

統計的モデリング基礎⑧

～モデルの評価と選択～

鹿島久嗣
(情報学科 計算機科学コース)

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

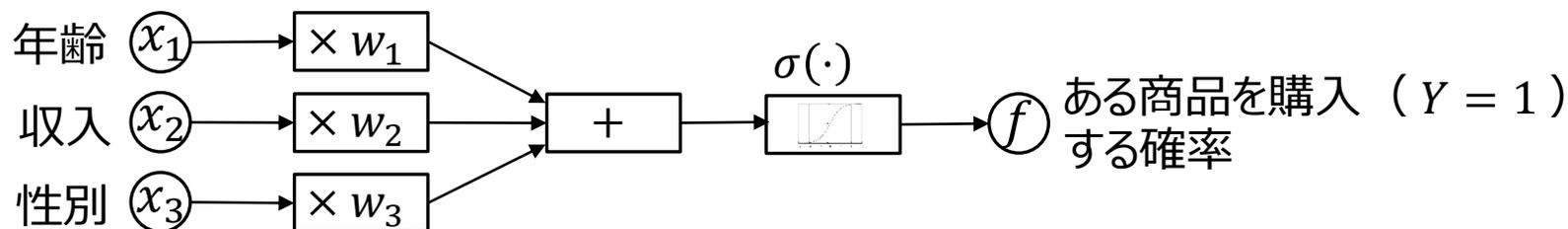
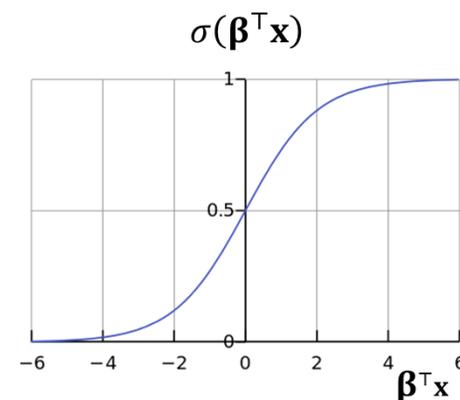
分類モデルの評価基準

【復習】分類モデルの例： ロジスティック回帰モデル

- ロジスティック回帰モデルは従属変数 $Y = 1$ となる確率を与える分類（判別）モデル：

$$P(Y = 1 | \mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}) = \sigma(w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_D x_D + \alpha)$$

- ◆ σ : ロジスティック関数 ($\sigma: \mathbb{R} \rightarrow (0,1)$)
- ◆ $\sigma(\cdot)$ の中身は線形回帰モデルと同じ ($\in \mathbb{R}$)
 - モデルパラメータ $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_D, \alpha)^\top$
 - 独立変数ベクトル $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_D, 1)^\top$
 - $\mathbf{w}^\top \mathbf{x}$ が大きい（小さい）ほど $Y = 1$ （ -1 ）と信じている



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の別の指標
- 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 $Y = 1$ となる確率を与える：
$$0 < P(Y = 1 | \mathbf{x}, \mathbf{w}) = \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{w}^\top \mathbf{x})} = \sigma(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}) < 1$$
 - 閾値を0.5として $P(Y = 1 | \mathbf{x}, \mathbf{w}) \geq 0.5$ かどうかで決めればよい？
 - 殆どのデータが $Y = 0$ だとしてもそれでよい？（稀な疾患の診断など）

混同行列：

予測の正解・不正解をまとめた表

- 一般に、推定後のモデルは $Y = 1$ となりそうな確信度 $f(\mathbf{x})$ を与える（例えばロジスティック回帰なら $\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x})$ や $\mathbf{w}^T \mathbf{x}$ がこれに該当）
- 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

基本的な予測精度の指標： 正解率、適合率、再現率、F値

		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⊙

■ 正解率：
$$\frac{\text{真陽性予測数} + \text{真陰性予測数}}{\text{全予測数}}$$

■ 適合率、再現率、F値：

「アイツが行く先では必ず事件が起こる」



Precision
● 適合率 =
$$\frac{\text{真陽性予測数}}{\text{陽性予測数}}$$

「現場にはいつもアイツがいる」

Recall
● 再現率 =
$$\frac{\text{真陽性予測数}}{\text{真陽性予測数} + \text{偽陰性予測数}}$$

● F値 =
$$\frac{\text{適合率} \cdot \text{再現率}}{\text{適合率} + \text{再現率}}$$
 : 適合率と再現率の調和平均

■ 注意：これらは閾値を変える（⇒混同行列が変わる）と変わる

閾値を変えながら予測精度の変化を見る： 適合率-再現率 (PR) 曲線

- 予測の閾値を変えながら適合率-再現率 をプロットしたもの

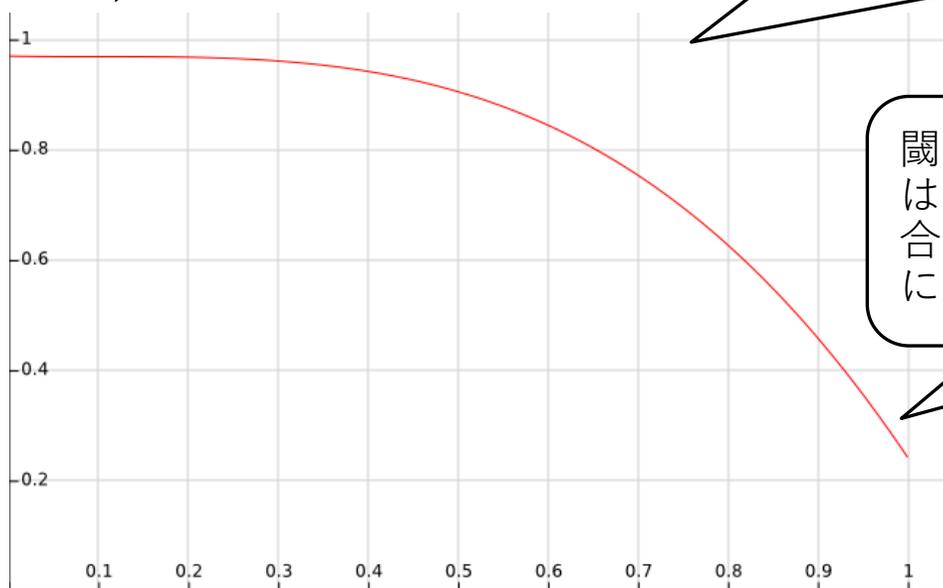
適合率
(Precision)

自信があるもの
だけを $Y = 1$ と
予測するので適
合率は高い

上に張り付くのが良い予測モデル

閾値をどんどん下げると最終的に
はすべて $Y = 1$ と予測するので、適
合率は全データ中での $Y = 1$ の比率
に近づく

注意：実際のデータで閾値を
変えながら曲線を描くとガクガクする



再現率 (Recall)

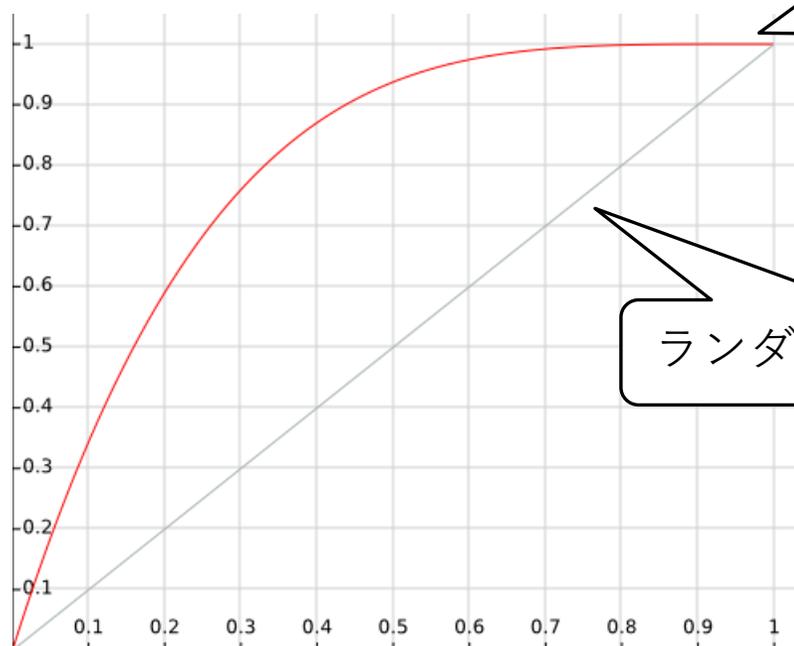
← 閾値大

→ 閾値小

閾値を変えながら予測精度の変化を見る： 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

真陽性予測割合（＝再現率）



左上に張り付くのが
良い予測モデル

閾値を下げれば真陽性
予測の数を増やせるが、
偽陽性予測も増える

ランダムな予測の場合

全データ中での $Y = 1$ の
比率には依存しない

閾値大

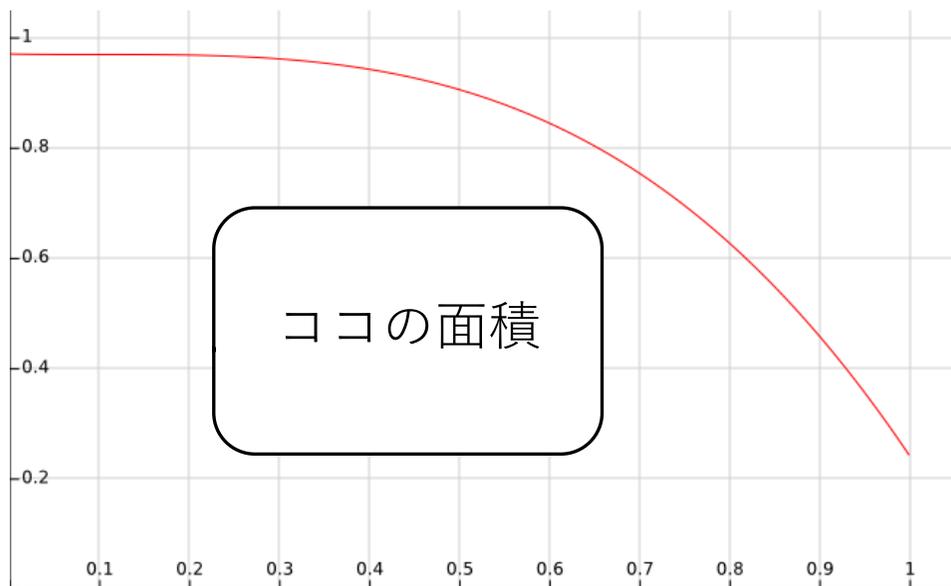
閾値小

閾値によらない予測精度指標： 曲線の下の面積を予測精度の代表値とする

- PR曲線の下での面積 (PR-AUC)
- ROC曲線の下での面積 (ROC-AUC)

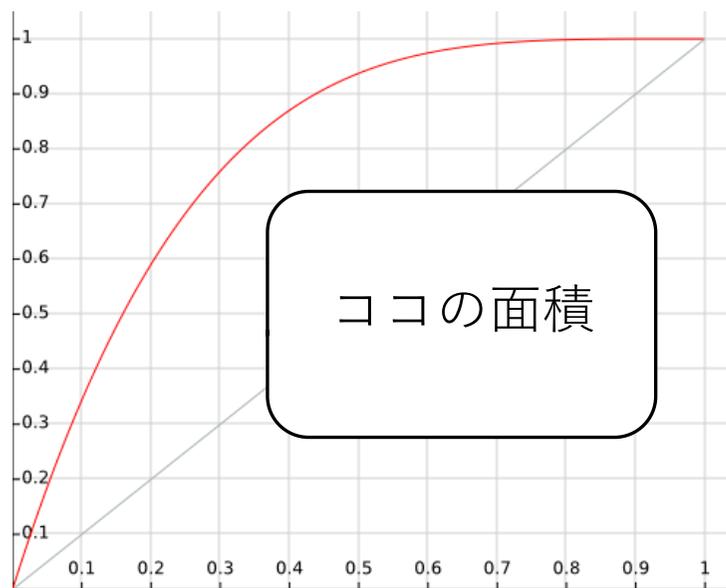
単にAUCといたら
通常はこちらを指す

適合率



再現率

真陽性予測割合



偽陽性予測割合

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を求めるのに要する計算量は $f(\mathbf{x})$ で整列するコスト ($O(n \log n)$) に等しい

$f(\mathbf{x})$ 大

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

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

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

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

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

閾値 τ \Rightarrow

適合率 = 2/3

再現率 = 2/2

真陽性予測 = 2/2 (再現率と同じ)

偽陽性予測 = 1/3

ROC-AUCの意味：

ROC-AUCは、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を意味する
 - 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

$$\begin{array}{l} f(\mathbf{x}) \uparrow \\ f(\mathbf{x}^{(2)}), y^{(2)} = +1 \\ f(\mathbf{x}^{(4)}), y^{(4)} = -1 \\ f(\mathbf{x}^{(1)}), y^{(1)} = +1 \\ f(\mathbf{x}^{(5)}), y^{(5)} = -1 \\ f(\mathbf{x}^{(3)}), y^{(3)} = -1 \end{array}$$

モデルの評価と選択

予測精度98%の
モデルができました！



ホントかよ？



課題① モデル評価：

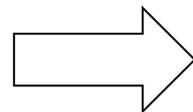
推定したモデルの将来の（実地での）性能を知りたい

- 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
（ただし、同じメカニズムで発生しているという仮定は必要）
- モデル推定に使うデータの答えを丸覚えしてしまえば、そのデータには必ず正解できるが、未知の問題に正解できない



訓練データ

モデル推定に用いたデータ



テストデータ

モデル運用時に初めて見るデータ

課題② モデル選択：

複数のモデル・ハイパーパラメータ候補の中から最良のものを選ぶ

- モデル推定の問題には、通常、いくつかのハイパーパラメータがある
 - 例：リッジ回帰

$$\text{minimize}_{\mathbf{w}} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2$$

- ハイパーパラメータを調整して予測精度を向上したい
- ハイパーパラメータはモデル推定の過程では推定できない
 - 上記の問題では $\lambda = 0$ が最良になってしまう

情報量規準：

理論的にモデルの真の性能を見積もる

- 情報量規準：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： $-2(\text{対数尤度}) + 2(\text{パラメータ数}) \cdot \ln n$
- しかし、理論的な仮定が満たされないときは不適
- 実用的には、後で紹介する検証用データを用いた実験的な方法が用いられがち
 - シナリオベースで考えられるという利点もあり

データを用いた性能評価の大原則： モデル推定に使ったデータを評価用途に使ってはいけない！

- モデルの予測精度を検証する目的で、モデルに推定に使用したデータを用いてはいけない 🏺
- モデル推定にすでに使用したデータに対するその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
- 極端な場合、モデル推定に使うデータの答えを丸覚えしてしまえばそのデータには必ず正解できる（が、未知の問題に正解できる保証はない）



モデル推定に用いたデータ

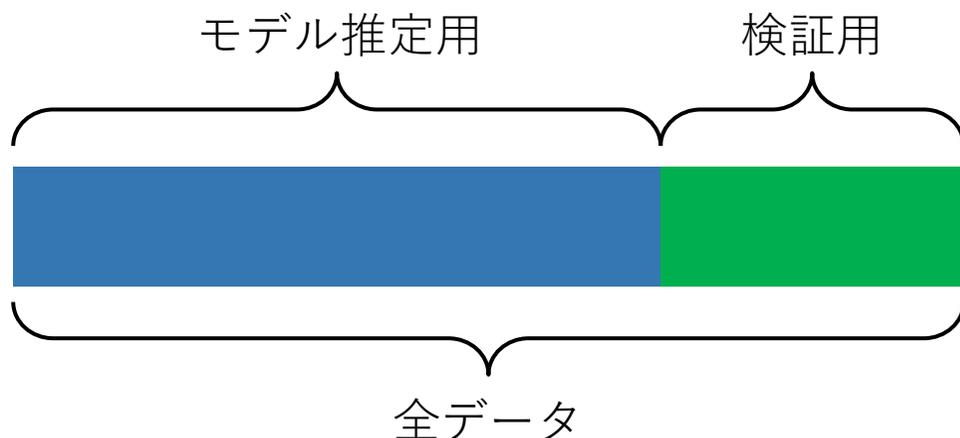


モデル評価に用いるデータ

シンプルな解決法：

検証用データを確保しておき、これを用いて性能評価する

- 解決法：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、...



データ分割における注意点：

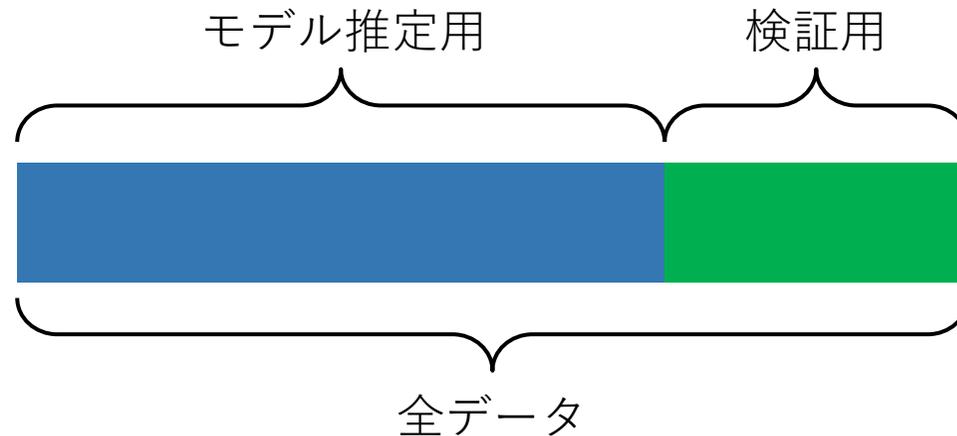
単純なランダムサンプリングは性能を過小評価する恐れ

- 単純なランダムサンプリングではクラス比のずれが生じることがある：
 - 2クラス分類問題：
クラスAとクラスBに40個ずつデータがあるとする → $A:B=1:1$
 - 推定用にデータを50個ランダムに選んだところ、
クラスAが30個、クラスBが20個であった → $A:B=3:2$
 - 検証用ではクラスAが10個、クラスBが20個になる → $A:B=1:2$
 - 推定と検証でクラス比にずれがある（性能を過小評価するリスクがある）
- 解決法：
 - 層化：各クラスから25個ずつランダムに取り出す
 - ブートストラップサンプリング：復元抽出する

検証の信頼性の確保：

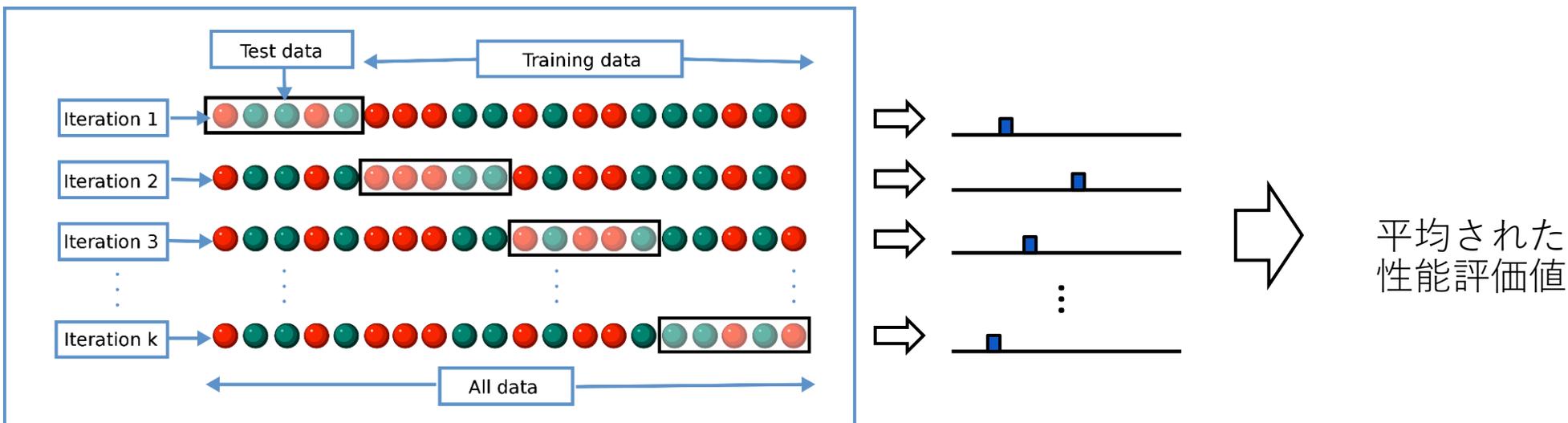
得られた推定性能はどのくらい信用してよいのか？

- 検証データで98%の予測精度が出た → どの程度信じてよいか？
 - 今回の推定／検証の切り分けが運が良かっただけの可能性？
- 推定用データと検証用データの切り分けを（ランダムに）何度もやればよいのでは？



交差検証： 推定と検証を繰り返す定番手法

- 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） → 平均をとる



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異なることに注意

二重交差検証： モデル選択と性能評価を同時に行う

- モデル選択と、選ばれたモデルの性能評価の両方を行いたい
- ひとつの K -分割交差検証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すでに用いたデータを評価に使ってはいけない
- 二重交差検証：
 - 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

外側のループ

評価データ

モデル推定用データ

内側のループ

選択用データ

モデル推定用データ

二重交差検証の（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ため、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

評価データ

選択用データ

モデル推定用データ

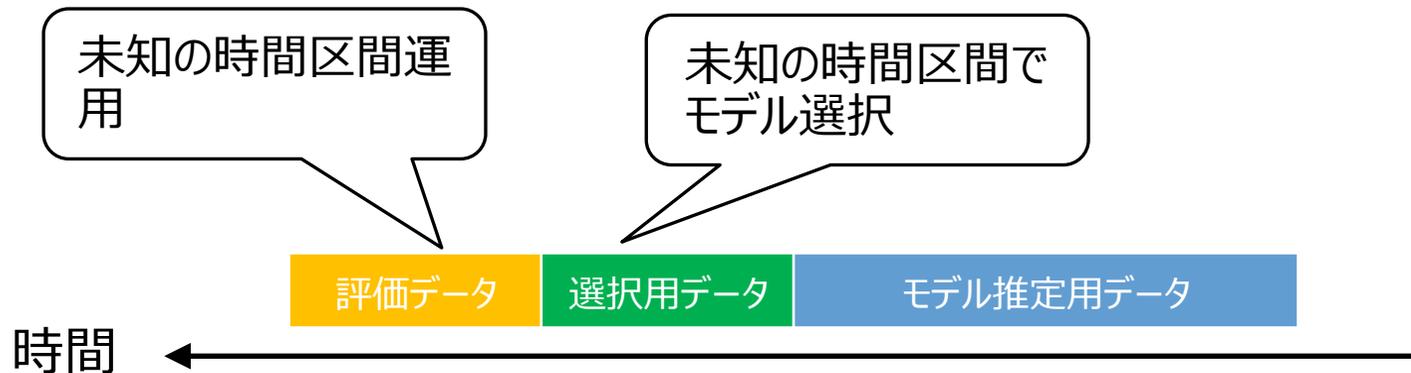
検証用データを用いるアプローチのメリット： 運用時のシナリオに合わせた評価用データの切り出し

- 評価用データの分割に関する基本的な考え方：
 - 運用時のデータ分布を再現するように
 - 評価の情報が漏れないように
- 例えば推薦システム（ユーザ・商品ペアに対し評価値を予測）：
 - 既存ユーザ・商品への推薦なら評価データをランダムに抜く
 - 新規ユーザへの推薦であれば行を抜くべき
 - 新規商品の推薦であれば列を抜くべき
- シナリオに合わせて検証データを準備できるところが評価データを使うメリット

	1	?	5	?
	?	2	4	?
	?	3	?	5

時系列データにおけるモデル評価・選択： サンプル外検証

- 時系列データでは、しばしばある時点以前のデータをもとに、その時点以降のデータについて予測することになる
- このシナリオに合わせた検証データの切り出しが必要
 - しばしばランダムに取り出すのは不適當（SNS炎上案件）
- サンプル外（Out-of-sample）検証：

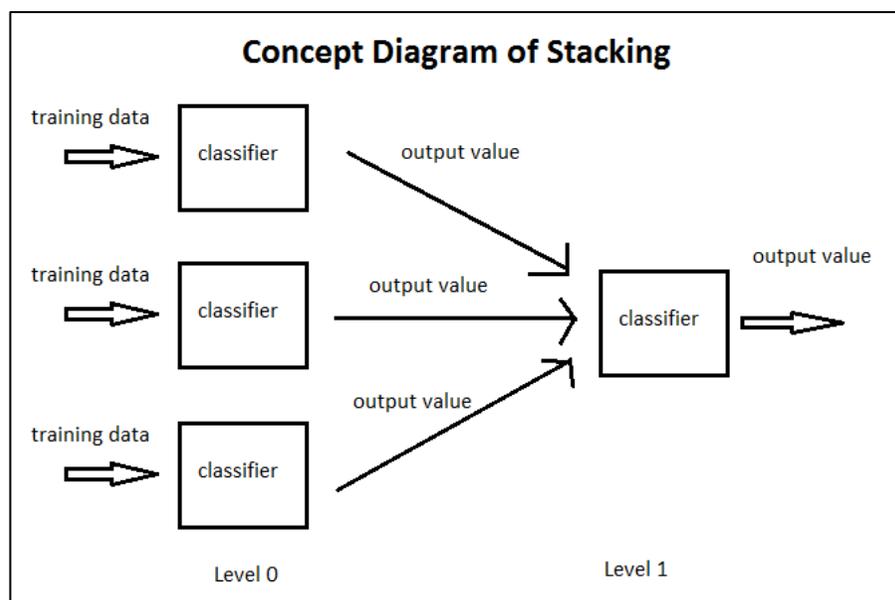


交差検証の応用（スタッキング）

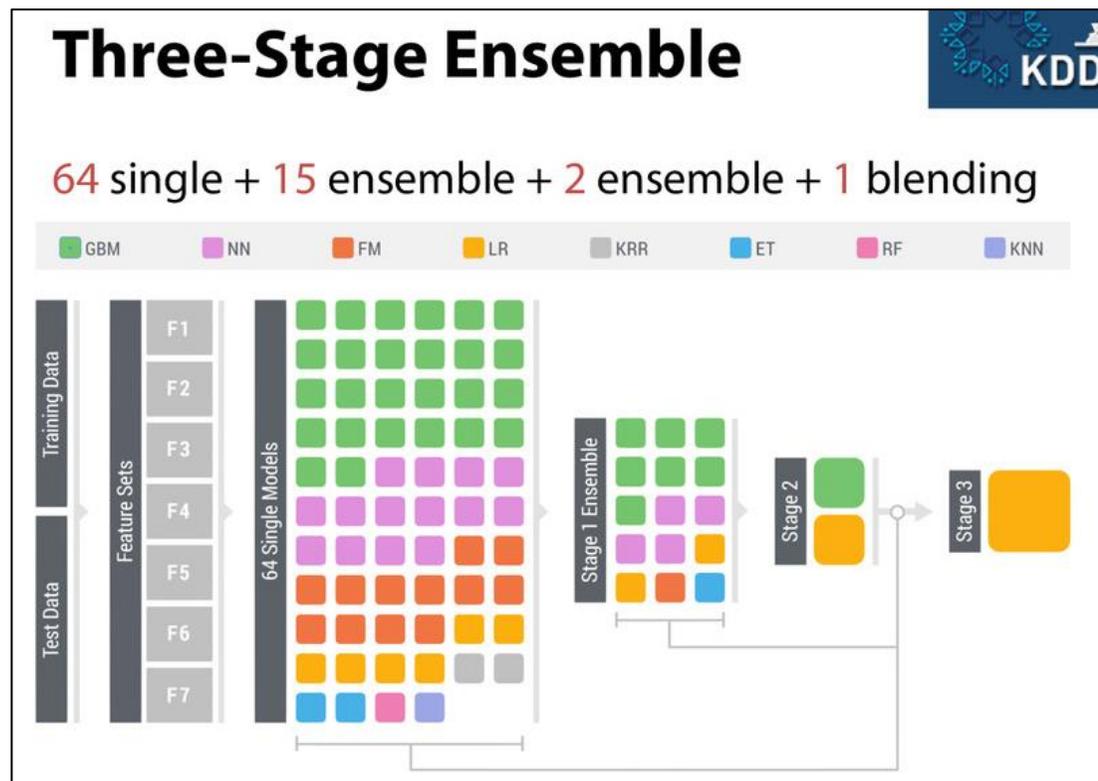
スタッキング :

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>



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
 - 深層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}_ℓ
 - $\ell + 1$ 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実施法： 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ただけ積む
- 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