
40263	0.0	0.0	0.0
47961	0.0	6.0	0.0
37672	0.0	166.0	22
112203	0.0	0.0	0.0
56047	0.0	317.0	71
123632	0.0	145.0	36
65616	0.0	35.0	0.0
33403	0.0	0.0	0.0
20170	0.0	0.0	0.0

Show 10 per page

1-1. データの読み込み

.....

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

```
# 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")
```

パスとは、コンピュータ上のファイルやフォルダへの経路のことです。

今回は train.csv と test.csv がノートブックと同じ階層にあるので、train.csv と test.csv までの経路は、ファイル名をそのまま指定するだけで大丈夫です。
ほかにも たとえば `../train.csv` と指定すると ノートブックの一つ上の階層にある train.csv というファイルを読み込みます。

1-1. データの読み込み

```
[10] 1 import pandas as pd
      2
      3 train = pd.read_csv("train.csv")
      4 test = pd.read_csv('test.csv')
```

```
[11] 1 train
```

```
↔ wrong_fragment urgent ... serror_rate srv_serror_rate rerror_rate srv_rerror_rate same_srv_rate diff_srv_rate srv_diff_host_rate ds
      0.0      0.0  ...    0.000000          0.000000    0.970555          0.871439          0.135961          0.074646          0.000000
      0.0      0.0  ...    1.024065          0.920154    0.000000          0.000000          0.095575          0.073942          0.000000
      0.0      0.0  ...    0.000000          0.000000    0.000000          0.000000          1.024575          0.000000          0.976209
      0.0      0.0  ...    0.000000          0.000000    0.000000          0.000000          0.953422          0.000000          0.000000
      0.0      0.0  ...    0.959654          0.926067    0.000000          0.000000          0.074621          0.065885          0.000000
      ...      ...  ...          ...              ...          ...              ...              ...              ...              ...
      0.0      0.0  ...    0.959072          0.994436    0.000000          0.000000          0.105512          0.069615          0.000000
```

セルに単に変数をかくと中身を確認できます！ (Jupyter Notebook の各セルは最後に評価された値を表示するためです)
さっとデバッグするときに便利です. 中身がわからなくなったらとりあえず書いて実行してみましょう.

1-1. データの読み込み

今まで



```
x = [1, 2, 3, 4, 5]
y = [2, 4, 6, 8, 10]

def loss(a):
    ...
```



今回も入力と出力 (の目標) にわけておく

1-1. データの読み込み

```
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['class']
```



1-1. データの読み込み

```
train_y = train['class']
```

⇒ `train_y` に攻撃? or 通常? の列
が入る👏👏

```
[6] 1 train_y = train['class']
```

```
[7] 1 train_y
```

```
0      attack
1      attack
2      attack
3     normal
4      attack
```

```
...
3623    attack
3624    attack
3625    attack
3626    attack
3627    normal
```

```
Name: class, Length: 3628, dtype: object
```

1-1. データの読み込み

機械学習モデルは **直接的には** 数以外
は扱えないので数に変換しておく.

```
train_y = train['class'].map({
    'normal': 0,
    'attack': 1
})
```

```
[4] 1 train_y = train['class'].map({
    2     'normal': 0,
    3     'attack': 1
    4 })
```

```
1 train_y
```

0	1
1	1
2	1
3	0
4	1
..	
3623	1
3624	1
3625	1
3626	1
3627	0

Name: class, Length: 3628, dtype: int64

1-1. データの読み込み

逆に, モデルに入力するデータは `train` から さっきの列 (と `id`) 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 `train.drop(columns=['id', 'class'])`

1-1. データの読み込み

```
train_x = train.drop(columns=['id', 'class'])
test_x = test.drop(columns=['id'])
```

⇒ `train_x` にさっきの列と `id` を除いたもの, `test_x` に `id` を除いたものが入る🙌🙌

```
[36] 1 train_x
```



	duration	src_bytes	dst_bytes	land	wrong_
0	0.0	0.0	0.0	0	
1	0.0	0.0	0.0	0	
2	0.0	6.0	0.0	0	
3	0.0	166.0	2256.0	0	
4	0.0	0.0	0.0	0	
...
3623	0.0	0.0	0.0	0	
3624	0.0	695.0	0.0	0	
3625	0.0	1364.0	0.0	0	
3626	0.0	990.0	0.0	0	
3627	0.0	120.0	0.0	0	

3628 rows x 30 columns

1-1. データの読み込み

✓ データの読み込みが完了!

今の状況整理

- `train_x` ... モデルに入力するデータ(接続時間,ログイン失敗回数,etc...)
- `train_y` ... モデルの出力の目標(攻撃? 通常?)
- `test_x` ... 予測対象のデータ

が入ってる

1-2. データの前処理

✓ 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
(極端な例... 平均が 10^{18} の列があったらすぐオーバーフローしてしまうので平均を引く)

今回は各列に対して「**標準化**」をします

1-2. データの前処理

標準化

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

(μ は平均, σ は標準偏差)

1. 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 $\mu_1 - \mu_2$
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 σ_1 / σ_2

⇒ 標準化で **平均を0, 標準偏差を1** にできる

初期化の際の議論を思い出すとこのようなスケーリングを行うことは自然な発想だと思います。

NN の入力の標準化については, LeCun, Yann, et al. "Efficient BackProp." Lecture Notes in Computer Science 1524 (1998): 5-50. にもう少し詳しく議論が載っていたので気になる人は読んでみてください。

1-2. データの前処理

✓ `scikit-learn` というライブラリの `StandardScaler` クラスを使うと、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

scaler = StandardScaler()

# 計算に必要な量（平均,標準偏差）を計算
scaler.fit(train_x)

# 実際に変換
train_x = scaler.transform(train_x)
test_x = scaler.transform(test_x)
```

`scaler.fit` によって引数で渡されたデータの各列ごとの平均と標準偏差が計算され、`scaler` に保存されます。そして、`scaler.transform` によってデータが実際に標準化されます。勘がいい人は「`test` に対しても `train_x` で計算した平均と標準偏差を使って標準化しているけど大丈夫なのか？」と思ったかもしれないですね。結論から言うとそうなのですが意図しています。ここに理由を書いたら信じられないくらいはみ出てしまったので、省略します。興味がある人は「Kaggleで勝つデータ分析の技術」p.124などを参照してみてください。

1-2. データの前処理

.....

```
train_x
```

```
test_x
```

などを実行してみると、確かに何かしらの変換がされている！ 🙌
(ついでに結果がテーブルから単なる二次元配列 (`np.ndarray`) に変換されてる)

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.

1-2. データの前処理

ので `train_y` もここで中身を取り出して `np.ndarray` にしておく.

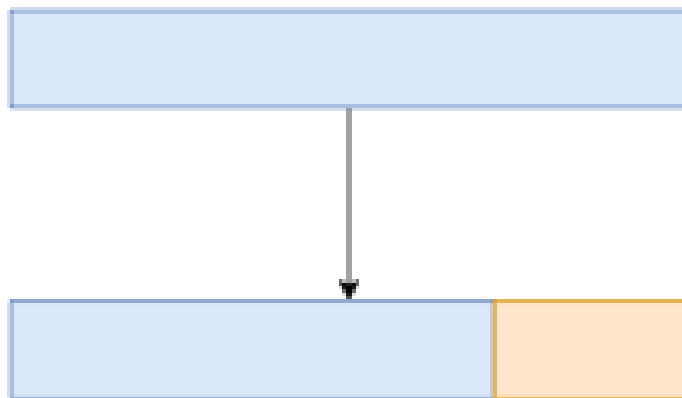
1. `train_y.values` で 中身の値を取り出せる.
2. `arr.reshape(-1, 1)` で `arr` を $N \times 1$ の形に変換できる

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

`np.ndarray` のメソッド `reshape` はその名の通り配列の形を変えるメソッドです. そして `-1` は「他の次元の要素数から自動的に決定する」という意味です. 例えば, 3×4 の配列に対して `.reshape(-1, 2)` とすると 6×2 にしてくれます. (2次元目が 2 と確定しているので勝手に 6 と定まる)

1-2. データの前処理 - バリデーション

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

`sklearn.model_selection.train_test_split` による分割

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

- `train_x`, `train_y` : 分割するデータ
- `test_size` : テストデータの割合
- `random_state` : **乱数のシード** ➡重要！！

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)
```

乱数シードを固定しよう！！

乱数に基づく計算がたくさん



実行するたびに結果が変わって、
めちゃくちゃ困る😓



乱数シードを固定すると、
毎回同じ結果になって



再現性確保

実際はそんな素朴な世の中でもなく、環境差異であったり、並列処理をしたとき（とくに GPU が絡んだとき）には単に乱数シードを固定するような見ためのコードを書いても結果が変わりがちで、困ることが多いです。対処法もいろいろ考えられているので、気になる人は jax の乱数生成の仕組みなどを調べてみると面白いかもしれません。

```
✓ [6] 1 import numpy as np  
0秒 2  
3 np.random.rand()
```

⇒ 0.09270375533413333

```
✓ [7] 1 np.random.rand()  
0秒
```

⇒ 0.6328926864844773

```
✓ [8] 1 np.random.seed(34)  
0秒
```

```
✓ [9] 1 np.random.rand()  
0秒
```

⇒ 0.038561680881409655

```
✓ [10] 1 np.random.seed(34)  
0秒
```

```
✓ [11] 1 np.random.rand()  
0秒
```

⇒ 0.038561680881409655

1-2. データの前処理 - バリデーション

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

```
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)
```

結果を確認すると...

```
train_x.shape
```

```
val_x.shape
```

確かに 7:3 くらいに分割されていることがわかる

1-3. PyTorchに入力できる形に

- ✓ PyTorchで扱える形にする

1-3. PyTorchに入力できる形に

数として **Tensor型** を使って自動微分などを行う

```
>>> 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型に直しておく必要あり

再掲: Tensor 型のつくりかた

`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 (gradient)を保持するかどうかのフラグ
 - デフォルトは `False`
 - 勾配の計算(自動微分)を行う場合は `True` にする
 - このあとこいつを微分の計算に使いますよ～という表明

1-3. PyTorchに入力できる形に

⚠ 我々が勾配降下法で使うのは,

各 **パラメータ** の損失に対する勾配



入力データの勾配は不要なので `requires_grad=True` とする必要はないことに注意！

1-3. PyTorchに入力できる形に

✓ 単にこれで OK !

```
import torch

train_x = torch.tensor(train_x, dtype=torch.float32)
train_y = torch.tensor(train_y, dtype=torch.float32)
val_x = torch.tensor(val_x, dtype=torch.float32)
val_y = torch.tensor(val_y, dtype=torch.float32)
test_x = torch.tensor(test_x, dtype=torch.float32)
```

全体の流れ1 ~モデルに入力するまで

✓ 1-0. データのダウンロード



✓ 1-1. データの読み込み



✓ 1-2. データの前処理



✓ 1-2. PyTorchに入力できる形に

全体の流れ

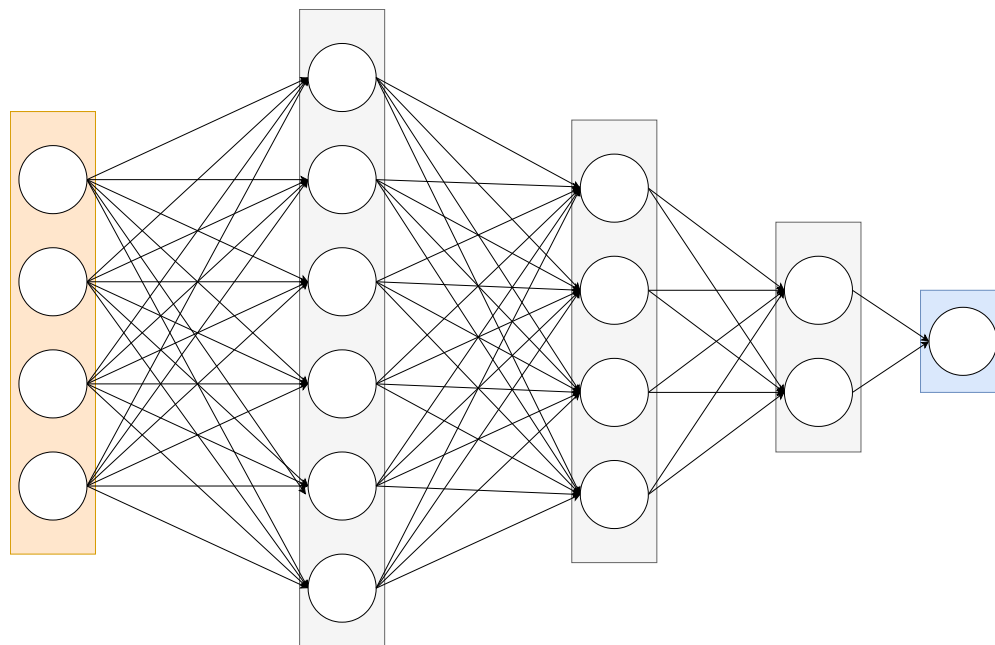


1. データの読み込み
2. モデルの構築
3. モデルの学習
4. 新規データに対する予測
5. 順位表への提出

2. モデルの構築

今からすること...

$f(x; \theta)$ をつくる



2. モデルの構築

`torch.nn.Sequential` によるモデルの構築



✓ `torch.nn.Sequential` を使うと 一直線 のモデルを簡単に定義できる.

```
import torch.nn as nn

model = nn.Sequential(
    nn.Linear(30, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1)
)
```

2. モデルの構築 ~ 二値分類の場合

二値分類の場合

⇒ 最後に **シグモイド関数** をかけることで出力を $[0, 1]$ の中に収める.

```
import torch.nn as nn

model = nn.Sequential(
    nn.Linear(30, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1),
    nn.Sigmoid() # <- ここ重要!
)
```

2. モデルの構築

```
import torch.nn as nn

model = nn.Sequential(
    nn.Linear(30, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1),
    nn.Sigmoid()
)
```

⇒ 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

引数に層を順番に渡すことで、モデルを構築してくれる！

→ 「全結合層($W \in \mathbb{R}^{30,32}$) → シグモイド関数 → 全結合層($W \in \mathbb{R}^{32,64}$) → シグモイド関数 → 全結合層($W \in \mathbb{R}^{64,1}$)」
という MLP の定義

2. モデルの構築

`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()
```

各全結合層のパラメータ $W^{(i)}$, $b^{(i)}$
が見える 👁️👉

0.038561680881409655

✓
6 秒

```
1 import torch.nn as nn
2
3 model = nn.Sequential(
4     nn.Linear(16, 32),
5     nn.Sigmoid(),
6     nn.Linear(32, 64),
7     nn.Sigmoid(),
8     nn.Linear(64, 1)
9 )
```

✓
0 秒

```
[13] 1 model.state_dict()
```

```
OrderedDict([('0.weight',
  tensor([[ 1.5935e-01,  1.1
           7.4866e-02, -2.0
           1.0282e-01,  4.6
          -1.9607e-01],
          [ 6.8658e-02, -2.4
           2.4991e-02, -8.8
          -9.1278e-02,  1.0
           1.3355e-01],
          [-1.5368e-01, -2.0
          -1.1788e-01, -1.7
           1.5117e-01, -1.3
```

2. モデルの構築

✓ 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, 30)
model(dummy_input)
```

`torch.rand(shape)` で,形が `shape` のランダムな `Tensor` が作れる

⇒ モデルに入力して計算できることを確認しておく！

(現段階では乱数でパラメータが初期化されたモデルに乱数を入力しているので値に意味はない)

2. モデルの構築

✓ $f(x; \theta)$ 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！





思い出すシリーズ

確率的勾配降下法

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

全体の流れ3. モデルの学習

3-1. 確率的勾配降下法の準備



3-2. 確率的勾配降下法の実装

確率的勾配降下法

.....

確率的勾配降下法 (SGD)

データの **一部** をランダムに選んで,
そのデータに対する勾配を使ってパラメータを更新する


3-1. 確率的勾配降下法の準備

整理: 我々がやらなきゃいけないこと

☞ データをいい感じに選んで供給する仕組みを作る

3-1. 確率的勾配降下法の準備

 < 私がやります

 `torch.utils.data.Dataset`, `torch.utils.data.DataLoader` を

使うと簡単に実装できる！

3-1. 確率的勾配降下法の準備

現状確認 🙌

`train_x` , `train_y` , `val_x` , `val_y` , `test_x` にデータが
`Tensor` 型のオブジェクトとして格納されている.

3-1. 確率的勾配降下法の準備

1. Datasetの作成 (Dataset)

- データセット (データの入出力のペア $\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$) を表すクラス

3-1. 確率的勾配降下法の準備

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 のサブクラスである TensorDataset が作れる！

```
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)
```

実際は torch.utils.data.Dataset を継承したクラスを作ることも Dataset 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ふつうはこれを使います (今回は簡単のために TensorDataset を使いました)

3-1. 確率的勾配降下法の準備

1. DataLoaderの作成 (DataLoader)

- Dataset から一部のデータ (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....

整理: 我々がやらなきゃいけないこと

👉 データをいい感じに選んで供給する仕組みを作る

をやってくれる

3-1. 確率的勾配降下法の準備

1. DataLoaderの作成 (DataLoader)

- 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

3-1. 確率的勾配降下法の準備

1. DataLoaderの作成(DataLoader型)

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



```
inputs.shape torch.Size([32, 30])  
targets.shape torch.Size([32, 1])  
-----  
inputs.shape torch.Size([32, 30])  
targets.shape torch.Size([32, 1])  
...
```

✓ データセットを一回走査するまでループが回ることを確認しよう！

3-1. 確率的勾配降下法の準備

.....

✓ DatasetとDataLoaderの作成

```
from torch.utils.data import TensorDataset, DataLoader

# 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)
```

3-1. 確率的勾配降下法の準備

整理: 我々がやらなきゃいけないこと

☞ データをいい感じに選んで供給する仕組みを作る

 **Done!**

3.2 確率的勾配降下法の実装

✓ データは回るようになった

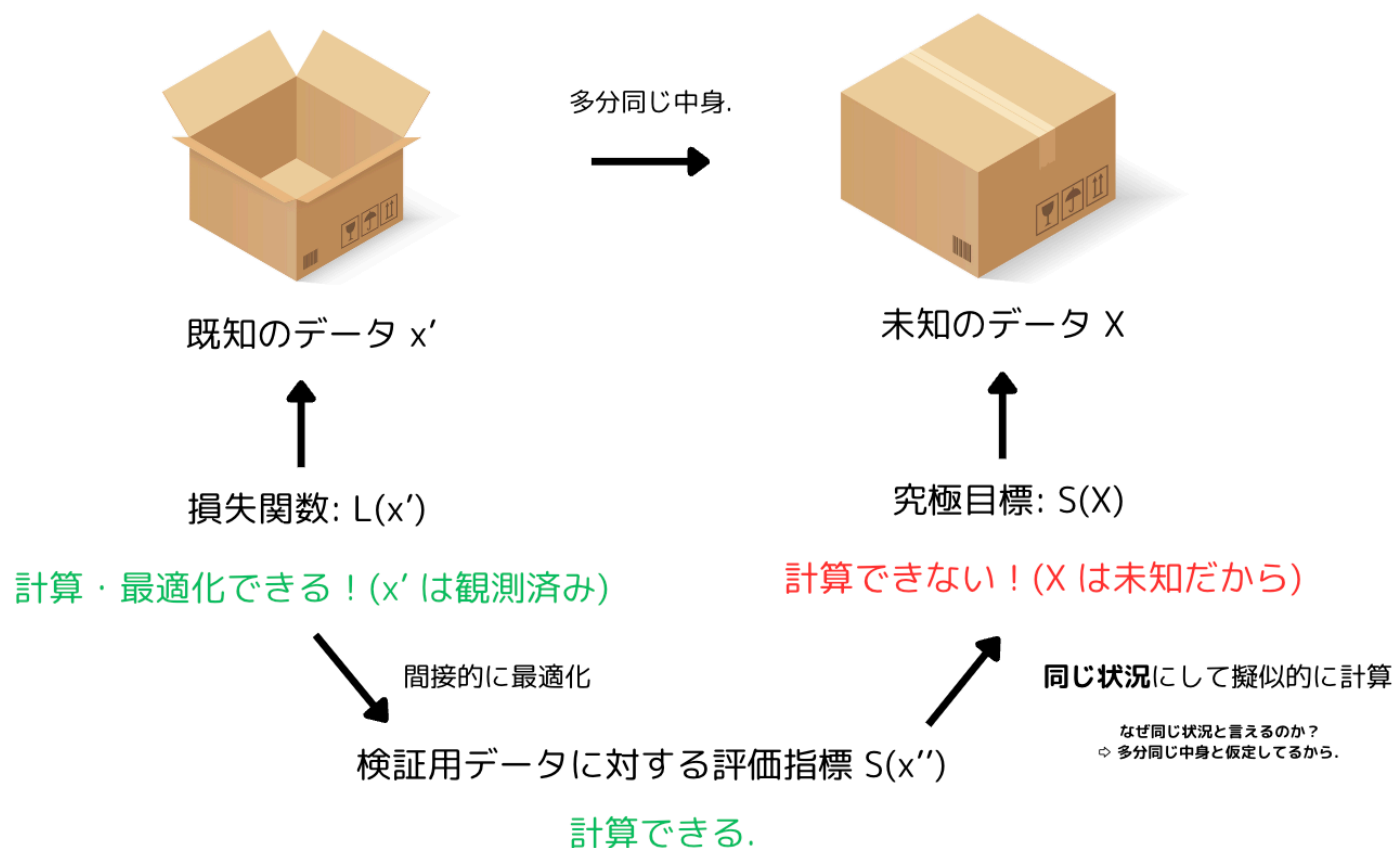
⇒あとは学習を実装すればOK！

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

3.2 確率的勾配降下法の実装: 損失関数の設定

1. 損失関数は何のためにあるのか？



3.2 確率的勾配降下法の実装: 損失関数の設定

今回の評価指標 📌 **正解率!**

3.2 確率的勾配降下法の実装: 損失関数の設定

今までは評価指標もすべて平均二乗和誤差だった



平均二乗誤差は微分可能なのでこれを **損失関数** として勾配降下法で最適化すれば



評価指標である 平均二乗誤差も最適化できた

3.2 確率的勾配降下法の実装: 損失関数の設定

正解率は直接最適化できる？

⇒ **No!!**

正解率の微分

パラメータを微小に変化させても
正解率は変化しない！

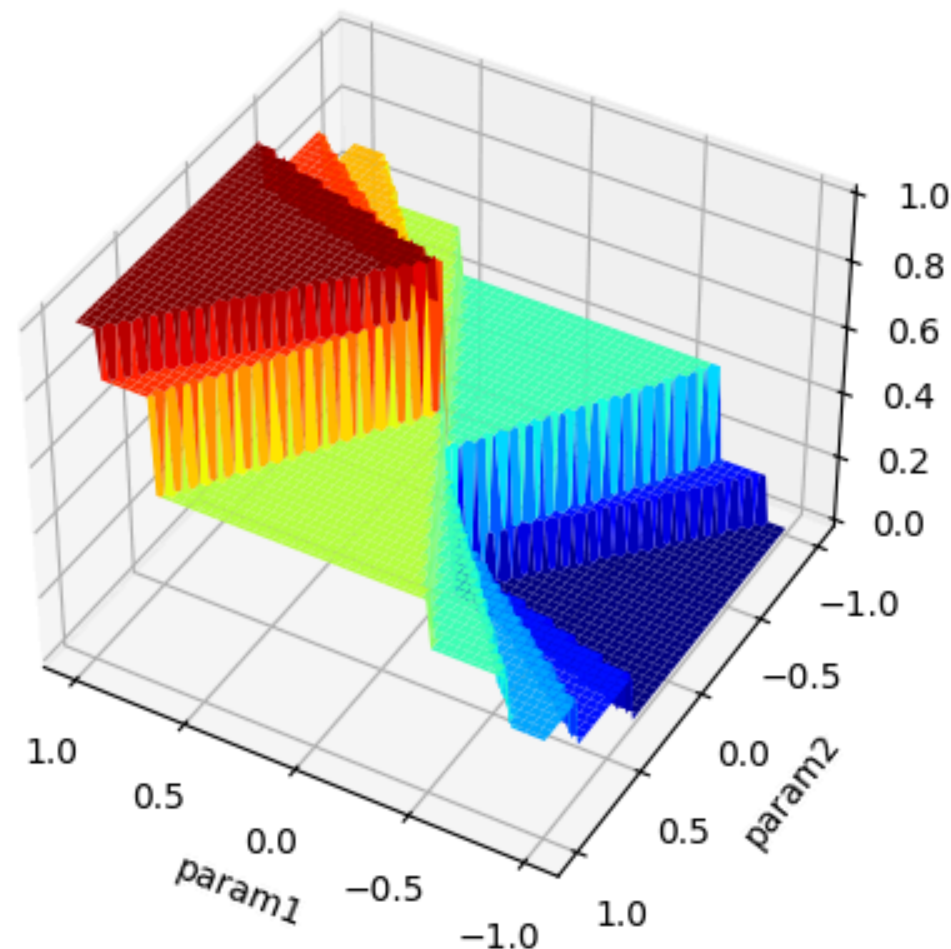
⇒ 正解率は,

- ほとんどの点で微分係数 0
- 変わるところも微分不可能



勾配降下法で最適化できない

右のグラフは、適当に作った二値分類 ($\mathbb{R}^2 \rightarrow \{0, 1\}$) のタスクをロジスティック回帰というモデルで解いたときの、パラメータ平面上的正解率をプロットしてみたものです。これを見ればほとんどのところが微分係数が 0 (\leftrightarrow 平坦) で、変わるところも微分不可 (\leftrightarrow 鋭い) ことがわかります。



正解率を間接的に最適化する

どうするか？

⇒ こういう分類を解くのに向いている損失関数を使って **間接的に** 正解率を上げる.

Binary Cross Entropy Loss

.....

二値交差エントロピー誤差 (Binary Cross Entropy Loss)

$$-\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \log(f(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f(x_i))$$

Binary Cross Entropy Loss

$$-\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \log(f(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f(x_i))$$

確認してほしいこと:

- 正解 y_i と予測 $f(x_i)$ が近いほど値は小さくなっている。
($y_i \in \{0, 1\}$ なのでそれぞれの場合について考えてみるとわかる)
- 微分可能である

👉 なので、損失関数として妥当

これもやはり二乗和誤差のときと同様に同様に尤度の最大化として **導出** できます。

Binary Cross Entropy Loss

✓ PyTorch では, `torch.nn.BCELoss` で使える !

```
import torch

criterion = torch.nn.BCELoss()

y = torch.tensor([0.0, 1.0, 1.0])
pred = torch.tensor([0.1, 0.9, 0.2])

loss = criterion(pred, y)
print(loss)    # ⇒ tensor(0.6067)
```

3.2 確率的勾配降下法の実装

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

3.2 確率的勾配降下法の実装

2. 勾配の計算を行う

やりかたは....？

3.2 確率的勾配降下法の実装

定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義
定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義→計算→backward(), 定義

損失に対するパラメータの勾配の計算例

```
# ここから
model = nn.Sequential(
    nn.Linear(30, 32),
    ...
)
# ここまでが "定義"

dummy_input = torch.rand(1, 30)
dummy_target = torch.rand(1, 1)

# "計算"
pred = model(dummy_input)
loss = criterion(pred, dummy_target)

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

3.2 確率的勾配降下法の実装

✓ 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)

3.2 確率的勾配降下法の実装

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

3.2 確率的勾配降下法の実装

```
for epoch in range(epochs):
    for inputs, targets in train_data_loader:
        # 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
        # ....
        # -----
```

3.2 確率的勾配降下法の実装

これまでは、我々が手動(?)で更新するコードを書いていた

⇒ 🔥 < **私がやります**

✅ 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

3.2 確率的勾配降下法の実装

(⚠: 完成版ではない)

```
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()
```

3.2 確率的勾配降下法の実装

✓ `optimizer = optim.SGD(params)` のようにすることで
`params` を勾配降下法で更新するオプティマイザを作成できる！

たとえば Adam が使いたければ `optimizer = optim.Adam(params)` とするだけでOK！



勾配を計算したあとに `optimizer.step()` を呼ぶと、
各 `Tensor` に載っている勾配の値を使ってパラメータを更新してくれる

3.2 確率的勾配降下法の実装

⚠ 注意 ⚠

`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` の結果が残っていておかしくなる)

↓ 次のページ...

学習の全体像を貼ります！！！！

3.2 確率的勾配降下法の実装

```
from torch import nn

model = nn.Sequential(
    nn.Linear(30, 32),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(32, 64),
    nn.Sigmoid(),
    nn.Linear(64, 1),
    nn.Sigmoid()
)

optimizer = torch.optim.SGD(model.parameters(), lr=1e-2)
criterion = torch.nn.BCELoss()

n_epoch = 100
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 (for文以降)

- 1行目. `for epoch in range(n_epoch)` データ全体を `n_epoch` 回まわす
- 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.

3.2 確率的勾配降下法の実装

- 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バリデーションデータでの損失を計算します. バリデーション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.

3.2 確率的勾配降下法の実装

- 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. これで割って平均の値にします.
- 32行目. 損失を出力します.

3.2 確率的勾配降下法の実装

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

バリデーション

バリデーションデータで 今回の評価指標である正解率がどのくらいになっているか計算しておく！

👉 これがテストデータに対する予測精度のめやす.

正解率の計算

1. 0.5 以上なら異常と予測する.

```
val_pred = model(val_x) > 0.5
```

2. `torch.Tensor` から `numpy.ndarray` に変換する

```
val_pred_np = val_pred.numpy().astype(int)  
val_y_np = val_y.numpy().astype(int)
```

2. `sklearn.metrics` の `accuracy_score` を使って正解率を計算する

```
from sklearn.metrics import accuracy_score  
accuracy_score(val_y_np, val_pred_np) # ⇒ (乞うご期待. これを高くできるように頑張る)
```

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}')
```

(各 エポックで正解率も計算するとより実験がしやすくなるので実装してみよう)

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が見れる

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

そういえば 💡

`test_x` に予測したい未知のデータが入っている

```
model(test_x)
```

⇒ 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()
    assert set(pred) == set([True, False])
    pred_class = ["attack" if x else "normal" for x in pred]
    sample_submission = pd.read_csv('sample_submission.csv')
    sample_submission['pred'] = pred_class
    sample_submission.to_csv('submit.csv', index=False)
```

をコピペ

→

5. 順位表への提出

予測結果 (True , False からなる Tensor)

```
pred = model(test_x) > 0.5
```

を作って,

```
write_pred(pred)
```

すると,

5. 順位表への提出

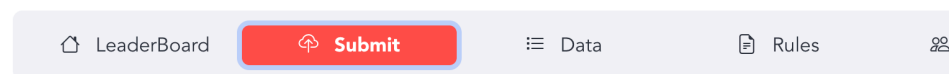
 > submit.csv

ができる！

👉 ダウンロードして, submit から投稿！ **順位表に乗ろう！**

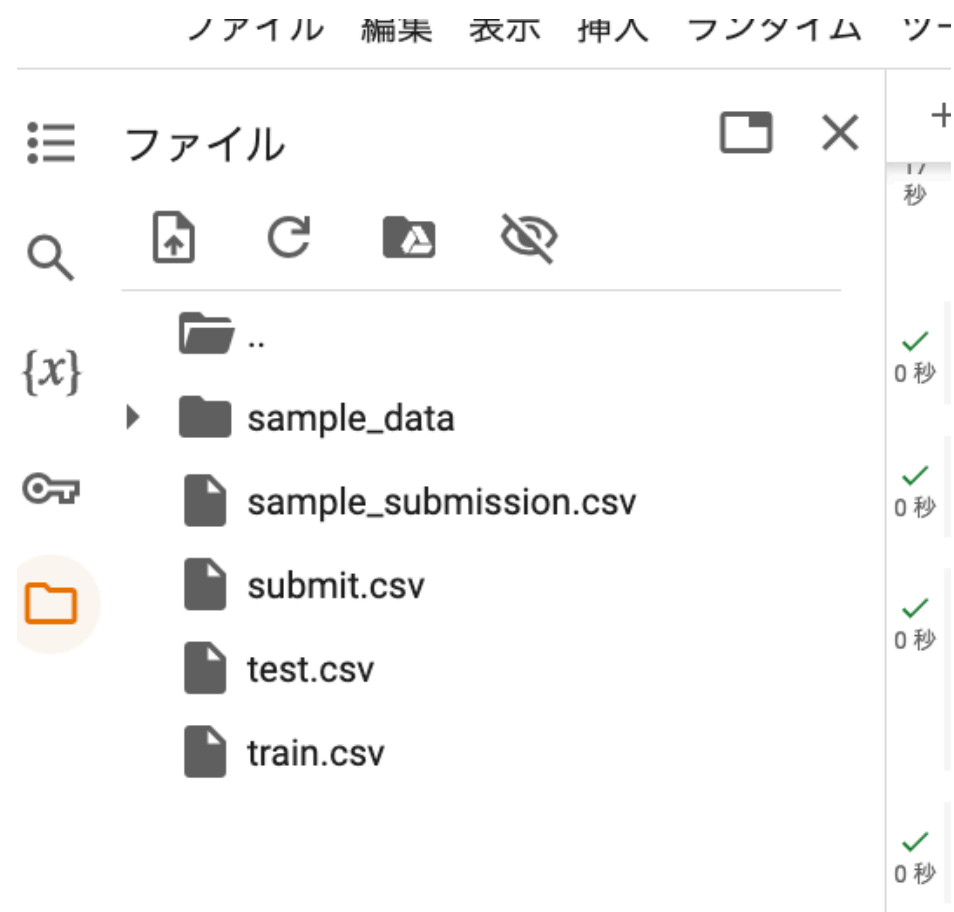
開催中のコンペ:

機械学習講習会 2024 記念 部内コンペ 🐦 📊



Login as abap34

Team: team 41



5. 順位表への提出

めざせ No.1 !