機械学習入門

経済学部 BX584

第8回 線形回帰

機械学習（＝計算機に学習させる）とは・・・

- 予測モデル＝値を入力すると出力値が得られる関数
- 出力側には目標値（理想的な値）があらかじめ決められている
  - 損失関数＝目標値からのズレの量をあらわす関数
- 目標値に近い値を出す関数を計算機に選ばせるのが機械学習

1変数の線形回帰

- 予測モデル＝出力を入力の関数で表したもの

- 線形回帰では関数のかたちを一次式（線形関数）に限定

$$f(x) = ax + b$$

- そして「aとbをいくらにすればよいか？」という問題を解く

簡単な例題

- ある箱に、
  - 2.0を入れたら-4.0が出てきてほしい
  - 1.0を入れたら-2.0が出てきてほしい
  - -3.0を入れたら5.0が出てきてほしい
- パラメータaとbをいくらにすればいいでしょうか？

点の位置を描画してみる

```
import matplotlib.pyplot as plt

x = [2, 1, -3]
y = [-4, -2, 5]

plt.plot(x, y, '.')
plt.show()
```

パラメータを使って出力値を表す

- 左辺がパラメータa, bを使って表した出力値
- 右辺が目標値

$$2.0a + b \approx -4.0$$
$$1.0a + b \approx -2.0$$
$$-3.0a + b \approx 5.0$$

誤差の2乗

- $2.0a + b \approx -4.0$ 誤差の2乗:$\{-4.0 - (2.0a + b)\}^2$
- $1.0a + b \approx -2.0$ 誤差の2乗:$\{-2.0 - (1.0a + b)\}^2$
- $-3.0a + b \approx 5.0$ 誤差の2乗:$\{5.0 - (-3.0a + b)\}^2$

問題を解く方針

- 誤差の2乗の和（足したもの）を最小にすることで

$$f(x) = ax + b$$

を求める。つまり、次の式の値を最小にするaとbを求める。

$$\{-4 - (2a + b)\}^2 + \{-2 - (a + b)\}^2 + \{5 - (-3a + b)\}^2$$

- 誤差の2乗の和を最小にする方法を「**最小二乗法**」と呼ぶ。

手計算で解く方法

$$l(a,b) = \{-4-(2a+b)\}^2+\{-2-(a+b)\}^2+\{5-(-3a+b)\}^2$$

- 上の関数$l(a,b)$をaで偏微分したものを$= 0$とおき、さらに
- 上の関数$l(a,b)$をbで偏微分したものを$= 0$とおくことで、
- 2本の方程式ができる。これをaとbについて解けばよい。

$$\frac{\partial l(a,b)}{\partial a} = -4\{-4-(2a+b)\} - 2\{-2-(a+b)\} + 6\{5-(-3a+b)\}$$
$$= 28a + 50 = 0$$

$$\frac{\partial l(a,b)}{\partial b} = -2\{-4-(2a+b)\} - 2\{-2-(a+b)\} - 2\{5-(-3a+b)\}$$
$$= 6b + 2 = 0$$

問題の一般化（1変数の線形回帰＝単回帰）

- 入力と、それに対する出力（＝目標値）がたくさん与えられている
  - 入力：$\{x_1, x_2, \ldots, x_N\}$
  - 出力：$\{y_1, y_2, \ldots, y_N\}$
- 入力と出力の間には、次の関係があると仮定する

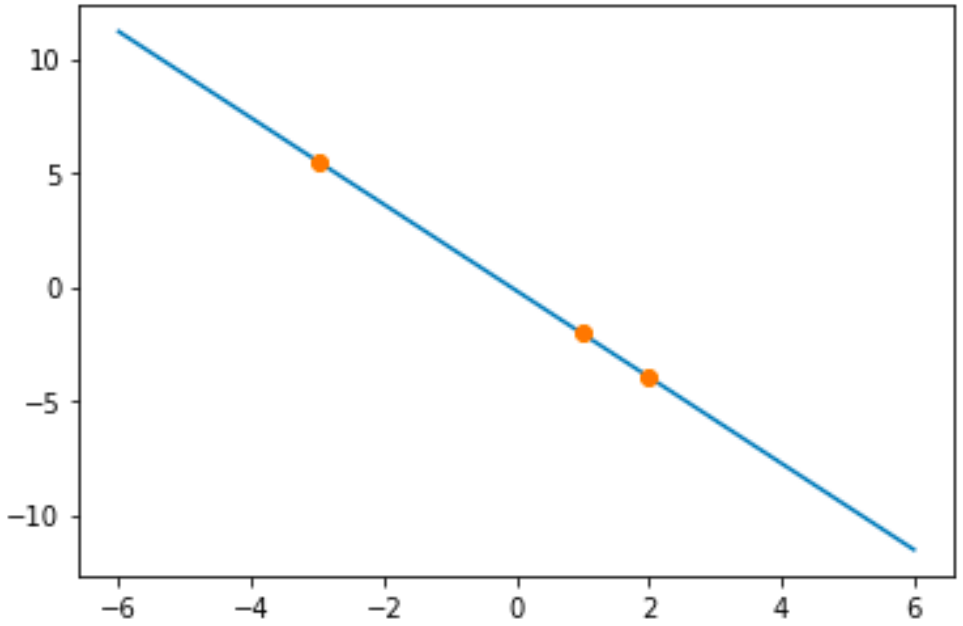
$$f(x) = ax + b$$

- このとき、誤差の二乗和を最小にするような関数を求める

問題の解き方のイメージ

- 入力値と出力値のペアを表す点がたくさんある
  - 入力値がx座標、出力値がy座標。
- それらの点にぴったり合う直線を引く

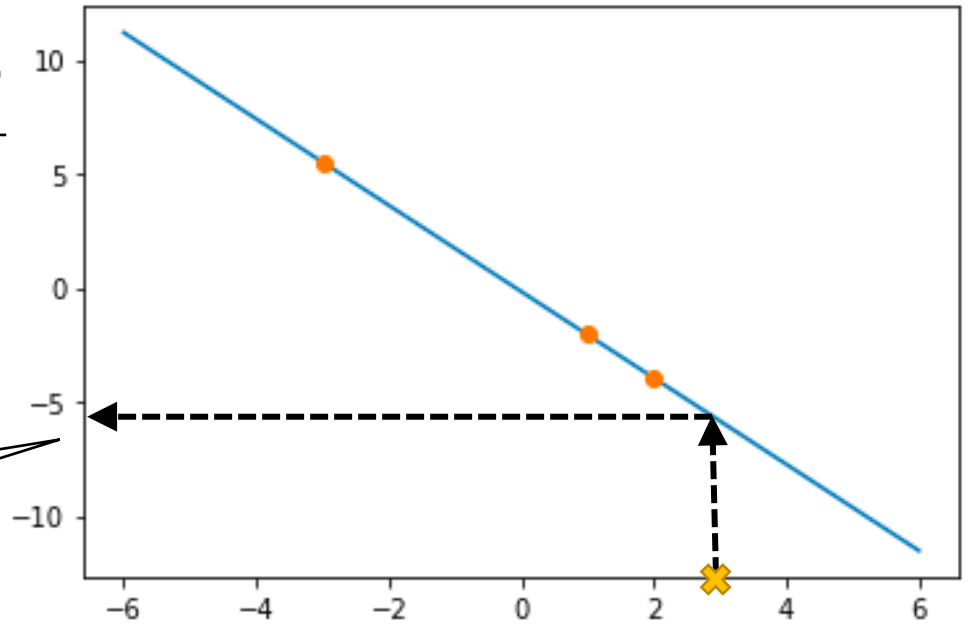
- こういう問題を「線形回帰」という
  - 「線形」≒「まっすぐ」



線形回帰による予測

- 直線が求まれば・・・
  - つまり関数を一つ選べば・・・

- 任意の入力値について目標値を予測可
  - 見たことない入力値でも出力値を計算可
  - 出力値を正解（目標値）の予測として使う
  - 機械学習は予測に使える！



未知の入力値について
予測された出力値

最小二乗法＝誤差の二乗和の最小化

- 最小二乗法はデータ点の数がいくら増えても使える
  - 各データの誤差の二乗：$\{y_i - (ax_i + b)\}^2$
  - 誤差の二乗の和

$$\sum_{i=1}^{N} \{y_i - (ax_i + b)\}^2$$

今日の例題（データ点をひとつ増やしただけです…）

- 関数$y = ax + b$によってモデル化される「箱」に
  - 2.0を入れたら-4.0が出てきてほしい
  - 1.0を入れたら-2.0が出てきてほしい
  - -3.0を入れたら5.0が出てきてほしい
  - -1.0を入れたら2.0が出てきてほしい
- パラメータaとbをいくらにすればいいでしょうか？

例題の点の位置を描画してみる

```
import matplotlib.pyplot as plt

x = [2, 1, -3, -1]
y = [-4, -2, 5, 2]

plt.plot(x, y, '.')
plt.show()
```

最小二乗法による線形回帰（エラーが出る）

```
from sklearn import linear_model

x = [2, 1, -3, -1]
y = [-4, -2, 5, 2]

reg = linear_model.LinearRegression() #線形回帰を準備
reg.fit(x, y) #最小2乗法を実行
print(reg.coef_, reg.intercept_)
```

最小二乗法による線形回帰（エラーが出ない）

```
from sklearn import linear_model

x = [[2], [1], [-3], [-1]]
y = [-4, -2, 5, 2]

reg = linear_model.LinearRegression() #線形回帰を準備
reg.fit(x, y) #最小2乗法を実行
print(reg.coef_, reg.intercept_)
```

なぜこうなっている？

- scikit-learnでは入力がベクトルであると想定
  - 入力が一個の数値であっても、一次元ベクトルに変換しないといけない

最小二乗法による線形回帰（こう書いてもよい）

```
import numpy as np
from sklearn import linear_model

x = [2, 1, -3, -1]
x = np.array(x).reshape(-1, 1)
y = [-4, -2, 5, 2]

reg = linear_model.LinearRegression() #線形回帰を準備
reg.fit(x, y) #最小2乗法を実行
print(reg.coef_, reg.intercept_)
```

重回帰

- 回帰のうち入力値が1つ＝単回帰
  - 直線をデータ点の集合にフィットさせる

- 入力値が2つ（説明変数が2つ）以上＝重回帰
  - 平面をデータ点の集合にフィットさせる
    - 「線形」＝「まったいら（曲がっていない）」

２変数の線形回帰

- 予測モデル＝出力を入力の関数で表したもの

- 線形回帰では関数のかたちを一次式（線形関数）に限定

$$f(x_1, x_2) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + b$$

- そして「a_1とa_2とbをいくらにすればよいか？」という問題を解く

２変数の場合の誤差の二乗和

- 各データの誤差の二乗：$\left\{y_i - \left(a_1 x_{i,1} + a_2 x_{i,2} + b\right)\right\}^2$
- 誤差の二乗の和

$$\sum_{i=1}^{N} \left\{y_i - \left(a_1 x_{i,1} + a_2 x_{i,2} + b\right)\right\}^2$$

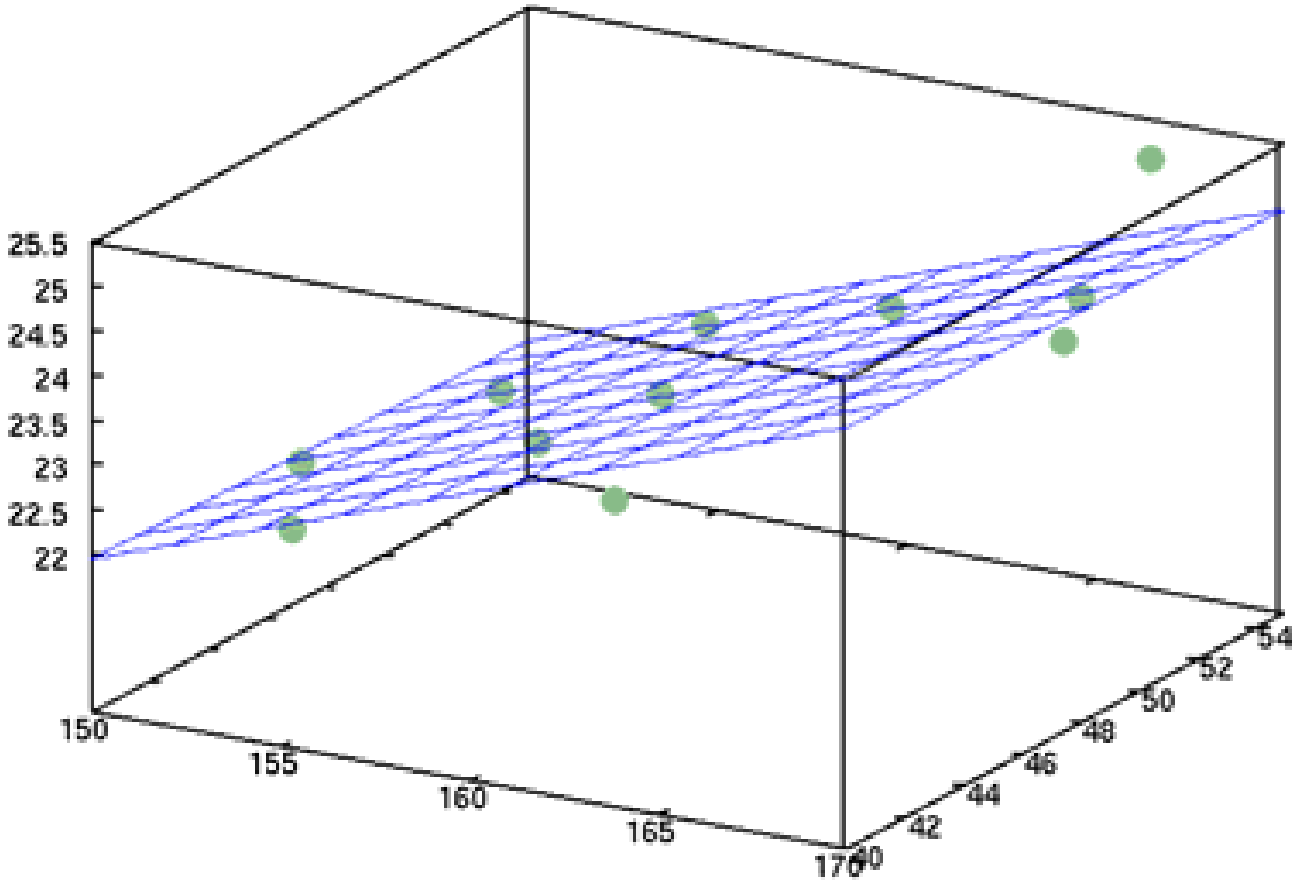
入力が2次元ベクトルの場合

```
import numpy as np
from sklearn import linear_model

x = [[2,2], [1,1], [-3,-3], [-1,-1]]
y = [-4, -2, 5, 2]

reg = linear_model.LinearRegression()
reg.fit(x, y)
print(reg.coef_, reg.intercept_)
```

入力が2次元ベクトルの場合のイメージ図



出典 http://www.wakayama-u.ac.jp/~wuhy/am8.pdf

予測の仕方

- 例: [-1.5, -1.5]という入力に対応する目的変数の値を予測したい

- predict()を使う
  - 「reg.predict([-1.5,-1.5])」と書く

- 見たことがない入力ベクトルについても出力を予測できる

入力が2次元ベクトルの場合の予測

```
import numpy as np
from sklearn import linear_model

x = [[2,2], [1,1], [-3,-3], [-1,-1]]
y = [-4, -2, 5, 2]

reg = linear_model.LinearRegression()
reg.fit(x, y)

print(reg.predict([-1.5,-1.5]))
```