機械学習入門

経済学部 BX584

第1回 イントロダクション

自己紹介

- 1995年 理学修士（東大理・情報）
  - 計算幾何に関する研究
- 1999年 学術修士（東大総合文化・科哲）
  - ブレンターノの判断論に関する研究
- 1999~2001年 光学メーカ勤務（富士写真光機）
  - コンパクトカメラのレンズ系の光学設計
- 2004年 情報理工学博士（東大情報理工・電子情報学）
  - Web検索
  - テキストマイニング

Pythonコーディング環境

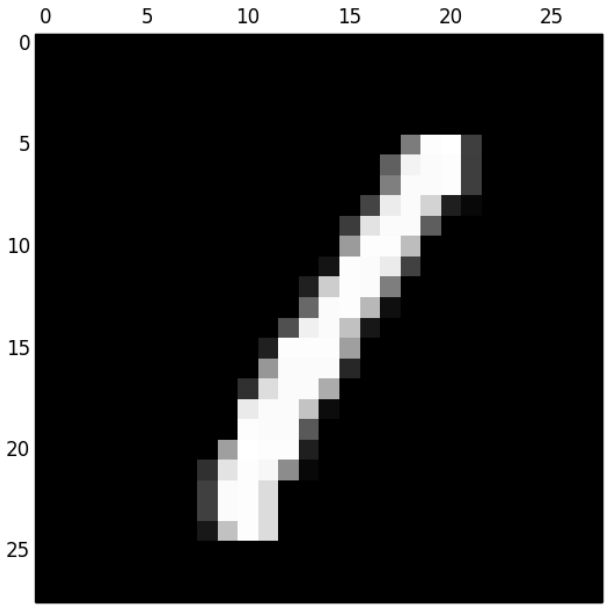
- Google Colaboratory

https://colab.research.google.com/

  - Gmailアカウントがあれば誰でも使えます。
    - ただし、今後有料版を使うかもしれないなら、立教のアカウントは使わない方がいいです。立教のGmailアカウントでは、Googleの有料サービスは使えないからです。

この授業の目標

- 画像に0～9のどの数字が書いてあるかを判定するコードを書く。
  - 右の画像は「1」
- 機械学習を用いる。



全体の講義内容

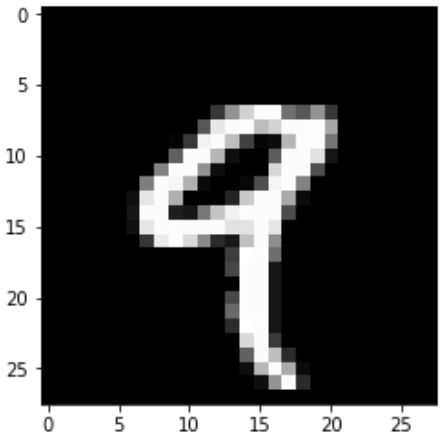
- 今日は機械学習のイントロダクション
  - 線形回帰の話（後の回でまた戻ってきます）
- 機械学習の道具に関する講義
  - Python入門
  - NumPy, matplotlibなどのライブラリ
- 機械学習の解説（scikit-learnを利用）

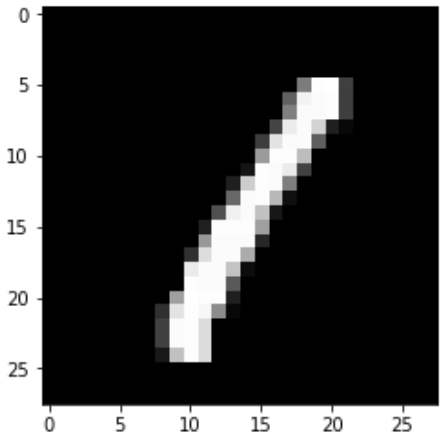
機械学習とは？

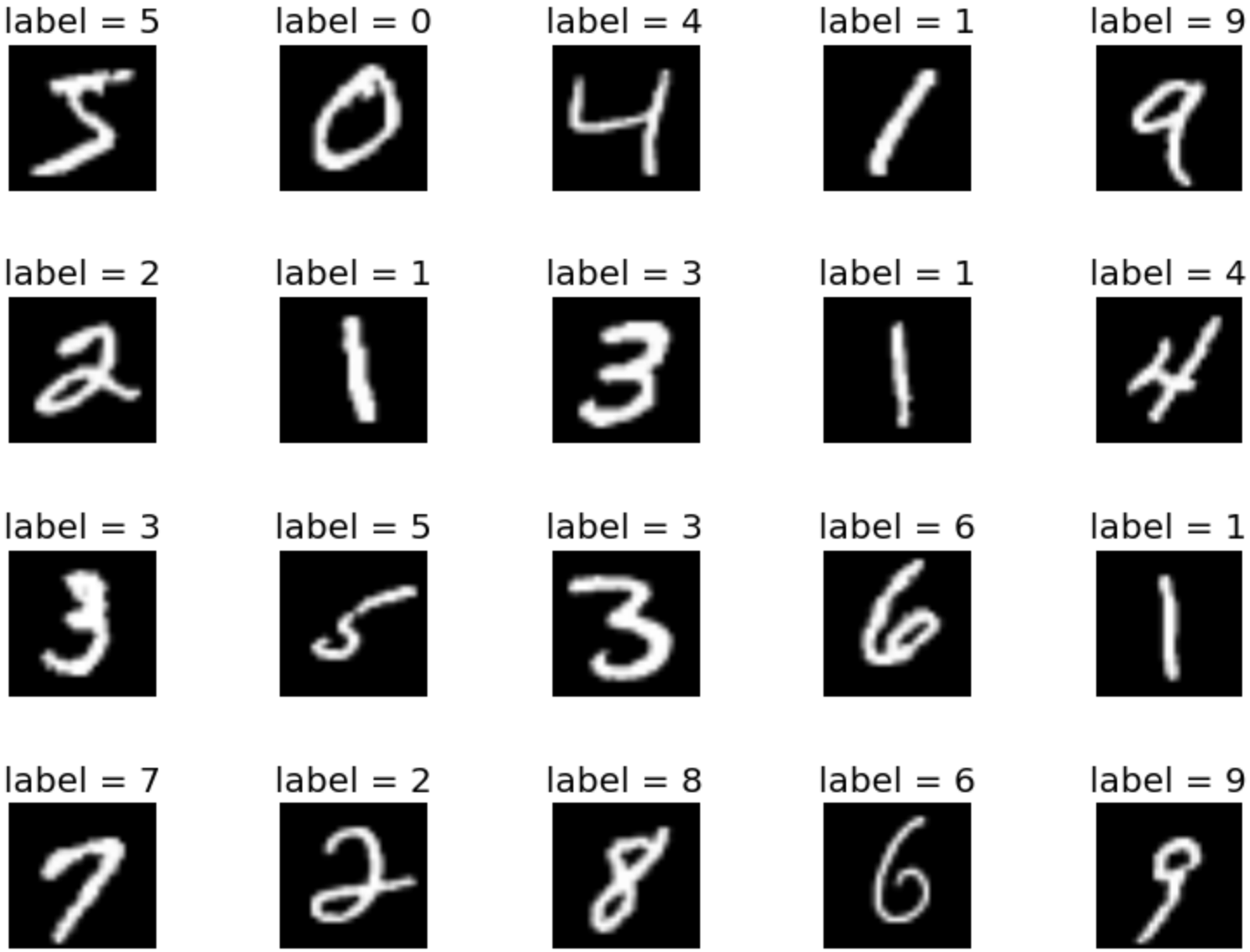
例：手書き数字画像の分類
（MNISTデータセット）

- 画像に0～9のどの数字が書いてあるかを計算機に判定させる
  - 右下の画像はそれぞれ「9」「1」が正解。

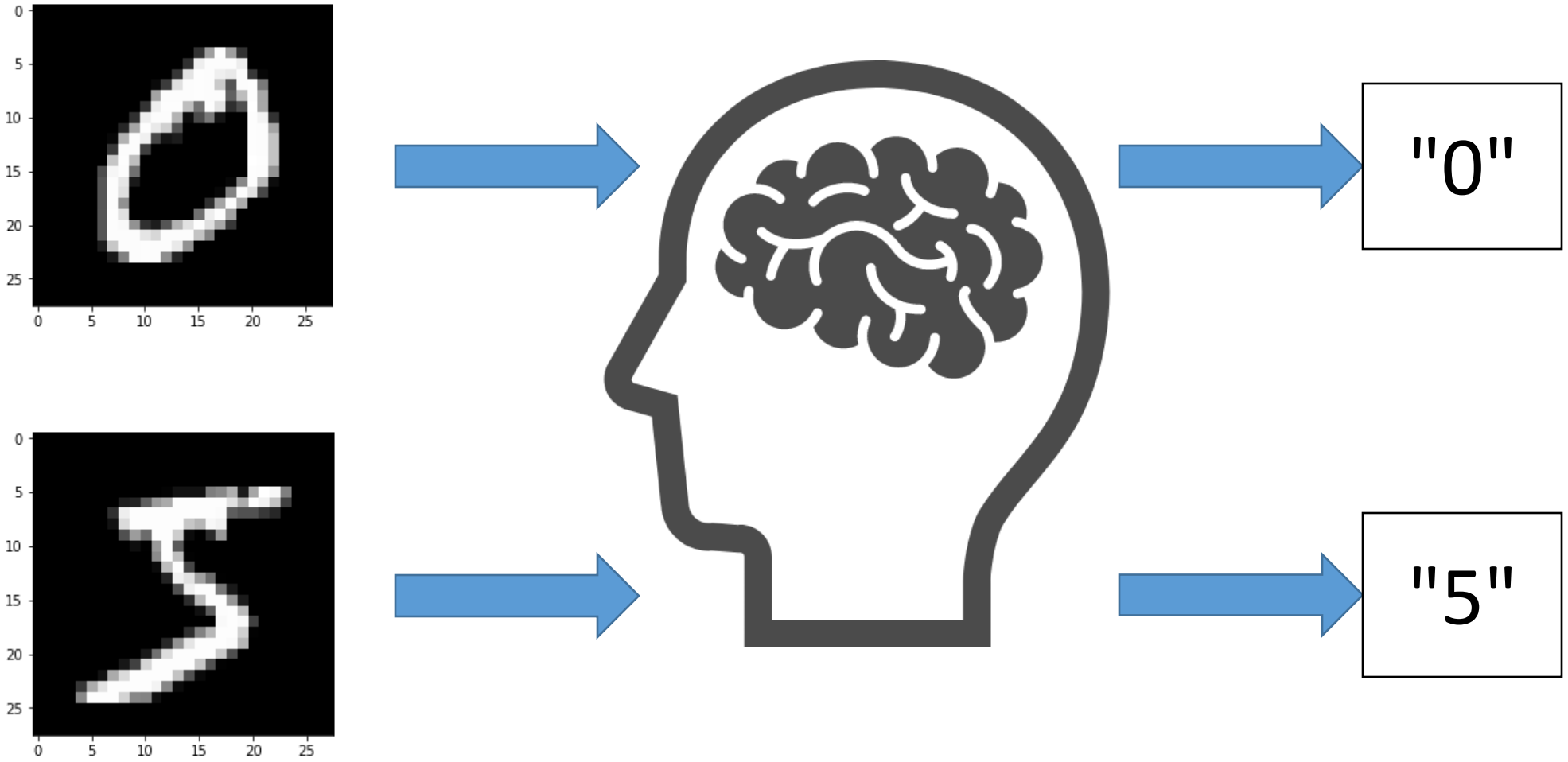
- 機械学習＝計算機に学習させる
  - どうやって？



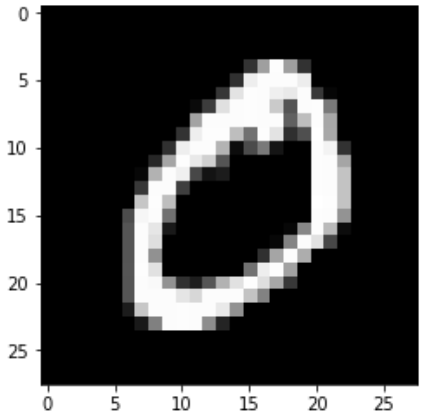


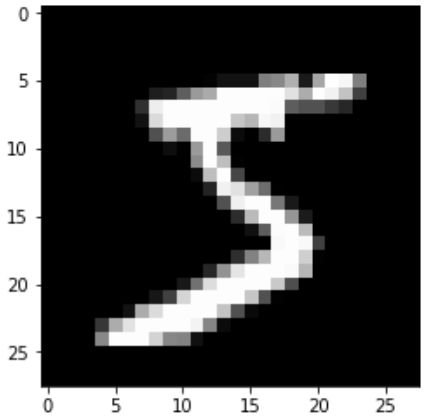

label = 5
label = 0
label = 4
label = 1
label = 9
label = 2
label = 1
label = 3
label = 1
label = 4
label = 3
label = 5
label = 3
label = 6
label = 1
label = 7
label = 2
label = 8
label = 6
label = 9

人間はすぐ答えが分かる
（すでに学習済みなので）



計算機に答えを当てさせるにはどうすればいいか？



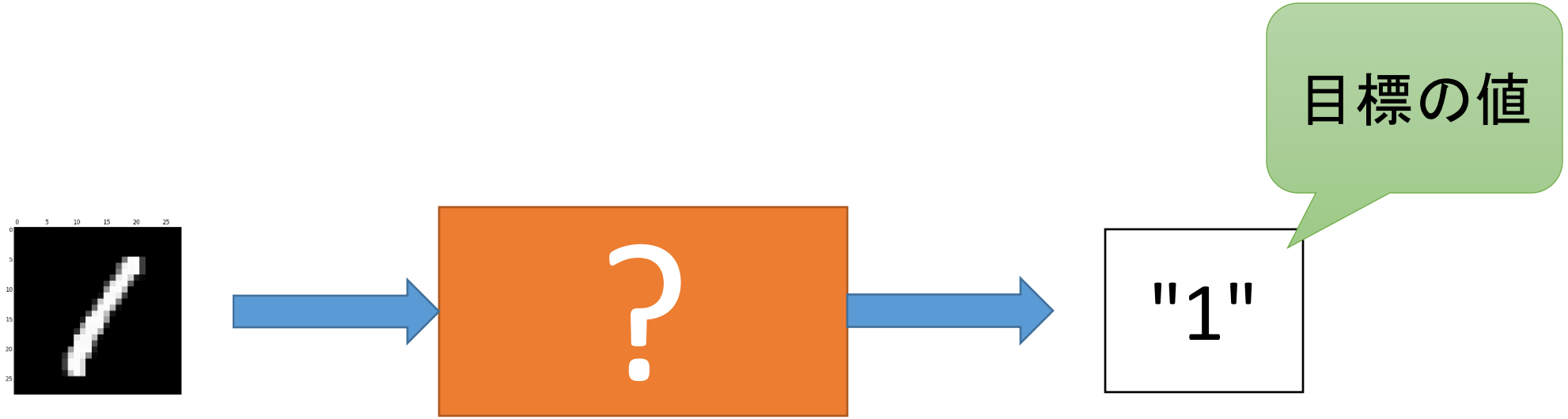


分類（classification）問題

- データを複数のグループへと自動的に分ける問題
  - 入力：分類したいデータ
  - 出力：どのグループへ分類すべきかを示す値＝「ラベル」
- どんな入力データにも正解のラベルを出して欲しい
  - 欲しいものは図の「？」の部分。

機械学習とは何か

- 学習：出てくる値が目標の値になる箱の中身（「？」の部分）を見つける
- 箱の中身：入力から出力を得るための何らかの計算方法
- 機械学習：箱の中身を計算機に見つけさせる



機械学習とは

良い関数を計算機に見つけてもらうこと。

関数＝適当な値を入れると、その値に応じて何かの値が出てくる箱
良い関数＝どんな値を入れても、出てくる値が目標の値

計算機に見つけてもらうのであって、
人間が試行錯誤して見つけるのではない。

もう少しテクニカルに言うと・・・

$$y=ax^2 + bx + c$$

関数の、無数にあるパラメータ設定の中から
良い設定を計算機で見つけること。

良い設定＝どんな入力に対しても（見たことがない入力に対しても）
望みどおりの出力が得られる

関数を選ぶ範囲

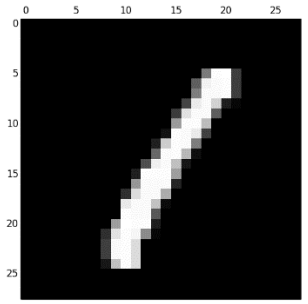
- 関数を選ぶ範囲は、あらかじめ決めておく
- どう決める？
  - 入力データのフォーマットを決める
  - 出力データのフォーマットを決める
  - 計算式の「かたち」を決める
    - 計算式はパラメータを含む（このパラメータを計算機で決めるのが機械学習）

例）入力画像をどうやって数値化する？

- ベクトルにする

例）28x28ピクセルのモノクロ画像

⇒ 28x28=784次元ベクトル



各ピクセルの値は0～255
（グレースケール）

画像を画像のまま扱う方法は
今日は割愛します。

```
[  0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0 124 253 255  63
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0  96 244 251 253  62   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0 127 251 251
 253  62   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0  68 236 251 211  31   8   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0  60 228 251
 251  94   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0 155 253 253 189   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0  20 253
 251 235  66   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0  32 205 253 251 126   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0 104
 251 253 184  15   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0  80 240 251 193  23   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0  32
 253 253 253 159   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0 151 251 251 251  39   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
  48 221 251 251 172   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0 234 251 251 196  12   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0 253 251 251  89   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0 159 255 253 253  31   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0  48 228 253 247 140   8   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0  64 251 253 220   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0  64 251 253 220   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0  24 193 253 220
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0]
```

例）出力記号をどうやって数値化する？

- "0", "1", "2", …はラベルであって数値ではない
- ベクトルにする

  例）10種類のラベルがある場合（"0", "1", "2", …, "9"の10種類）

  ⇒ 10次元ベクトルとして数値化

  - "3"というラベルの場合:

[0 0 0 1 0 0 0 0 0 0]

こういうものを
one-hot vectorと呼ぶ。

手書き数字画像の分類

入出力データをベクトル化した後の状態

784次元

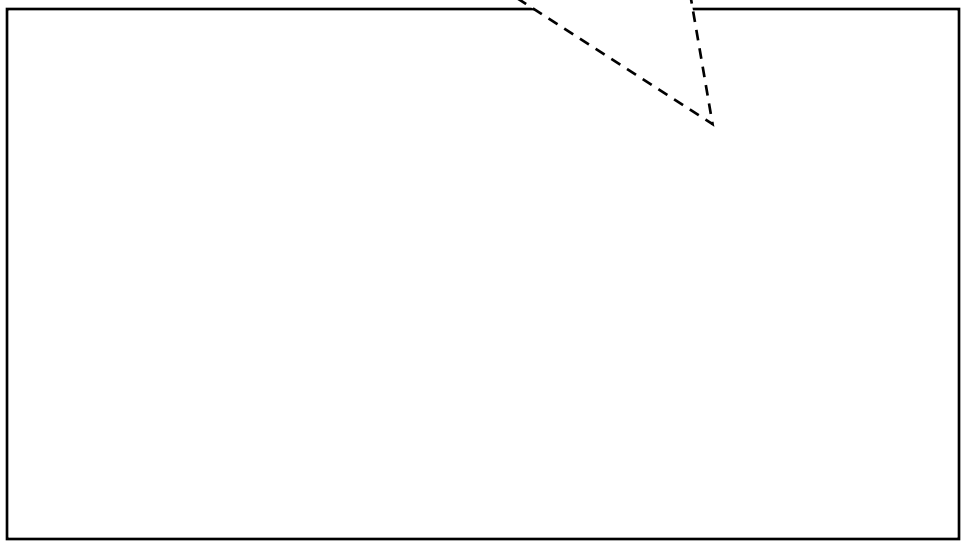
0
0
…
0
124
253
…
64
251
…
0
0

0
1
0
…
0

10次元

（鋭い方ならこう思いつかれるかも･･･）

「こういう行列を見つければいいのでは？」



「で･･･どうやって見つけるの？」

$$\cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 124 \\ 253 \\ \vdots \\ 64 \\ 251 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \fallingdotseq \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

ちょっと複雑すぎるので・・・

- 入力も出力も1個の数値である場合を考える
  - 1個の数値の入力を
  - 1個の数値の出力に
- こういう変換のなかだけから選ぶ

単回帰（入力も出力も1次元）

問題1

- ある箱に、
  - 1という数値を入れたら3という数値が出てきてほしい。
  - 2という数値を入れたら4という数値が出てきてほしい。
  - 3という数値を入れたら5という数値が出てきてほしい。
  - 4という数値を入れたら6という数値が出てきてほしい。
- 箱の中でどういう計算をすればいいでしょうか？

問題2

- ある箱に、
  - 1という数値を入れたら3という数値が出てきてほしい。
  - 2という数値を入れたら8という数値が出てきてほしい。
  - 3という数値を入れたら13という数値が出てきてほしい。
  - 4という数値を入れたら18という数値が出てきてほしい。
- 箱の中でどういう計算をすればいいでしょうか？

問題3

- ある箱に、
  - 1という数値を入れたら2という数値が出てきてほしい。
  - 2という数値を入れたら-1という数値が出てきてほしい。
  - 3という数値を入れたら-4という数値が出てきてほしい。
  - 4という数値を入れたら-7という数値が出てきてほしい。
- 箱の中でどういう計算をすればいいでしょうか？

問題4（出力が0か1かの二値）

- ある箱に、
  - 1という数値を入れたら0という数値が出てきてほしい。
  - 2という数値を入れたら0という数値が出てきてほしい。
  - 7という数値を入れたら1という数値が出てきてほしい。
  - 8という数値を入れたら1という数値が出てきてほしい。
- 箱の中でどういう計算をすればいいでしょうか？
  - こういうタイプの問題は、またいずれ。

箱を関数だと思う

- 「xを入れたらyが出てきてほしい」
  - $y = f(x)$と書ける
  - $f(x)$はxの関数（関数：行き先がひとつに決まる）
- 問題を解くことで何をしていたか？
  - 関数$f(x)$の式を求めていた

問題5（ちょっとデータ数が多い）

- ある箱に、
  - 2.0という数値を入れたら-4.0という数値が出てきてほしい。
  - 1.0という数値を入れたら-2.0という数値が出てきてほしい。
  - -3.0という数値を入れたら5.0という数値が出てきてほしい。
  - 0.5という数値を入れたら-0.9という数値が出てきてほしい。
  - -4.1という数値を入れたら8.3という数値が出てきてほしい。
  - -1.5という数値を入れたら2.9という数値が出てきてほしい。
  - -2.5という数値を入れたら4.9という数値が出てきてほしい。
  - 6.2という数値を入れたら-12.2という数値が出てきてほしい。
- 箱の中でどういう計算をすればいいでしょうか？

モデルを設定する

- モデル＝箱の中身を数式で表したもの
- ここでは関数のかたちを一次式に設定（一番簡単なので）

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

- そして「aとbをいくらにすればいいか？」という問題を解く

問題5の続き

$$2.0a + b = -4.0$$
$$1.0a + b = -2.0$$
$$-3.0a + b = 5.0$$
$$0.5a + b = -0.9$$
$$-4.1a + b = 8.3$$
$$-1.5a + b = 2.9$$
$$-2.5a + b = 4.9$$
$$6.2a + b = -12.2$$

解けない方程式

- 未知数はaとbの二つだけ。
- なのに等式がたくさんある。
  - 式が2つだったら解ける。
- つまり・・・解はない。
- 困った！

問題5で式が二つだけだったら・・・

$$2.0a + b = -4.0$$

$$1.0a + b = -2.0$$

- これは普通の連立一次方程式。

解決法：問題を変える

- 未知数はaとbの二つだけ
  - なのに等式がたくさんある（式が2つだったら解ける）
  - つまり・・・解はない
- そこで・・・値がズレてもいいことにする
  - 誤差（残差）を許す

別の解決法：関数の次数を上げればいいのでは？

- 確かにそのとおり
- ただ、この解決法がいいとは限らない
- この点についてはまた後日
  - いわゆる「過学習 overfitting」の問題

問題5の続き（簡単のために式を3つにした。）

$$2.0a + b \approx -4.0$$

$$1.0a + b \approx -2.0$$

$$-3.0a + b \approx 5.0$$

完全に一致しなくてもいい、
という意味。

誤差（残差ともいう）

- $2.0a + b \approx -4.0$
  - 誤差は$-4.0 - (2.0a + b)$
- $1.0a + b \approx -2.0$
  - 誤差は$-2.0 - (1.0a + b)$
- $-3.0a + b \approx 5.0$
  - 誤差は$5.0 - (-3.0a + b)$

誤差の2乗

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

問題を解く方針

- 誤差の2乗の和を最小にすることで

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

のaとb（モデルのパラメータ）を求める

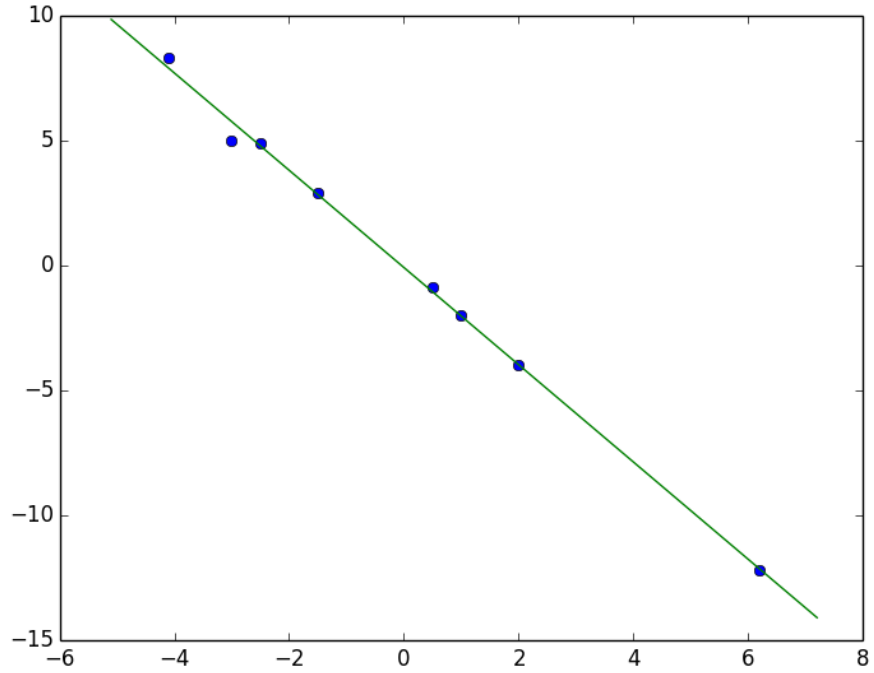
  - いまの問題の場合、次の式の値を最小にするaとbを求める

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

- この誤差を「2乗和誤差」と呼ぶ

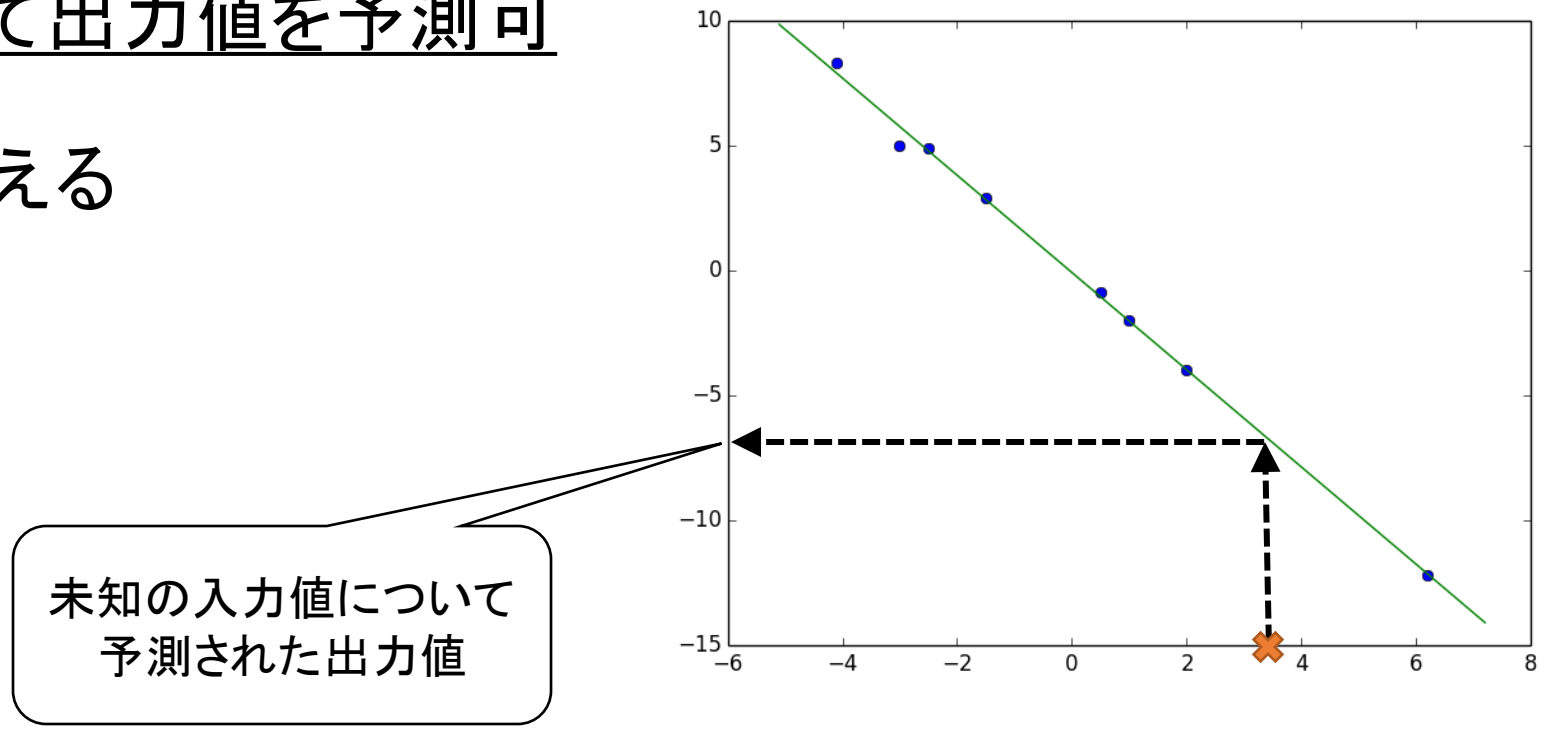
問題の解き方のイメージ

- 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



線形回帰による予測

- 直線が求まれば・・・
- 任意の入力値について出力値を予測可
- 機械学習は予測に使える



機械学習とは・・・

- 入力値と出力値のペアが大量に与えられているとき・・・
- 入力値から出力値を計算する方法（関数）を計算機に学習させる
  - 関数は特定の形式をしていると仮定（例：一次式）
  - 出力値からのズレ具合の測り方を決める（例：誤差の二乗の和）
  - そのズレを機械に小さくさせる＝機械に関数のパラメータを推定させる

    （例：一次式の係数を、誤差の二乗和ができるだけ小さくなるように決める）
- 正確に言えばこれは「教師あり」学習（「教師なし」学習はまた別の話。）

逆に言えば・・・

「”良い関数を見つける”という問題へ落としこめない問題は

いくら頑張っても機械学習では解けません」

- 解きたい問題を、「良い関数を見つける」問題として、どうにかして、言い換えてみてください

課題1（全員提出）

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

上の2乗和誤差を最小にするaとbの値を求めよ

- 電子ファイルでCanvas LMSに提出してください。
  - 手書き計算をスマホで撮った画像、Word、PDFなど、いずれもOK。
- 解き方はいくらでも調べていいです。
  - 数学が苦手な方はちゃんと調べましょう。