https://bit.ly/2JL5r0W

KYOTO UNIVERSITY

統計的モデリング基礎⑦
～モデルの選択～

鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE AND TECHNOLOGY

モデルの選択と評価：
評価指標と性能検証の枠組み

- モデルの予測精度を測る指標
- 精度計測の枠組み：交差検証
- 交差検証の応用：モデルスタッキング

モデルの予測精度の検証：
判別（質的従属変数予測）の予測精度をどう測るか？

- 回帰（量的従属変数）の予測精度は二乗誤差で測る
  - あるいは絶対誤差、あるいはアプリケーション依存
- 判別（質的従属変数）の予測精度はどのように測るか
  - 予測の誤り回数でよさそうだが…
  - ロジスティック回帰モデルは$Y = 1$となる確率：

$$P(Y = 1|\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{w}^\top \mathbf{x})} = \sigma(\mathbf{w}^\top \mathbf{x})$$

  - 閾値を0.5として$P(Y = 1|\mathbf{x}, \mathbf{w}) \geq 0.5$かどうかで決める？
  - 殆どのデータが$Y = 0$だとしたら（稀な疾患の診断など）

混同行列：
予測の結果をまとめた表

- 推定後のモデル（例えばロジスティック回帰）は $Y = 1$ となりそうな程度$f(\mathbf{x})$ を与える
- 予測時には$f(\mathbf{x})$ がある閾値 τ より大きければ $Y = 1$と予測する
- 予測が決まると混同行列が決まる：

		予測	
		$Y = 1$	$Y = -1$
真の値	$Y = 1$	真陽性予測数☺	偽陰性予測数
	$Y = -1$	偽陽性予測数	真陰性予測数☺

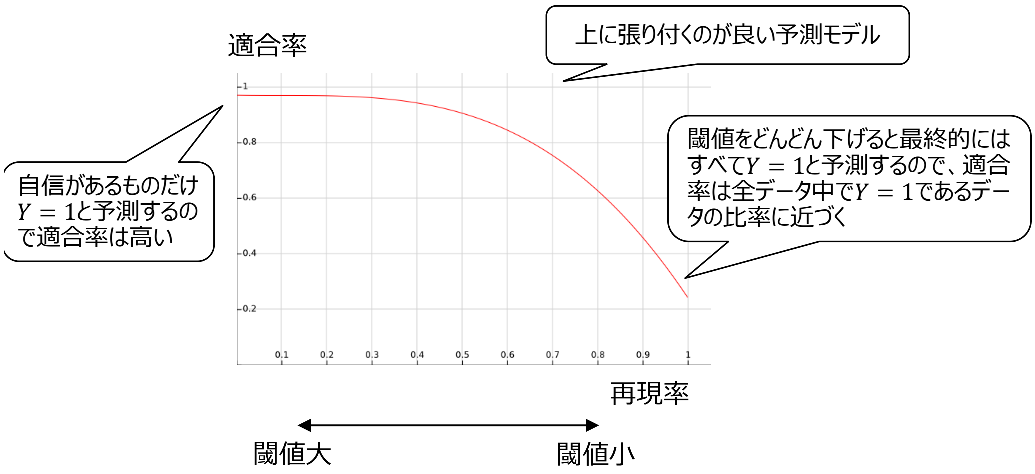
☺： 予測が正しい

正解率、適合率、再現率、F値：
基本的な予測精度の指標

- 正解率：$\dfrac{\text{真陽性予測数}+\text{真陰性予測数}}{\text{全予測数}}$
- 適合率、再現率、F値：
  - $\text{適合率} = \dfrac{\text{真陽性予測数}}{\text{陽性予測数}}$
  - $\text{再現率} = \dfrac{\text{真陽性予測数}}{\text{真陽性予測数}+\text{偽陰性予測数}}$
  - $\text{F値} = \dfrac{\text{適合率}\cdot\text{再現率}}{\text{適合率}+\text{再現率}}$ ： 適合率と再現率の調和平均

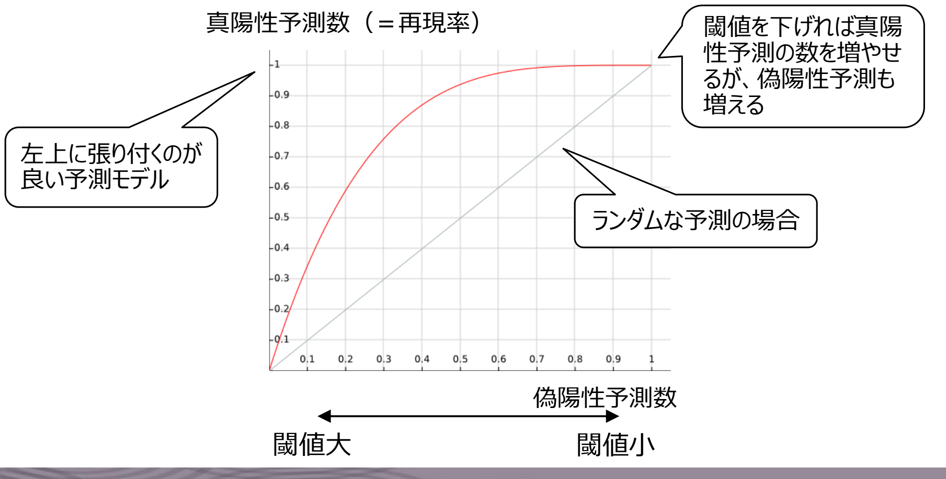
閾値を変えながら見る：
適合率-再現率（PR） 曲線

- 閾値を変えながら適合率-再現率 をプロットしたもの



閾値を変えながら見る：
ROC曲線

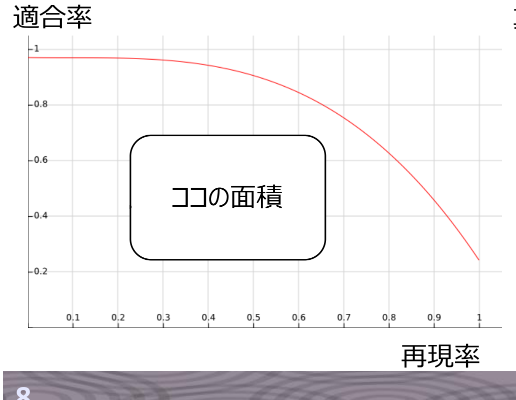
- 受信者操作特性（ROC）曲線：閾値を変えながら真陽性予測数（＝再現率）と偽陽性予測数をプロットしたもの

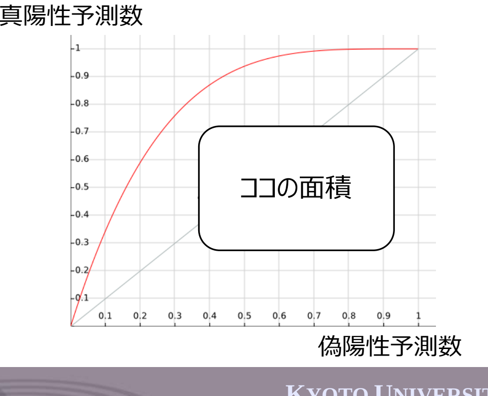


閾値によらない指標：
曲線の下の面積

- PR曲線の下の面積（PR-AUC）
- ROC曲線の下の面積（ROC-AUC）

単にAUCといったら通常はこちら





AUC等の計算量：
PR・ROC曲線、AUCを求める計算量＝データ整列の計算量

- PR曲線、ROC曲線、これらのAUCを求める計算量は$f(\mathbf{x})$で整列するコスト（$O(n\log n)$）

$f(\mathbf{x})$

$f(\mathbf{x}^{(2)}), y^{(2)} = +1$

$f(\mathbf{x}^{(4)}), y^{(4)} = -1$

$f(\mathbf{x}^{(1)}), y^{(1)} = +1$

閾値 τ

$f(\mathbf{x}^{(5)}), y^{(5)} = -1$

$f(\mathbf{x}^{(3)}), y^{(3)} = -1$

適合率=2/3
再現率=2/2
真陽性予測数=2/2（再現率と同じ）
偽陽性予測数=1/3

ROC-AUCの意味：
順序付けの精度を表す

- ROC-AUC：$y^{(i)} = +1, y^{(j)} = -1$ であるすべての(i,j)の組のうち、$f(\mathbf{x}^{(i)}) > f(\mathbf{x}^{(j)})$となっているものの割合
  - 正しい順序で並べられているかをチェックしている（fは$Y = 1$である信念度合い）
- AUC=1：完璧な予測、AUC=0.5：完全にランダムな予測（AUC=0は予測を反転すれば完璧な予測）
- 先の例では$2 \times 3 = 6$ペアのうち5ペアの順序が保たれているので、AUC=5/6

$f(\mathbf{x})$

$f(\mathbf{x}^{(2)}), y^{(2)} = +1$

$f(\mathbf{x}^{(4)}), y^{(4)} = -1$

$f(\mathbf{x}^{(1)}), y^{(1)} = +1$

$f(\mathbf{x}^{(5)}), y^{(5)} = -1$

$f(\mathbf{x}^{(3)}), y^{(3)} = -1$

評価の枠組み：
モデル選択と評価

- 予測モデリングにおいて実際に興味があるのは、推定した予測モデルを運用する際の、将来のデータに対する精度
  - モデル推定に用いたデータと将来のデータは異なる（同じメカニズムで発生しているという仮定はあるが）
- ハイパーパラメータを調整して予測精度を向上したい：
  - リッジ回帰：$\mathrm{minimize}_{\mathbf{w}}\ \|\mathbf{y} - \boldsymbol{X}\mathbf{w}\|_2^2 + \lambda\|\mathbf{w}\|_2^2$
  - ハイパーパラメータはモデル推定の過程では推定されない

情報量基準：
モデルの真の性能を見積もる基準

- 情報量基準：真の性能を見積もる
  - AIC： $-2(\text{対数尤度}) + 2(\text{パラメータ数})$
  - BIC： $-2(\text{対数尤度}) + 2(\text{パラメータ数}) \cdot \ln n$
- ただし、いくつかの仮定のもとで
- 以下ではより実験的な性能評価の枠組み（交差検証）を説明する

モデル評価の大原則：
モデル推定に使ったデータを評価に使ってはいけない

- モデルの予測精度を検証するために、モデルに推定に使用したデータを用いてはいけない
  - モデル推定に使ったデータに対するモデルの精度は、そのモデルの真の精度の推定値ではない
- データを推定用データと検証用データに分割して用いる：
  1. 推定用データを用いてモデルを推定する
  2. 推定したモデルの性能を検証用データで評価する
  - 分割はアプリケーションの文脈に合わせて行う必要がある
    - ランダムに分割、時系列順に分割、…

モデル評価の統計的枠組み：
交差検証

- (K-分割) 交差検証：将来のモデル運用時の性能を推定するための枠組み
- 全データを、重複しない K 個の集合に等分割する：
  - うち $K-1$ 個の集合をモデル推定に用いる
  - 残りひとつの集合で評価を行う
- 検証用のデータ集合を変えると、K 通りの評価が行われる（ K個の評価値が得られる）
  - これらの平均をとって性能の推定値とする

ハイパーパラメータの推定：
交差検証によるハイパーパラメータ推定

- 正則化（MAP推定）の際のハイパーパラメータ
  - ハイパーパラメータはモデル推定（の最適化問題）においては自動的に決まらない（ 0になってしまう）
- (K-分割) 交差検証によるハイパーパラメータ調整：
  - K個に分割されたデータのうち $K-1$ 個を用いて、それぞれのハイパーパラメータ設定においてモデル推定を行う
  - 残りひとつの集合を用いてそれぞれのモデルの精度を測る
  - K個の評価値の平均がもっともよいハイパーパラメータを採用
    - この評価値は、モデル運用時の性能とは<u>異なる</u>ことに注意

二重交差検証：
ハイパーパラメータ推定と性能評価を同時に行う

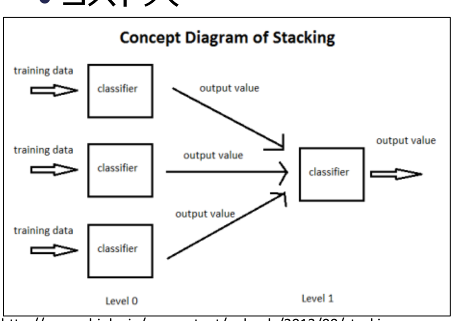
- しばしば、ハイパーパラメータ推定と、最終的に選ばれたモデルの性能の推定の両方を
- ひとつの K-分割交差検定で行ってはいけない 
  - ハイパーパラメータ推定を行った際にみたデータを評価に使ってはいけない
- 二重交差検定：
  - 外側のループでは性能評価を行う
  - 内側のループではハイパーパラメータ調整を行う
  - 計算コストが高い

二重交差検定の（軽量な）代用：
“開発用データ”方式

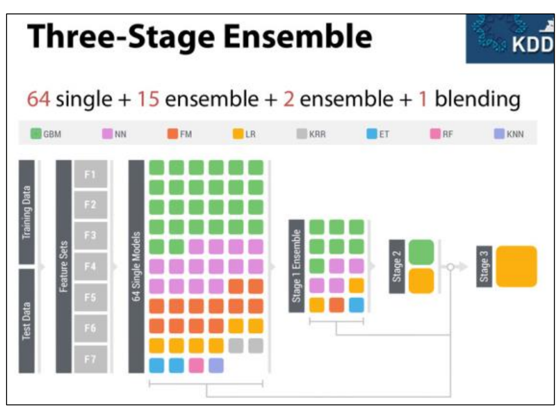
- 二重交差検証は計算コストが高いので、もう少し簡単な方法がほしい
- “開発用データ” 方式
  - K分割したデータのうち $K-2$ 個を推定に用いる
  - 残りのうちひとつをハイパーパラメータ調整に用いる
  - 最後のひとつを性能評価に用いる

スタッキング：
複数のモデルを並列・直列に積み上げる方法

- 予測モデルの出力を、次の予測モデルの独立変数として用いる
- モデルを2段・3段と積み上げることで複雑なモデルを実現
  - Kaggle等でも多用される
  - コスト大



http://www.chioka.in/wp-content/uploads/2013/09/stacking.png



Kohei Ozaki: Techniques (Tricks) for Data Mining Competitions
https://speakerdeck.com/smly/techniques-tricks-for-data-mining-competitions

スタッキングのモデル：
ある層の出力は次の層の入力

- スタッキング：複数のモデルを並列・直列に結合する
  - ディープニューラルネットワークの構造に類似
  - 別種のモデルでも可能
- ℓ段目の出力が $\ell+1$段目の入力になる
  - 0段目の出力 $\mathbf{y}_0$ = 元々の独立変数ベクトル $\mathbf{x}$
  - ℓ段目の出力 $\mathbf{y}_\ell$
  - $\ell+1$段目の入力$\mathbf{x}_{\ell+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_\ell \\ \mathbf{y}_\ell \end{pmatrix}$

スタッキングにおける難点：
単純に積んだだけではダメ

- 単純な方法で実現してみる：
  1. データ Dから予測モデル f を推定
  2. D に対する f の出力を次のモデルの入力にする

  …. これでうまくいきそう？ … が実際にはダメ
- 「大原則」を思い出す：モデル推定に用いたデータに対する予測は信用してはいけない
  - モデルは推定に用いるデータを再現するように推定されるので、データに偏っている

スタッキングの正しいやり方：
交差検証の方式を用いる

- 推定用データを K 個に分割して：
  1. $K-1$ 個をモデル推定に用いる
  2. 作ったモデルを残り1個に適用して、次段に渡す
  - 上記のステップ 1&2 を K 通り繰り返せばデータセット全体に対して、推定に用いていないモデルによる予測が得られる
- 上記によって拡張されたデータで次の層（2 層目）のモデル推定を行う
- 以降、同様の手続きを繰り返して積みたいだけ積む
- 各層の各モデルが K個できてしまうので、最後にもう一度全データでモデルを推定しなおす