KYOTO UNIVERSITY

統計的モデリング基礎③
～回帰モデリング～

鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE
AND TECHNOLOGY

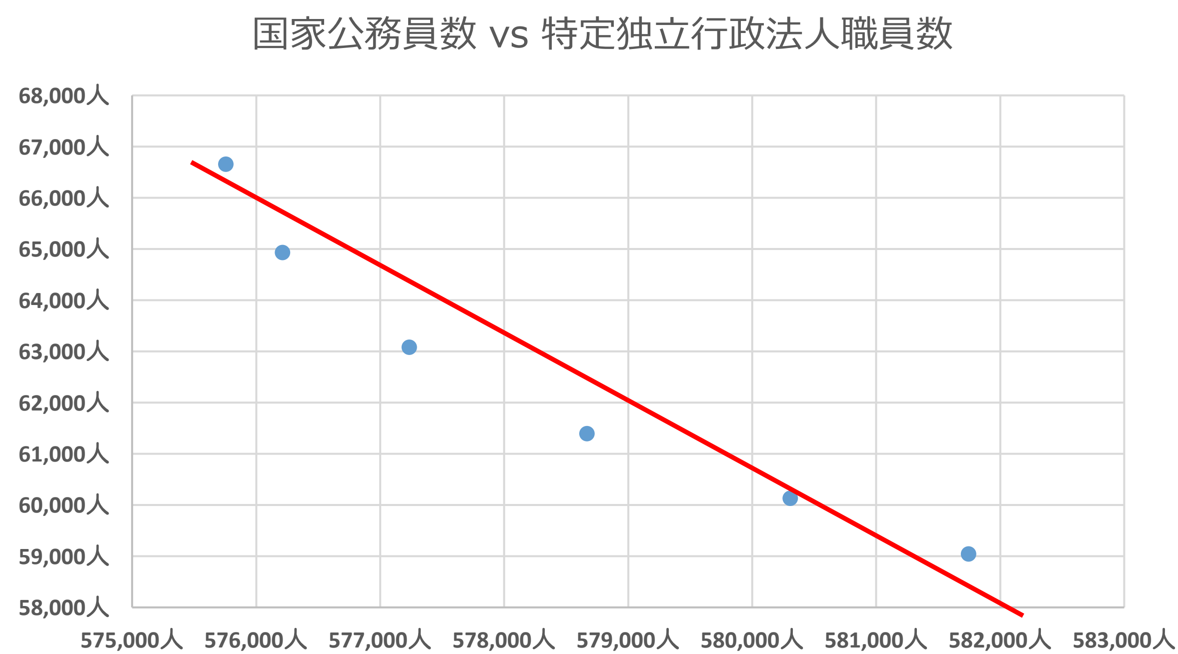
回帰

回帰：
片方の変数でもう片方の変数を説明

- 相関 (correlation) は二変数 x, y を区別せずに対等に扱う
  - 一方が増えたときに他方が増える (減る) 関係性を調べる
  - 例：身長と体重
- 回帰 (regression) は変数 x で変数 y を説明する
  - 一方から他方が決定される様子や程度を調べる
  - 例：年齢と血圧、所得と消費
  - xを独立変数・説明変数、yを従属変数・応答変数などとよぶ

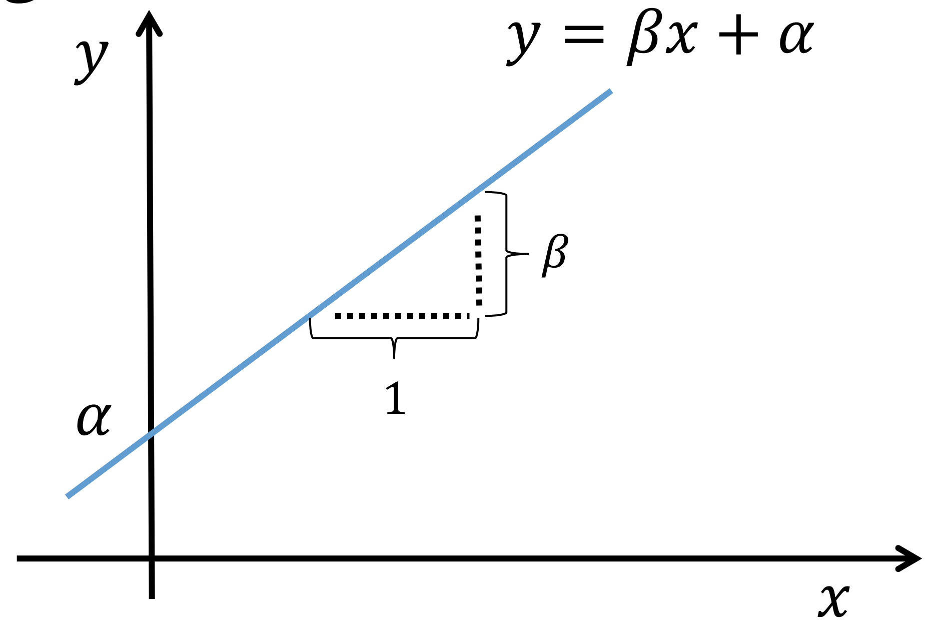
回帰の問題：
片方の変数からもう片方を説明するモデルをデータから推定

- 2つの変数 x と y の組についてN組のデータがある
  - $\mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)})$ と $\mathbf{y} = (y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)})$
- y を x で説明（予測）するモデルgがほしい
  - 概ね $y = g(x)$ となるg
  - 例えば直線をgとして仮定
- gの使い道：
  - 予測
  - 因果関係の発見
（ただし注意が必要）



基本的な回帰モデル：
線形回帰モデル

- 線形モデル： $y = g(x) = \beta x + \alpha$
  - β：傾きパラメータ（xが1増えると、yが1増える）
  - α：切片パラメータ
- xとyの間に直線的な関係を仮定する
  - yがxの線形関数に依存



回帰モデルのパラメータ推定問題の定式化：モデルとデータの食い違いを最小化する最小二乗法

- データ：$\mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)})$ と $\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right)$
- モデルの出力する予測値：$\hat{y}^{(i)} = \beta x^{(i)} + \alpha$
- モデルの予測と実際のデータとの食い違いを定義する：

$$\ell(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} - \left(\beta x^{(i)} + \alpha\right)\right)^2$$

  - 食い違いを二乗誤差で測る

- 最適化問題（最小化）：

$$\left(\hat{\alpha}, \hat{\beta}\right) = \operatorname{argmin}_{\alpha,\beta} \ell(\alpha, \beta)$$

最小二乗法の解：二乗誤差を最小化する解

- $\ell(\alpha, \beta)$をαとβで偏微分して0とおいて、解くと：

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_i (x^{(i)} - \bar{x})(y^{(i)} - \bar{y})}{\sum_i (x^{(i)} - \bar{x})^2} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$$

$$\hat{\alpha} \ = \bar{y} - \beta \bar{x}$$

- x と y の共分散：$S_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x^{(i)} - \bar{x})(y^{(i)} - \bar{y})$
- x の不偏分散：$S_{xx} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} \left(x^{(i)} - \bar{x}\right)^2$

最小二乗法の性質：不偏性と推定精度

- いくつかの仮定の下で不偏性をもつ
  - 母集団において$\epsilon^{(i)} = y^{(i)} - \left(\beta^* + \alpha^* x^{(i)}\right)$が同一の分布に従い一定の分散$\sigma^2$、互いに無相関、$\epsilon_i$と$x_i$が無相関などの仮定
  - 不偏性：$\mathrm{E}\left[\hat{\beta}\right] = \beta^*, \mathrm{E}[\hat{\alpha}] = \alpha^*$ （標本の取り方についての期待値）
- $\mathrm{Var}\left[\hat{\beta}\right] = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(x^{(i)} - \bar{x}\right)^2}$：広範囲の$x^{(i)}$があったほうが精度がよい
- $\mathrm{Var}[\hat{\alpha}] = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}}{\sum_{i=1}^{n}\left(x^{(i)} - \bar{x}\right)^2}\right)$：原点付近の$x^{(i)}$があったほうが精度がよい

決定係数：
従属変数をモデルがどの程度説明できたかを測る

- 決定係数 R^2 ：モデルの予測値 $\hat{\mathbf{y}} = \left(\hat{y}^{(1)}, \hat{y}^{(2)}, \ldots, \hat{y}^{(n)}\right)$ とデータ $\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right)$との相関係数の2乗

$$R^2 = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}^{(i)} - \bar{y}\right)\left(y^{(i)} - \bar{y}\right)\right)^2}{\left(\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}^{(i)} - \bar{y}\right)^2\right)\left(\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} - \bar{y}\right)^2\right)} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}^{(i)} - \bar{y}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} - \bar{y}\right)^2}$$

  - $\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right)$ の変動（分母）のうち、回帰式が説明できる変動（分子）の割合

- 相関係数は$-1 \leq R \leq 1$なので、決定係数 $0 \leq R^2 \leq 1$
  - 決定係数が1に近いほどデータへのモデルの当てはまりがよい

決定係数：
従属変数をモデルがどの程度説明できたかを測る

- **y** の変動の分解：

$$\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)}-\bar{y}\right)^2=\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}^{(i)}-\bar{y}\right)^2+\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)}-\hat{y}^{(i)}\right)^2$$

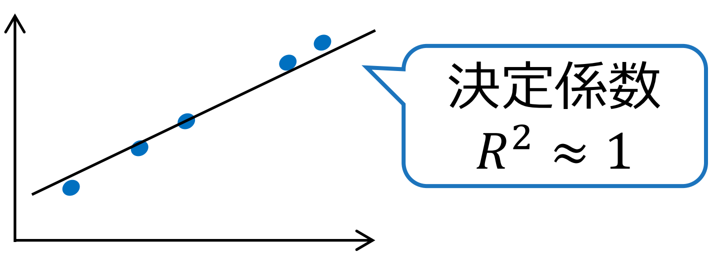
y の変動

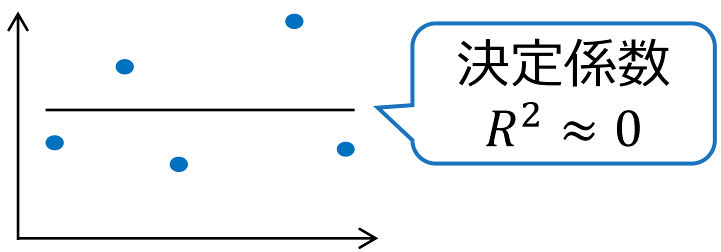
回帰式の予測$\hat{y}^{(i)}$が説明できる変動

残差の平方和
$\sum_{i=1}^{n}\epsilon^{(i)^2}$

$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}^{(i)}-\bar{y}\right)^2}_{\text{回帰による説明}}$ $\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\epsilon^{(i)^2}}_{\text{回帰後に残るばらつき}}$

$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}^{(i)}-\bar{y}\right)^2}_{\text{回帰による説明}}$ $\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\epsilon^{(i)^2}}_{\text{回帰後に残るばらつき}}$





課題：
回帰モデリングを試してみよう！

- 自分でデータを見つけよう！
  - 従属変数と独立変数を決めよう！
  - データ：$\mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)})$ と $\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right)$
- 回帰モデルを推定してみよう！：$\hat{y}^{(i)} = \beta x^{(i)} + \alpha$

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_i (x^{(i)} - \bar{x})(y^{(i)} - \bar{y})}{\sum_i \left(x^{(i)} - \bar{x}\right)^2}, \quad \hat{\alpha} = \bar{y} - \beta \bar{x}$$

- 決定係数を計算、データと回帰モデルをプロットしてみよう！
- 推定に使用しないデータに対しても、予測を評価してみよう

重回帰

重回帰：
複数の独立変数を用いて予測

- （単）回帰では、ひとつの独立変数から予測を行う

$$g(x) = \beta x + \alpha$$

  - 例：年齢から年収を予測する

$$(\text{年収}) = \beta \times (\text{年齢}) + \alpha$$

- 重回帰では複数の（m個の）独立変数を用いる

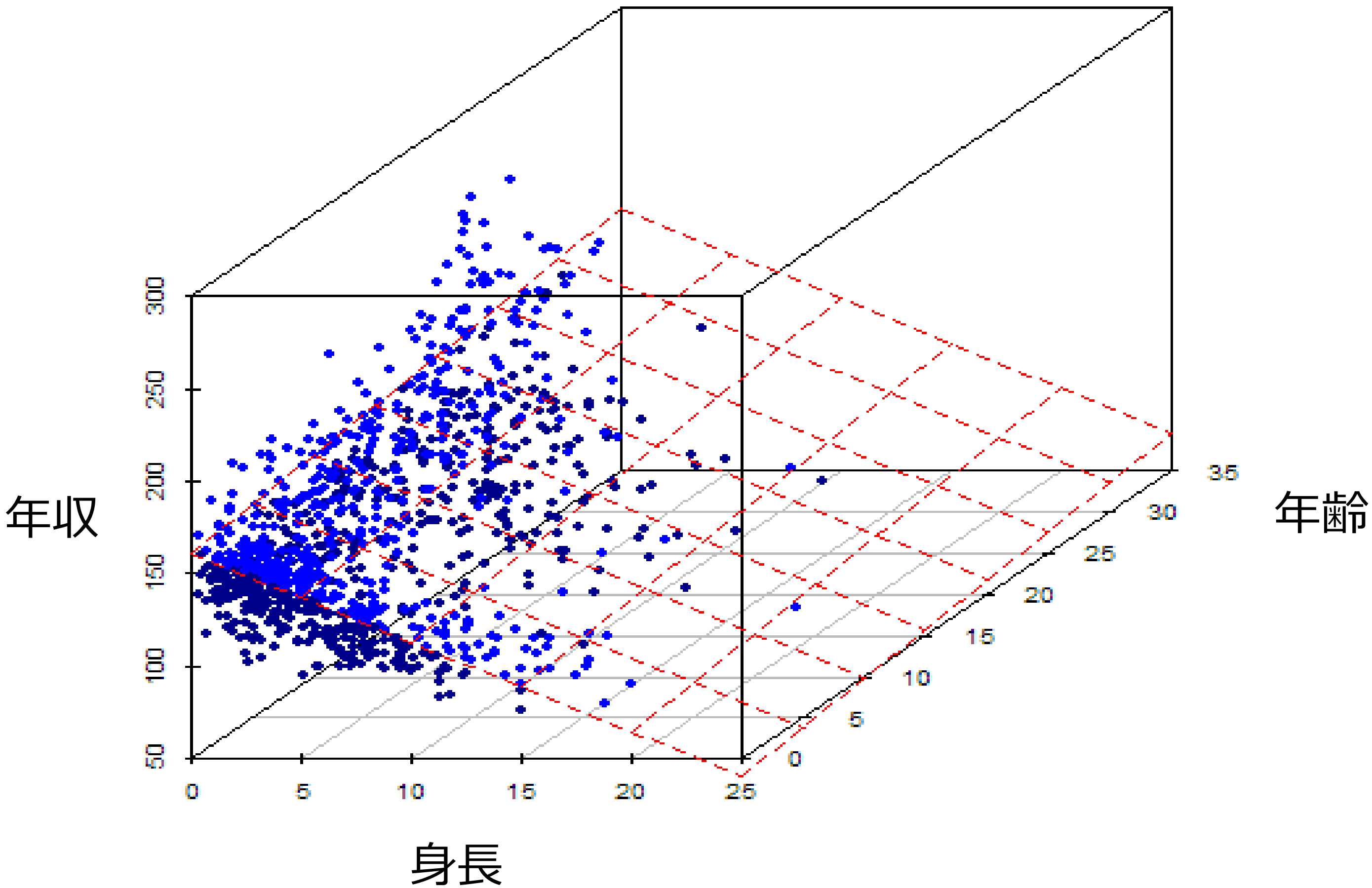
$$g(x) = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_m x_m + \alpha$$

  - 例：年齢と身長から年収を予測する

$$(\text{年収}) = \beta_{(\text{年齢})} \times (\text{年齢}) + \beta_{(\text{身長})} \times (\text{身長}) + \alpha$$

重回帰のイメージ：（超）平面でデータに当てはめる

- 単回帰では直線で近似、重回帰では（超）平面で近似



重回帰モデルの推定問題：
最小二乗法によってパラメータを推定する

- 単回帰と同じく、モデルの予測と実際のデータとの食い違いを二乗誤差で測る

$$\ell(\alpha, \{\beta_i\}_{i=1}^m) = \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right)^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} - \left(\beta_1 x_1^{(i)} + \beta_2 x_2^{(i)} + \cdots + \beta_m x_m^{(i)} + \alpha\right)\right)^2$$

- 最適化問題（最小化）を解いてパラメータ推定値を求める：

$$\left(\hat{\alpha}, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \ldots, \hat{\beta}_m\right) = \mathrm{argmin}_{\alpha, \{\beta_i\}_{i=1}^m}\, \ell(\alpha, \{\beta_i\}_{i=1}^m)$$

  - すべてのパラメータについて偏微分して0とおき連立方程式を得る

行列とベクトルを用いた表記：
行列とベクトルを用いて書き換えると便利

- モデル：$y = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}$
  - パラメータ： $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m, \alpha)^\top$
  - 独立変数：$\mathbf{x}^{(i)} = \left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_m^{(i)}, 1\right)^\top$

最後の次元は
切片部分に相当

- 目的関数：$\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right)^2$
$$= \sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} - \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)^2 = \|\mathbf{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}\|_2^2$$
  - 計画行列： $\boldsymbol{X} = \left(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}\right)^\top$
  - 従属変数： $\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(N)}\right)^\top$

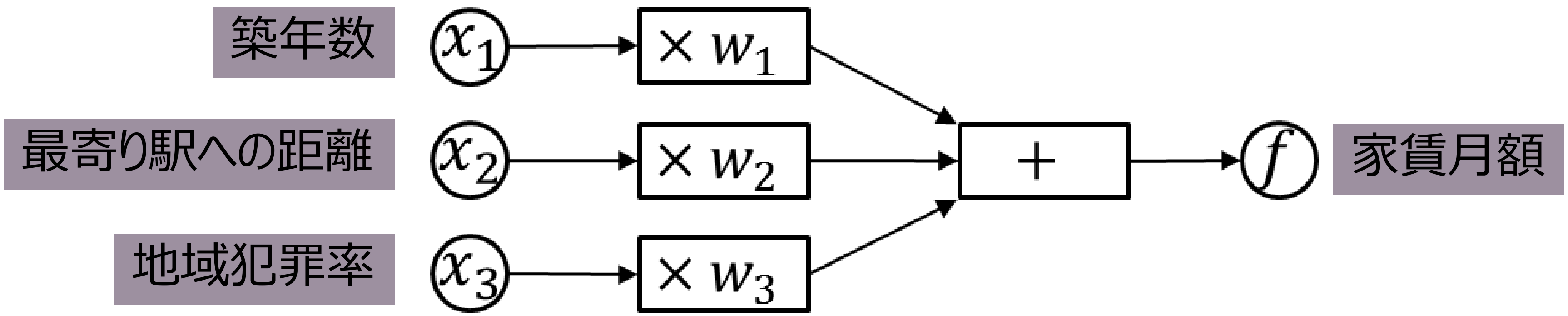
例：
家賃予測

- 計画行列：4件の賃貸住宅

$$\boldsymbol{X} = \left[\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{x}^{(3)}, \mathbf{x}^{(4)}\right]^\top = \left[\begin{pmatrix}15\\10\\1.0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}3\\1\\0.1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}35\\5\\7.0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}40\\70\\1.0\end{pmatrix}\right]^\top$$

- 独立変数（ベクトル）：4件分の家賃

$$\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, y^{(3)}, y^{(4)}\right)^\top = (140, 85, 220, 115)^\top$$



重回帰モデルの解：解析解が得られる

- 目的関数：$L(\boldsymbol{\beta}) = \|\mathbf{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}\|_2^2 = (\mathbf{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})^\top(\mathbf{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})$
- 解: $\boldsymbol{\beta}^* = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top\mathbf{y}$

ただし、本当に（数値的に）解くときには連立方程式のほうを解く

- ただし、解が存在するためには$\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X}$が正則である必要
  - モデルの次元数mよりもデータ数nが大きい場合はおおむね成立
- 正則化：正則でない場合には$\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X}$の対角成分に正の定数$\lambda > 0$を加えて正則にする
  - 新たな解: $\boldsymbol{\beta}^* = \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{\beta}} L(\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X} + \lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^\top\mathbf{y}$
  - 目的関数に戻すと：$L(\boldsymbol{\beta}) = \|\mathbf{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$

パラメータのノルムに関するペナルティ項

多重共線性：
独立変数間に強い相関がある場合には注意

- 重回帰モデルにおいて、独立変数間に強い相関がある場合には推定されたパラメータの分散が大きくなり、信頼性が下がる
  - どちらでも説明できるので、パラメータの重みを奪い合う
  - 例：年齢と勤続年数など
- 予測には影響しないが、得られたモデル（パラメータ）を解釈したい場合には注意を要する
  - 相関が強い場合には、片方ずつ用いた結果を調べるなどを行う

質的変数の取り扱い

質的変数の扱い：ダミー変数の利用

- 独立変数が質的変数（記号を値としてとる）の場合
  - 例：{右, 左}、{京都, 大阪, 東京}
- ダミー変数：{0,1}の2値をとる変数
  - {右, 左}を{0,1}として表現
  - 3値以上の場合には、選択肢数−1個のダミー変数を用いる：京都= (1,0)、大阪= (0,1)、東京= (0,0)

東京をベースラインとして各地域の差分を示す

- 例：年齢と性別から年収を予測する

$$(\text{年収}) = \beta_1 \times (\text{年齢}) + \beta_2 \times (\text{性別}) + \alpha$$

  - 性別が男性であるか {0(No), 1(Yes)} のダミー変数

従属変数が質的変数の場合：ダミー変数を従属変数として回帰を適用（が、やや不適）

- 従属変数が質的変数の場合
  - 例：年収と年齢から性別を当てる
- 従属変数をダミー変数として回帰を適用する
  - 例：$(\text{性別}) = \beta_1 \times (\text{年齢}) + \beta_2 \times (\text{年収}) + \alpha$
- 回帰モデルの適用は厳密にはちょっと変
  - 回帰モデルは連続値を出力するが、本来、性別にあたるダミー変数は$\{0,1\}$のいずれかの値のみをとる
  - 最小二乗法が仮定している均一分散性が成立しない
    - 「効率性」が満たされないため推定値のバラつきが大きい

非線形回帰

非線形回帰：
線形回帰に非線形性を導入する

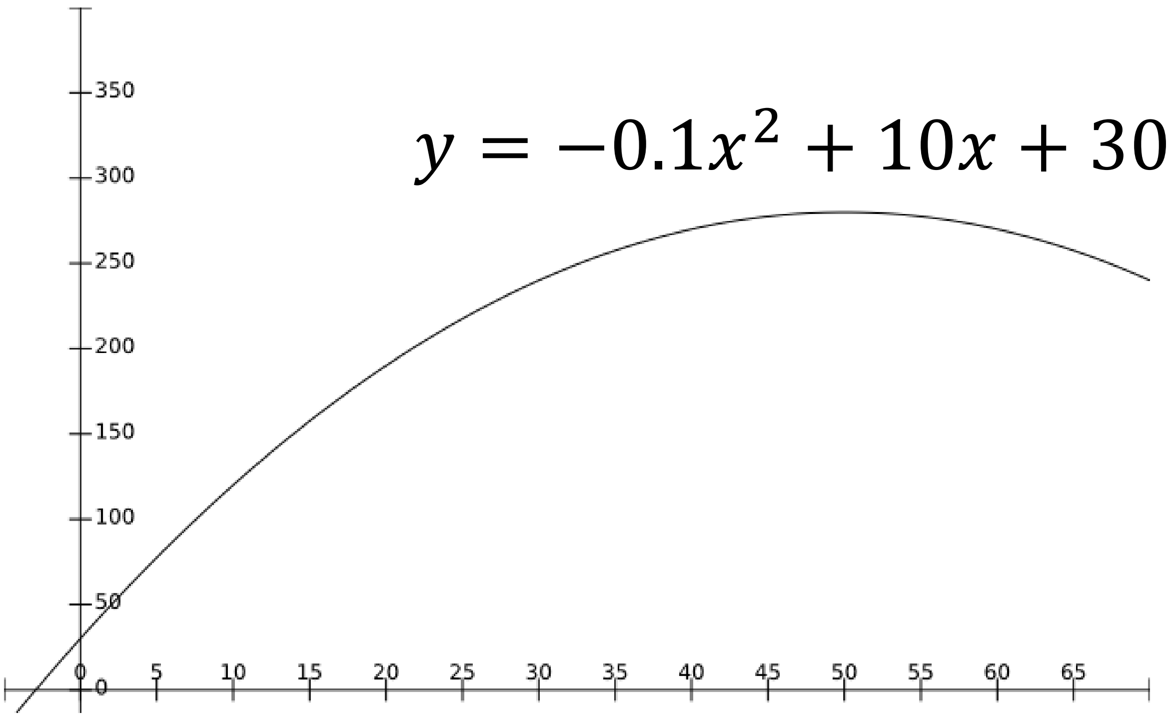
- ここまでは線形モデルを仮定してきた：$y = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}$
  - パラメータ： $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m, \alpha)^\top$
  - 独立変数：$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m, 1)^\top$
  - シンプルで安定して扱いやすい
- 線形モデルに非線形性を導入するにはどうしたらよいか？

1. 変数変換（例： $x \to \log x$）
2. 交差項（例：$x_1, x_2 \to x_1 x_2$）
3. カーネル法

変数変換：
簡単に非線形性を導入する方法

- 独立変数に対して非線形の変換を適用する：

$$x \to \log x, e^x, x^2, \frac{1}{x}, \dots$$



$$y = -0.1x^2 + 10x + 30$$

変数の対数変換：傾きパラメータβの意味が異なる

- $y = \beta x + \alpha$ の独立変数（x）と従属変数（y）は対数変換して用いられることがある

- 変換と係数の意味

		従属変数	
		y	$\log y$
独立変数	x	$y = \beta x + \alpha$ xが1単位増加するとyがβ単位増加する	$\log y = \beta x + \alpha$ xが1単位増加するとyが$1+\beta$倍になる
	$\log x$	$y = \beta \log x + \alpha$ xを2倍するとyがβ単位増加する	$\log y = \beta \log x + \alpha$ xを2倍するとyが$1+\beta$倍になる

KYOTO UNIVERSITY

交差項：
変数の組み合わせを導入

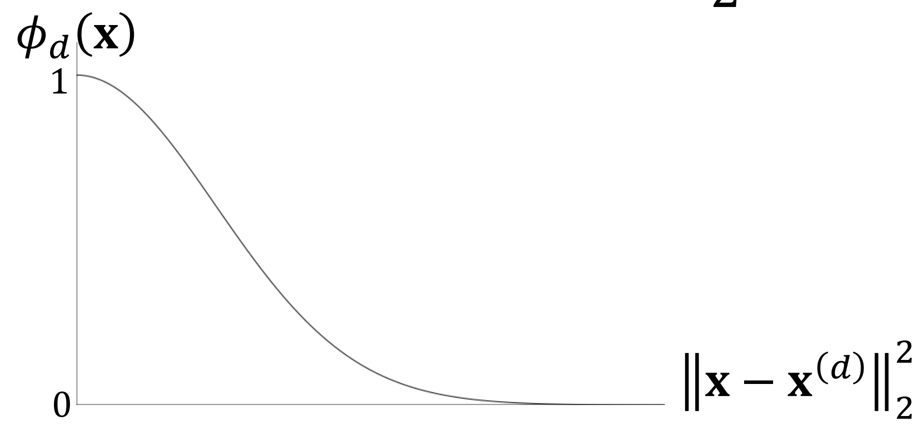
- もともとの独立変数$x_1, x_2, \ldots, x_m$に加えて、2変数の交差項$\{x_d x_{d'}\}_{d,d'}$を用いる
  - ダミー変数の交差項は2変数のANDに相当
- すべての交差項を採用すると行列パラメータ**B**を導入して $y = \mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{x}$ と書くことができる

$$y = \mathrm{Trace}\left(\underbrace{\begin{bmatrix} \beta_{1,1} & \cdots & \beta_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{m,1} & \cdots & \beta_{m,m} \end{bmatrix}}_{\mathbf{B}}^\top \underbrace{\begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 x_2 & \cdots & x_1 x_m \\ x_2 x_1 & x_2^2 & & x_2 x_m \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_m x_1 & x_m x_2 & \cdots & x_m^2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}\,\mathbf{x}^\top} \right)$$

 ※ $\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\top$ としてBの低ランク分解を仮定するとFactorization Machine

カーネル回帰：カーネル関数を用いた非線形性の導入

- 前述の変数変換アプローチを一般化する
- 線形モデル$y = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}$において、$d$番目の独立変数$x_d$を「カーネル関数」をもちいた基底$\phi_d(\mathbf{x})$で与える
  - カーネル関数$\phi_d(\mathbf{x})$：独立変数$\mathbf{x}$に何らかの非線形変換を適用したもの
- カーネルの例：ガウスカーネル $\phi_d(\mathbf{x}) = \exp(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(d)}\|_2^2)$
  - 要するに、d番目のデータとの「類似度」のようなもの

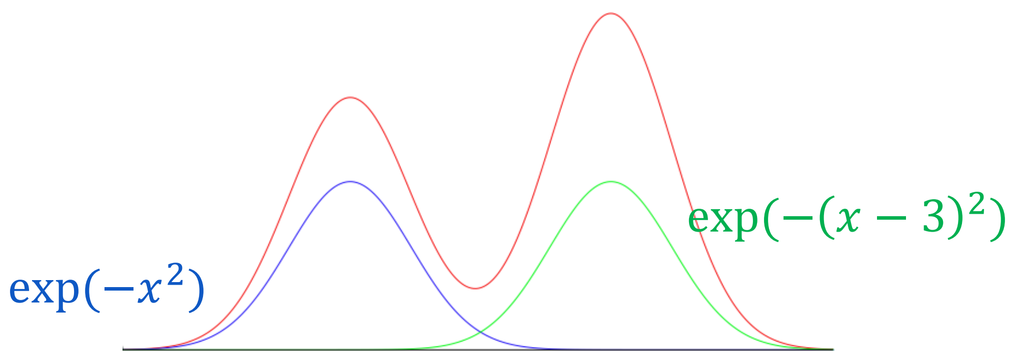


カーネル回帰：
カーネル関数を用いた非線形性の導入

- カーネル回帰モデル：

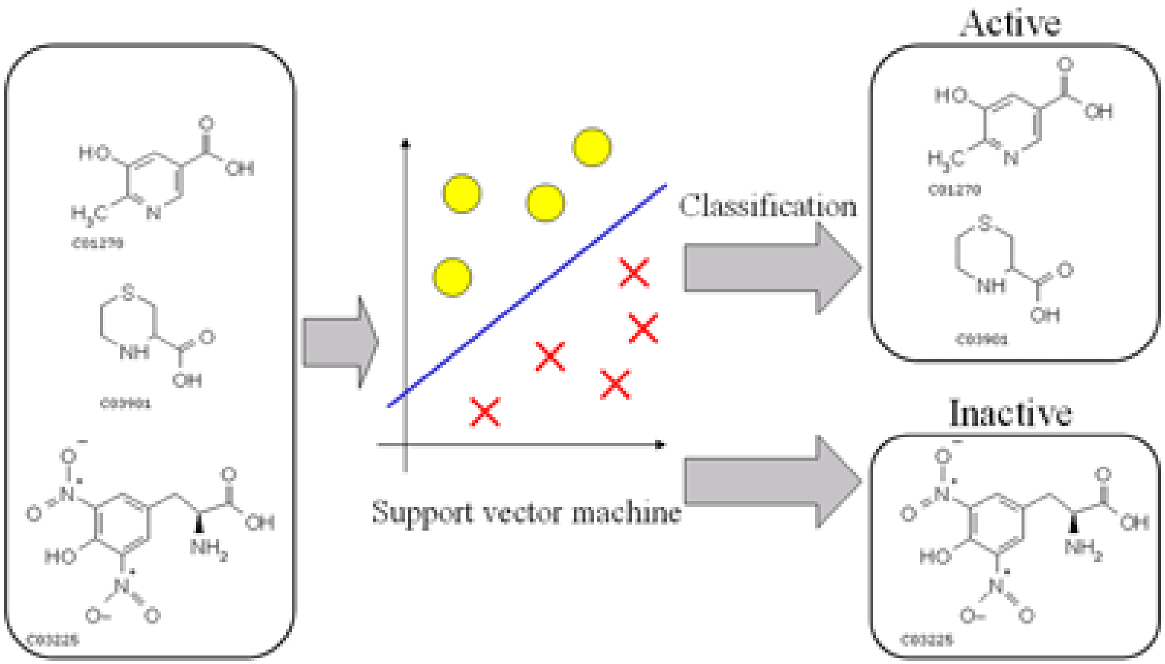
$$y = \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = \beta_1\phi_1(\mathbf{x}) + \beta_1\phi_2(\mathbf{x}) + \cdots + \beta_n\phi_n(\mathbf{x}) + \alpha$$

  - モデルの次元数nは、もとの$\mathbf{x}$の次元数mとは異なることに注意
    - 通常はモデルの次元数n ＝データサイズにとる
  - $\phi_d(\mathbf{x})$は$\mathbf{x}$と$\mathbf{x}^{(d)}$の類似度を表すカーネル関数
- $n = 2, m = 1$の例：$y = 1.5\exp(-x^2) + 2\exp(-(x-3)^2)$



さまざまなカーネル関数：
カーネル関数を変えれば様々なデータに対応可能

- カーネル回帰はカーネル関数の定義を変えることで、任意の対象を扱うことができる
  - 独立変数がベクトル $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_m, 1)^\top$である必要すらない
- カーネル関数によって、系列、木、グラフなども扱うことができる



http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/coe/img/akutsu_fig_e_02.gif

まとめ：
回帰モデリング

- 回帰では、（1個ないし複数の）独立変数から従属変数を説明・予測するモデルを作る
- 線形回帰モデル：独立変数が線形に効くモデル
- 最小二乗法によって回帰モデルのパラメータが求まる
- モデルの当てはまりは決定係数によって測る
- 変数変換や交差項などによって非線形性を導入できる