◎ Step1 モデルを決める

家賃 y
- 広さ x_1
- 距離 x_2
- ⋮
- 治安 x_M

M : 入力変数の数

$$\underbrace{\hat{y}}_{予測値} = \underbrace{w_1 \overset{30m^2}{x_1} + w_2 \overset{500m}{x_2} + \cdots + \overset{0.03}{w_M} x_M}_{重み\ (weight)} + \underbrace{b}_{バイアス}$$

$$b = w_0 \times \underbrace{1}_{x_0}$$

$$\hat{y} = w_0 x_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_M x_M$$

$$\hat{y} = \underbrace{\begin{bmatrix} w_0 & w_1 & \cdots & w_M \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{w}^T} \underbrace{\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_M \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$$

$$\hat{y} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_0 & x_1 & \cdots & x_M \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}^T} \underbrace{\begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_M \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{w}} = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{w}$$

◎ Step2 「評価関数」を決める

パラメータ $\underbrace{\overset{M}{w},\ \overset{1}{b}}_{M+1}$

$(\underbrace{y}_{実測値} - \underbrace{\hat{y}}_{予測値})^2$ → 2乗誤差

評価関数

$$\mathcal{L} = (y_1 - \hat{y}_1)^2 + (y_2 - \hat{y}_2)^2 + \cdots + (y_N - \hat{y}_N)^2$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 - \hat{y}_1 & y_2 - \hat{y}_2 & \cdots & y_N - \hat{y}_N \end{bmatrix}}_{(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})^T} \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 - \hat{y}_1 \\ y_2 - \hat{y}_2 \\ \vdots \\ y_N - \hat{y}_N \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}}$$

$$= (\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})^T (\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})$$

キカガク

No. 4 重回帰分析2

Date

◎STEP3 評価関数を「最小化」する

✓STEP 3-1 式変形を行う

STEP1

$$\hat{y}_1 = x_1^T w$$

$$\mathcal{L} = (y-\hat{y})^T(y-\hat{y})$$

$$\hat{y} = \begin{bmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^T w \\ x_2^T w \\ \vdots \\ x_N^T w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_N^T \end{bmatrix} w$$

サンプル

$$\begin{array}{l} \text{1件目} \\ \text{2件目} \\ \vdots \\ \text{N件目} \\ \\ \end{array} \underbrace{\begin{array}{c} \begin{bmatrix} x_{10} & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1M} \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2M} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N0} & x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{NM} \end{bmatrix} \\ \begin{array}{ccccc} \underbrace{1}_{\text{ダミー}} & \text{広さ} & \text{距離} & & \text{治安} \end{array} \end{array}}_{\text{入力変数}\ =\ X} \begin{array}{l} x_1^T \\ x_2^T \\ \\ x_N^T \end{array} w$$

$$\Rightarrow \hat{y} = Xw$$

$$\hat{y} = Xw$$

$$\mathcal{L} = (y-\hat{y})^T(y-\hat{y})$$

$$= (y - Xw)^T(y - Xw)$$

$$= \{y^T - \underbrace{(Xw)^T}_{w^TX^T}\}(y - Xw)$$

$$= (y^T - w^TX^T)(y - Xw)$$

$$= y^Ty - \underbrace{y^TXw}_{\text{スカラー}} - \underbrace{w^TX^Ty}_{\text{スカラー}} - w^TX^TXw$$

① $(1)^T = 1$

スカラーは転置しても同じ

② $(ABC)^T = C^TB^TA^T$

$(y^TXw)^T = y^TXw$ ①

$\rightarrow w^TX^Ty$ ②

同じ

$$\Rightarrow \mathcal{L} = y^Ty - 2y^TXw + w^TX^TXw$$

ベクトル b

$2(X^T y)$　　Aベクトル

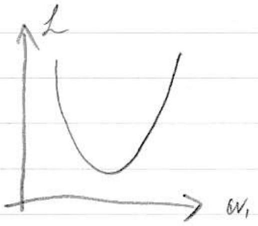
$$\mathcal{L} = \underbrace{y^T y}_{C=\text{スカラー}} - 2\underline{y^T X}\, w + w^T \underline{X^T X}\, w$$

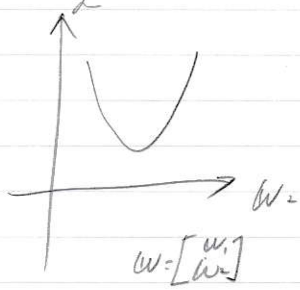
最小化したい

$$= C + b^T w + w^T A w$$

✓ STEP 3-2　最適なパラメータwを求める

$$\mathcal{L} = c + b^T w + w^T A w$$





$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$　$b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$　$C = 1$　$w = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}$

$$\mathcal{L} = 1 + \begin{bmatrix} 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} w_1 & w_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}$$

$$= 1 + w_1 + 2w_2 + \begin{bmatrix} w_1 & w_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 + 2w_2 \\ 3w_1 + 4w_2 \end{bmatrix}$$

$$= 1 + w_1 + 2w_2 + w_1(w_1 + 2w_2) + w_2(3w_1 + 4w_2)$$

$$= 1 + w_1 + 2w_2 + 5w_1 w_2 + w_1^2 + 4w_2^2$$

w_1

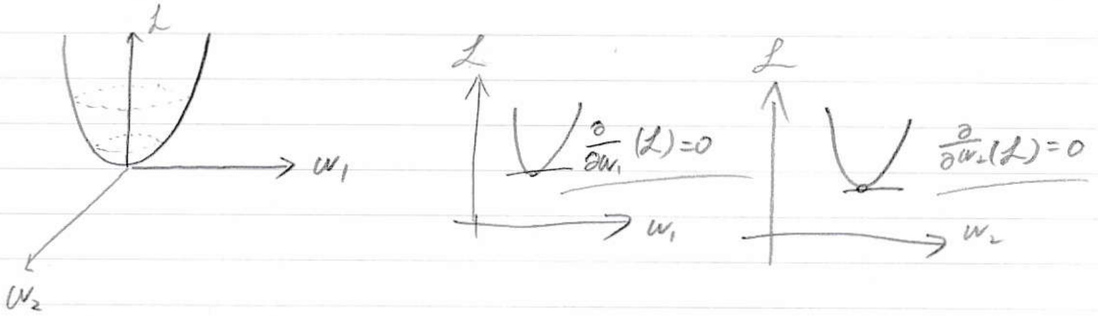
$$\mathcal{L} = w_1^2 + (5w_2 + 1)w_1 + (1 + 2w_2 + 4w_2^2)$$

w_1に関して
2次関数

w_2

$$\mathcal{L} = w_2^2 + (5w_1 + 2)w_2 + (1 + w_1 + w_1^2)$$

w_2に関しても
2次関数



$$
\underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial w_0}(L) \\ \frac{\partial}{\partial w_1}(L) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial w_m}(L) \end{bmatrix}}_{\frac{\partial}{\partial w}(L)} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}}_{\mathbb{0}}
$$

ベクトルで微分
↳最適なパラメータ
分かる!!

$$\frac{\partial}{\partial w}(L) = 0$$

ベクトルで微分の
公式

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial w}(c + b^T w + w^T A w) = 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\partial}{\partial w}(c)}_{① \Rightarrow 0} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial w}(b^T w)}_{② \Rightarrow b} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial w}(w^T A w)}_{③ \Rightarrow (A+A^T)w} = 0$$

$b = -2X^T y$ $\quad$ $A = X^T X$

$(AB)^T = B^T A^T$

$$\Rightarrow -2X^T y + \{X^T X + \underbrace{(X^T X)^T}_{X^T X}\} w = 0$$

$$\Rightarrow -2X^T y + 2X^T X w = 0$$

$$\Rightarrow \cancel{2}X^T X w = \cancel{2}X^T y$$

$\Rightarrow$

$\Rightarrow X^TXw = X^Ty$

両辺に左側から$(X^TX)^{-1}$をかける

$$\Rightarrow \underbrace{(X^TX)^{-1}(X^TX)}_{I:\text{単位行列}}w = (X^TX)^{-1}X^Ty$$

$$\Rightarrow Iw = (X^TX)^{-1}X^Ty$$

$$\Rightarrow w = (X^TX)^{-1}X^Ty$$

$$\cancel{w = \frac{X^Ty}{X^TX}}$$

線形代数で割り算×

◎よく出る式変形への質問

$$X^TXw = X^Ty$$

$(X^TX)^{-1}$

それぞれ$(X^T)^{-1}$じゃダメなの!?

$$\underbrace{(X^T)^{-1}X^T}_{I}Xw = \underbrace{(X^T)^{-1}X^T}_{I}y$$

$$Xw = y$$

$$\Rightarrow \underbrace{(X)^{-1}X}_{I}w = (X)^{-1}y$$

$$\Rightarrow w = X^{-1}y \quad \times$$

×

○ $w = (X^TX)^{-1}X^Ty$

逆行列の条件

Aが正方行列であること

$$\begin{array}{c|c} & 1,\ \text{広さ},\ \text{治安} \cdots 10 \\ \begin{array}{c}1\\2\\\vdots\\100\end{array} & \begin{bmatrix} 1000\times10 \\ \| \\ X \end{bmatrix}\end{array}$$

$X^T \Rightarrow 10\times1000$

$(X^T)^{-1}$ ⇐ 計算不可

$(X^TX)^{-1}$

$10\times1000,\ 1000\times10 \rightarrow (10\times10)$ 正方行列になる

多重共線性に気をつける

マルチコ