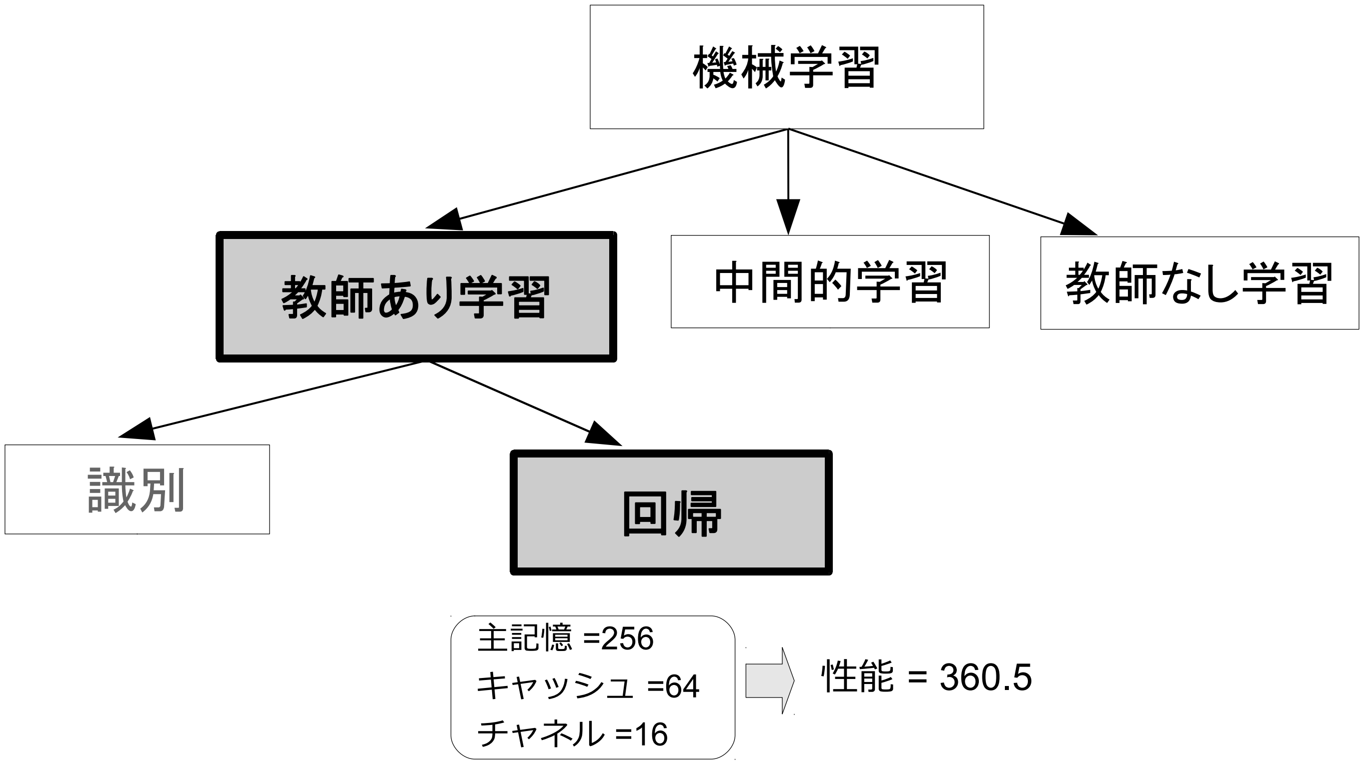
6. 回帰

- 問題設定
  - 教師あり学習
  - 数値入力　→　数値出力



6.1 数値特徴に対する「教師あり・回帰」問題の定義

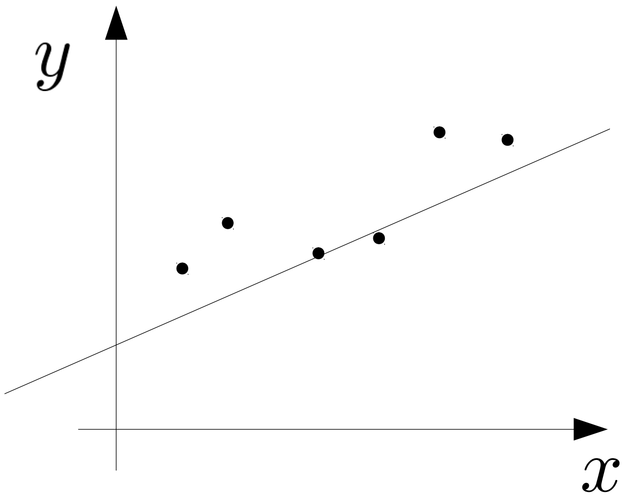
- 「教師あり・回帰」問題のデータ
  - 特徴ベクトル $\boldsymbol{x}$ と正解情報 y のペア

    $$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}, \quad i = 1 \ldots N$$
  - 特徴ベクトルは次元数 d の固定長ベクトル

    $$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \ldots, x_{id})^T$$
  - 数値形式の正解情報 y を**ターゲット**とよぶ
- 学習の目的
  - 未知データに対する予測性能が高いモデルを得る
  - 予測根拠の説明性が高いモデルを得る

6.2 線形回帰

- 問題設定
  - 学習データとのなるべく誤差の少ない直線を求める



- 定式化
  - 入力 $\boldsymbol{x}$ から出力 y を求める回帰式を 1 次式に限定
  - 学習データから係数 $\boldsymbol{w}$ を求める

$$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{d} w_i x_i \qquad \text{ただし } x_0 \equiv 1$$

6.2 線形回帰

- 最小二乗法による係数の推定
  - 推定の基準：誤差の二乗和 E を最小化

$$E(\boldsymbol{w}) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \hat{c}(\boldsymbol{x}_i))^2$$

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

$\boldsymbol{X}$: 全学習データを並べた行列

$\boldsymbol{w}$: 係数のベクトル表現

  - $\boldsymbol{w}$ で偏微分した値が 0 となるのは

$$\boldsymbol{X}^T (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y}$$

$\boldsymbol{w}$ が解析的に求まる

6.3 回帰モデルの評価

- 回帰問題の評価法
  - 誤差の二乗和：手法間の評価に有効
  - 相関係数：出力と正解とがどの程度似ているか
  - 決定係数：１から残差変動と全変動の比を引く
    （相関係数の２乗で計算可能）

Weka の結果表示例

```
=== Cross-validation ===
=== Summary ===

Correlation coefficient          0.9012
Mean absolute error             41.0886
Root mean squared error         69.556
Relative absolute error         42.6943 %
Root relative squared error     43.2421 %
Total Number of Instances      209
```

決定係数の式

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{c}(x_i))}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{y})}$$

$\tilde{y}$： y の平均

6.4 正則化

- 正則化の考え方
  - 正則化項の導入

    → 複雑なパラメータ $\boldsymbol{w}$ （過学習）の回避

    – L1 ノルム $|\boldsymbol{w}|$ ： 0 となるパラメータが多くなる　Lasso

    – L2 ノルム $\|\boldsymbol{w}\|^2$ ：パラメータを 0 に近づける　Ridge

- リッジ回帰
  - 誤差の二乗和に L2 ノルム正則化項を加える

$$E(\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) + \underline{\lambda \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{w}}$$

λ ：誤差の二乗和と正則化項とのバランス

$$\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} + \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

$\boldsymbol{w}$ が解析的に求まる

6.4 正則化

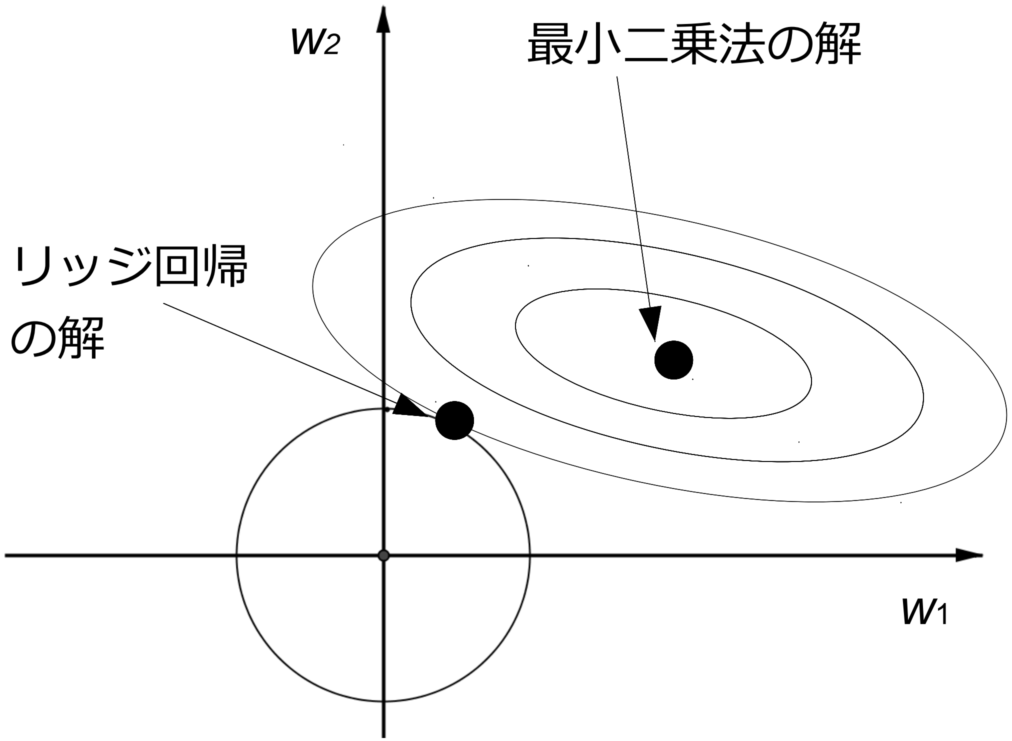
- ラッソ回帰
  - 誤差の二乗和に L1 ノルム正則化項を加える

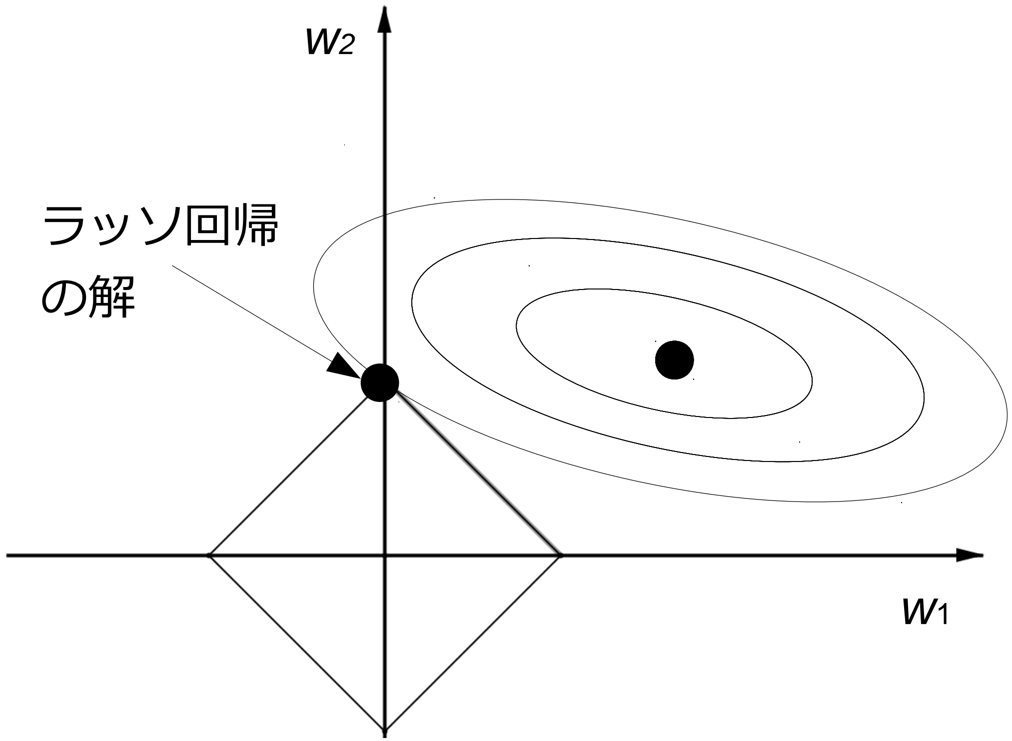
$$E(\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}) + \underline{\lambda \sum_{j=1}^{d} |w_j|}$$

  - 微分不可能な点があるため、解析的に解を求めることができない
    - 適当な初期重みから始め、リッジ回帰で上界を押さえる逐次更新アルゴリズム等を用いる

6.4　正則化

- リッジ回帰とラッソ回帰





パラメータを 0 に
近づけている

0 となるパラメータを
多くしている

6.5 バイアス－分散のトレードオフ

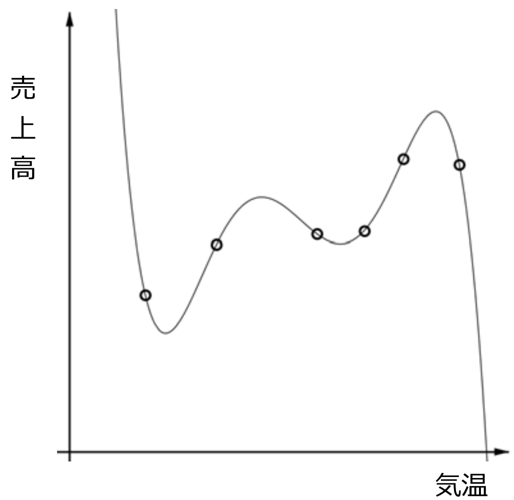
- 最小二乗法の精度向上
  - 基底関数 $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}) = (\phi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \phi_b(\boldsymbol{x}))$ を考える

例 $\boldsymbol{\phi}(x) = (1, x, x^2, \ldots, x^b)$

$$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=0}^{b} w_j \phi_j(\boldsymbol{x})$$

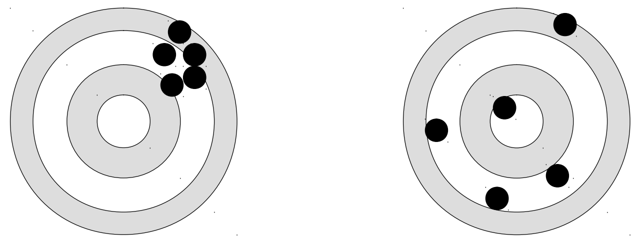
  - 係数が線形であれば、最小二乗法が適用可能

- 問題点
  - 汎化性能の低下



6.5 バイアス－分散のトレードオフ

- バイアスと分散
  - バイアス：正解からのズレ
  - 分散：求まる解の安定性

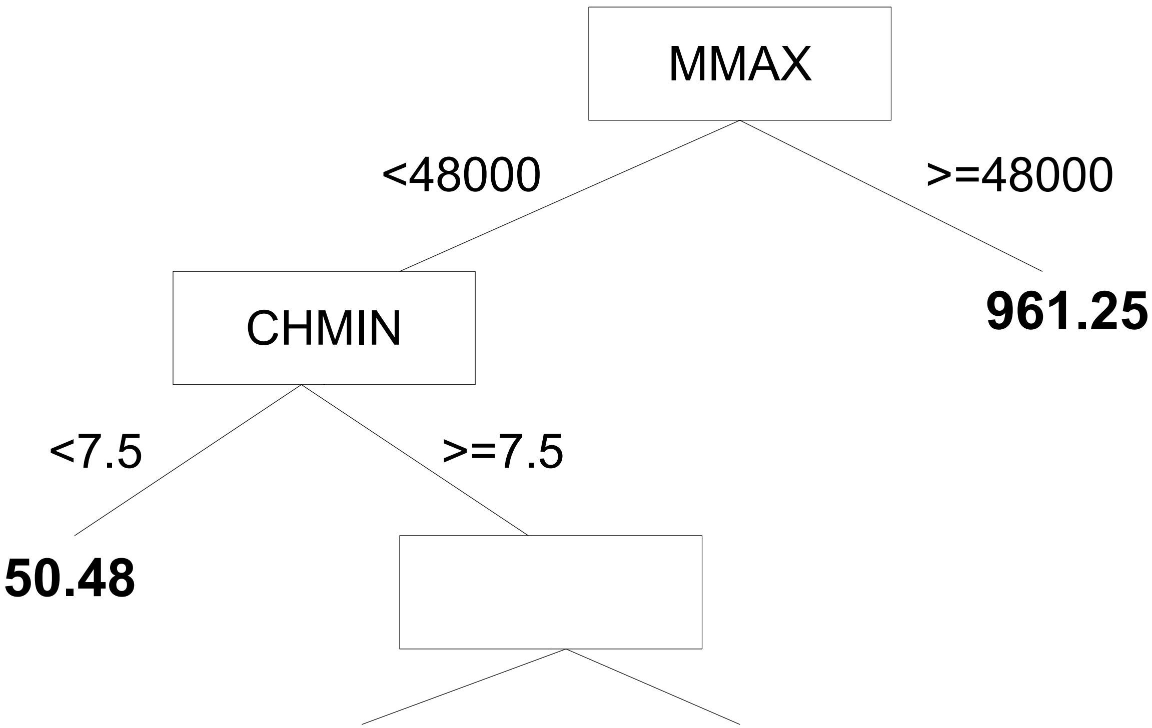


単純なモデル　　複雑なモデル

- 単純なモデル
  - 正解からはずれているかもしれない→バイアス**大**
  - データが多少ぶれても結果は似ている→分散**小**
- 複雑なモデル
  - 正解をカバーしている可能性が高い→バイアス**小**
  - データが少し違えば結果が大きく異なる→分散**大**

6.6 回帰木

- 回帰木とは
  - 識別における決定木の考え方を回帰問題に適用
  - ターゲット値の分散が小さくなるように分割
  - リーフの値はターゲットの平均値



6.6 回帰木

- CART (classification and regression tree)
  - 木の構造を二分木に限定
  - データの分類基準はジニ不純度
    - 2 クラスの場合のジニ不純度 $I_G(p) = 2p(1-p)$
    - クラスの出現が等確率のとき最大
  - 回帰に用いるときのデータの分類基準はターゲット値の分散
    - 子ノードの重み付き分散和が最小となる特徴を選ぶ

6.6 回帰木

- CART (classification and regression tree)
  - 分散の計算
    - Y: あるノードに属するデータのターゲット値の集合

$$Var(Y) = \frac{1}{|Y|} \sum_{y_i \in Y} (y_i - \bar{y})^2 \qquad \bar{y} \ : \ Y\text{の平均}$$

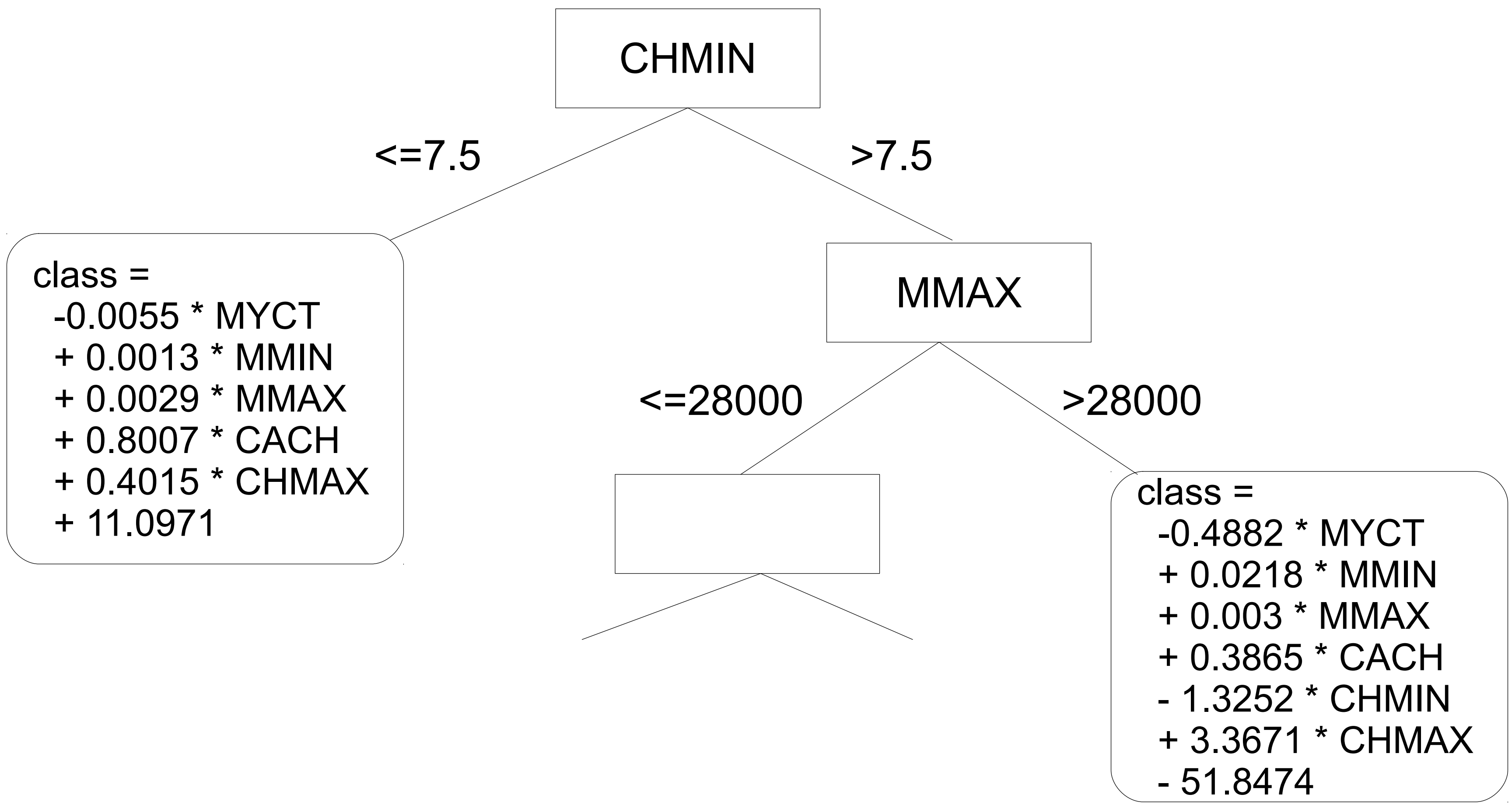
$$Var(\{Y_1, \ldots, Y_l\}) = \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} Var(Y_j)$$

$$= \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} \left(\frac{1}{|Y_j|} \sum_{y \in Y_j} y^2 - \bar{y}_j^2 \right)$$

$$= \frac{1}{|Y|} \sum_{y \in Y} y^2 - \sum_{j=1}^{l} \frac{|Y_j|}{|Y|} \bar{y}_j^2$$

6.7 モデル木

- モデル木とは
  - リーフを線形回帰式にした回帰木



6.7 モデル木

- モデル木の特徴
  - 木構造によって、振る舞いの異なるデータを分割した基準が明示される
  - 回帰木よりも性能が高い回帰モデル

カーネル回帰

- 基底関数にカーネルを用いる

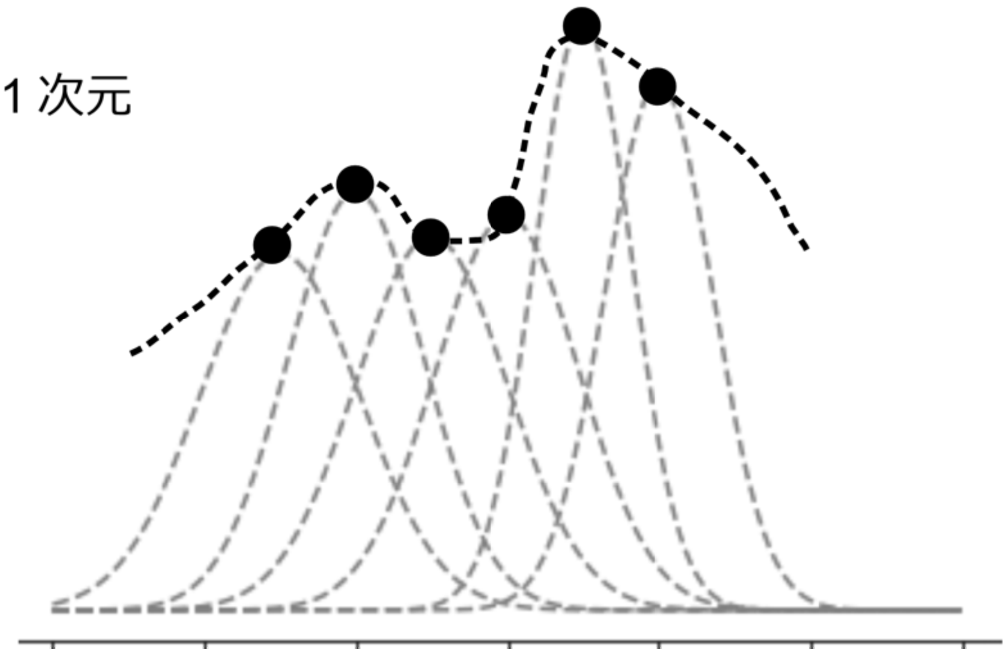
$$\hat{c}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j)$$

- RBF カーネルを用いた場合

$$K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \exp(-\gamma ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'||^2)$$

カーネル関数の値の
重み付き和で出力を計算
＝学習データの近傍で
のみ関数を近似

1 次元



2 次元