単回帰を使う

正田 備也

masada@rikkyo.ac.jp

kNNの課題の追加説明

- kを交差検証（cross validation）で決める方法

- 前回説明したcross validationの方法は、leave-one-outと呼ばれる
  - まずtest dataを除去（test setは、最後に一回、評価に使うだけ）
  - 残りのデータをtraining setとvalidation setに分割
  - 前回説明した方法では、validation setは一つの国だけ ＝ leave-**one**-out
  - この一つの国を取り替えつつ、それぞれの場合の予測誤差を記録
  - これらの予測誤差の平均を求める
  - この予測誤差の平均を最小にするkの値を調べる（elbow curve）

交差検証 （cross validation）

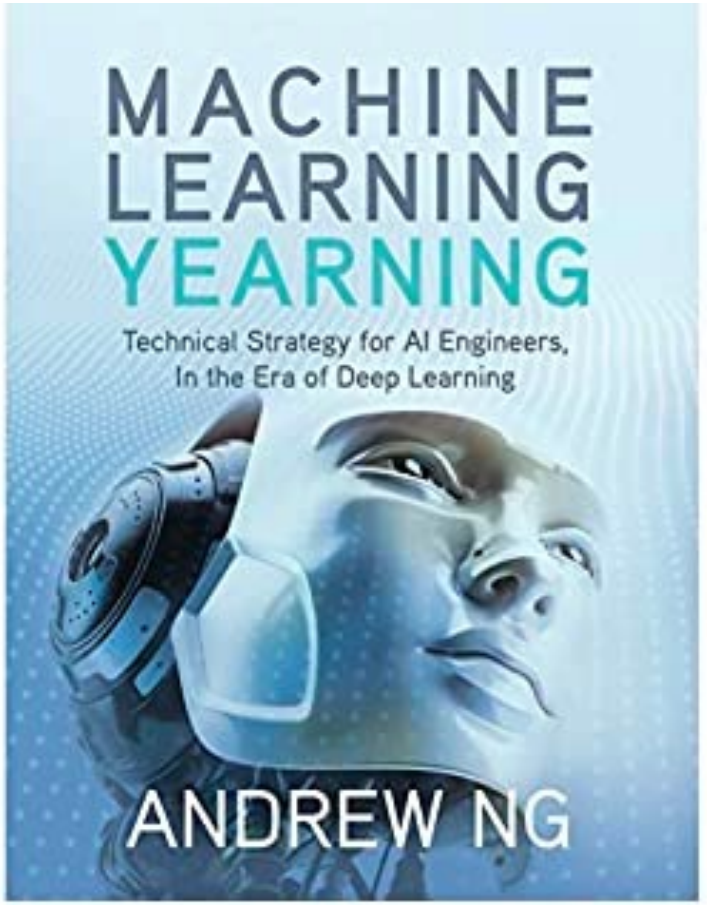
- 機械学習の実験では、しばしばデータ集合を3つに分ける

1. training set
2. validation set (development set)

（1と2：交差検証に使う）

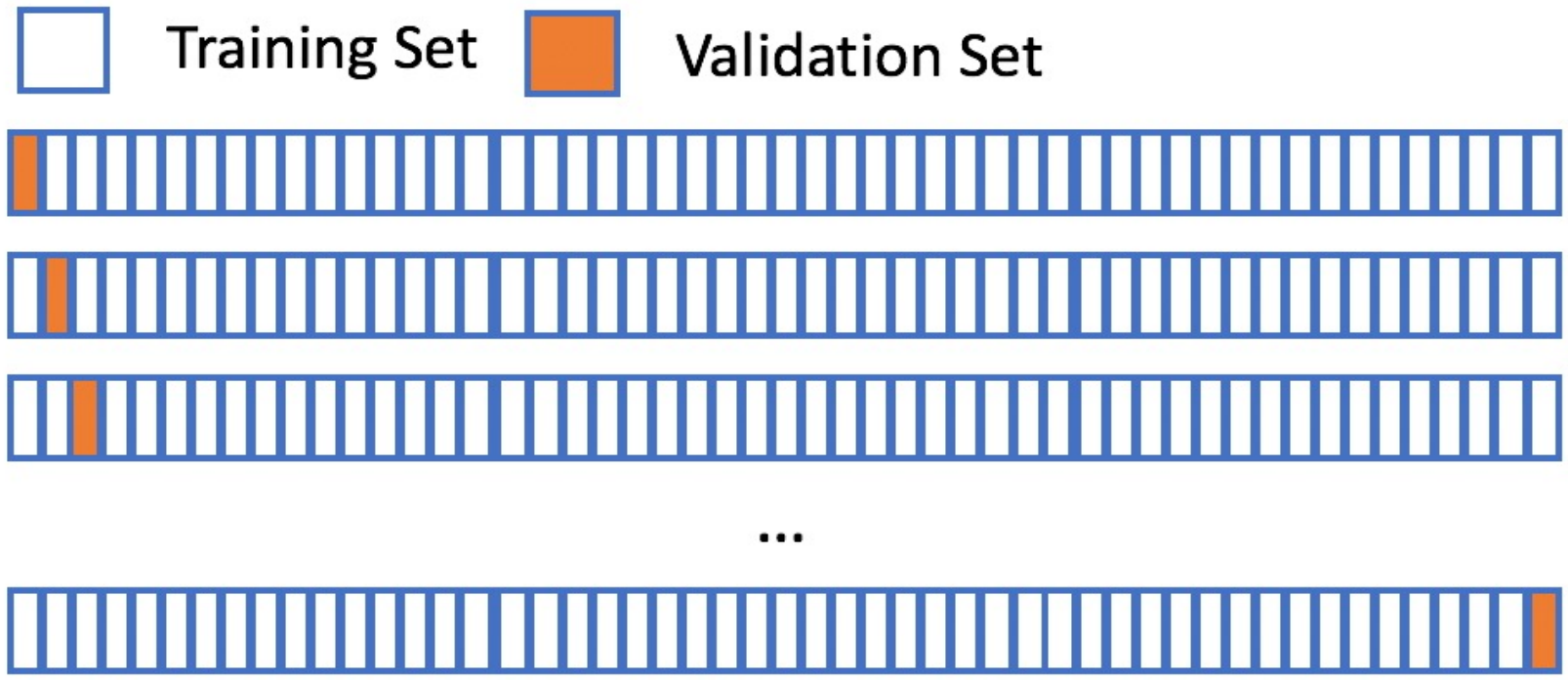
3. test set

- test setは、最後に一回、手法の最終的な評価に使うだけ
- training setとvalidation setを使って、良いモデルを選んでおく
  - test setで評価する前に、できるだけ良いモデルを選んでおく
  - validation setの取り方をいろいろ変える→交差検証



https://www.deeplearning.ai/machine-learning-yearning/

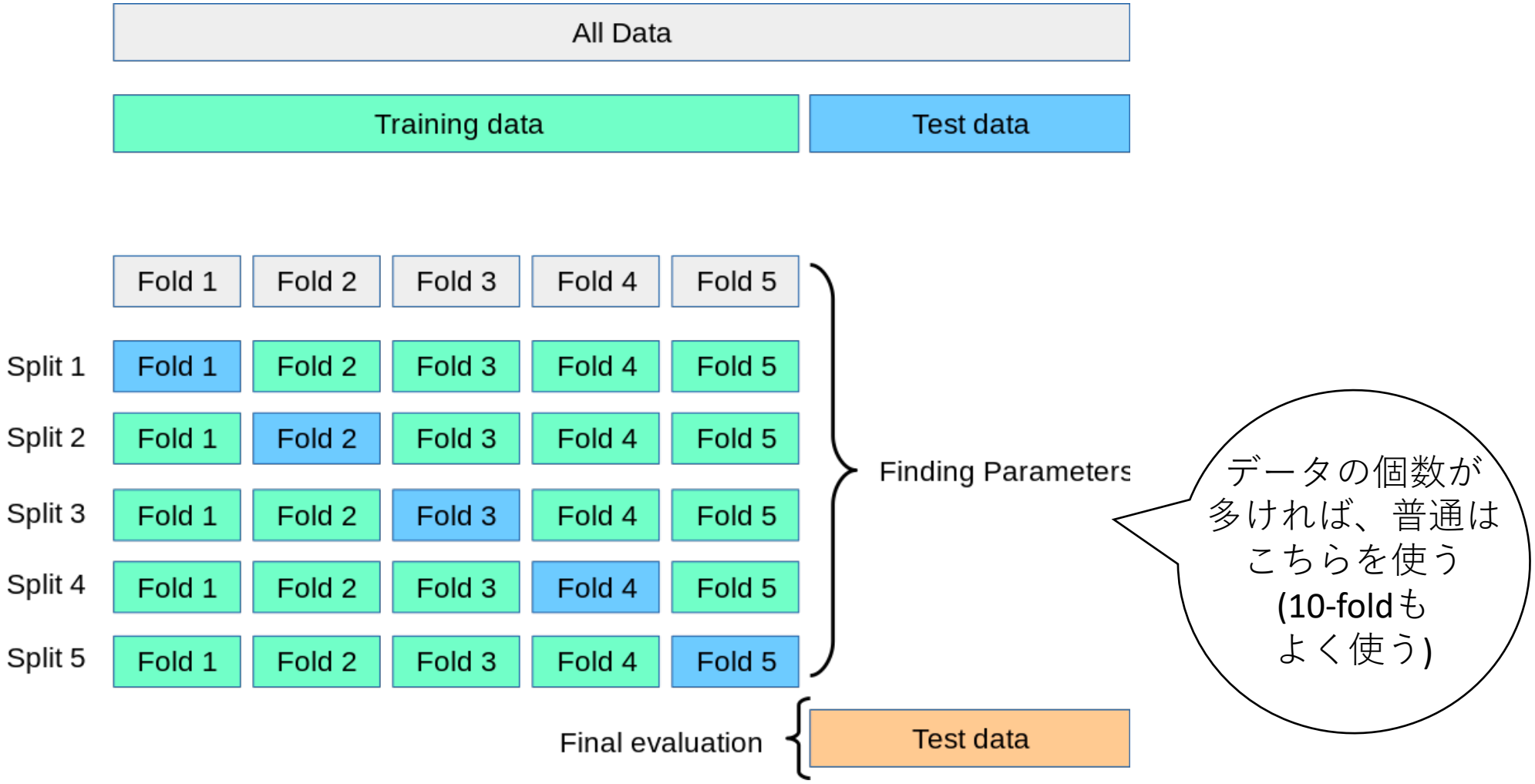
leave-one-out cross validation



データの個数が
少ないときに
よく使うCV

https://campus.datacamp.com/courses/model-validation-in-python/cross-validation?ex=10

5-fold cross validation



https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html

データ分割の必要性の雰囲気

- 未知データに対する予測性能を調べたい！
  - training setとは別に、test setを用意する必要がある。
  - そのtest setを最後に一回使って、手法の予測性能を測る。

- できるだけ良いモデルを探したい！
  - training setの部分集合を、validation setとして取り出す必要がある。
  - 個々のモデルをvalidation set上で評価して比較する。
  - validation setは、何通りも違う取り出し方をし、評価を繰り返す。
    - 良いモデル＝予測に良いモデル or データの「理解」に良いモデル

今日の予定

- 機械学習とは何かを説明。
- それをふまえて、単回帰を説明。
- そして、scikit-learnを使った単回帰の実装
  - 勾配降下法については、次回説明

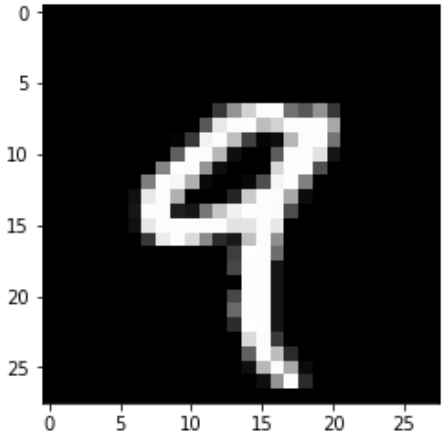
課題5

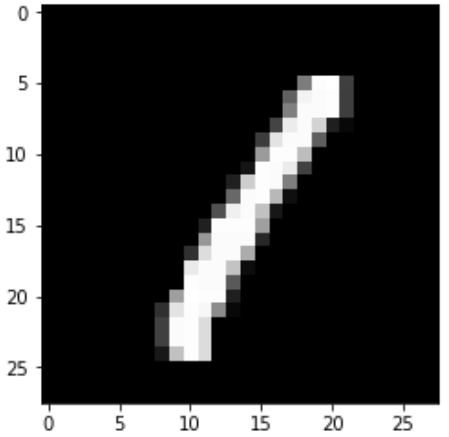
- 一人当たりのGDPから生活満足度を予測してみよう(p.22)
- 日本について、他の全ての国の生活満足度が既知と仮定し、生活満足度を予測しよう
- 予測は、実際の値との差の絶対値で、評価しよう
- sklearnの線形回帰を使おう
- 推定結果を直線のグラフとして可視化しよう
  - その際、訓練データの散布図も、グラフに重ねて描こう

機械学習とは？

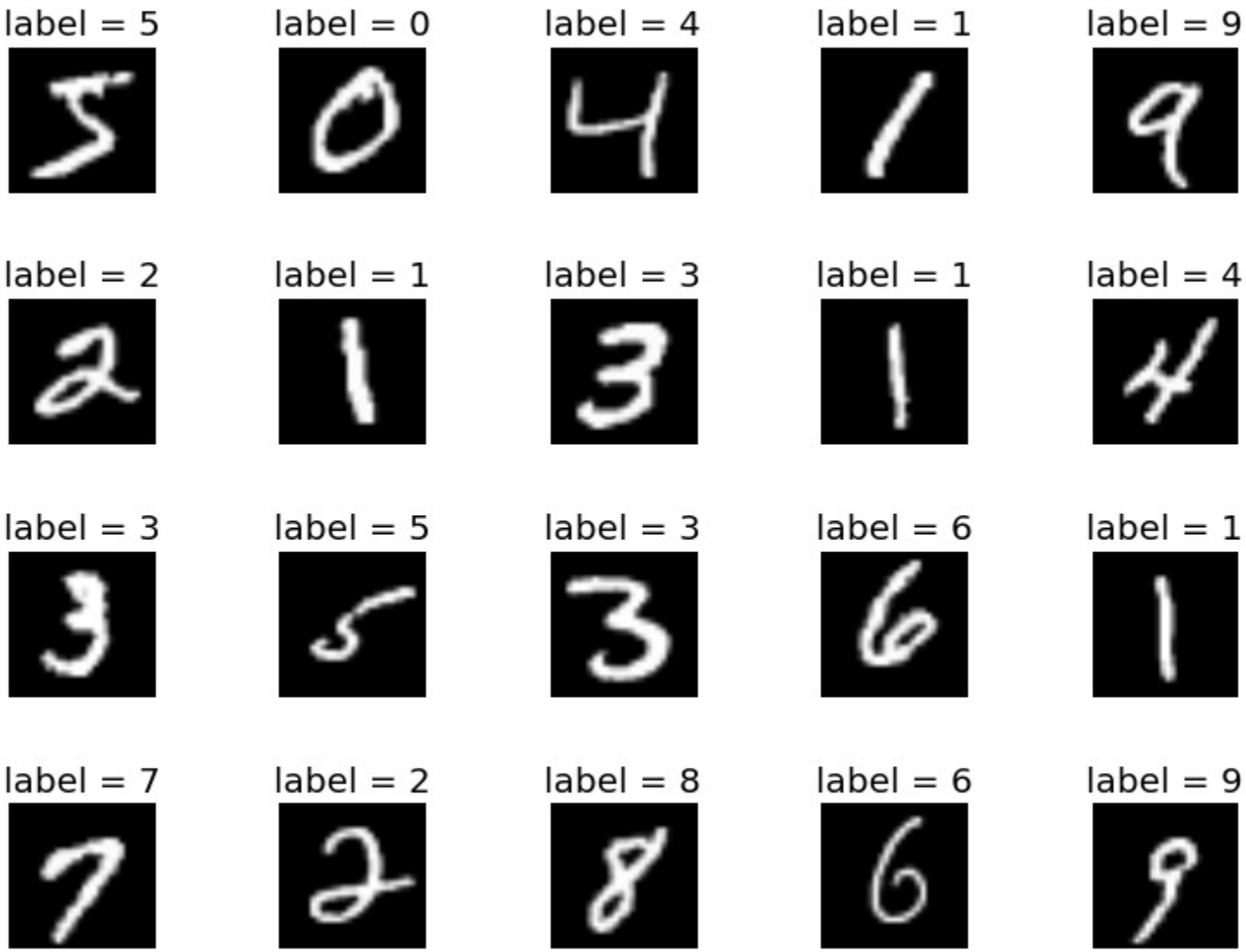
例：手書き数字画像の分類（MNISTデータセット）

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

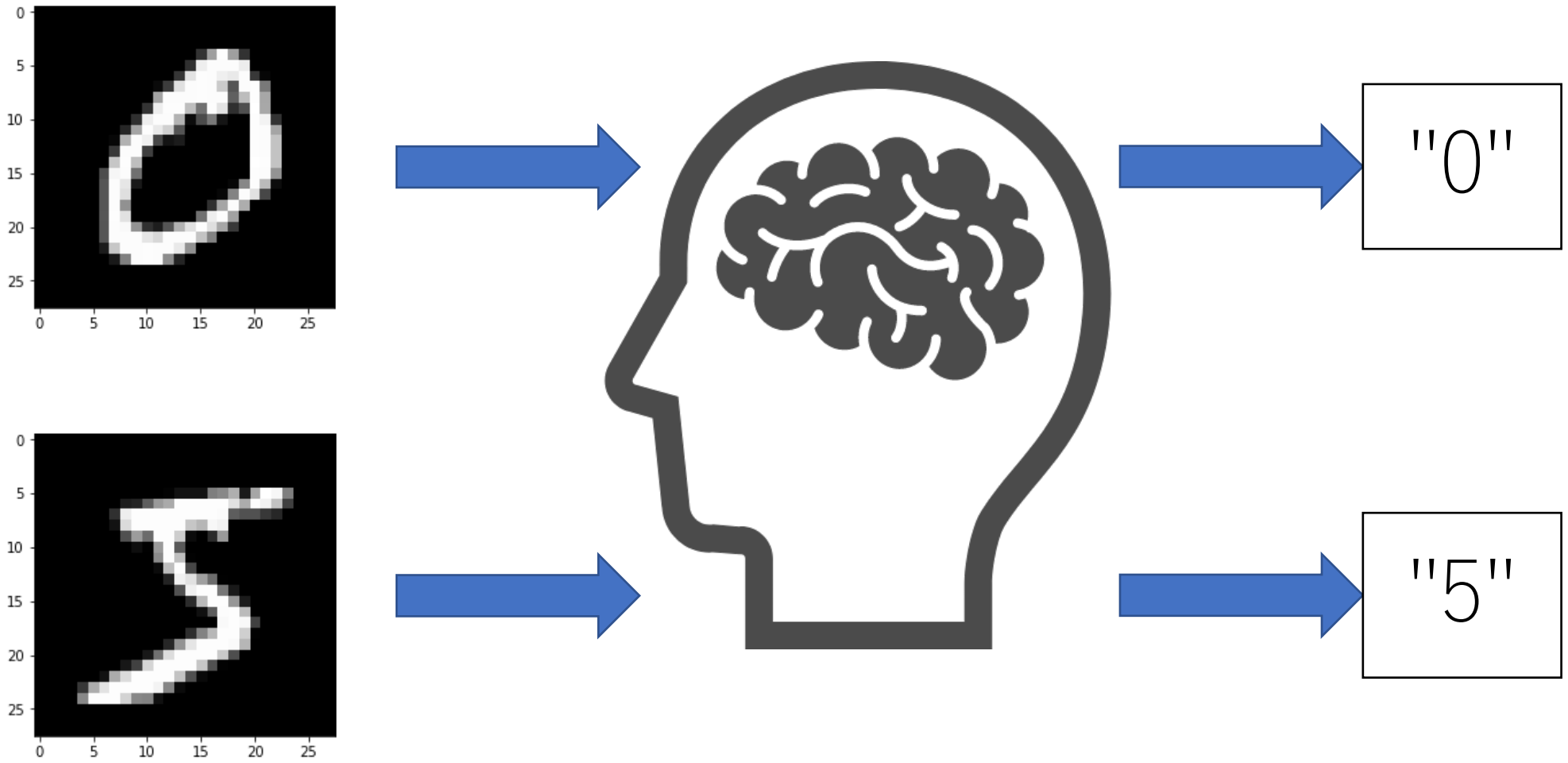




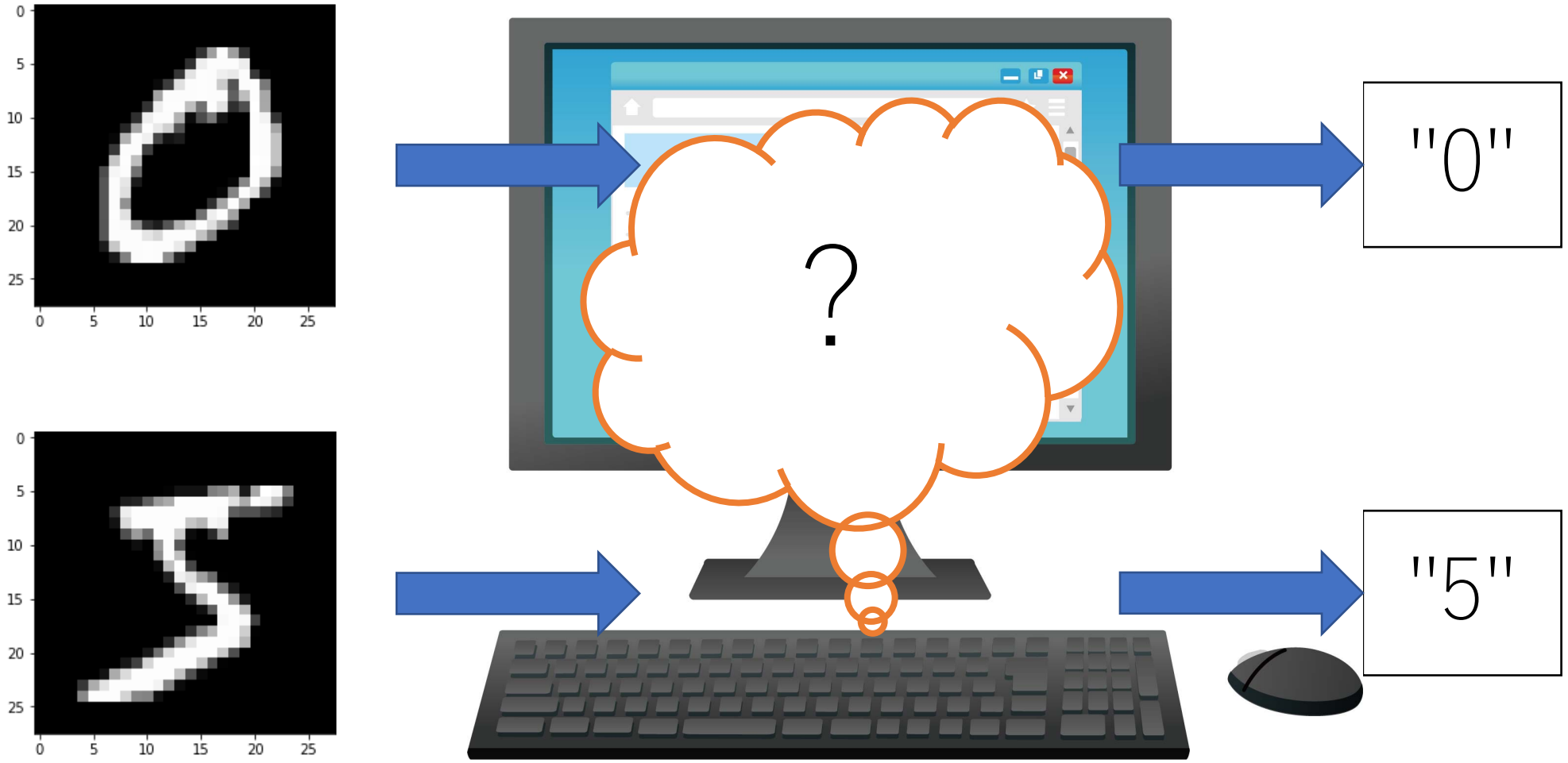
- 機械学習＝計算機に学習させる
  - どうやって？


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？

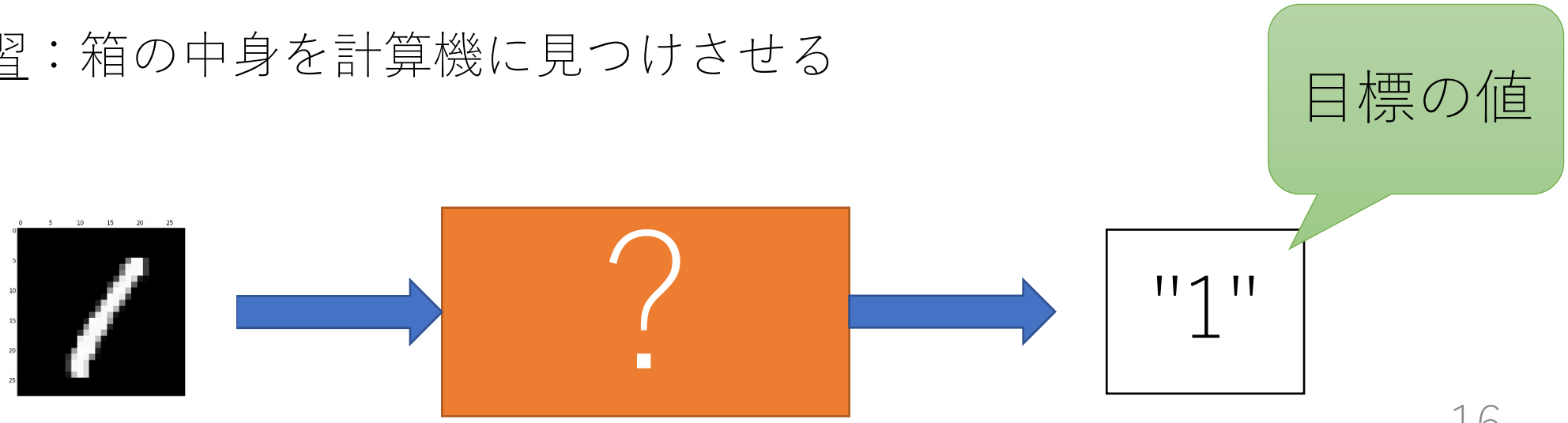


分類(classification)

- データを複数のクラスへと分ける問題
  - 入力：分類したいデータ
  - 出力：どのクラスへ属させるべきかを示す値＝「クラスラベル」
- どんな入力データにも、ちゃんと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

- 学習：箱から出てくる値が目標の値になるような箱の中身（「？」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　　＝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に近い箱

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・・・

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

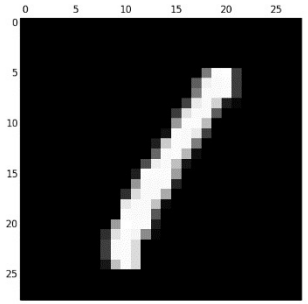
- 関数を選ぶ範囲は、あらかじめ決めておく
- どう決める？
  - 入力データのフォーマットを決める
    - 入力データをどのように数値化するか？
  - 出力データのフォーマットを決める
    - 出力データをどのように数値化するか？
  - 計算式の「かたち」を決める
    - 計算式はパラメータ（自由に変更できる部分）を含む。
    - このパラメータを計算機で決めるのが、機械学習。

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）

```
[  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   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  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   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  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   0 234 251 251 196  12   0   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   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   0 159 255 253 253  31   0   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   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

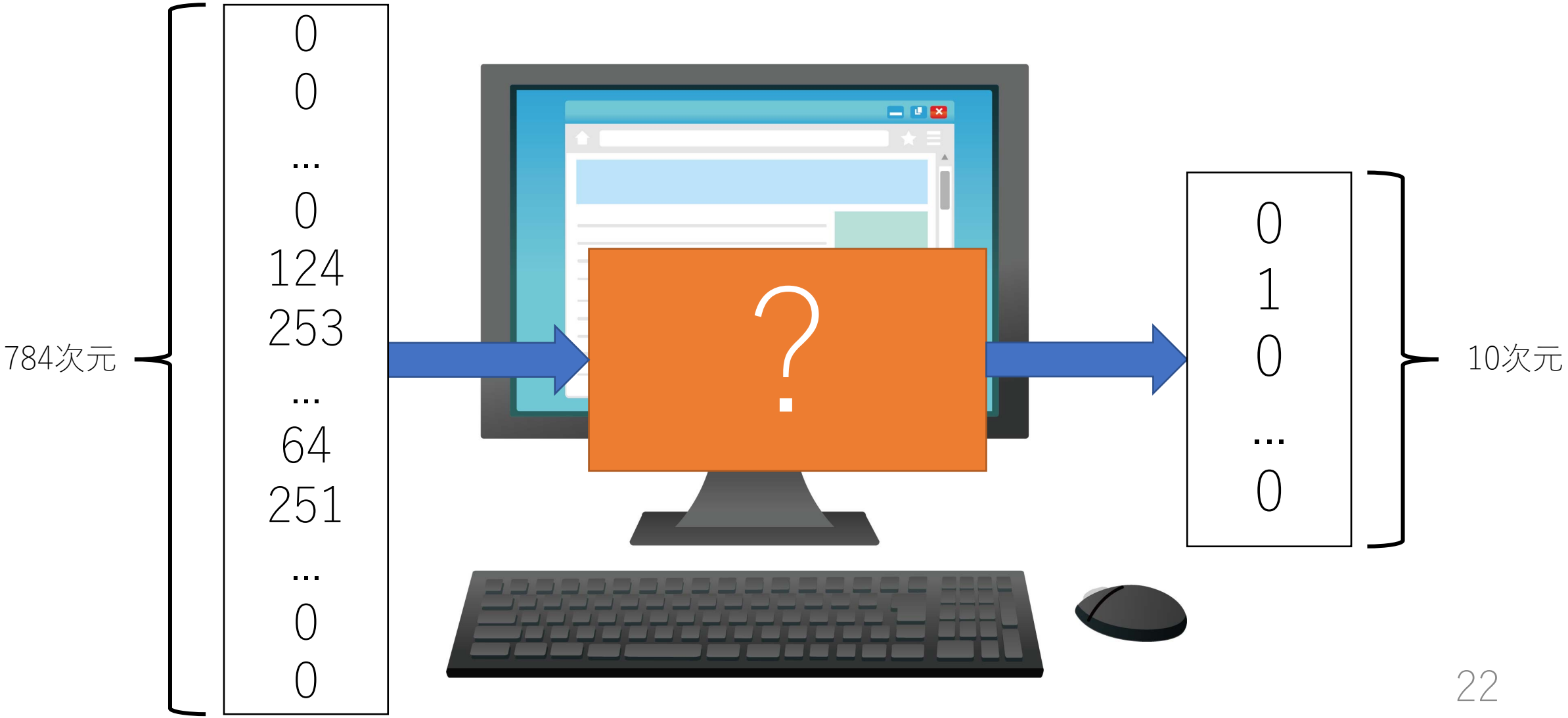
  - "3"というラベルの場合:

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

こういうものを
one-hot vectorと呼ぶ。

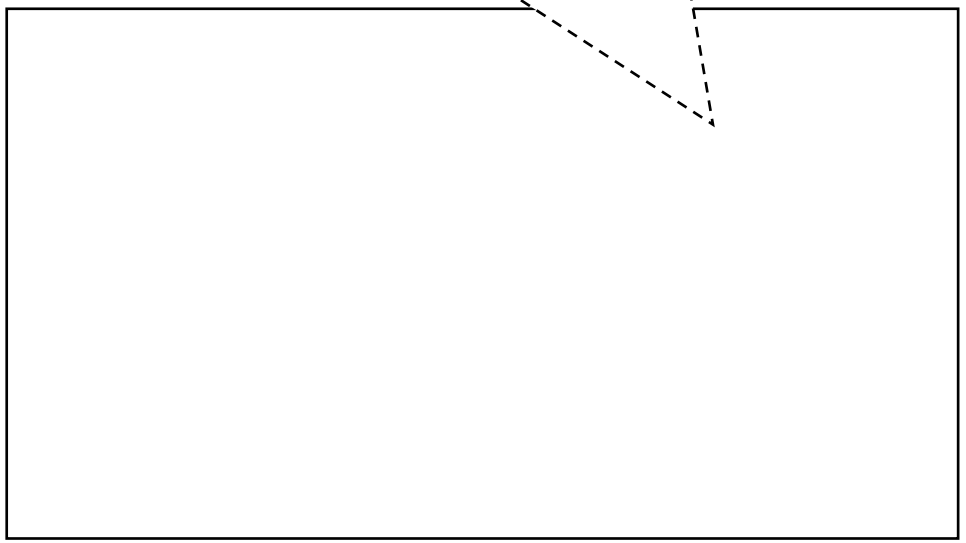
手書き数字画像の分類の問題設定

入力データと出力データをベクトル化した後の状態



（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？」



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

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次元ベクトル）

例題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？

例題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？

例題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？

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）
- 例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

例題4（ちょっとデータ数が多い）

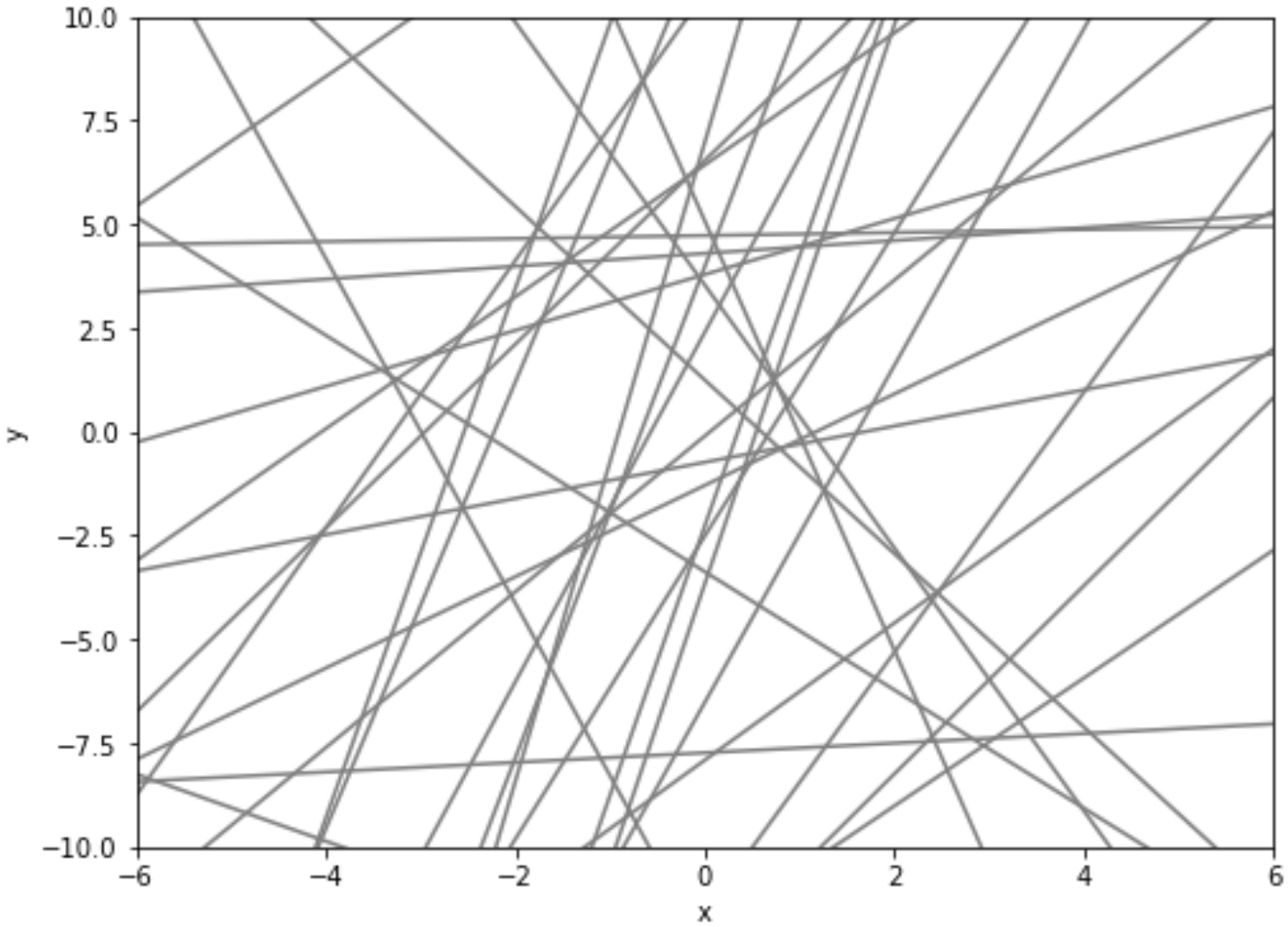
- ある箱に、
  - 2.0という数値を入れたら-4.0という数値が出てきてほしい。
  - 1.2という数値を入れたら-2.0という数値が出てきてほしい。
  - -3.0という数値を入れたら5.5という数値が出てきてほしい。
  - 0.5という数値を入れたら-0.9という数値が出てきてほしい。
  - -4.1という数値を入れたら8.3という数値が出てきてほしい。
  - -1.5という数値を入れたら2.9という数値が出てきてほしい。
  - -2.5という数値を入れたら4.9という数値が出てきてほしい。
  - 6.2という数値を入れたら-12.2という数値が出てきてほしい。
- 箱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）

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

  - これで関数を選ぶ範囲が決まった。（線形回帰）
- 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
  - あとはこの範囲の中で、できるだけいい関数を選べばよい。



$f(x) = ax + b$は様々でありうる

例題4の続き

$$2a + b = -4$$
$$1.2a + b = -2$$
$$-3a + b = 5.5$$
$$0.5a + b = -0.9$$
$$-4.1a + b = 8.3$$
$$-1.5a + b = 2.9$$
$$-2.5a + b = 4.9$$
$$6.2a + b = -12.2$$

解けない方程式

- 未知数は$\boldsymbol{a}$と$\boldsymbol{b}$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！

例題4で式が２つだけだったら・・・

$$2a + b = -4$$

$$1.2a + b = -2$$

- これは普通の連立一次方程式
  - 答えは$a = -2.5, b = 1$

問題を変える
目標の値に、一致させるのではなく、近づける

- 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・・・値がズレていてもいいことにする
  - 一致しなくても、十分に近ければ良い、と考える

例題4の続き（簡単のために式を3つにした）

$$2a + b \approx -4$$

$$1.2a + b \approx -2$$

$$-3a + b \approx 5.5$$

完全に一致しなくてもいい、
という意味。

残差

- $2a + b \approx -4$
  - 残差は $(2a + b) - (-4)$
- $1.2a + b \approx -2$
  - 残差は$(1.2a + b) - (-2)$
- $-3a + b \approx 5.5$
  - 残差は$(-3a + b) - 5.5$

残差の2乗
2乗するとプラスかマイナスかが関係なくなる

- $2a + b \approx -4$
  - 残差の2乗は$\{(2a + b) - (-4)\}^2$
- $1.2a + b \approx -2$
  - 残差の2乗は$\{(1.2a + b) - (-2)\}^2$
- $-3a + b \approx 5.5$
  - 残差の2乗は$\{(-3a + b) - 5.5\}^2$

問題を解く方針

- 残差の2乗の和を最小にすることで、関数

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

のaとbを求める

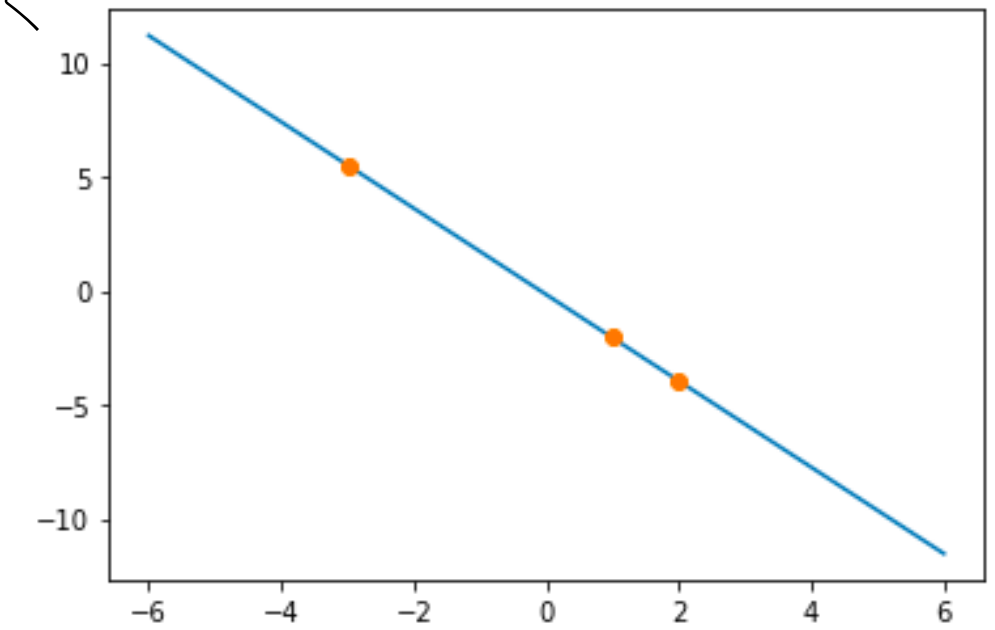
- つまり、$ax + b$というモデルのパラメータを求める
  - 例題4の場合なら、次の式の値を最小にするaとbを求める

$$\{(2a + b) - (-4)\}^2 + \{(1.2a + b) - (-2)\}^2 + \{(-3a + b) - 5.5\}^2$$

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$\boldsymbol{x}$座標、出力値が$\boldsymbol{y}$座標。
- それらの点にぴったり合う直線を引く

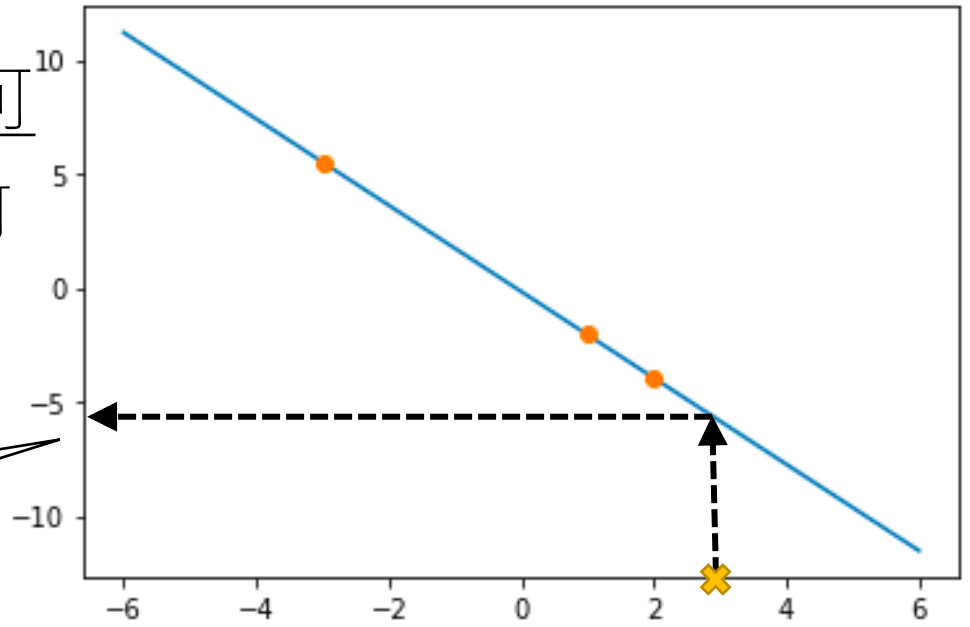
- こういう問題を「線形回帰」という
  - 「線形」≒「まっすぐ」



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出力値を予測可
  - 見たことない入力値でも出力値を計算可
  - 機械学習は予測に使える！



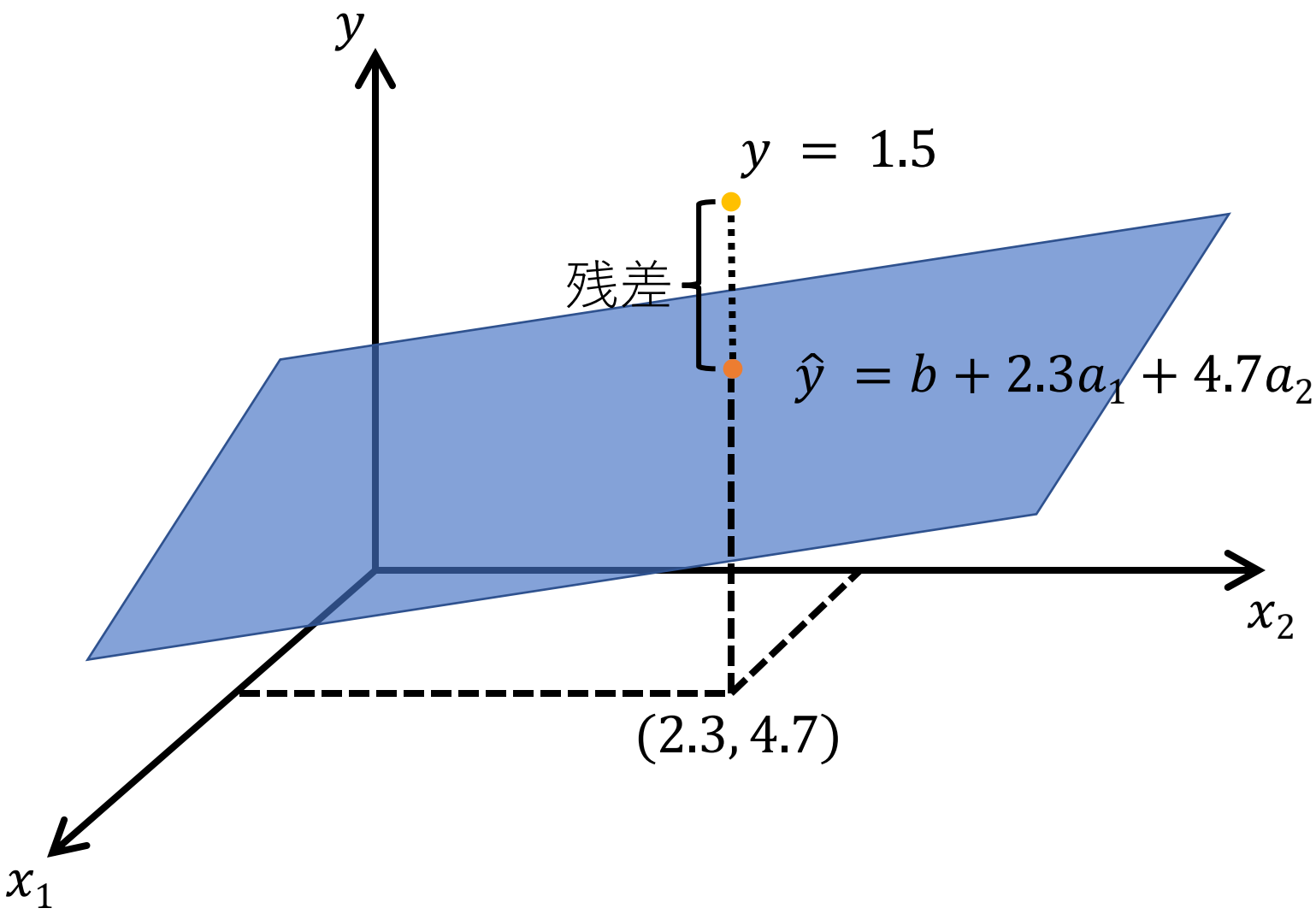
未知の入力値について
予測された出力値

単回帰

- 回帰のうち入力値が1つのものを単回帰と呼ぶ

  - 入力値が2つの場合だと・・・
  - 線形回帰は、平面をデータ点にフィットさせる
    - 「線形」＝「まったいら（曲がっていない）」

入力値が２つの線形回帰



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）を計算機に探させる。

  - 関数は特定の形式を持っていると仮定する（例：1次式）
    - 関数を探す範囲は、すでに決まっていると仮定
  - 目標の出力値からのズレの測り方を決める（例：残差の2乗の和）
    - そして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、残差平方和ができるだけ小さくなるように決める

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、
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

機械学習の問題として解くのに必要なもの

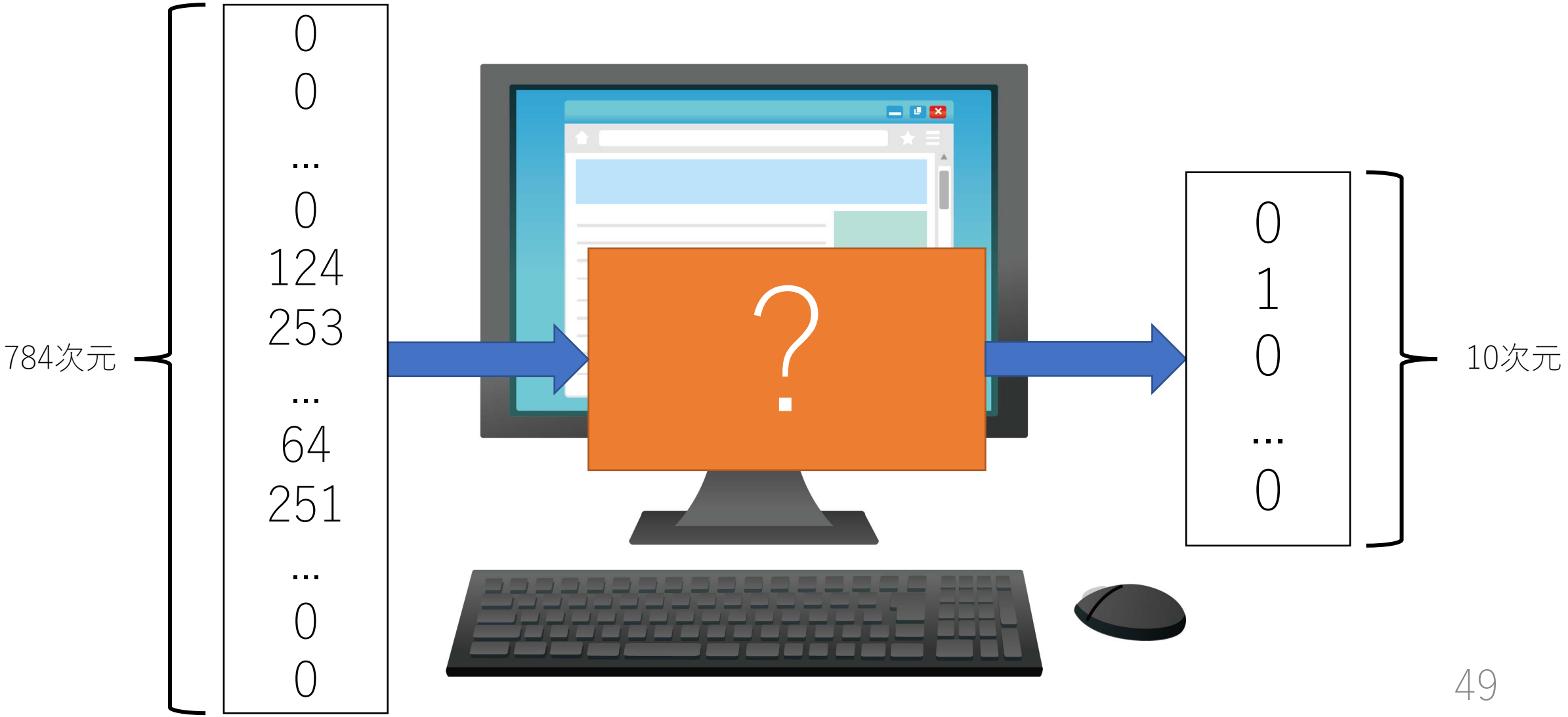
- 数値化された入力とそれ対応する目標値としての出力の、ペア
  - このペアは、たくさんあればあるほど、良い
- 入力を目標の出力へ変換する関数の式の形
  - 式の形を固定すれば、あとはパラメータの値をうまく決めればよい
- 関数の出力値と目標値とのズレの測り方
  - 残差の2乗の和は、一つの候補
  - このズレが損失関数。モデルのパラメータを変えると、ズレも変わる。

損失関数

- モデルの出力値とターゲットとのズレを表す関数
  - 線形回帰では残差の 2 乗の和をよく使う
- モデルパラメータを動かすと損失関数の値も動く
  - 単回帰では、傾きと切片がパラメータ
- モデルパラメータを動かして損失関数を最小化する
  - これがいわゆる「学習」

手書き数字画像の分類の問題設定

入力データと出力データをベクトル化した後の状態



演習

$$\{(2a+b)-(-4)\}^2+\{(1.2a+b)-(-2)\}^2+\{(-3a+b)-5.5\}^2$$

上の残差の２乗和を最小にするaとbの値を求めよ。

実践

scikit-learnを使う

- 機械学習のライブラリ
- 線形回帰だけでなく、いろいろ入っている
  - SVMやk-meansなど
  - 手法だけでなく、実験に使えるデータセットも入っている
- データの型としてnumpyのarrayが使える
  - 便利！

説明用の例題

- 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
  - 1.2を入れたら-2.0が出てきてほしい
  - -3.0を入れたら5.5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？

最小二乗法による線形回帰（エラーが出る）

```
from sklearn import linear_model

reg = linear_model.LinearRegression() #線形回帰を準備
x = [2.0, 1.2, -3.0, -1.0]
y = [-4.0, -2.0, 5.5, 2.0]
reg.fit(x, y) #最小２乗法を実行
a = reg.coef_
b = reg.intercept_
print(a, b)
```

最小二乗法による線形回帰（エラーが出ない）

```
from sklearn import linear_model

reg = linear_model.LinearRegression() #線形回帰を準備
x = [[2.0], [1.0], [-3.0], [-1.0]]
y = [-4.0, -2.0, 5.5, 2.0]
reg.fit(x, y) #最小２乗法を実行
a = reg.coef_
b = reg.intercept_
print(a, b)
```

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1個の数値であっても、1次元のベクトルとして扱わないといけない

最小二乗法による線形回帰

```
import numpy as np
from sklearn import linear_model

reg = linear_model.LinearRegression() #線形回帰を準備
x = [2.0, 1.0, -3.0, -1.0]
x = np.array(x).reshape(-1, 1)
y = [-4.0, -2.0, 5.5, 2.0]
reg.fit(x, y) #最小２乗法を実行
a = reg.coef_
b = reg.intercept_
print(a, b)
```