CC BY

データサイエンス概論I＆II

予測と回帰分析

九州大学 数理・データサイエンス教育研究センター

データを用いた「予測」

だれでも予測をしながら生きている.
でも正直，正確な予測は，現代でも難しい

身近な予測①
未来の予測

- 試験の勉強
  - 過去の傾向からみて，明日はきっとこの問題が出るだろう

- スポーツ
  - 次はストレートを投げてくるに違いない

- 買い物
  - この値段・素材のものを買えば，5年は大丈夫だろう

- 天気予報
  - 過去の天気データを用いて，明日以降の天気を予測

他にも…
- 株価の予測
- 競馬等のギャンブル
- 就職活動

などなど

身近な予測②
未来ではなくても，「だろう」がつけば全部「予測」

- 画像認識
  - (無意識に)「この動物は犬だろう」
  - (無意識に)「あ，機嫌が悪そうだ」
  - この本（表紙とタイトル）は，きっと面白いだろう

「見た目」（画像）がすべてではない．
それでも我々は（ある程度正確に）
「これは何だ！」と予測して生きている！

- 推量・診断
  - これぐらい勉強すれば，これぐらいの点数は取れるだろう
  - この体温ならば，インフルエンザだろう

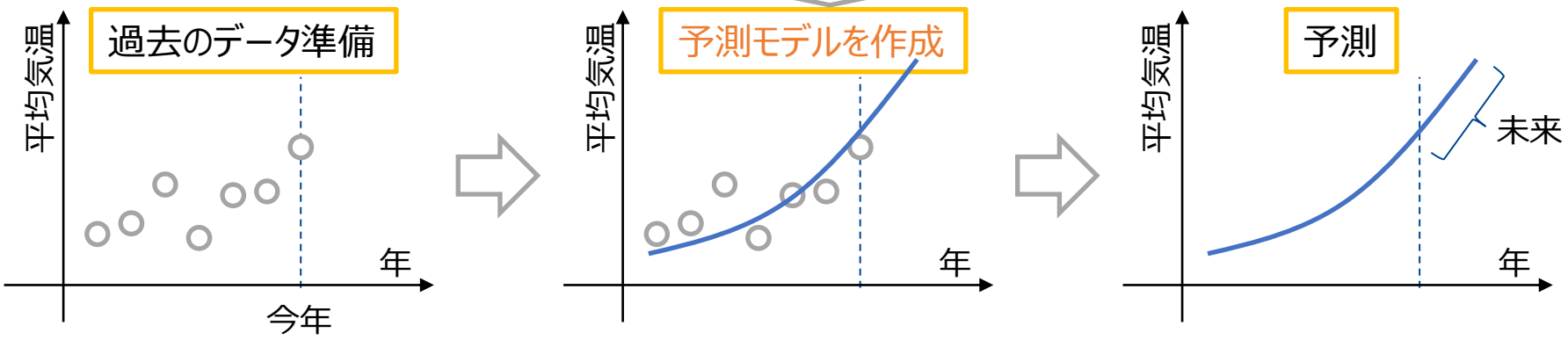
- 因果推論(＝こういう結果になったのはこういう原因があったからだ)
  - 警察の推理，故障原因の推定，考古学

- 推薦
  - このユーザーなら，この商品なら買ってくれそう！

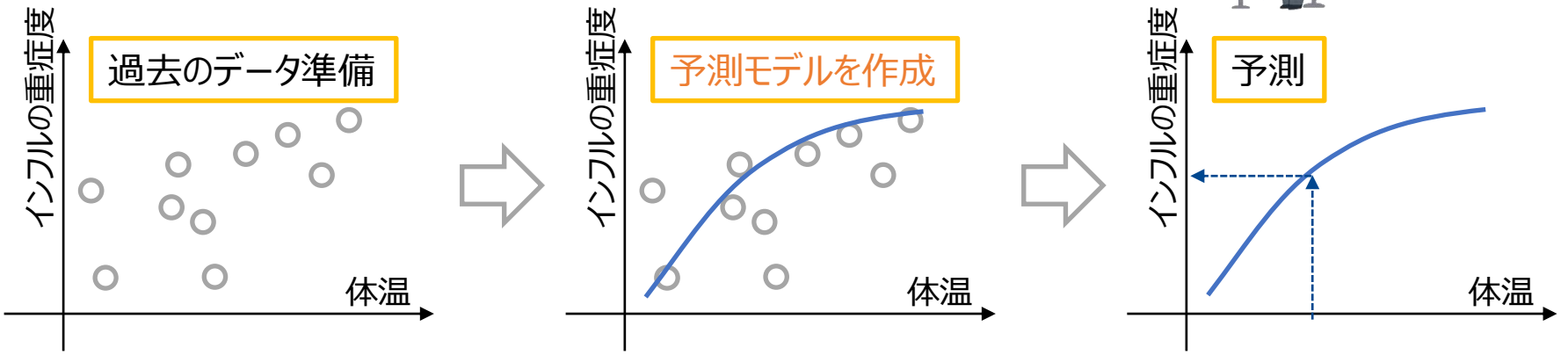
データを用いた予測の方法：
難しそうに感じるかもしれませんが，みんな無意識にやっていることです

- 未来を予測する場合

後述（回帰分析）

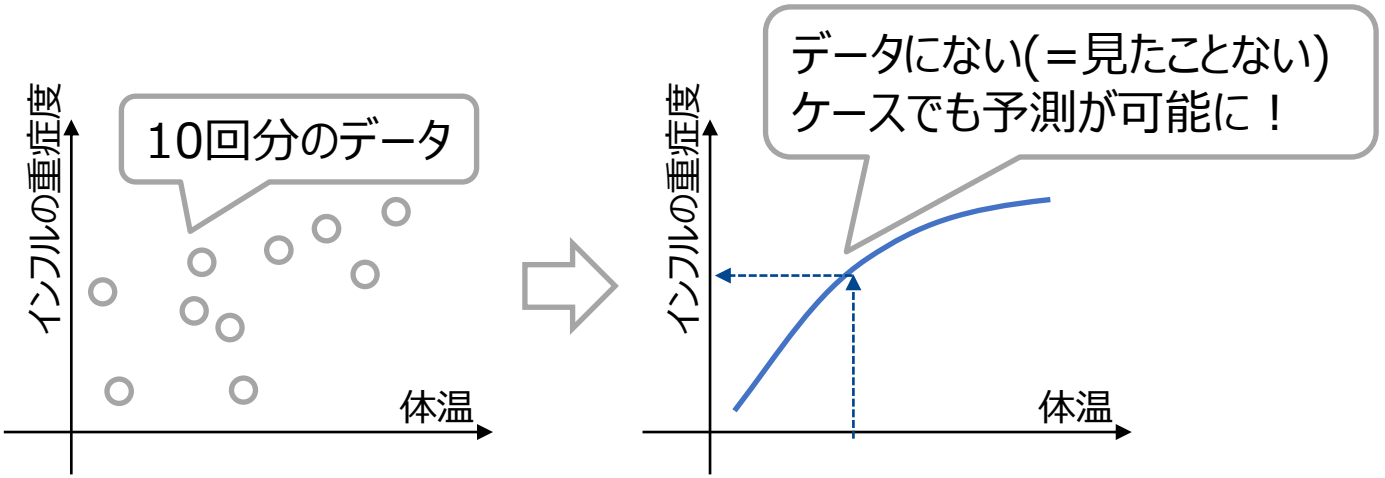


- （未来に限らない）より一般的な予測の場合



予測モデルのうれしいところ

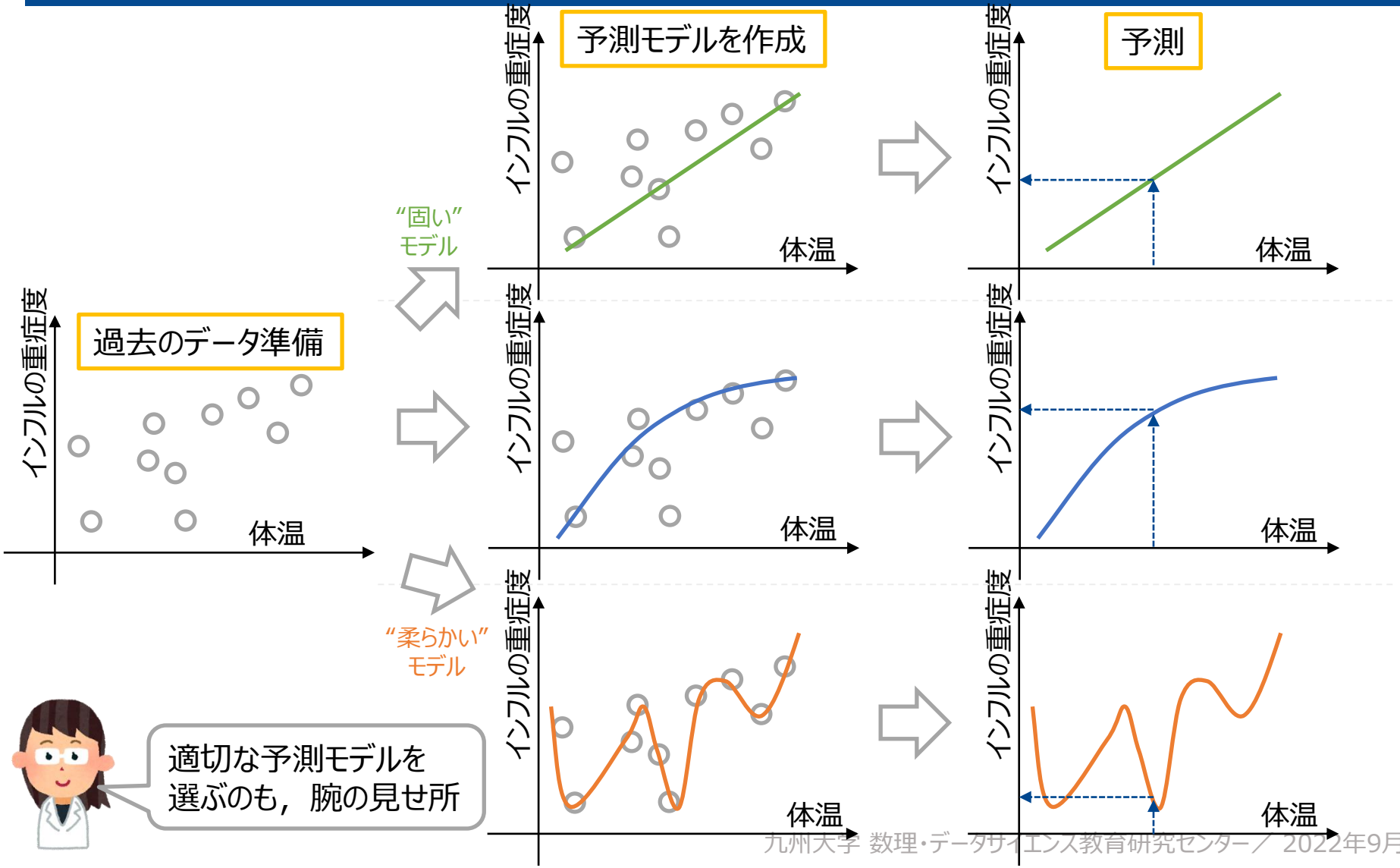
- 過去になかった状況に対しても予測可能



- 我々人間も，過去の数回の経験(＝データ)に基づいて，
  未知の状況でも何らかの予測を行いながら生きてる！

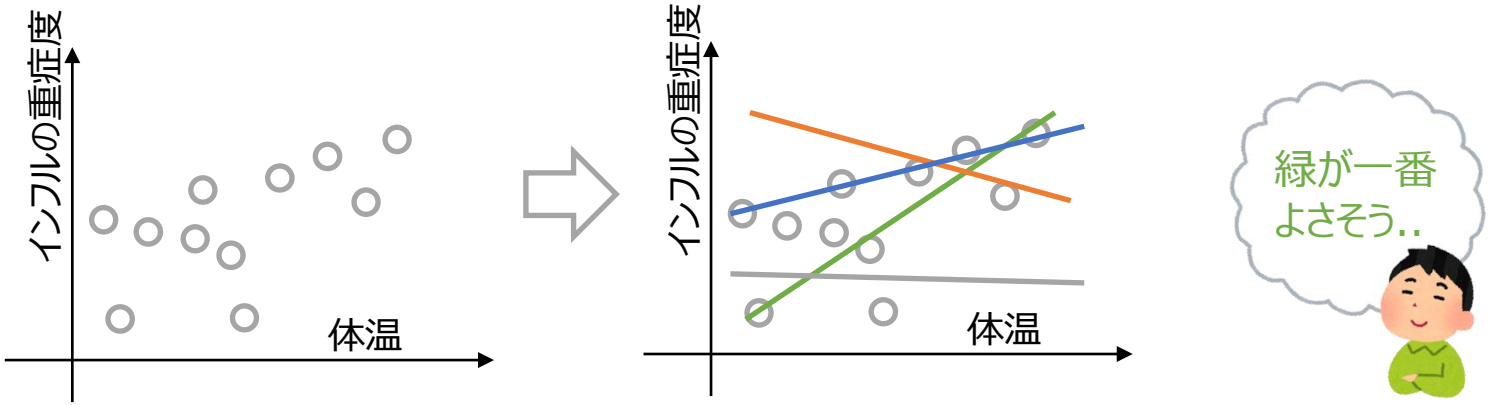
  - 「以前こうなったから，今回はたぶんこうなる」という知識が皆さんの「予測モデル」
  - 例：医師も，他の患者の診察結果に基づいて，初診の患者を診察している
  - 例：見たことのないタイプの犬でも，過去に見た犬に基づき，犬とわかる

予測モデルは様々考えられる．そして，モデルによって予測結果は異なる(精度が違う)



さらに…
同じ予測モデルでも，「あてはめ方」は色々

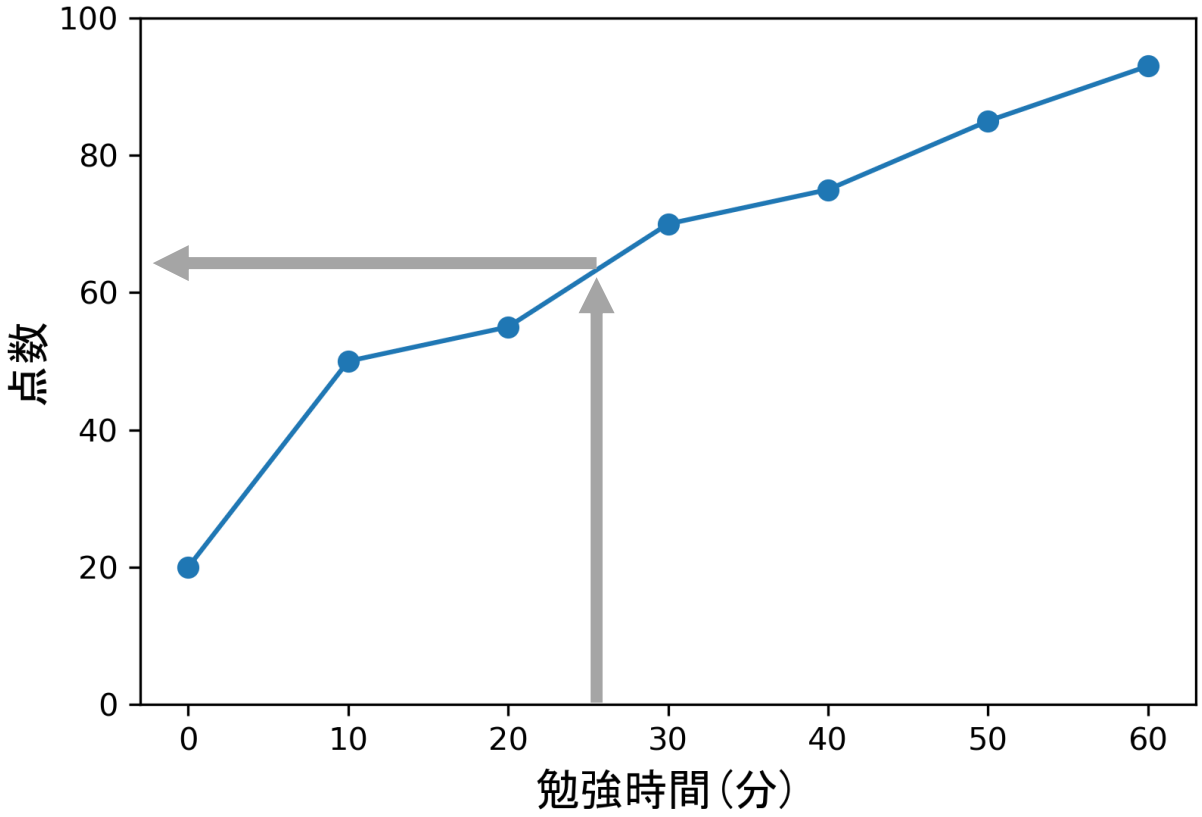
- 例えば同じ「まっすぐな予測モデル(線形予測モデル)」でもデータへの「あてはめ方」は色々考えられる



- なるべく多くのデータを正確に予測できるように，適切にあてはめる必要がある
  - 後述する「最小二乗法」が一般的

ちなみに，小学生でも予測をやっている！ 折れ線グラフ，実は最も単純な「予測」

- 予測モデル＝折れ線

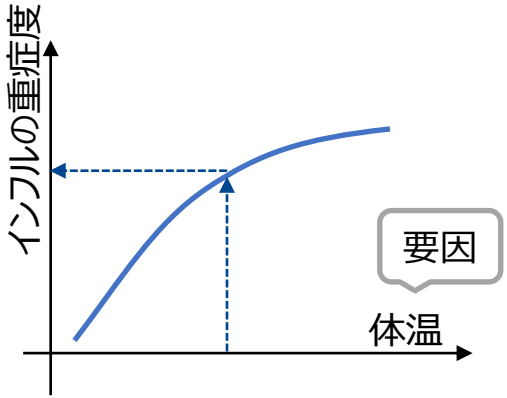


- 未測定の勉強時間(ex. 25分)でも点数を予測可能(63点ぐらい)

しかし予測は難しい！

- 過去のデータを十分に集められない場合がある
  - 「あなたの10年後の給料」を予測するためには，「あなたと似たような人」をたくさん集める必要がある

- 予測結果を決める要因が不明な場合がある
  - インフルの重症度は体温だけでよいのか？
  - 上記の「10年後の給料」予測に必要な要因は？
  - 天気予報のように要因がほとんど無限に存在する場合もあり



- 現時点と予測時点では状況が違う場合がある
  - 2年後に突然不況が起こったら，「10年後の給料」予測結果は外れる
  - ＝いつまでも同じ予測モデルが使えるとは限らない

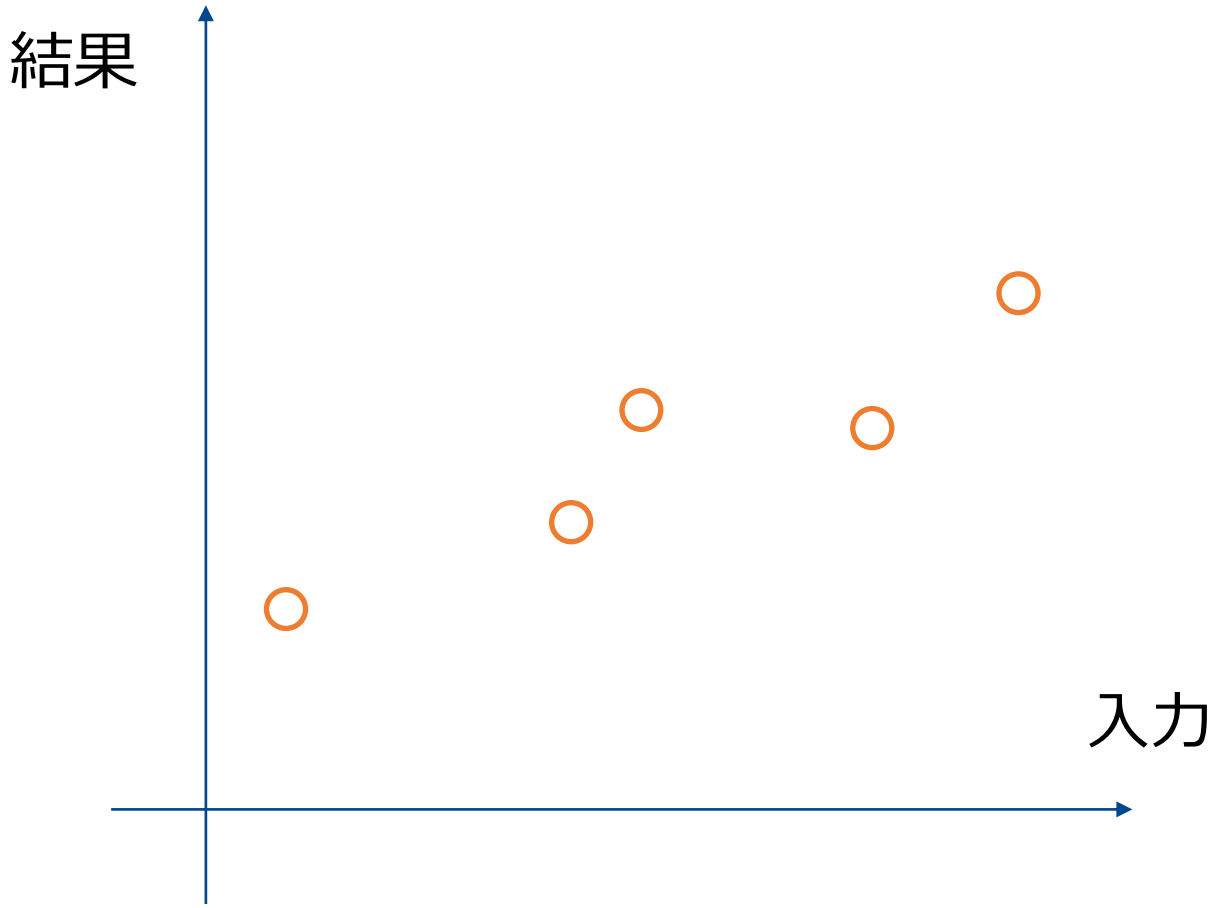
- どの予測モデルを使えばよいかは，自明ではない

… など様々な難しさがある！

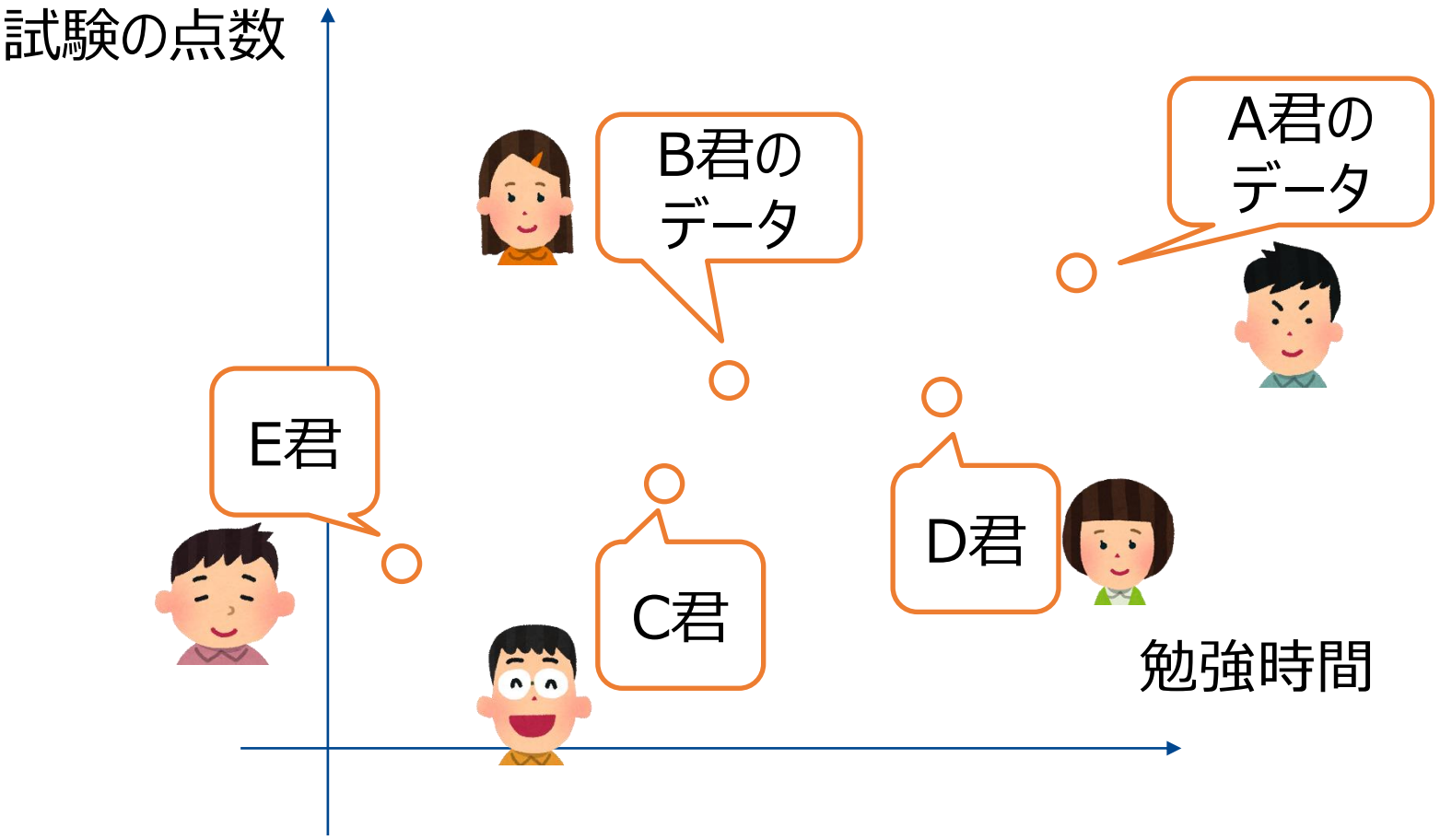
回帰による予測

すでにお伝えしたことをもう一度

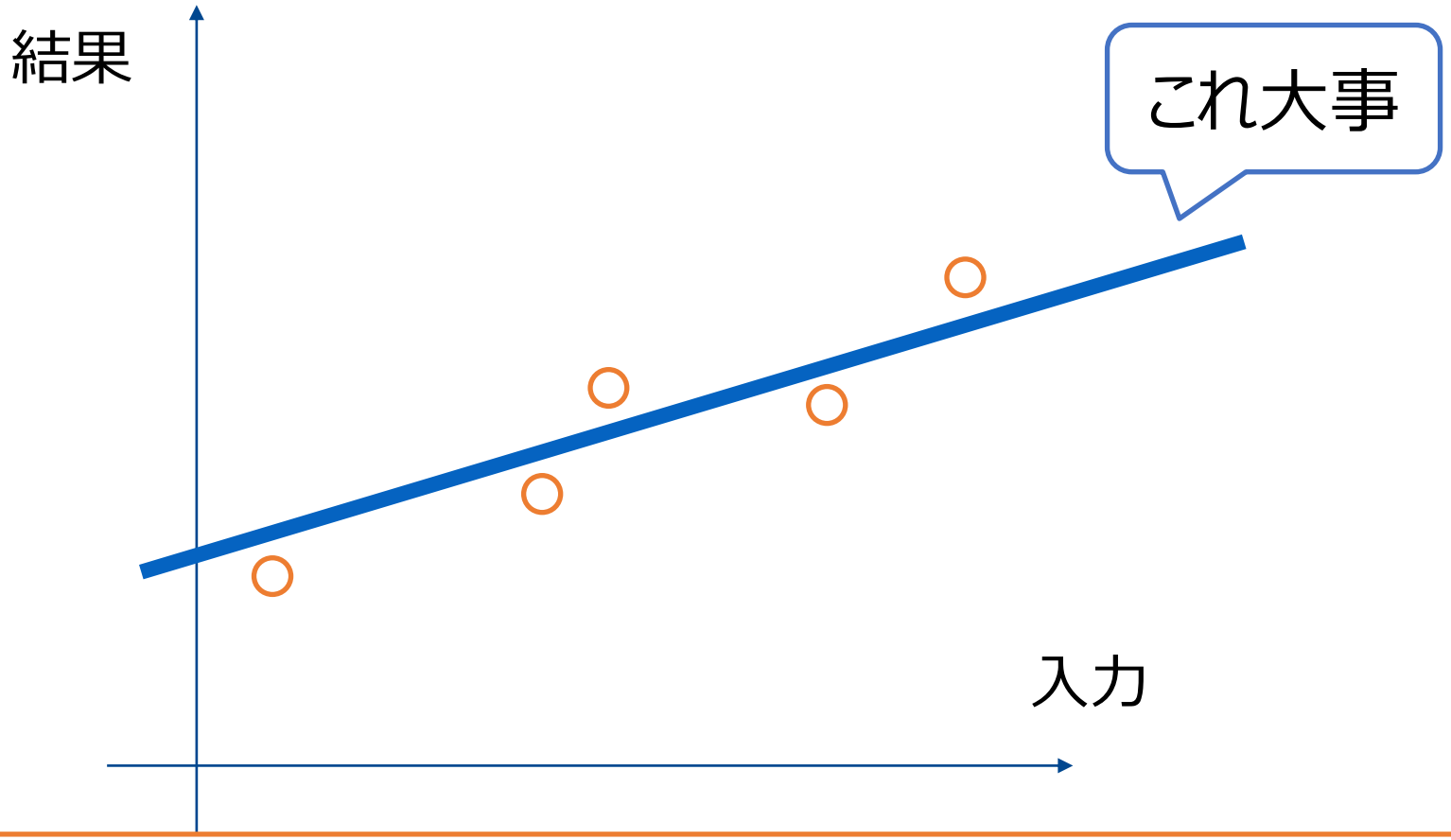
回帰による予測（ステップ1/3）：データ収集



回帰による予測（ステップ1/3）：データ収集の例

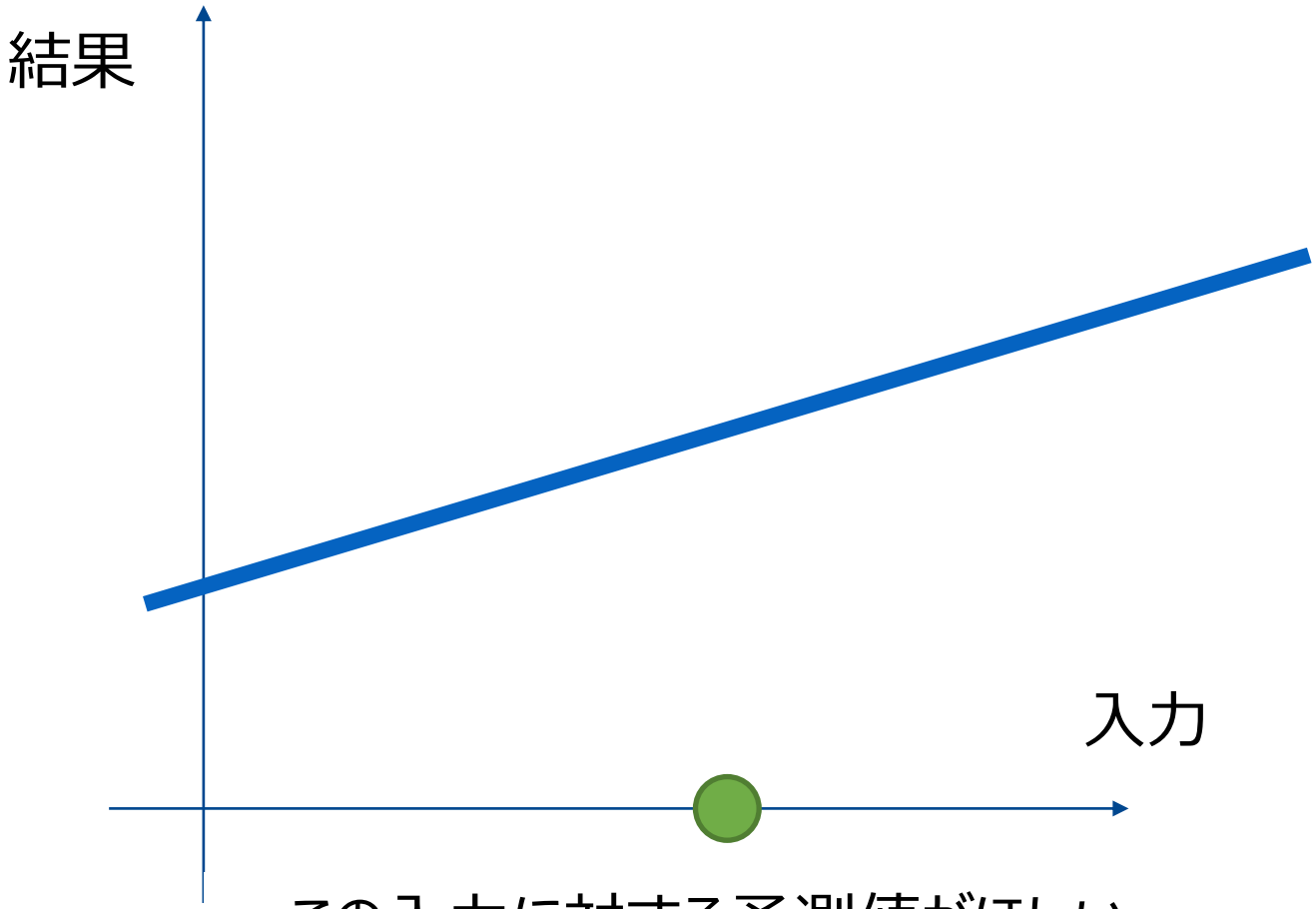


回帰による予測（ステップ2/3）：
モデルあてはめ



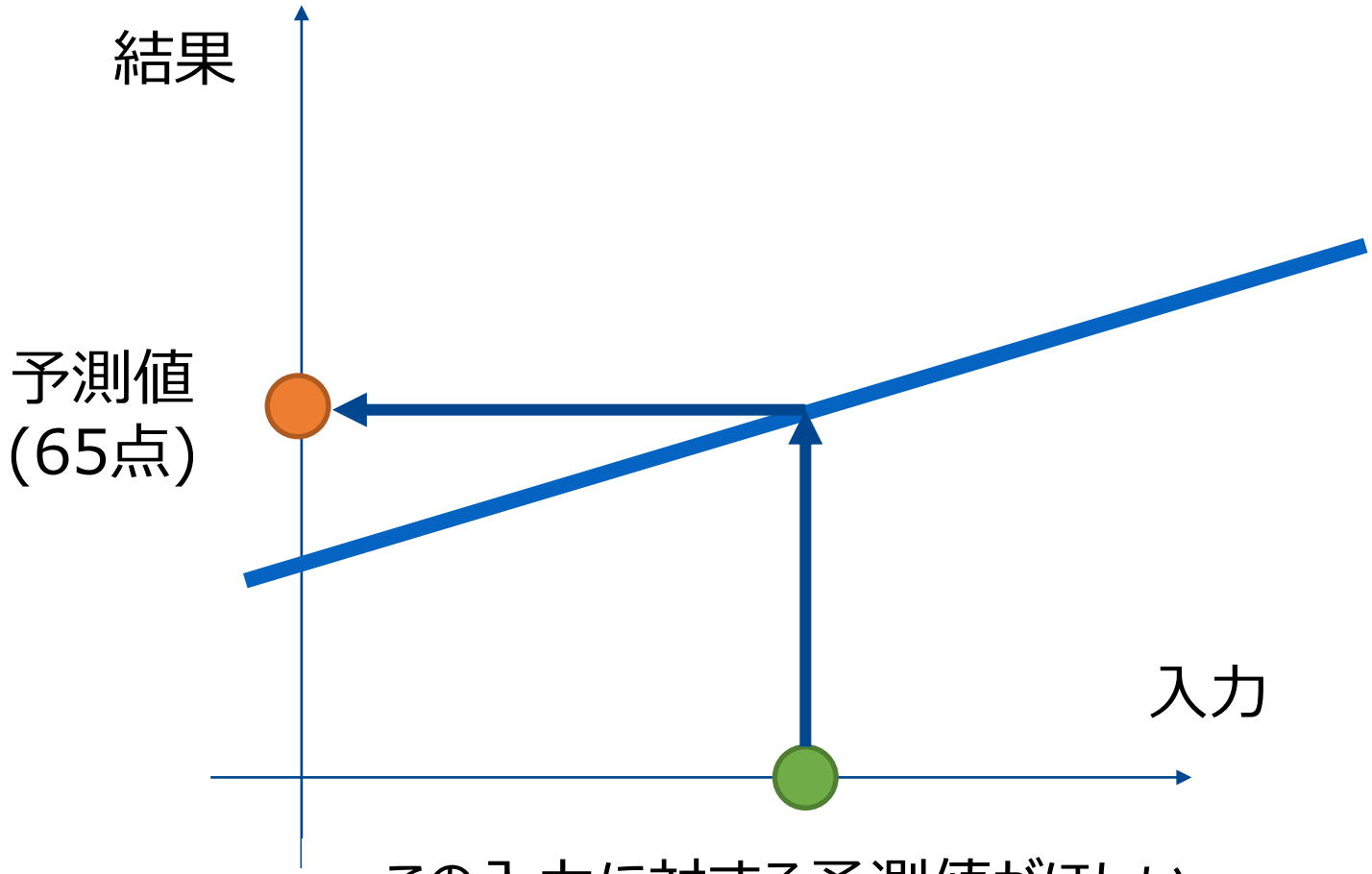
モデル＝「条件 or 入力」と「結果」間に成り立つと予想される関係.
上記は「線形モデル」

回帰による予測（ステップ3/3）：予測



この入力に対する予測値がほしい
(ex. 勉強3時間だと何点取れそう？)

回帰による予測（ステップ3/3）：予測



この入力に対する予測値がほしい
(ex. 勉強3時間だと何点取れそう？)

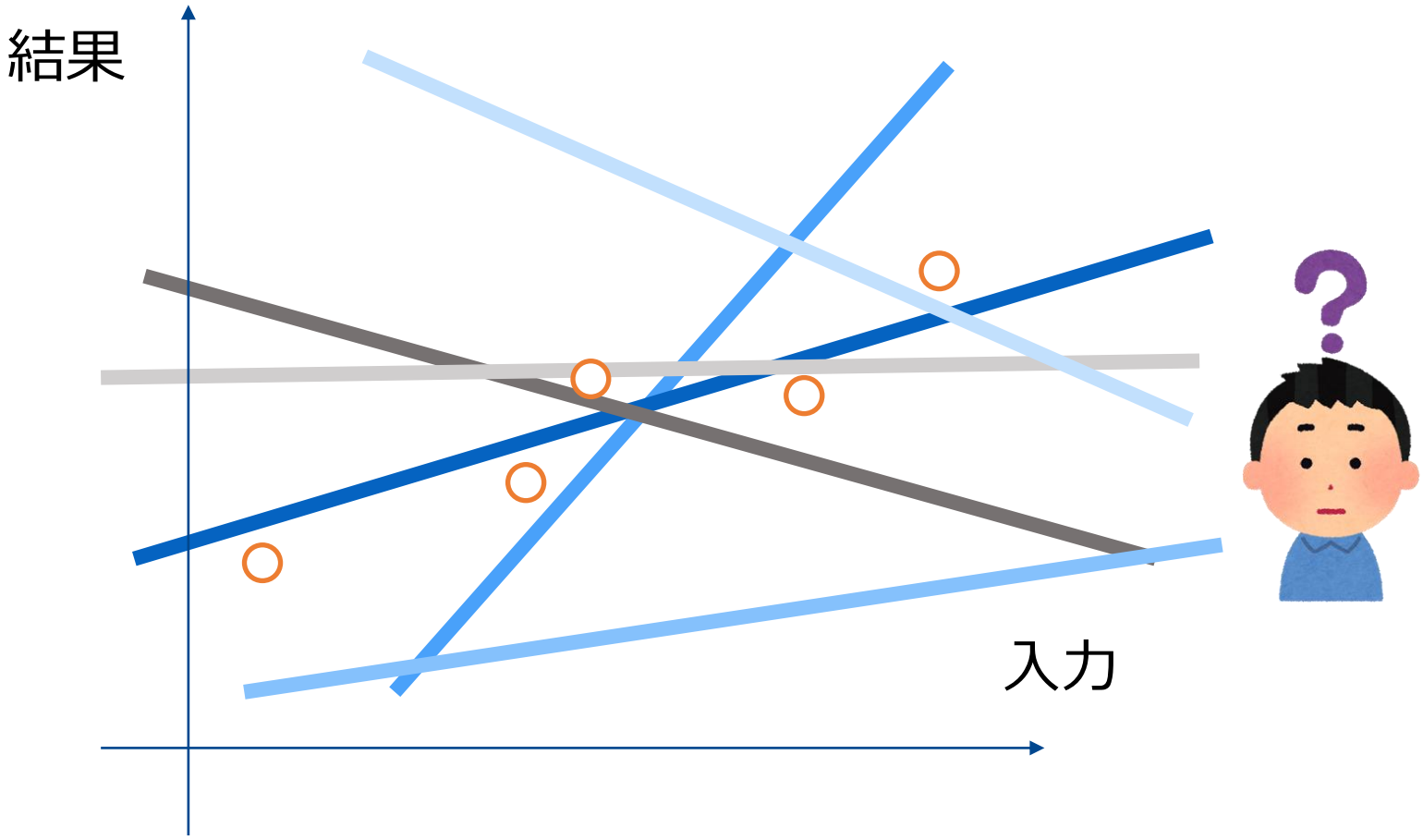
回帰分析とは

- いくつかの（入力，結果）の事例に基づいて，
- それらの関係をモデル化することで，
- 新たな入力に対して，その結果を予測する方法．
- 専門的な用語としては
  - 入力→説明変数
  - 結果→外的変数
  - とか言ったりしますが…

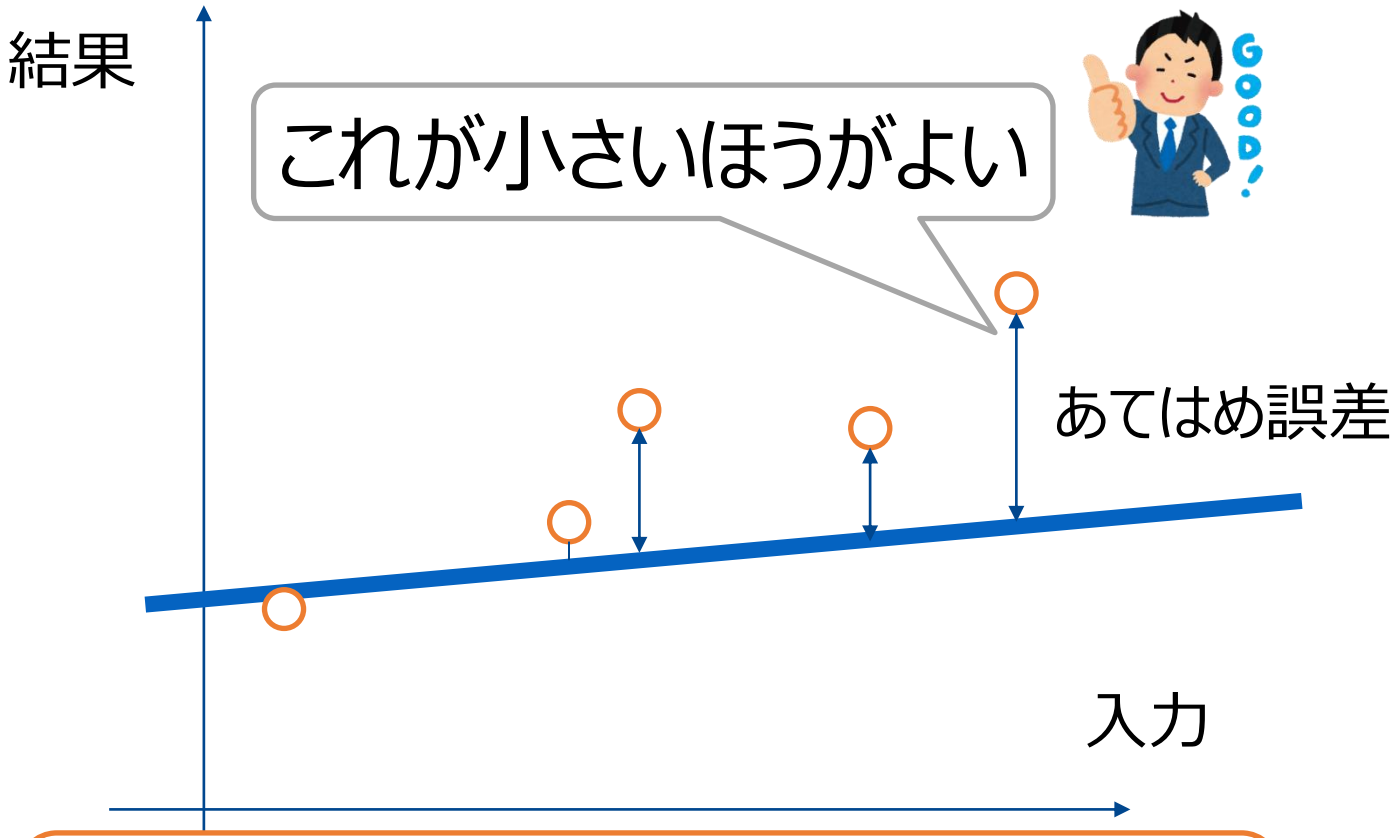
「モデルあてはめ」の方法

最小二乗法で解く！

どういう「あてはめ結果」が望ましい？(1/3)

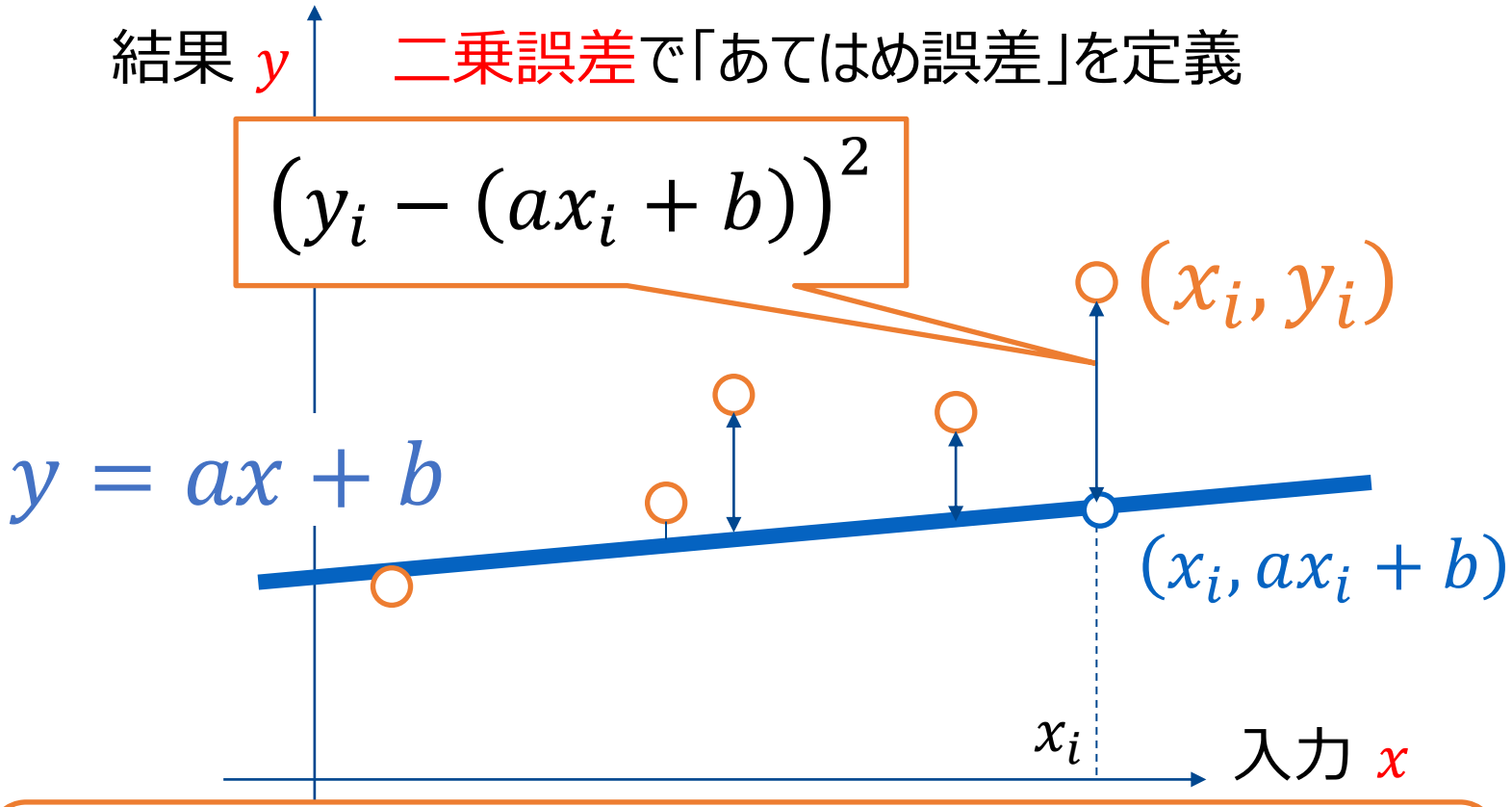


どういう「あてはめ結果」が望ましい？(2/3)



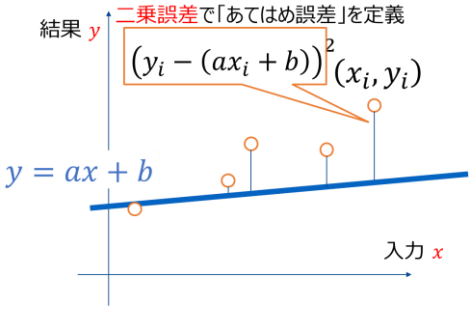
$\sum_i$ 第iデータのあてはめ誤差　→最小化

どういう「あてはめ結果」が望ましい？(3/3)



aとbをいじって$\sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$を最小化

これを「最小二乗法」と呼ぶ



二乗誤差を最小にしたいから
最小二乗法

aとbをいじって$\sum_i (y_i-(ax_i+b))^2$を最小化

どうやって？？

最小二乗法，どう解く？ まず問題をよく見る(1/3)

最小化したいもの

$$\sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$$

$$= \sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)\left(y_i - (ax_i + b)\right)$$

$$= \sum_i x_i^2 a^2 - (y_i - b\ )2x_i a + (y_i - b\ )^2$$

落ち着いて考えれば aに関する2次関数

$$= \left(\sum_i x_i^2\right) a^2 - 2\left(\sum_i (y_i - b\ )\, x_i\right) a + \sum_i (y_i - b\ )^2$$

最小二乗法，どう解く？ まず問題をよく見る(2/3)

最小化したいもの

$$\sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$$

$$= \sum_i (y_i - ax_i - b\ )(y_i - ax_i - b\ )$$

$$= \sum_i b^2 - (y_i - ax_i)2b + (y_i - ax_i)^2$$

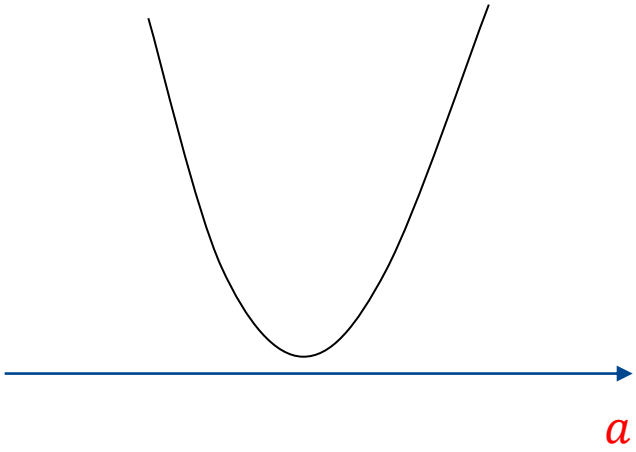
落ち着いて考えれば bに関しても2次関数

$$= \left(\sum_i 1\right) b^2 - 2\left(\sum_i (y_i - ax_i)\right) b + \sum_i (y_i - ax_i)^2$$

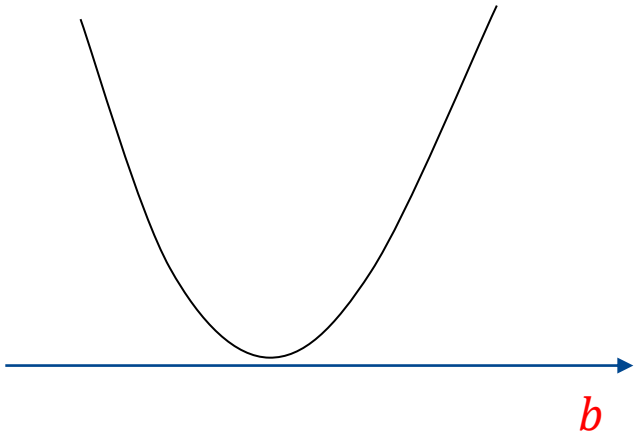
最小二乗法，どう解く？
まず問題をよく見る(2/3)

$$\sum_i (y_i - (ax_i + b))^2$$

a方向から見ても2次関数



b方向から見ても2次関数



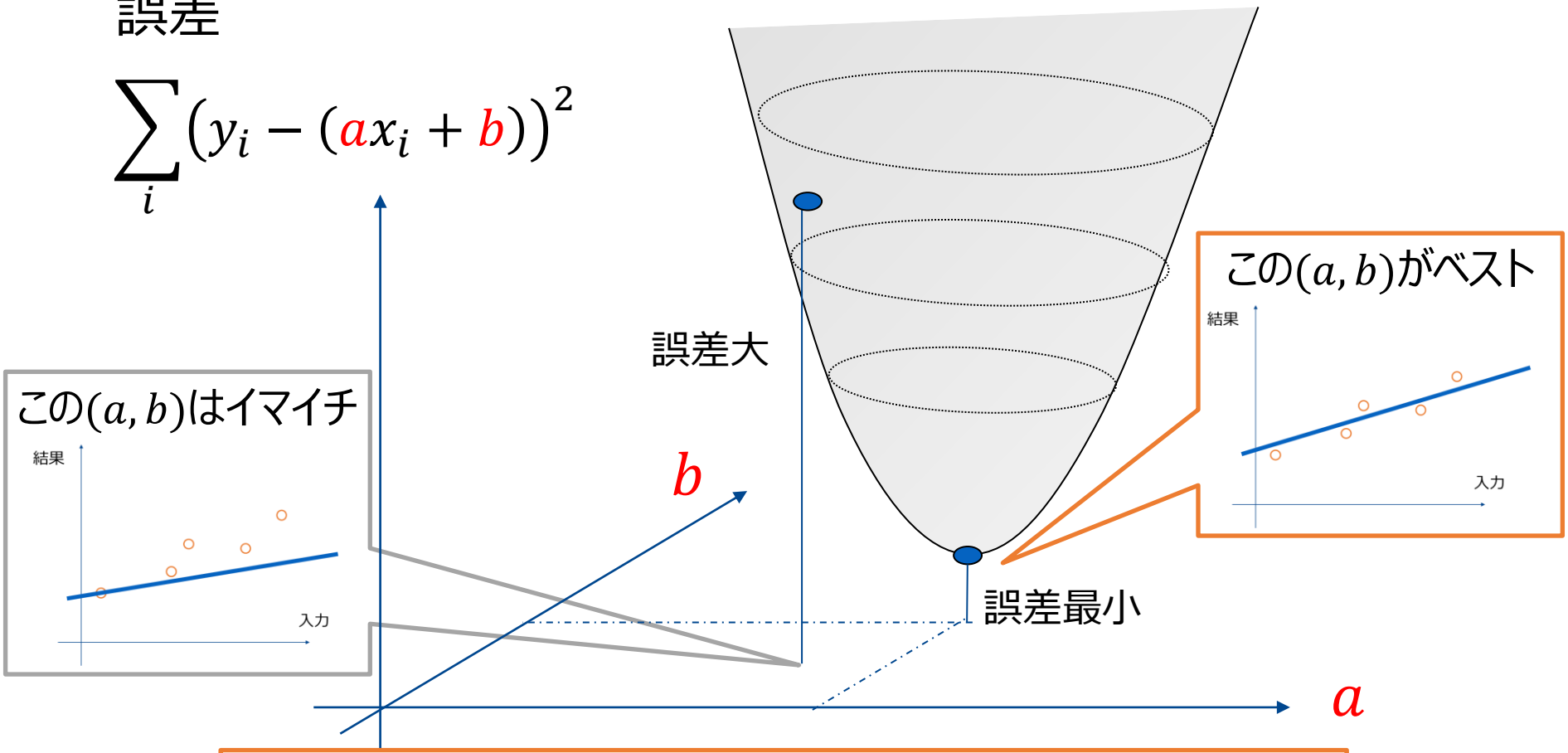
ということは…

← 富士山はどこから見てもこんな感じ

最小二乗法，どう解く？
要するに誤差はこんな形になっています

誤差

$$\sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$$



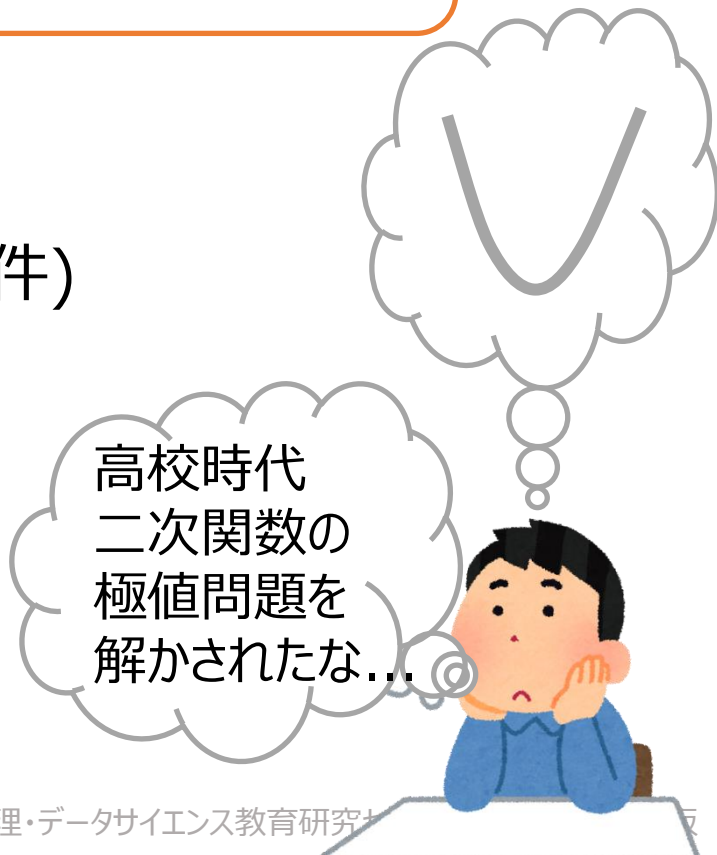
ベストは 1 か所→ベストな「モデルあてはめ」は一つ！
(by 一か所だけ出っ張った二次関数の美しい特性)

最小二乗法，どう解く？
解き方の細かいところ

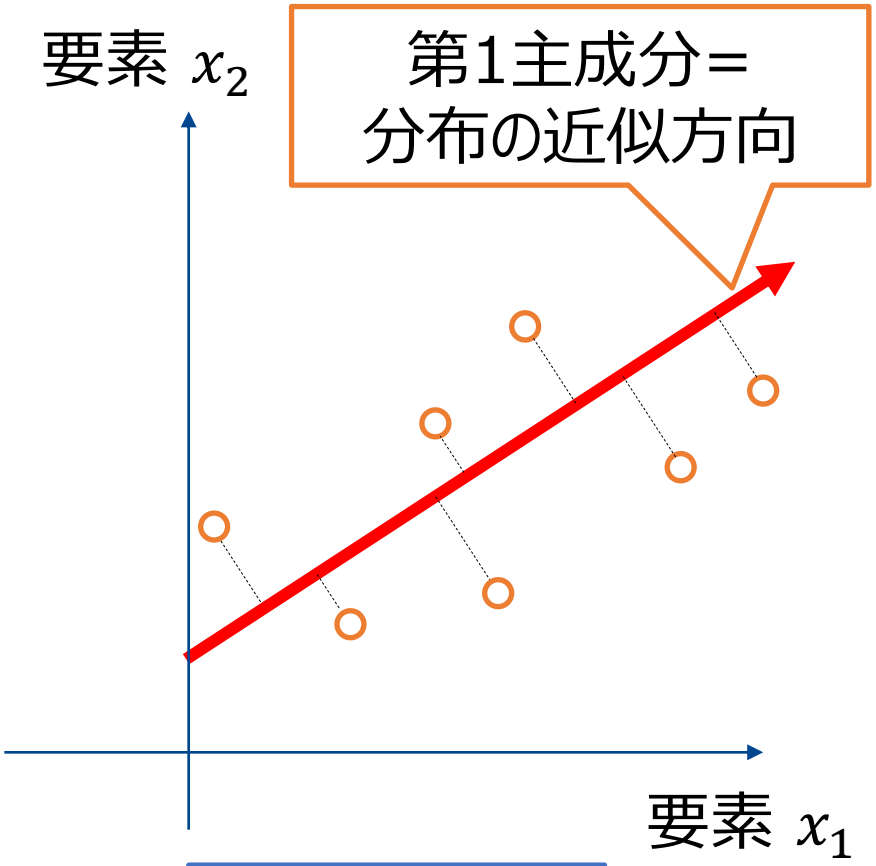
aとbをいじって$\sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$を最小化

解き方(要は「極値なら微分してゼロ」という条件)

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial \sum_i \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2}{\partial b} = 0 \end{cases}$$

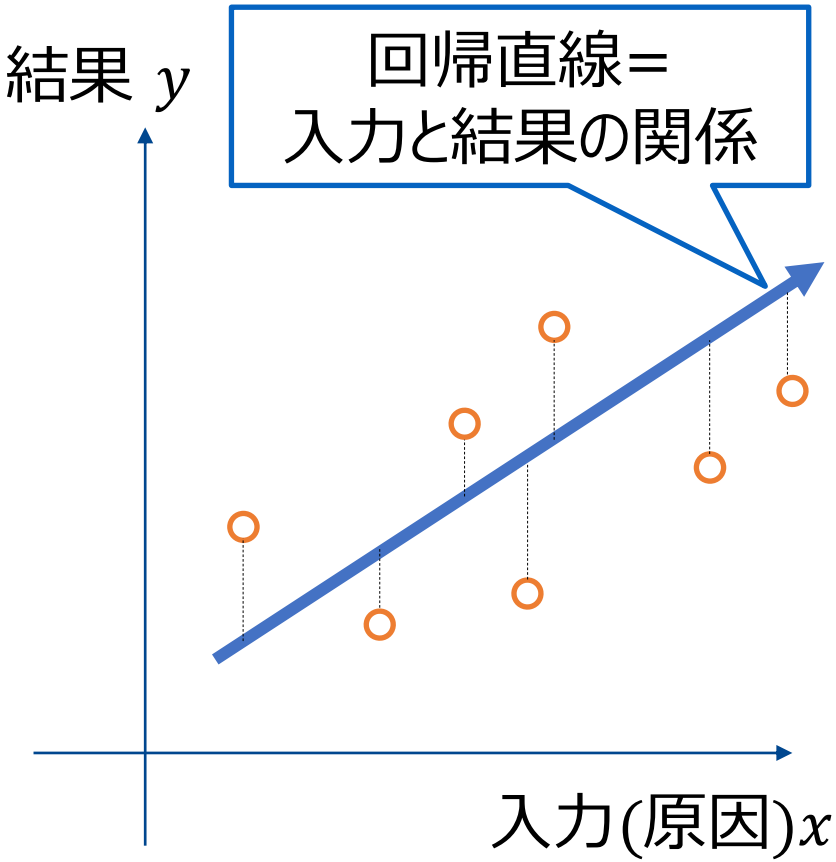


主成分分析と回帰分析の違い：
どちらがいい・悪いというものではなく，目的からして全く違う



主成分分析

要素 x_1，x_2を交換しても同じ



(線形)回帰分析

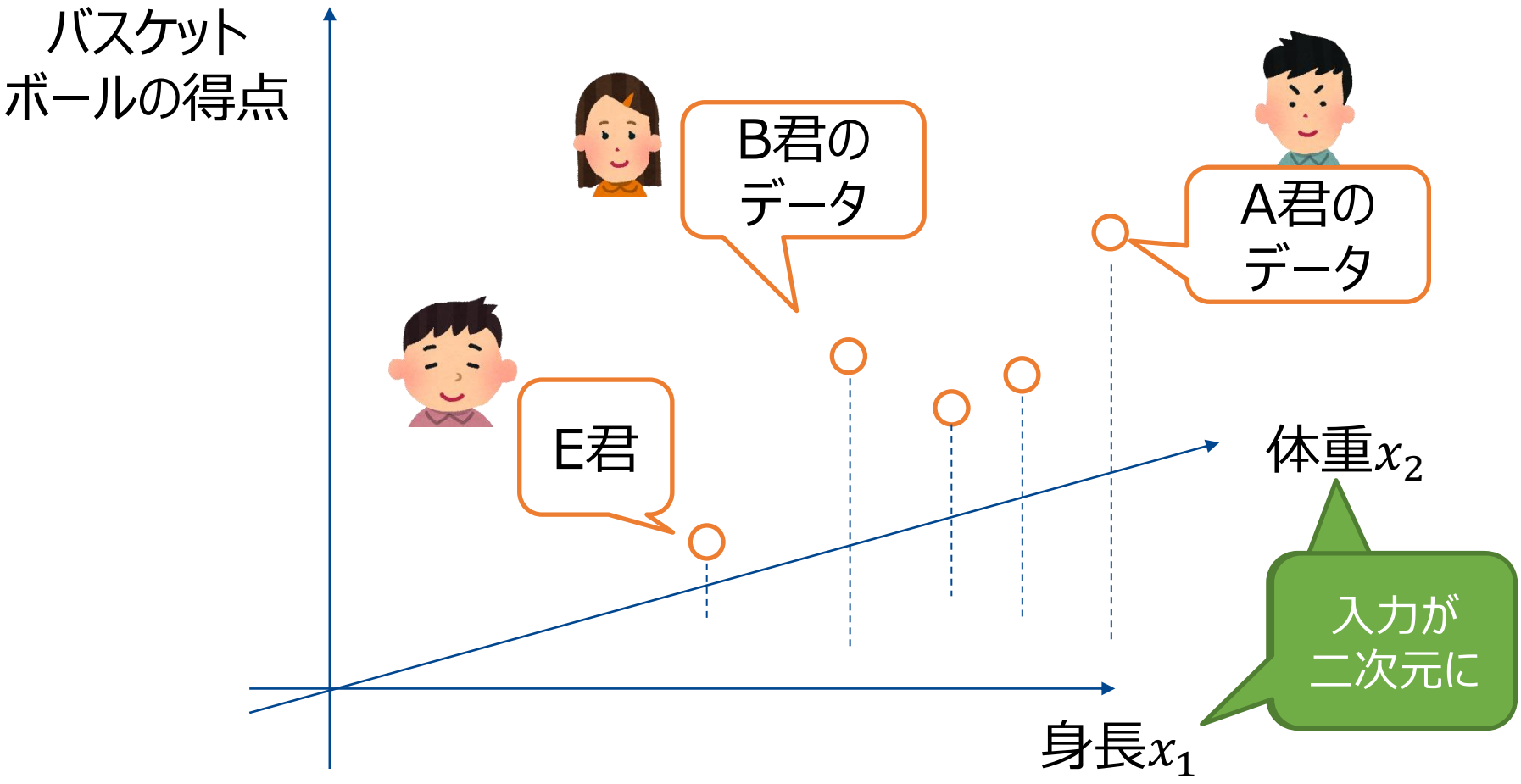
入力 xと結果yを交換すると違う直線

重回帰分析

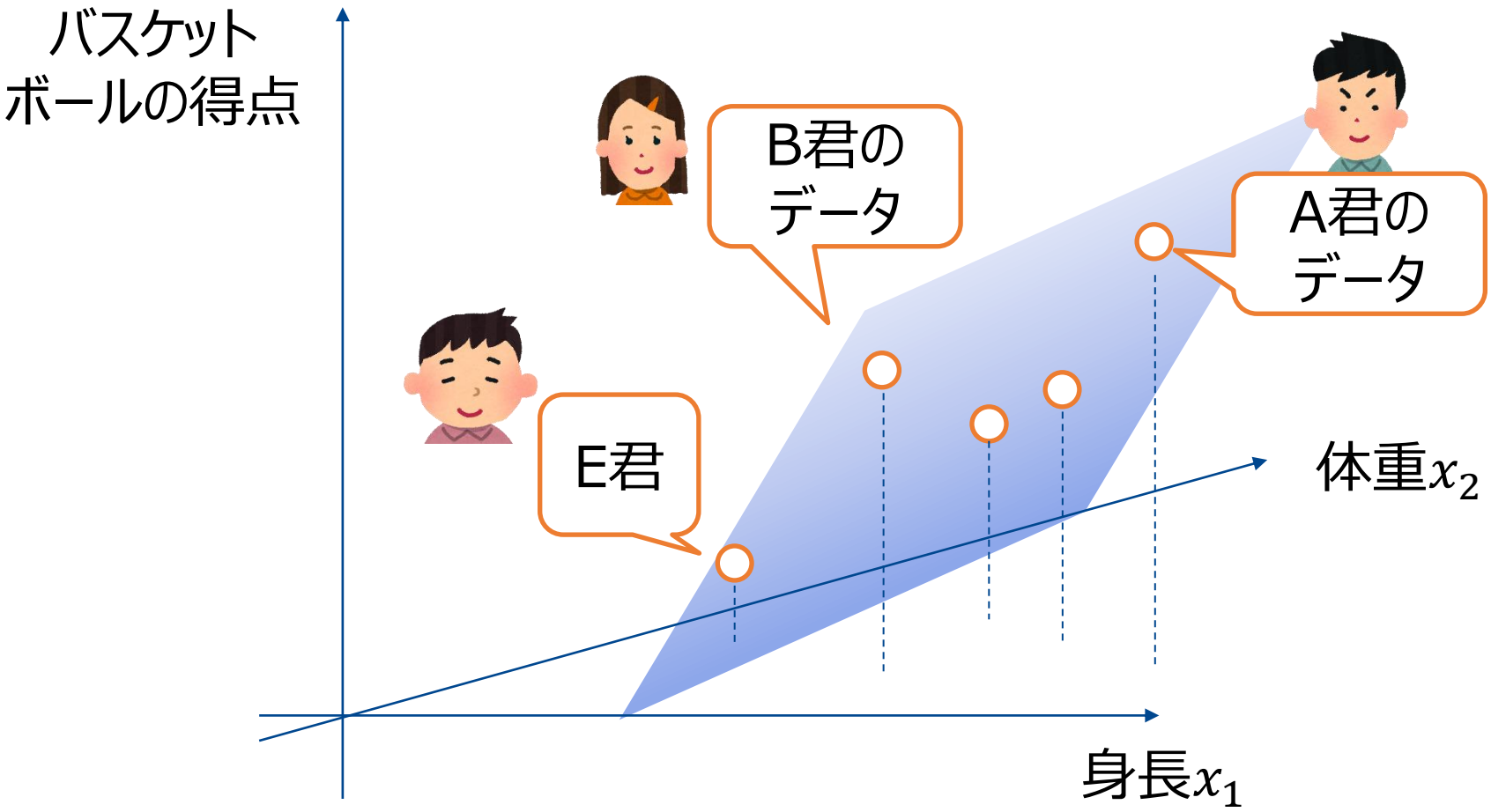
重たくないのに

入力＝複数の変数
結果＝単一の値

重回帰による予測（ステップ1/3）：データ収集

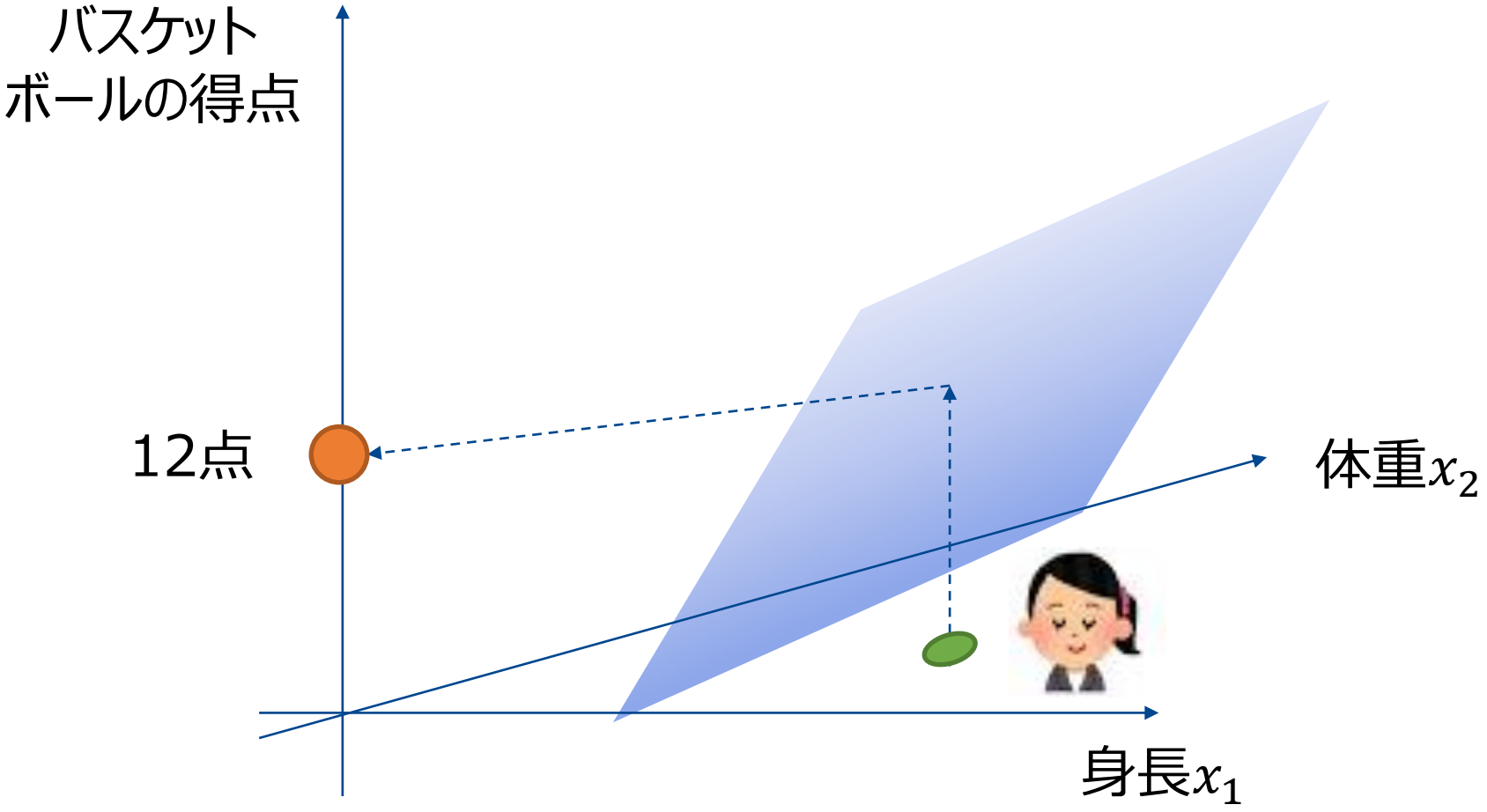


重回帰による予測（ステップ2/3）：モデルあてはめ



→ やはり最小二乗法になります

重回帰による予測（ステップ3/3）：予測



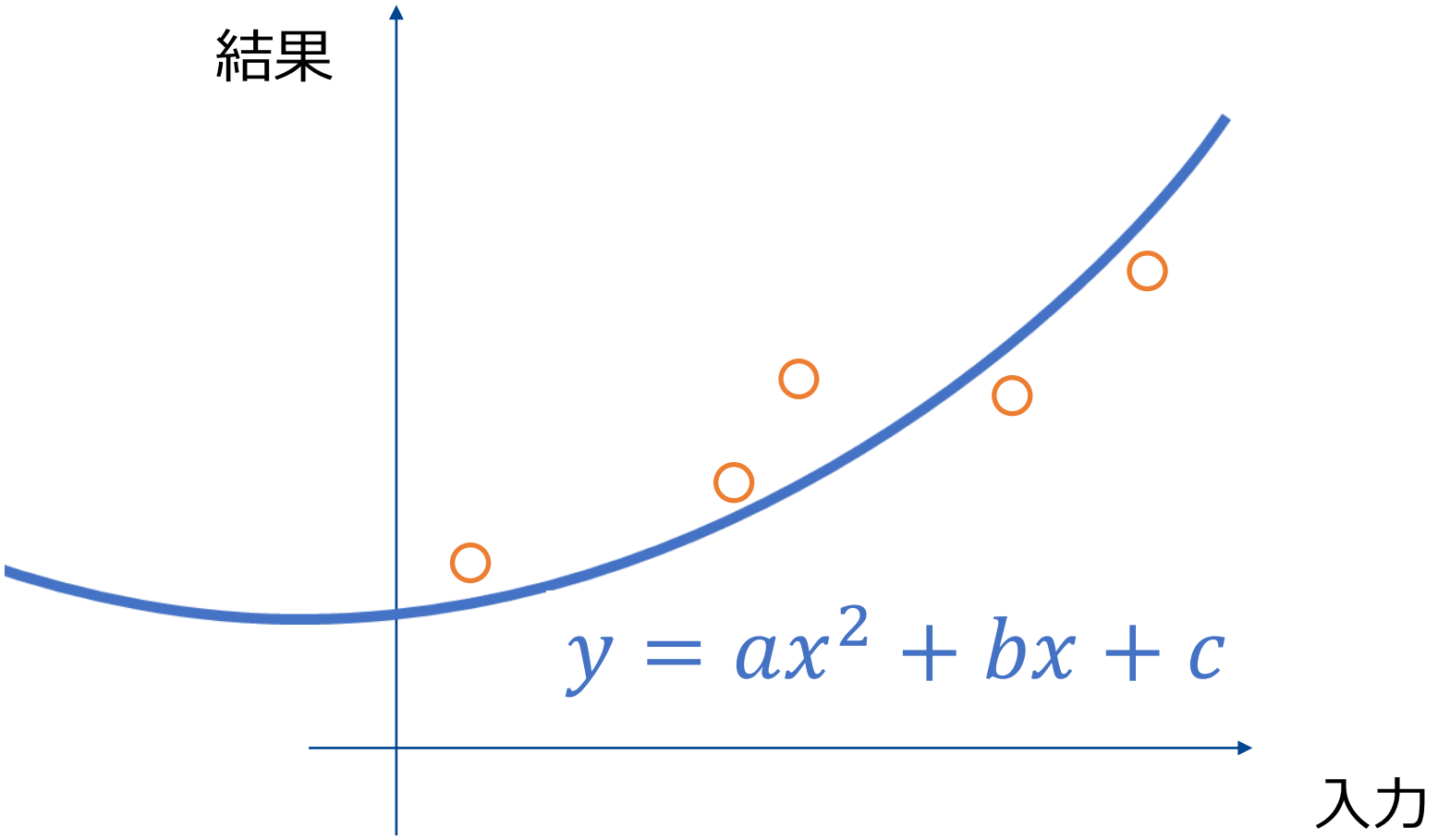
余談：なんで「重」回帰？ 何か重たいのか？

- 英語では Multiple regression analysis
  - このmultipleを「重」と訳した
  - Regression analysis ＝ 回帰分析
- Multiple＝「複数のものを(同時に)」という意味合いか
- というわけで「何かが重たい」わけではない

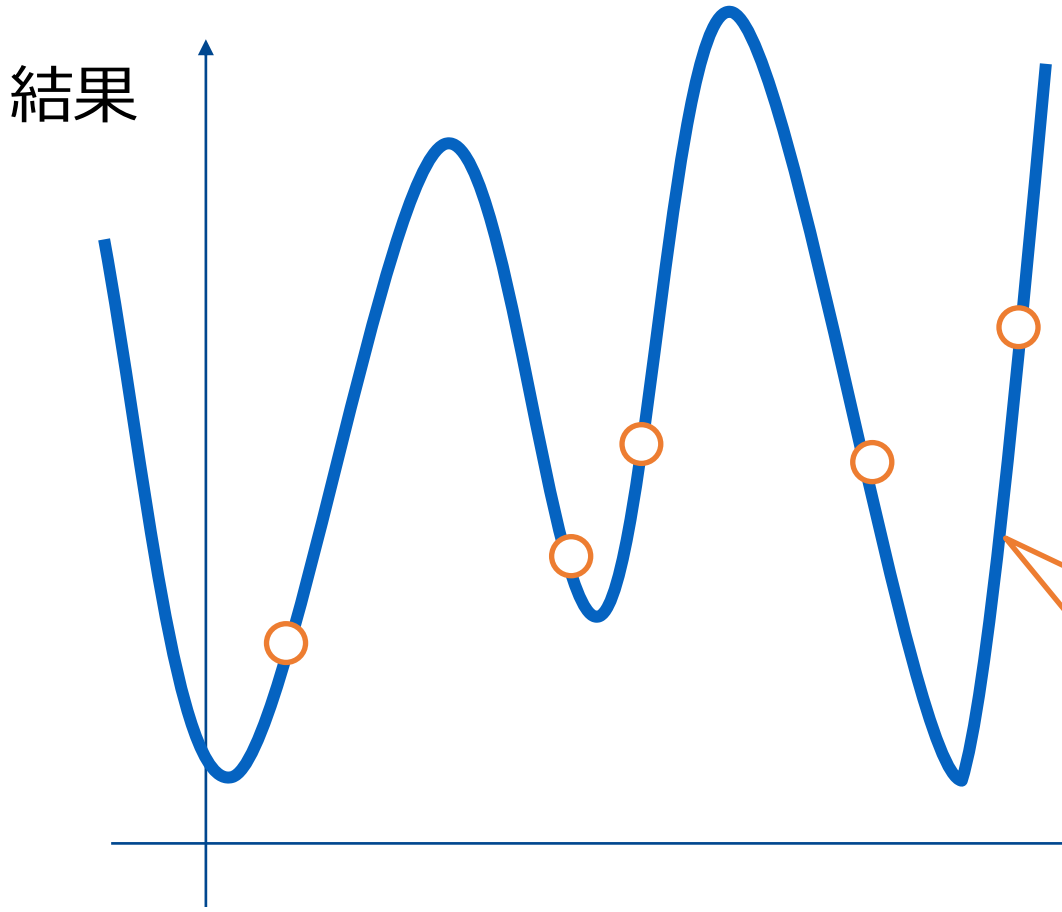
より複雑なモデルの利用

多項式モデル

回帰分析は「線形モデル」だけじゃない：2次関数モデル



回帰分析は「線形モデル」だけじゃない：N次多項式モデル



全データを通過
→誤差ゼロ

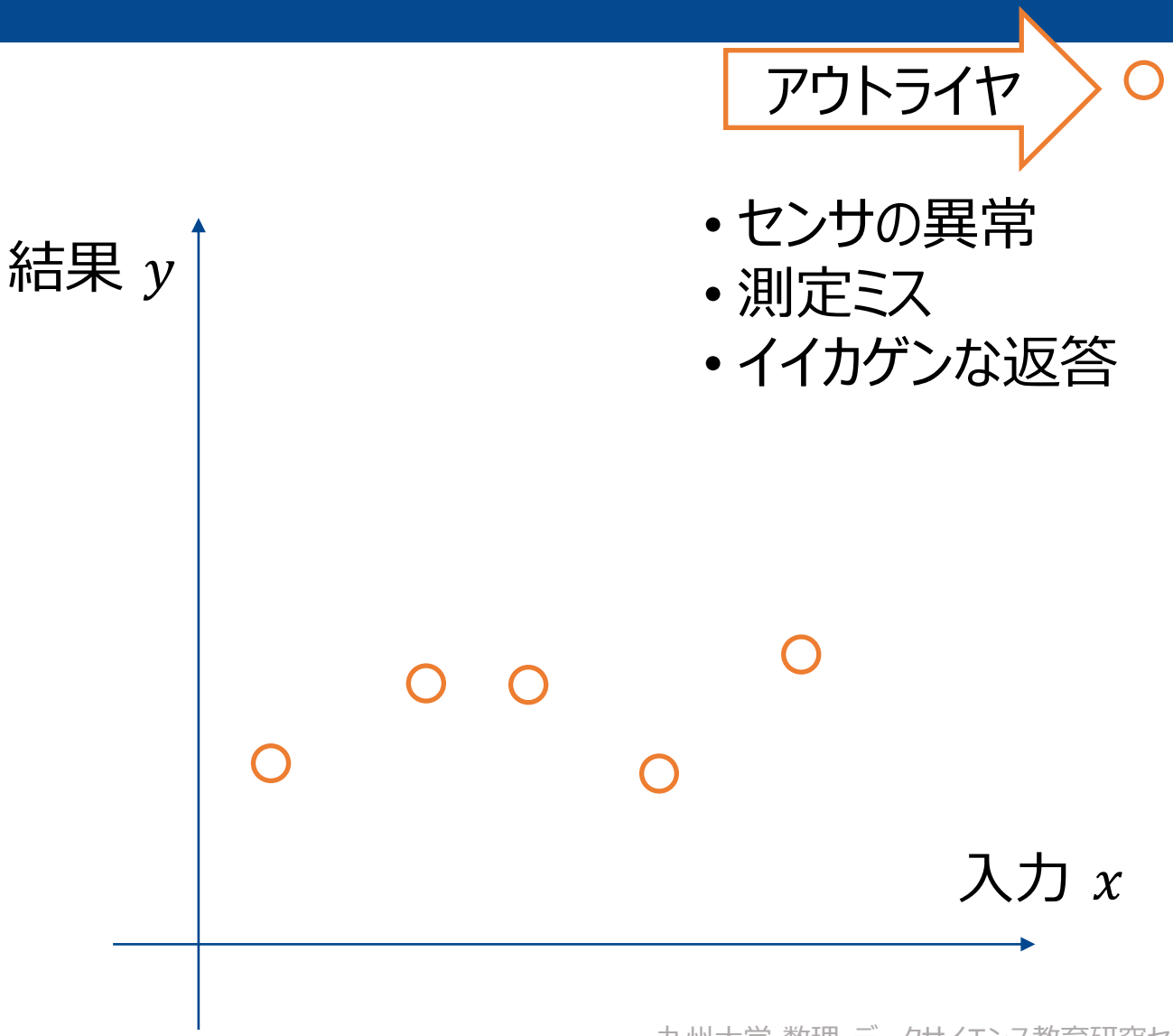
でも…これOK？
(この点，後述)

$$y = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

回帰分析で注意したい点

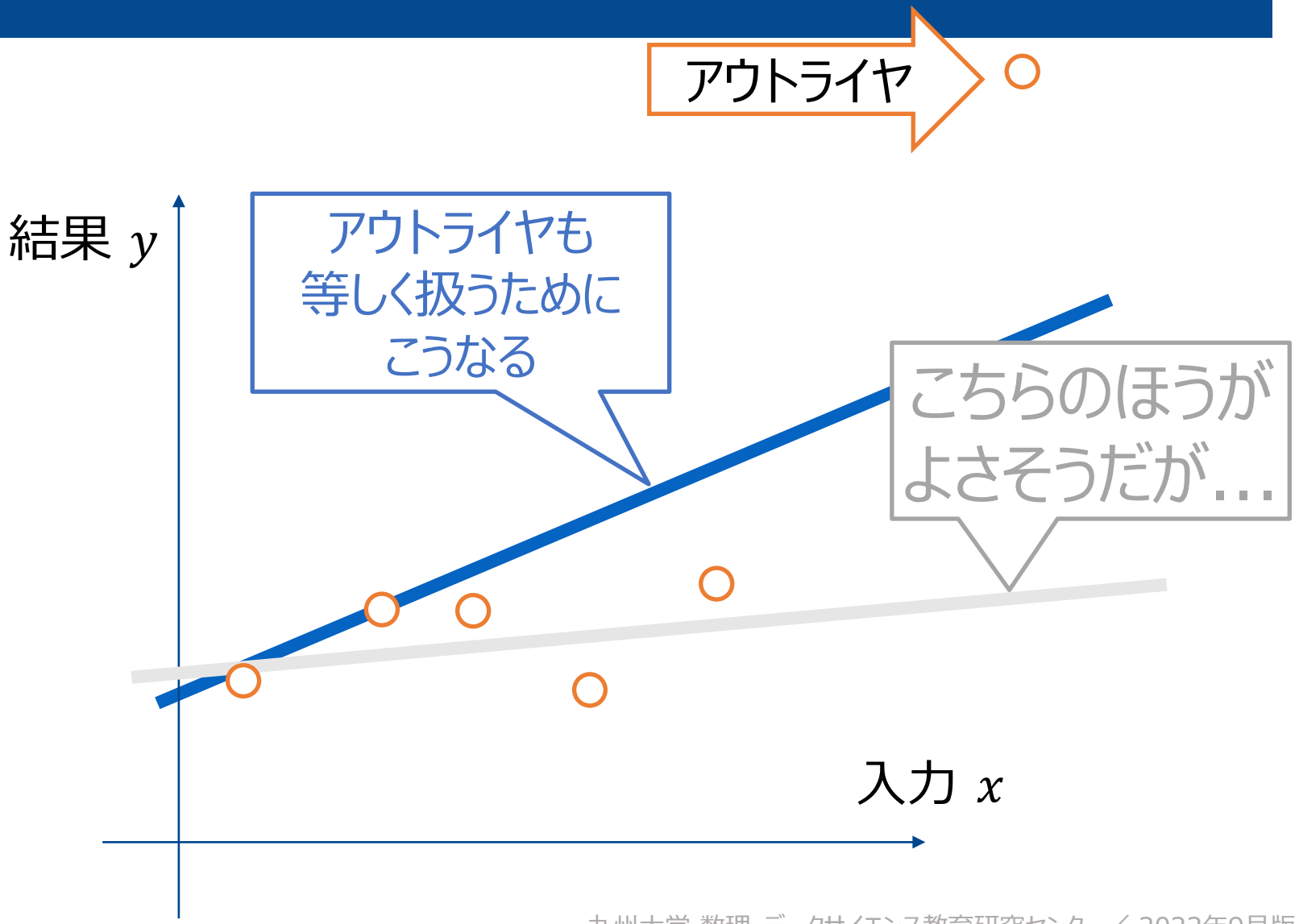
アウトライヤとオーバーフィット

アウトライヤ(はずれ値)の悪影響(1/3)



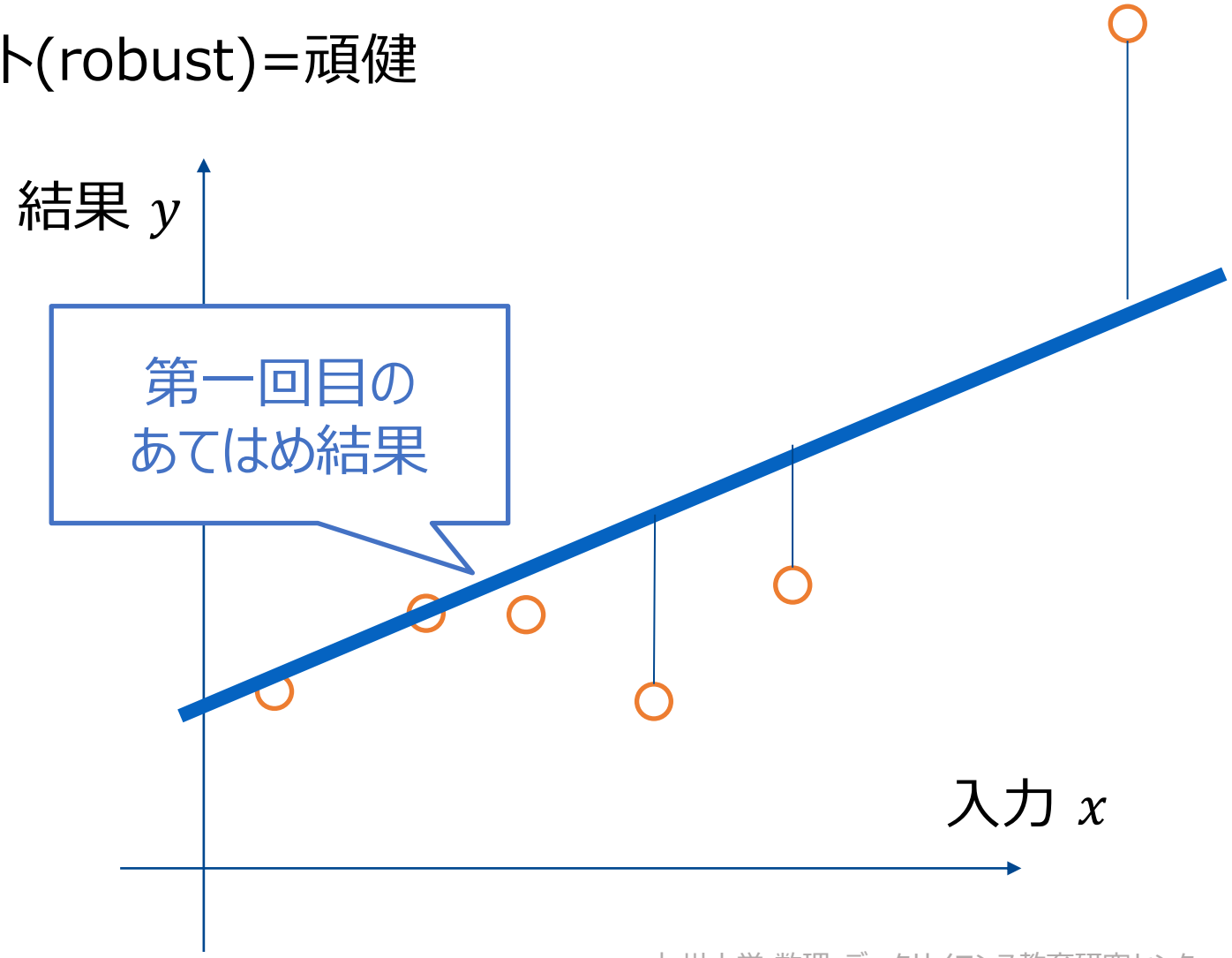
- センサの異常
- 測定ミス
- イイカゲンな返答

アウトライヤ(はずれ値)の悪影響(2/3)

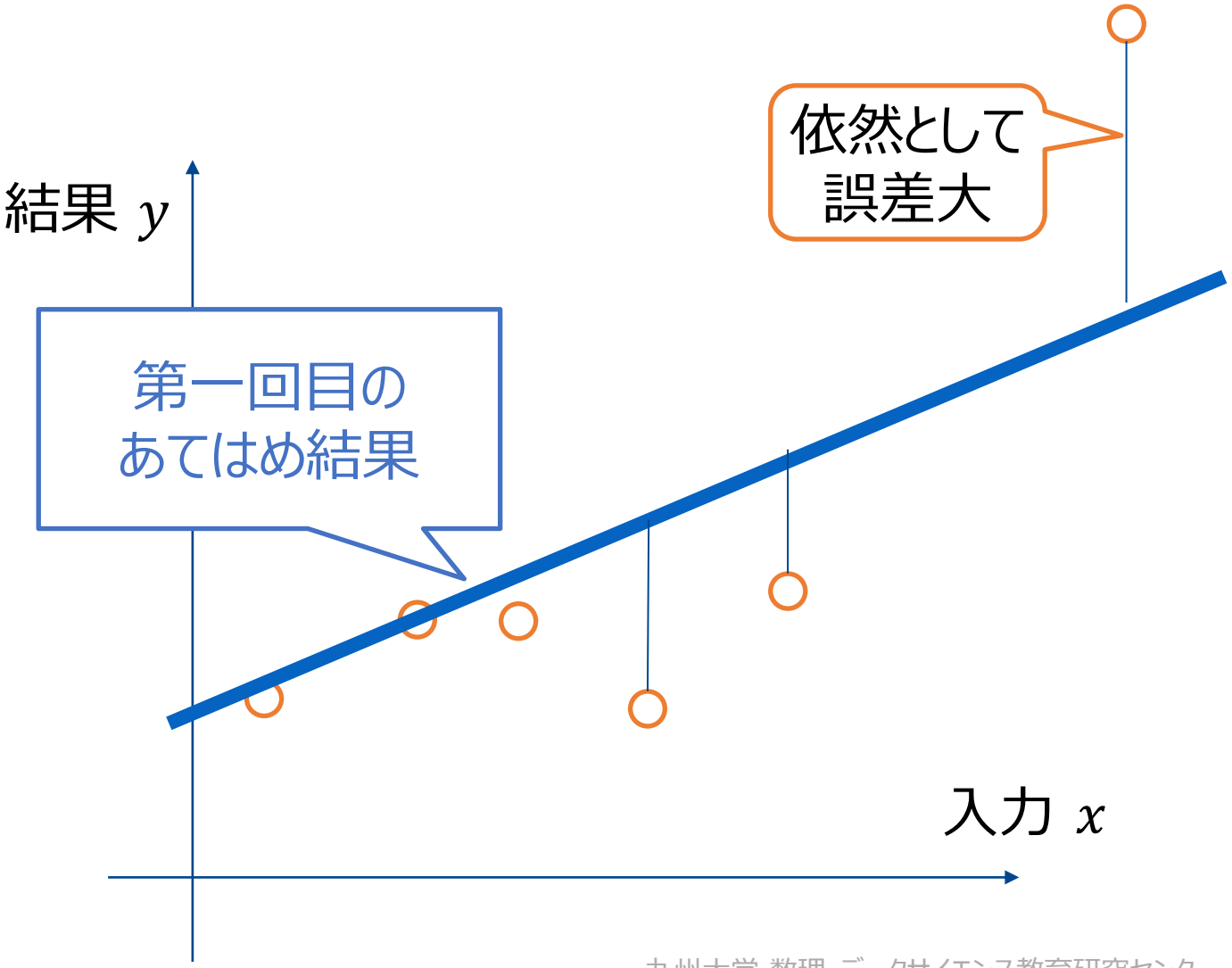


アウトライヤ(はずれ値)の悪影響(3/3)
対策：「ロバスト最小二乗法」

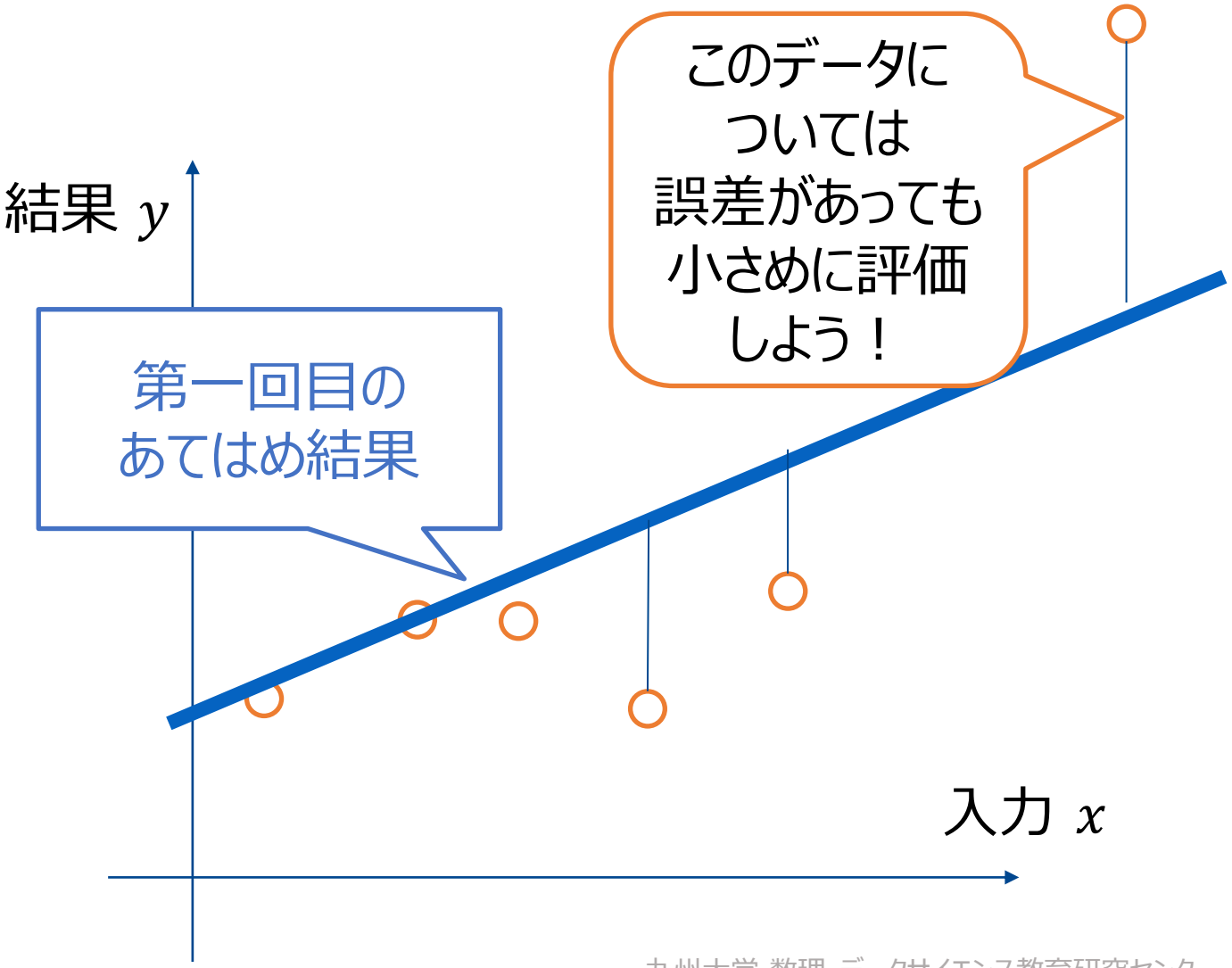
- ロバスト(robust)＝頑健



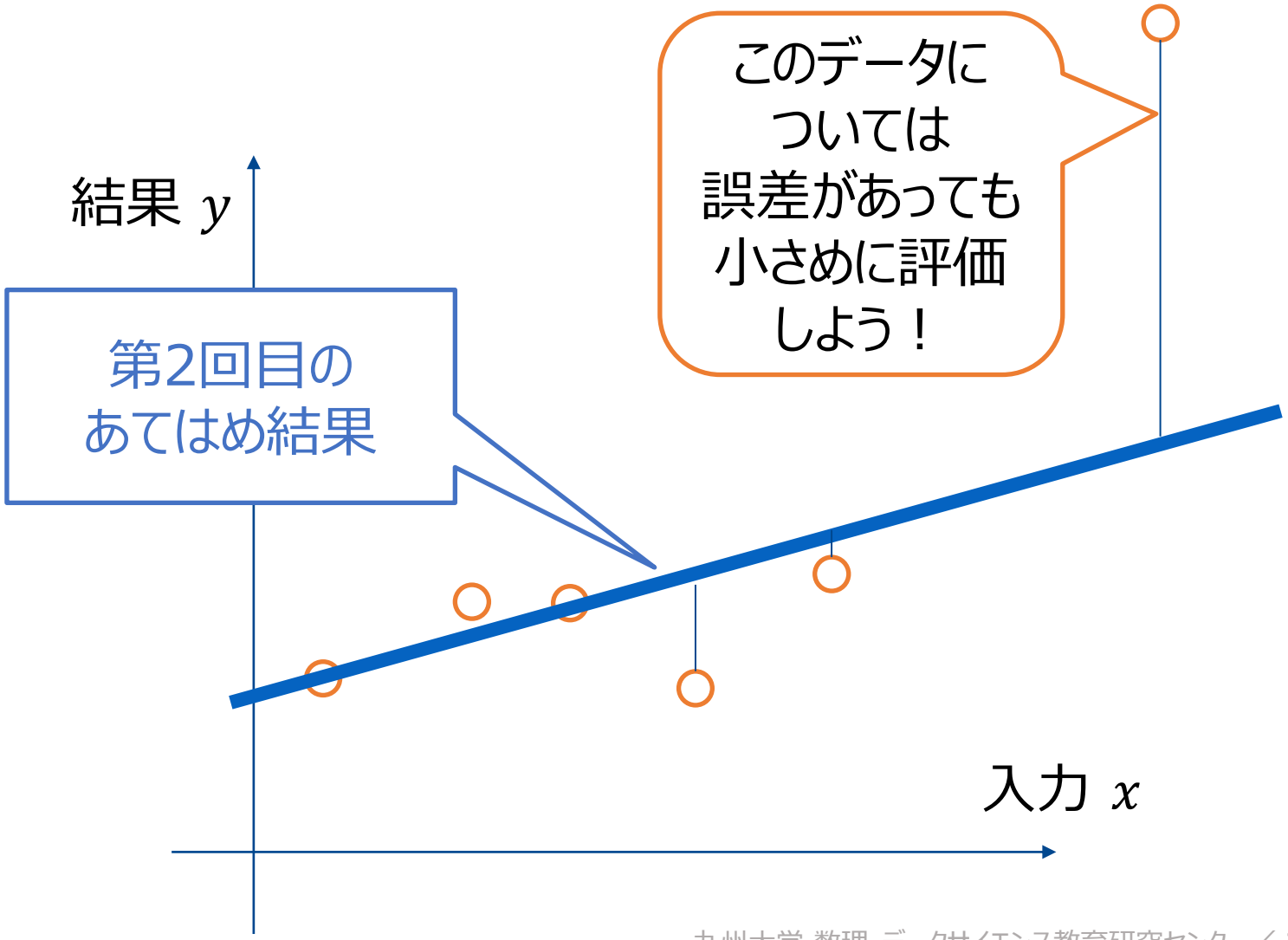
アウトライヤ(はずれ値)の悪影響(3/3)
対策：「ロバスト最小二乗法」



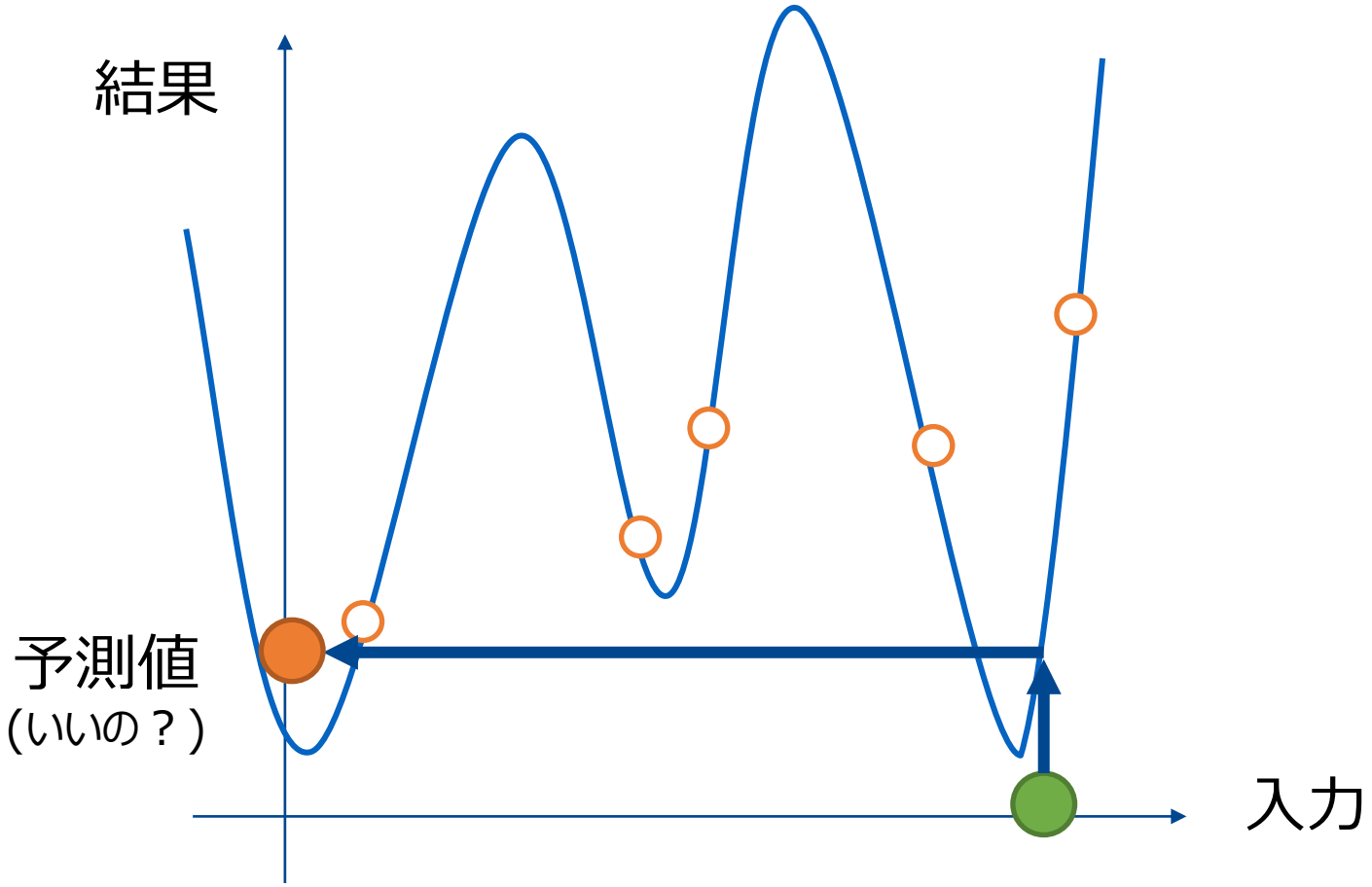
アウトライヤ(はずれ値)の悪影響(3/3)
対策：「ロバスト最小二乗法」



アウトライヤ(はずれ値)の悪影響(3/3)
対策：「ロバスト最小二乗法」



オーバーフィッテイングと汎化能力(1/3)

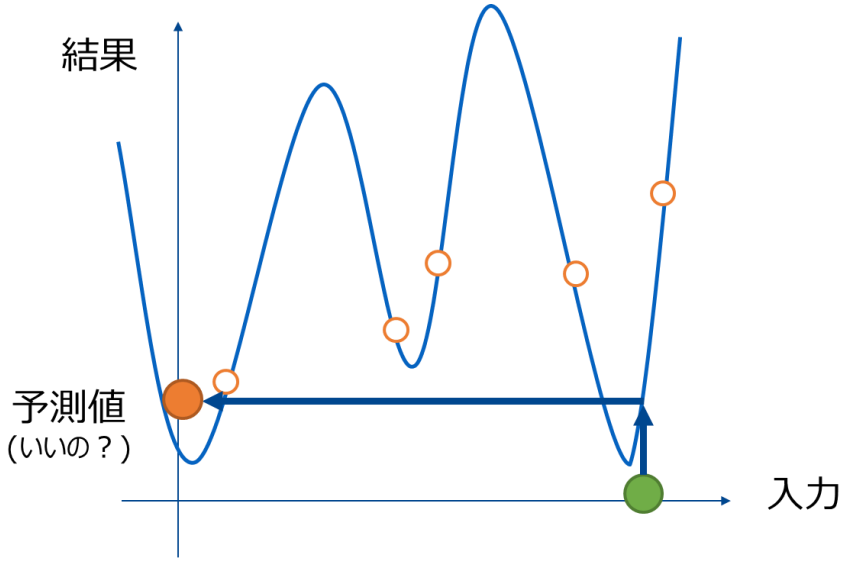


事前に与えられたデータにとってはハッピーだが
未知データにとっては使い物にならない(オーバーフィット)

オーバーフィッテイングと汎化能力(2/3)

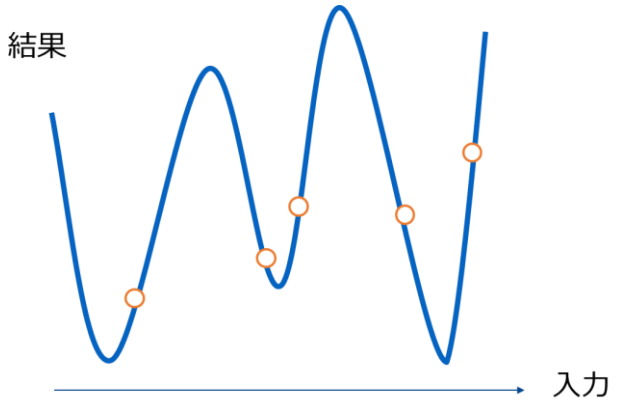
- 汎化能力(generalization)とは？
  - 回帰曲線を求めるときには使わなかったデータについても，ちゃんと妥当な予測結果が得られるか？

- だから下の例は「汎化能力」がない例



オーバーフィッティングと汎化能力(3/3)

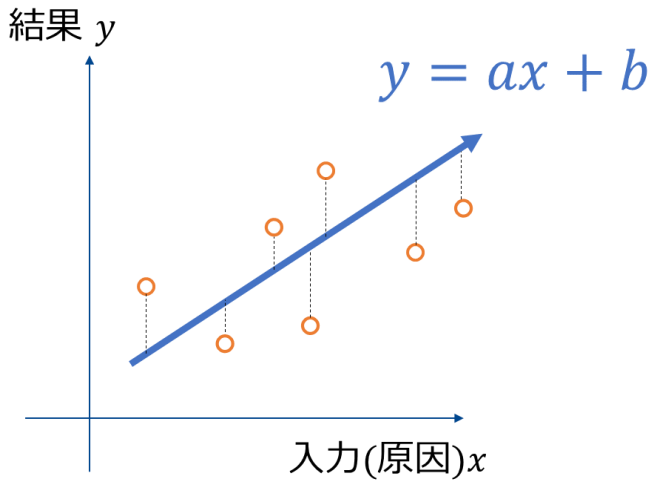
高次多項式モデル



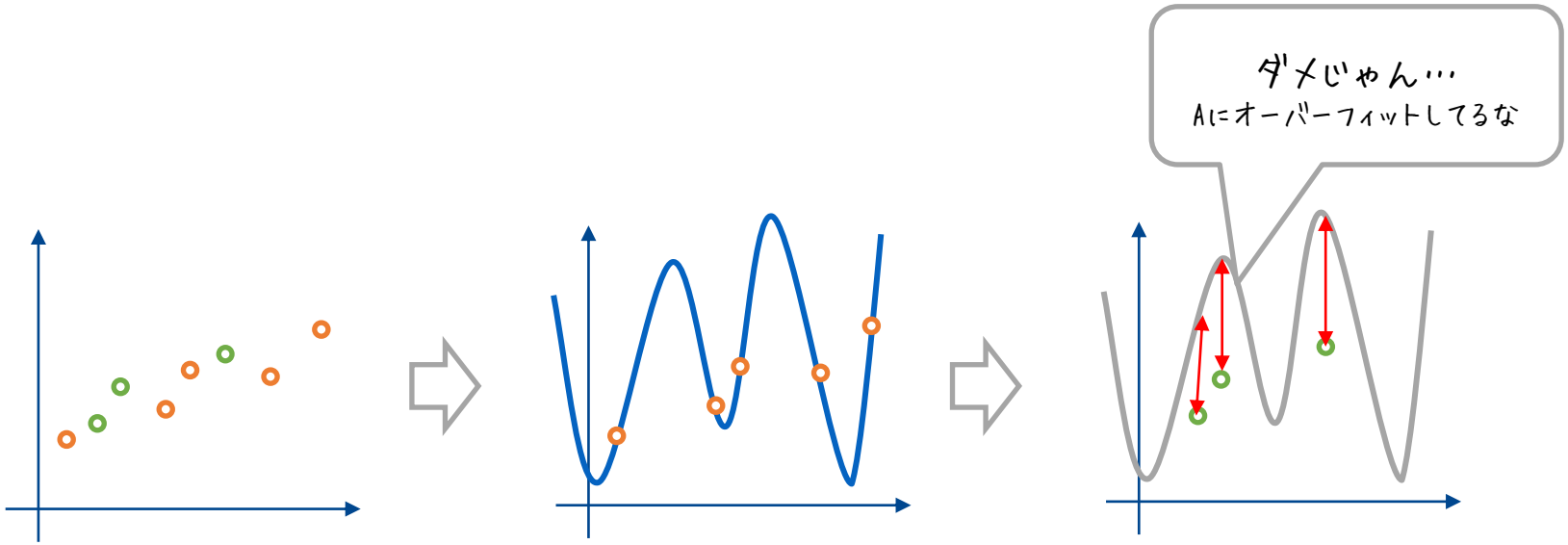
$$y = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

(良)事前に与えられたデータに
対する誤差小さい
(悪)大量に事前データがないと
回帰結果に汎化能力がない恐れ

線形モデル



(悪)事前に与えられたデータに
対する誤差大
(良) 事前データ数が少なくても
ひどいオーバーフィッティングは少ない

オーバーフィッティングやアウトライヤの影響を見つける方法：バリデーション(validation)

1. 事前に収集されたデータ集合をランダムにA，Bに分ける
2. 集合Aの中のデータを使って，モデルフィッティングを行う
3. 求まったモデルを使い，集合Bのデータがどれぐらいきちんと予測できるかを評価する
   - ※集合Bのデータも正解値はわかっている