

立教大学大学院人工知能科学研究科 数理科学概論

第1回

2023/4/15

担当：石川真之介

本日の内容

- 授業について
- 数理科学と機械学習との関係



授業の目標

機械学習の仕組みを数学用語を使って
説明できるようになる

今週の目標

- 授業の位置付けとスコープを知る
- なぜ機械学習の理解に数学が必要かを知る

授業について

- 春学期の土曜午後はプロジェクトチーム実習も担当していることもあり、教室で授業をすることが多くなる見込みです
ただし天気が悪いのでリモートとかは普通にあり得ます (今日はさすがに。。)
- 授業の構成は
講義 (前半) + 演習(計算問題等)&休憩 + 講義 (後半)
のため、対面授業として行う効果がオンラインと比べて
すごく高いわけではないかな…と思っています
- 授業は毎回録画し、アップロードしますので、授業時間に出席できない
ことは特に問題ありません。
出席確認等もしないので、単位取得や成績で不利になることも
ありません。

リモートでの受講について

- 教室で授業を行う場合でも、Zoom での同時配信を行います。
リモート受講は常に選択可能です。
- 資料は画面共有で示すつもりですが、接続が悪いときのために
事前にダウンロードしておくことをお勧めします。
教員と受講者全員のネットワーク環境がずっと良好とは考えづらいです。
- 接続できない等のトラブルは、slack の授業チャンネルに
書き込んでください。
- 質問：
軽い質問やコメント、感想 → Zoom チャット (※ 拾わない可能性あり)
授業中の質問は音声 on での発言もOKです。
授業時間外も含め質問 → slack 授業チャンネル
- 発言時以外は、マイクはミュートに設定しておいてください。
カメラをオンにすることは必須ではありません。

授業にあたって

デジタル化とデータ

現代社会においてはあらゆるものが「数値化」 「デジタル化」
される



「デジタル化」 「数値化」された「データ」を扱う基礎となるのが「数学」
データを扱うための道具がコンピュータ

数理科学概論 シラバスより

授業の目標

機械学習により取り組む課題をどのように数学的に記述するか、
機械学習のアルゴリズムがどのような数学的手法を用いているかを学び、
機械学習の数理的側面の理解を深める。

授業の内容

基幹科目「機械学習」で扱うアルゴリズムをより深く理解するため、機械学習で
解決したい課題や機械学習アルゴリズムを数学的に記述するのに必要となる、
ベクトル、行列、微分法、確率、統計といった数学的トピックの基礎を学ぶ。

また、多くの課題が帰着する最適化問題について、その概要及び解法について説明する。

数学的問題のコンピュータプログラムによる実装についても適宜紹介する。

理工系の学部出身でない学生や、コンピュータによる数値計算の経験がない学生には
履修を推奨する。

授業方針

- AI プランナーが目標とすべきこと：
数理科学概論で扱うキーワードが説明できる
→ 機械学習アルゴリズムを数学の言葉で説明できるようになる
- AI エンジニア、AI サイエнтиストが目標とすべきこと：
数理科学概論で扱う数学を活用できるようになる
→ アルゴリズムの理解、実装、開発
- 授業としては主にプランナーを想定。
(受講者の数学習熟度の差はかなり激しいと思われ、全員に合わせることは不可能な点をご理解ください)
- 具体例や、イメージを重視。厳密な定義を示さない場合、証明を行わない場合もある。AI エンジニア、AI サイエнтиスト志望の学生は必要性を感じた場合自主学習で補完を推奨。
- 4月の授業についていけない場合は、各自高校数学の復習をすることを強く推奨。
学生同士での勉強会、助け合いもおすすめです。

What this course is:

本授業の内容は以下の通り。

- 本授業は、機械学習を念頭においた**数学の授業**である
- 機械学習で使われる数学について、その**概要および用語**を学習する
- 最適化問題とは何か、最適化問題を解くにはどうしたらよいか、いくつかのケースについて説明する
- 数学的处理をコンピュータでどう扱うかについて、Python のデモにより**紹介**する

What this course is not:

本授業は以下の内容ではない。本授業で扱う内容が参考になることは大いにあるので、他の授業や自主学習で次のステップに進んで欲しい。

- 機械学習アルゴリズムの解説をするための授業ではありません。
- Python コードを書けるようにするための授業ではありません。
- 具体的なデータの取り扱い方、データ処理の方法を学ぶ授業ではありません。
- 特定の資格試験の対策講座ではありません。
- 文系出身者に理系大学生並みの数学的能力を身につけるためのものではありません。

授業の予定

1. 数理科学と機械学習との関係の概要 (今回)
2. 高校数学の復習：ベクトル
3. 高校数学の復習：微分、積分
4. 高校数学の復習：場合の数、確率
5. 行列の計算
6. 関数と微分・偏微分
7. 多変数関数の勾配
8. 確率、統計の基礎
9. 情報量の基礎
10. 最適化問題(1) 最適化問題の概要
11. 最適化問題(2) 制約なし最適化と解法アルゴリズム
12. 最適化問題(3) 線形計画問題、双対定理
13. 最適化問題(4) ラグランジュ未定乗数法
14. 最適化問題(5) サポートベクターマシンの数理

参考書

- 赤石雅典 『最短コースでわかる ディープラーニングの数学』
(日経BP)
ディープラーニングの、と言いつつ他の機械学習モデルも解説。
数学の項目と機械学習の関係も含め、丁寧に説明されている。
- 加藤公一 『機械学習のエッセンス 実装しながら学ぶPython、
数学、アルゴリズム』 (SB クリエイティブ)
基礎的な数学の解説から、Python による機械学習実装まで、一連の流れが学べる
- 金森敬文 他 『機械学習のための連続最適化』 (講談社)
研究者による学術書。大学数学の学習前提。
最適化問題をきちんと勉強したい人向け。

高校数学解説書のおすすめについては、学生同士で相談してみてください

参考になるサイト

- Chainer Tutorial

<https://tutorials.chainer.org/ja/>

機械学習に使う数学の解説もあり。簡潔にまとまっている。

- @IT 「AI・機械学習の数学入門 — 中学・高校数学のキホンから学べる」

https://atmarkit.itmedia.co.jp/ait/subtop/features/di/mathematics_index.html

本当に数学が苦手という人に最初の数回がおすすめ。

読み物としても面白い。

- ネット上の記事は玉石混合…と言いたいところだが、近年かなり

信頼できないものも。

大学院生としてしっかり学ぶには、信頼できる著者、メディアの記事を。

評価

- レポートにより評価する。3回程度を予定。
オンライン (Canvas LMS を使用予定) で提出。
- 数学の授業とはいえ、主にプランナー向けと考えているので、
「説明する」タイプの課題を含む。

数学と機械学習

機械学習

機械学習は、「ある情報をもとに判断 (予測、分類) する仕組み」(機械学習モデル) を、人間がルールを教えるのではなく、計算機自らが学習することにより (自動的に) 作成すること、と捉えられる (※詳しくは/正確には、授業「機械学習」にて!)

機械学習モデルは情報から判断を導く。コンピュータは情報も判断も数値として扱う。

したがって、機械学習モデルは数値から数値を導くものと言える。これは、数学で関数と呼ばれるものと捉えられる。



同一の入力データに対し同じ結果になる → 入力データの関数

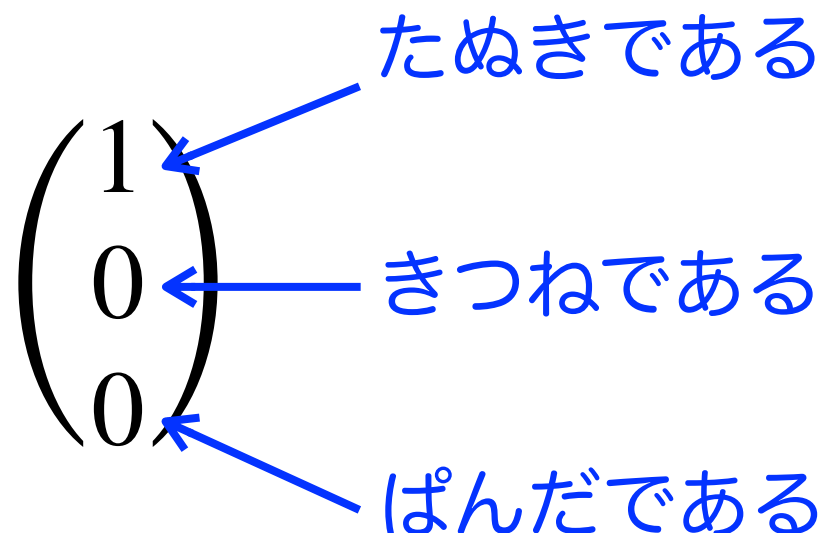
入力データ、出力データの表し方

深層学習を含む機械学習では、入力データは数値化し、出力データも数値。

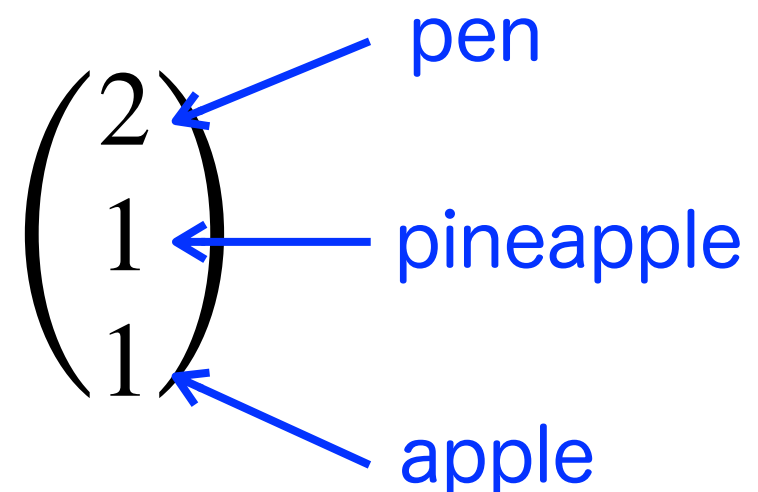
- もともと数値データはそのまま (重さ、距離、時間の長さ etc)
- 分類問題、自然言語処理も数値に変換する
- いずれの場合も一般には1つの数値ではなく、複数の数値の組み合わせで表す。このとき、**ベクトル**が活用される。

※ ベクトルの成分は縦向きに並べることもある。詳細は第2回授業にて

分類の例 (one-hot encoding)



自然言語処理の例 (bag of words)



機械学習モデルの捉え方

したがって、機械学習モデルとは一般に

「ベクトルを入力し、ベクトルを得る」関数と考えられる。

(入力と出力の成分の数は一致している必要はない)



機械学習モデルにおいて、入力ベクトルから出力ベクトルを得る計算過程でよく使われるのが行列計算である。

行列計算は、線形回帰から深層学習まで多くのモデルで活用される。

機械学習と確率

機械学習による課題解決のため現実世界でデータを集めた場合、その内容は100 % 完全とは限らない。

さまざまな要因により本当の値とのズレ (誤差) が含まれる、注目している課題とは関係ないばらつきが含まれる等がある。

機械学習モデルによる出力も100 % 完璧にはできない。

こういった課題を取り扱うのに便利なのが**確率**。

確率により記述される推測**統計**学の手法を用いれば、事象の起こりうる**確率**を推測できる。

統計的分布から**確率**を求めるためには**積分**が使われる。

学習と最適化

教師あり学習 (出力の正解が分かっているデータを用いた機械学習) でデータをモデルに学習させる際には、できるだけモデル出力の正解率を上げられる (=正解とのズレが小さくなる) ようにモデルを調整していく。

このとき使われるのが微分である。

微分は、値をわずかに変化させたときに、結果にどの程度の影響が出るか、その比率を計算する操作である。

微分により、モデルで使われている値をどう変化させるとよりよいモデルにできるかを調べることができる。

ある値が最小/最大になるための条件を求める数学的問題を最適化問題と呼ぶ。

機械学習は、数学的には最適化問題に帰着すると考えることができる。

本日のまとめ

- この授業は「機械学習を数学の言葉で説明できる」ようになるため数学を学習するための授業
- 機械学習は「数値を入力、数値を出力」とするシステムとみなせ、その中身を理解するのに必要なのが数学