線形回帰（２）

正田 備也

masada@rikkyo.ac.jp

正則化 regularization

Ridge回帰とLasso

[ESLII] Jerome H. Friedman, Robert Tibshirani, and Trevor Hastie. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. Second Edition. Chapter 3.

変数を選択することの問題点

- 説明変数が多いとき、例えばESLII, Sec. 3.2.1のExample: Prostate Cancerのように検定の結果を使ってnon-significantな変数を削ったりする
  - 同書3.3節には、もっと良い変数選択の方法が書かれてある。
- しかし、変数を選択するというのは、離散的な手続き
  - 予測対象となるデータ集合によって、性能に段差がつくことがある
- そこで、shrinkage methodsと呼ばれる連続的な手続きを採る

(Z score) = (Coefficient) / (Std. Error) による変数選択

TABLE 3.2. *Linear model fit to the prostate cancer data. The Z score is the coefficient divided by its standard error (3.12). Roughly a Z score larger than two in absolute value is significantly nonzero at the $p = 0.05$ level.*

Term	Coefficient	Std. Error	Z Score
`Intercept`	2.46	0.09	27.60
`lcavol`	0.68	0.13	5.37
`lweight`	0.26	0.10	2.75
`age`	−0.14	0.10	−1.40
`lbph`	0.21	0.10	2.06
`svi`	0.31	0.12	2.47
`lcp`	−0.29	0.15	−1.87
`gleason`	−0.02	0.15	−0.15
`pgg45`	0.27	0.15	1.74

[ESLII, p.50]

変数選択を連続的にする

- ある説明変数を使わない＝その説明変数の係数を<u>ゼロにする</u>

ON/OFFではなく、連続的にすると・・・

- ある説明変数を使わない＝その説明変数の係数が<u>ゼロに近くなるようにする</u>

Ridge回帰

- 通常の最小二乗法とは、最小化すべき関数が少し違う

$$l(\boldsymbol{a}) = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - a_0 - \sum_{j=1}^{d} a_j x_{i,j} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{d} {a_j}^2$$

- 説明変数の係数（切片は含まない）の2乗和も同時に最小化
  - 係数が全体的に0のほうに近寄った値になる。
  - λ でその強さをコントロールする。
  - λ は交差検証などで決定する。

Lasso

- 通常の最小二乗法とは、最小化すべき関数が少し違う

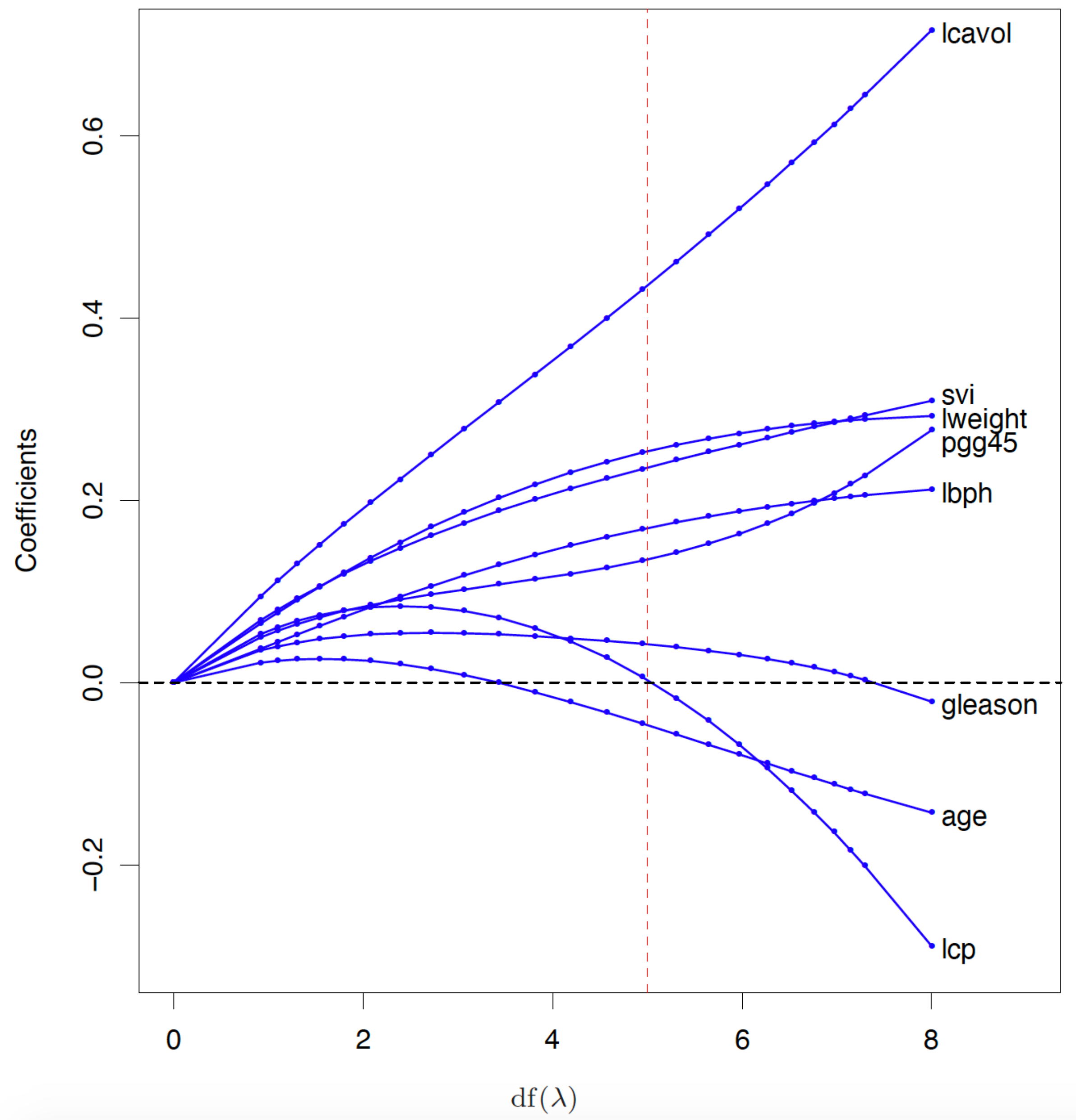
$$l(\boldsymbol{a}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i - a_0 - \sum_{j=1}^{d} a_j x_{i,j}\right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{d} |a_j|$$

- 説明変数の係数（切片は含まない）の<u>絶対値和</u>も同時に最小化
  - 係数が全体的に$\mathbf{0}$のほうに近寄った値になる。
  - λ でその強さをコントロールする。
  - λ は交差検証などで決定する。

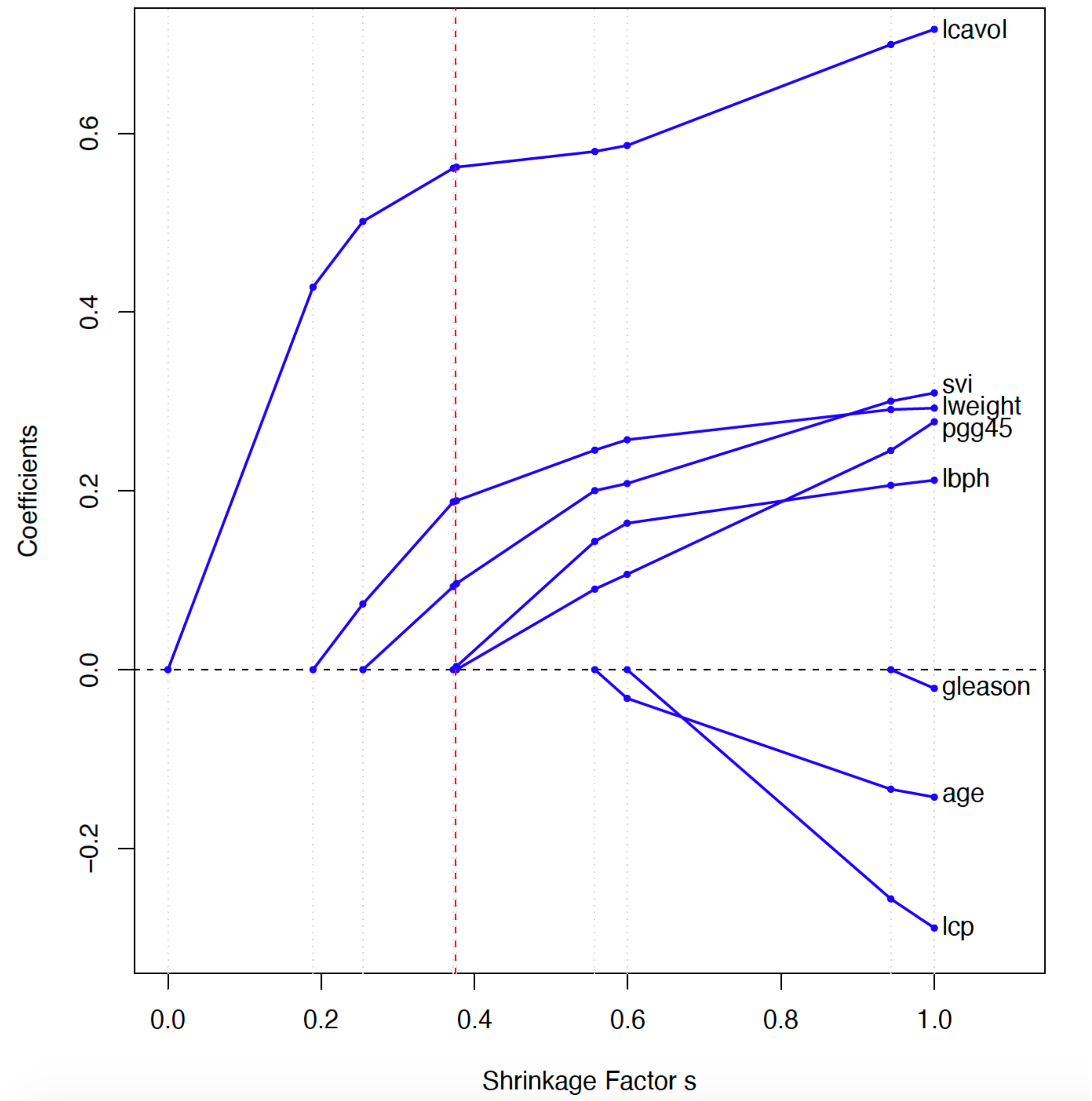
Ridge回帰とLassoの違い

- λ を大きくして係数をゼロに近づける項の効きを強くすると…

- Ridge回帰では、すべての係数が全体的にゼロに近寄る
- Lassoでは、係数がひとつずつ、ほぼゼロの値になっていく



Ridge回帰 [ESLII, p.65]



Lasso [ESLII, p.70]

なぜ切片が正則化に含まれないのか(1/2)

- 例えばy_iに一斉に1を足して、推定をやり直したとすると…
  - 通常の最小二乗法：切片の推定値だけが変化する
  - Ridge回帰やLasso：切片を正則化に含ませると答え全体が変わる

- つまり、推定計算がy_iの原点をどこに採るかに依存してしまう
- よって、切片は、通常、正則化には含ませない

なぜ切片が正則化に含まれないのか(2/2)

- しかし、切片を含まない正則化を使った推定は、中心化されたデータを使うことで初めから切片を無視した正則化を使った推定と、全く同じ答えを与える
- また、前者の方法で得られる切片の推定値については、後者の方法で得られる他の係数の推定値を使って表現できる（下式）

$$\hat{a}_0 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i - \sum_{j=1}^{d} \hat{a}_j \left(\frac{1}{N}\sum\nolimits_{i=1}^{N} x_{i,j}\right)$$

It has to be emphasized that in practice, the bias parameter θ_0 is left out from the norm in the regularization term; penalization of the bias would make the procedure dependent on the origin chosen for y. Indeed, it is easily checked that adding a constant term to each one of the output values, y_n, in the cost function would not result in just a shift of the predictions by the same constant, if the bias term is included in the norm. Hence, usually, ridge regression is formulated as

$$\text{minimize} \quad L(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = \sum_{n=1}^{N} \left(y_n - \theta_0 - \sum_{i=1}^{l} \theta_i x_{ni} \right)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{l} |\theta_i|^2. \tag{3.43}$$

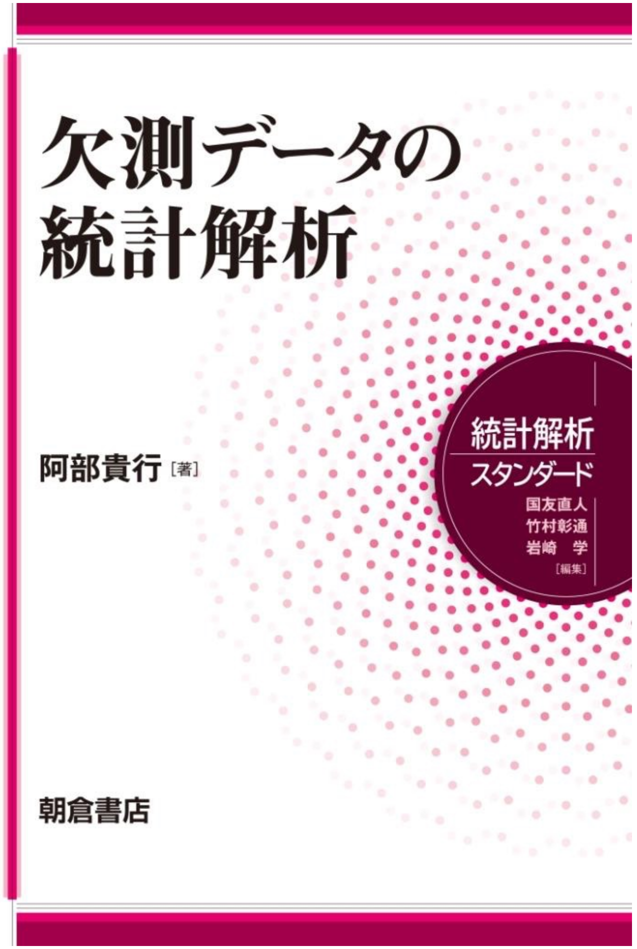
It turns out (Problem 3.11) that minimizing Eq. (3.43) with respect to θ_i, $i = 0, 1, \ldots, l$, is equivalent to minimizing Eq. (3.41) using *centered* data and neglecting the intercept. That is, one solves the task

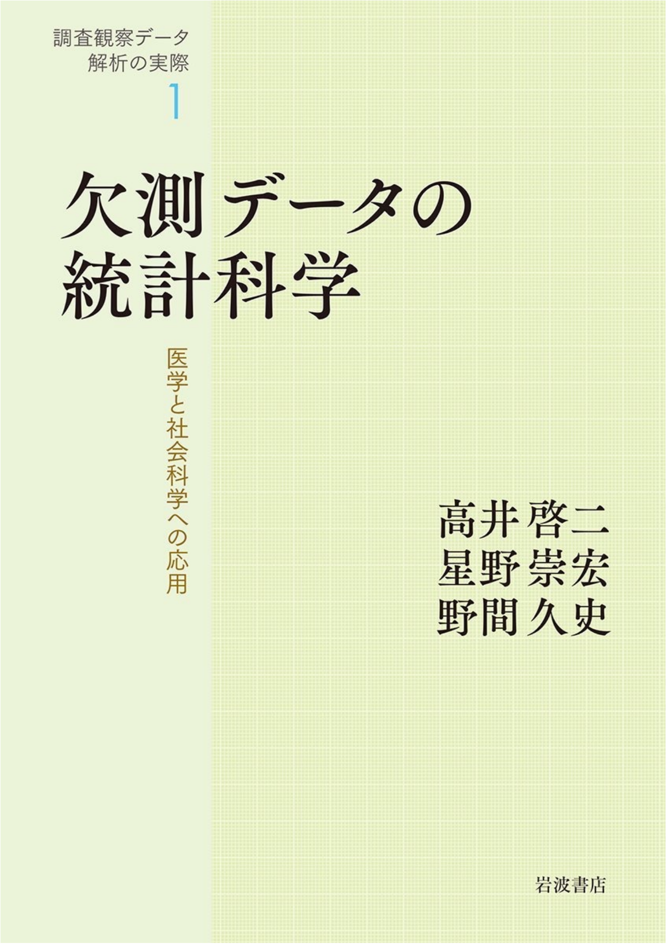
$$\text{minimize} \quad L(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = \sum_{n=1}^{N} \left((y_n - \bar{y}) - \sum_{i=1}^{l} \theta_i (x_{ni} - \bar{x}_i) \right)^2 + \lambda \sum_{i=1}^{l} |\theta_i|^2, \tag{3.44}$$

and the estimate of θ_0 in Eq. (3.43) is given in terms of the obtained estimates $\hat{\theta}_i$, i.e.,

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \sum_{i=1}^{l} \hat{\theta}_i \bar{x}_i,$$

欠測データ


欠測データの
統計解析
阿部貴行［著］
統計解析
スタンダード
国友直人
竹村彰通
岩崎 学
［編集］
朝倉書店


調査観察データ
解析の実際
1
欠測データの
統計科学
医学と社会科学への応用
高井啓二
星野崇宏
野間久史
岩波書店


高橋将宜・渡辺美智子 著
欠測データ処理
R による単一代入法と多重代入法
統計学
5
One Point
共立出版

参考資料

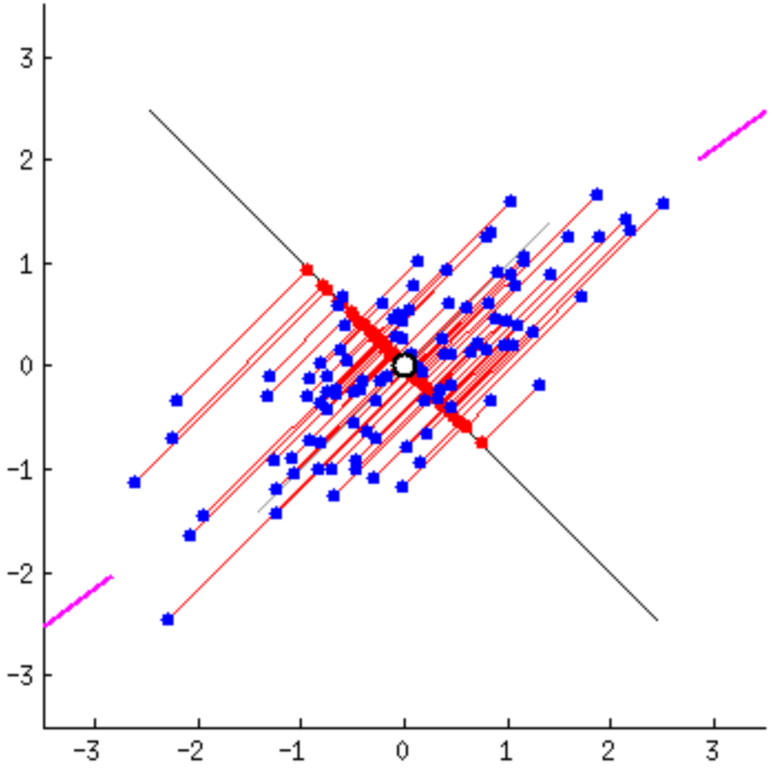
- 「諸外国の公的統計における欠測値の対処法」
  - http://toukeigaku.sakura.ne.jp/jp/Toukeigaku/journal/112toukeigaku/takahashi112.pdf

- 「欠測値の補完に係る主な方法」
  - https://www.soumu.go.jp/main_content/000741245.pdf
    - https://www.soumu.go.jp/main_sosiki/singi/toukei/hyokabunkakai/kaigi/02shingi05_02000472.html

主成分分析

dimensionality reductionの一手法

PCAのイメージ



https://medium.com/@shiva1gandluri/principal-component-analysis-pca-in-machine-learning-c3f239249b73

PCAによる次元削減のイメージ

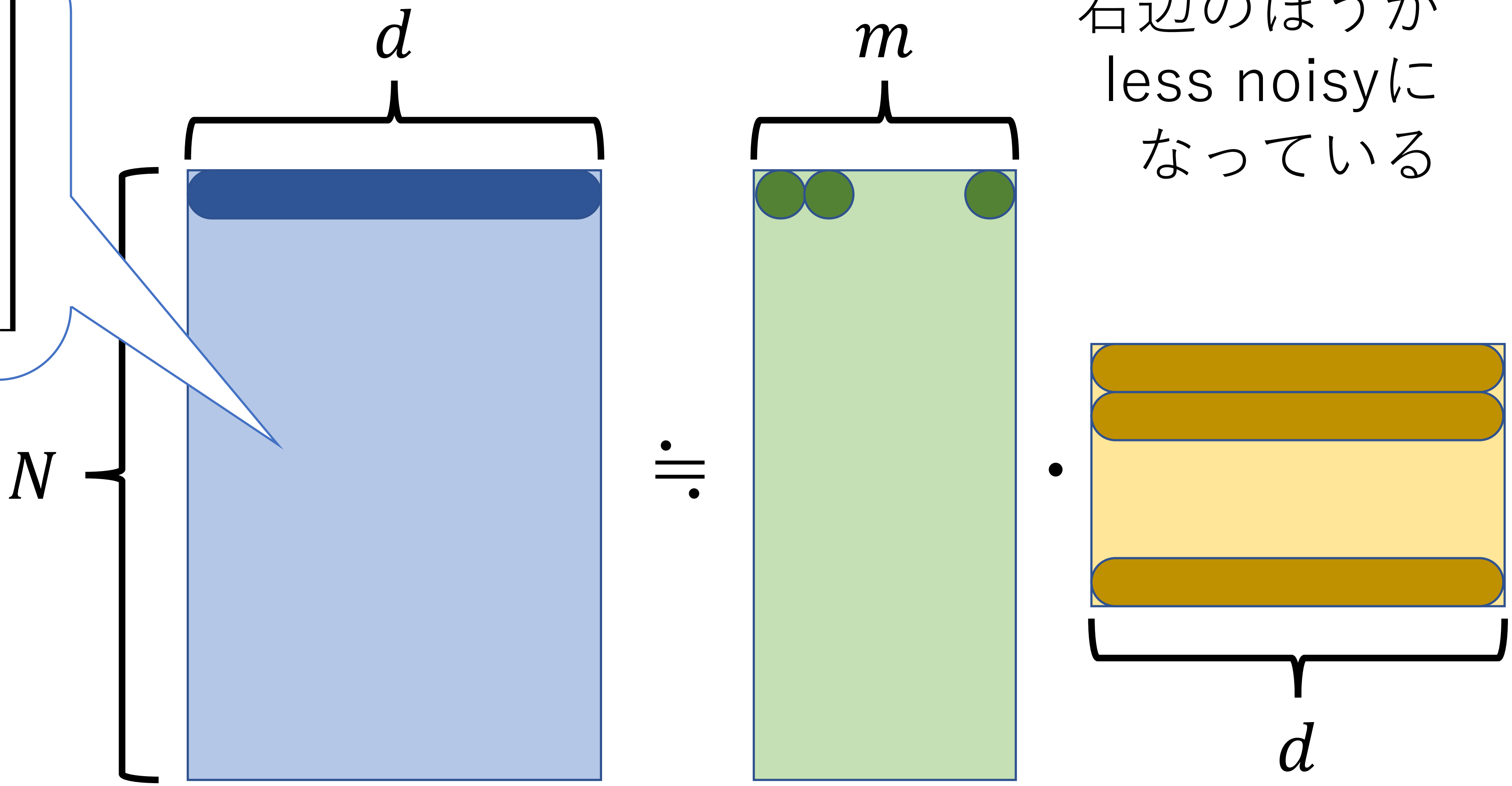
1. データをあらかじめ中心化しておく（平均を引いておく）
   - スケーリングもしておく（標準偏差で割っておく）
2. 原点を通る直線のうちデータに一番「近い」ものを見つける
3. その直線に垂直な平面へ、データを射影する
4. 2.に戻って、次元がひとつ落ちた空間で同じことを繰り返す

PCAの雰囲気

- データがどの方向に大きく散らばっているかを知ることは有益
- そこで・・・
- データがより大きく散らばっている向きを順番に見つけていく
    - 後から見つけた向きは、先に見つけた向きに直交しているようにする

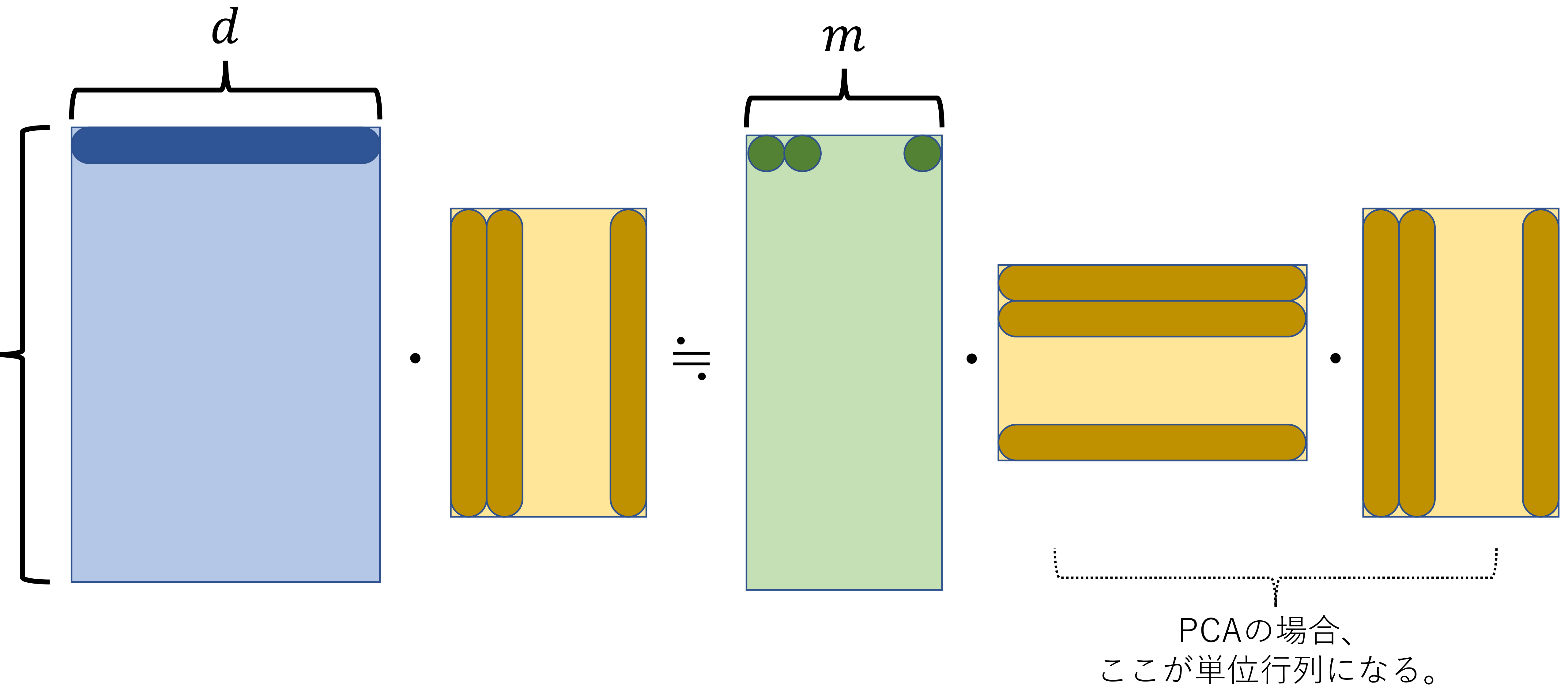
PCAで計画行列をless noisyにする

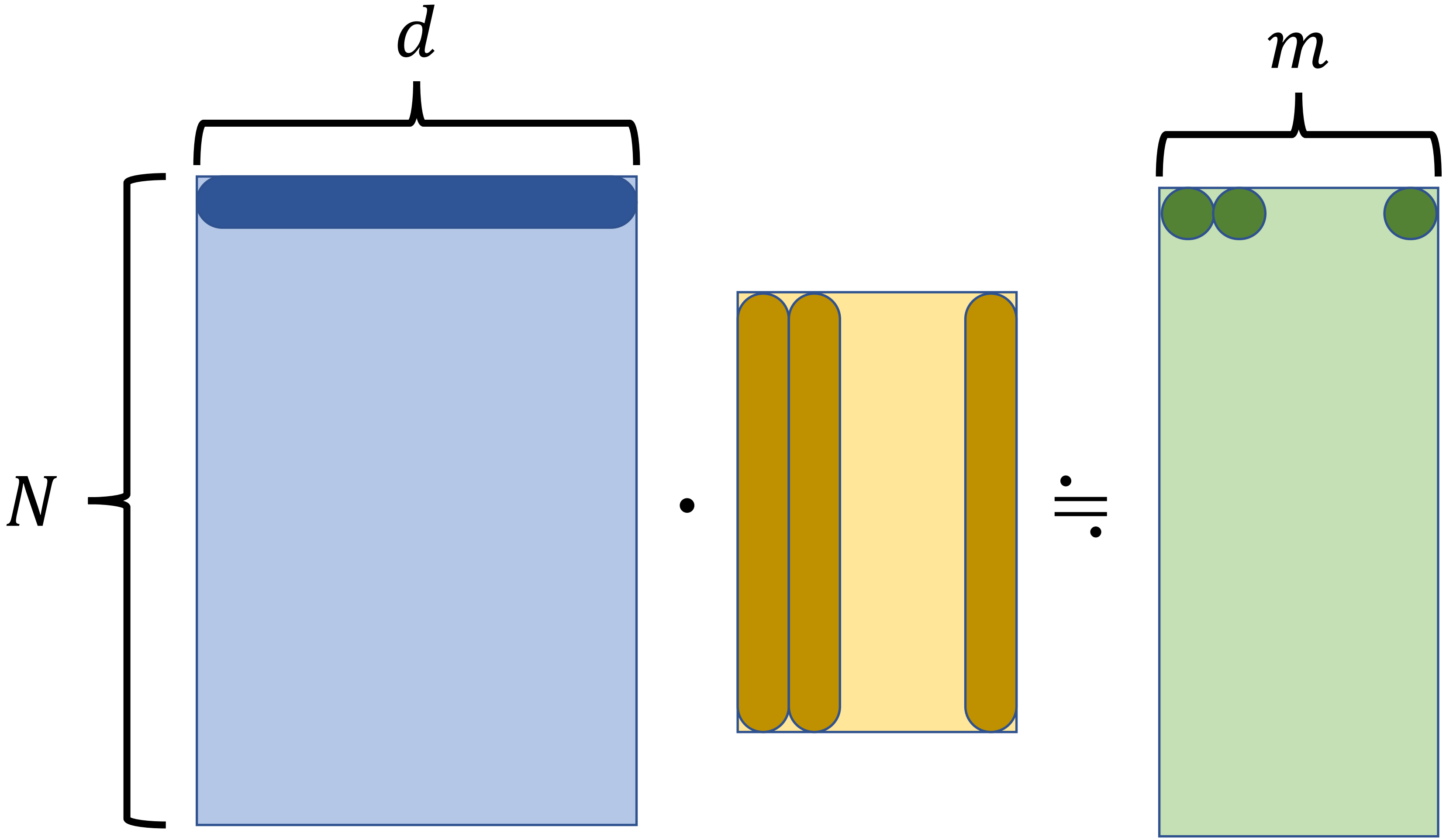
$$\begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,d} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{i,1} & x_{i,2} & \cdots & x_{i,d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N,1} & x_{N,2} & \cdots & x_{N,d} \end{bmatrix}$$



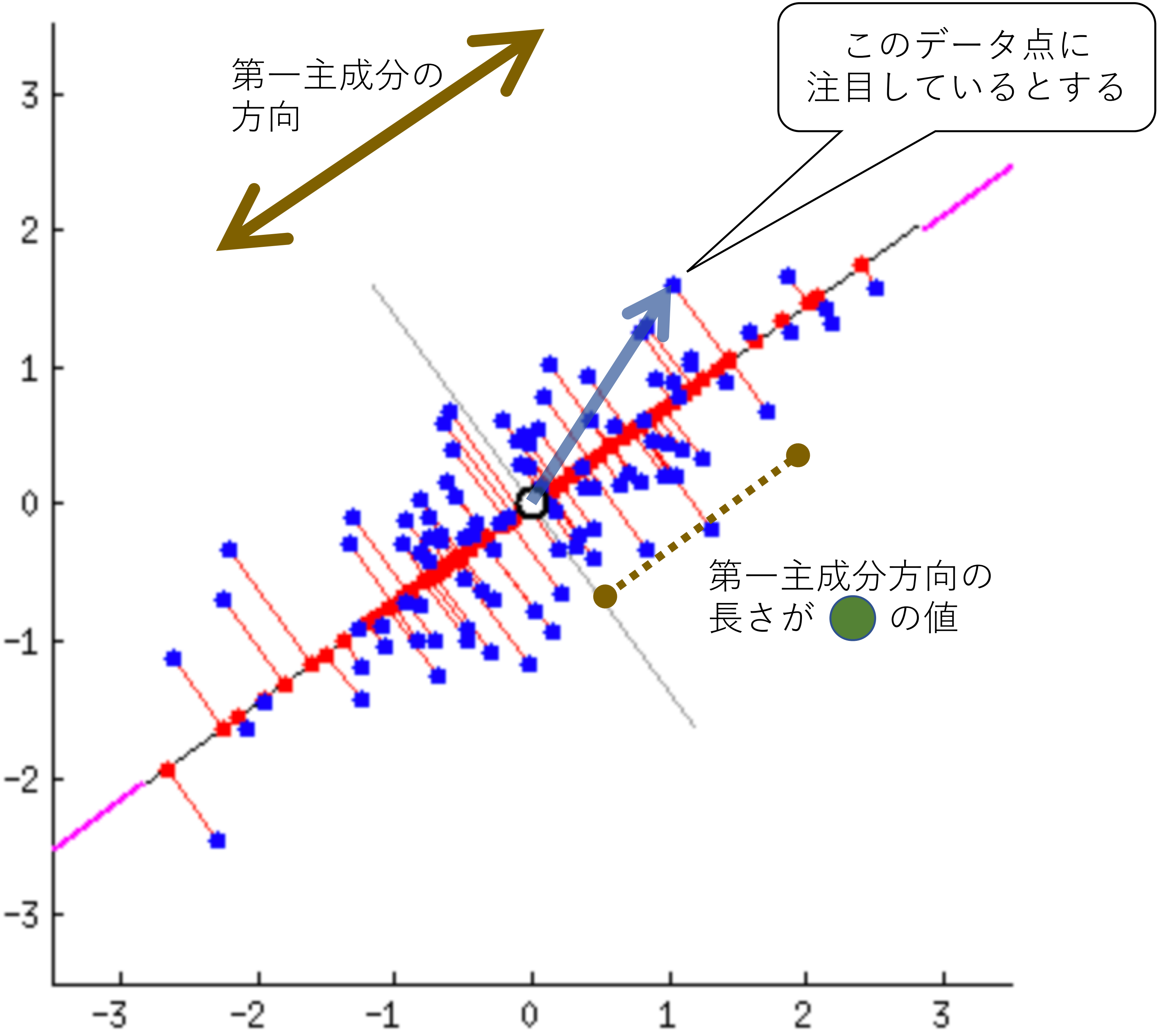
右辺のほうが
less noisyに
なっている

左辺は
元々の
計画行列


d
m
≒
PCAの場合、
ここが単位行列になる。



- 元のd次元空間のなかに、m本の直交する座標軸を取り…
- その軸を使って、元のデータ点の座標値を決め直す


第一主成分の
方向
このデータ点に
注目しているとする
第一主成分方向の
長さが の値
3
2
1
0
-1
-2
-3
-3
-2
-1
0
1
2
3