社会人向け講座「データ分析者養成コース」

機械学習技術とその数理基盤
(第１部)

鈴木大慈
東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻
理研AIP

2018年4月4日/4月18日

自己紹介

- **現職：**
  - 東京大学大学院情報理工学系研究科
    数理情報学専攻　准教授
  - 理研AIP「深層学習理論チーム」チームリーダー

- **専門：**
  - 機械学習の数理
    - 汎化誤差理論
    - 確率的最適化
  - 数理統計学
    - 高次元統計
    - ノンパラメトリック法

アウトライン

一日目

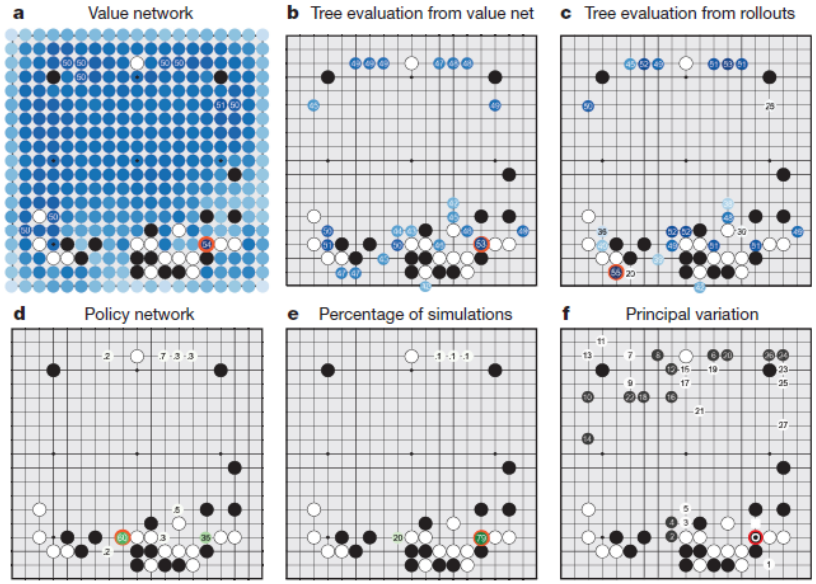
- 機械学習の歴史
- 機械学習の考え方
- モデルと損失
- 過学習の問題
  - 正則化
  - 変数選択
- スパース高次元データ解析 (時間があれば)

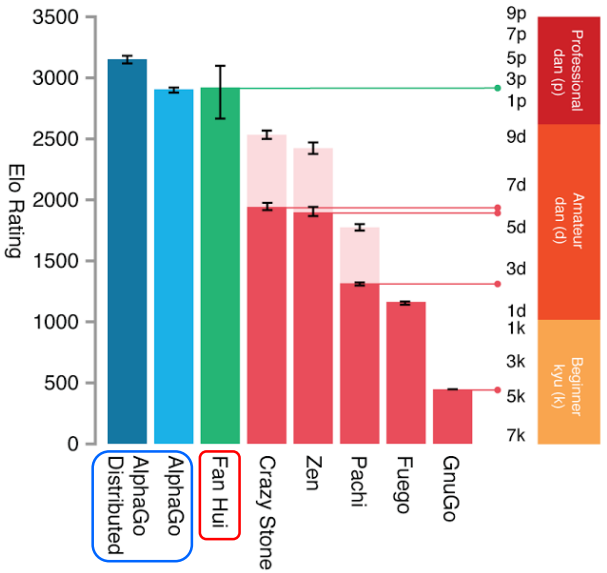
二日目

- 低ランク行列/テンソル分解
- 深層学習
  - モデル
  - 応用
  - 理論

AlphaGo/Alpha Zero

深層学習+強化学習+モンテカルロ木探索+自己対戦

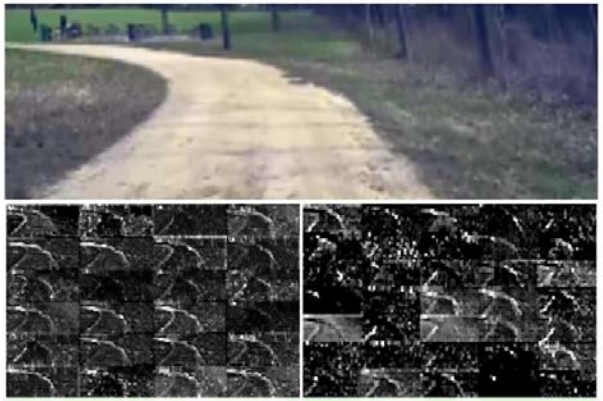




2015年10月5〜9日欧州覇者Fan Hui (2段) に5-0で勝利
2016年3月9〜15日イ・セドルと対局し4-1で勝利
2017年5月23〜27日柯潔と対局し3-0で勝利
2017年12月 AlphaZeroが4時間の自己対戦のみでelmo, AlphaGo Zeroを上回る.

[Silver et al. (Google Deep Mind): Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search, Nature, 529, 484—489, 2016]

自動運転



詳報：トヨタが頼った謎のAI半導体メーカー

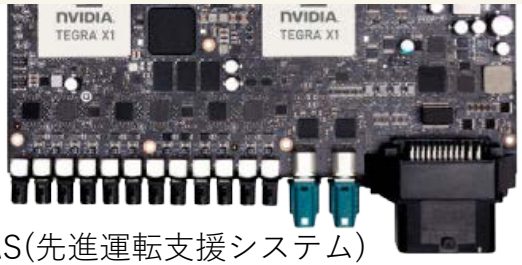
産業秩序が激変、自動車を「操る」のは誰だ

島津 翔　バックナンバー

2017年5月22日（月）

AI（人工知能）による産業構造の激変が始まった。

売り上げ規模など従来の序列は全く関係ない。対応できない既存勢力は没落する。強固なピラミッドを持つ自動車産業とて安泰ではない。AIによる自動運転の実用化が、激変の号砲



ADAS(先進運転支援システム)

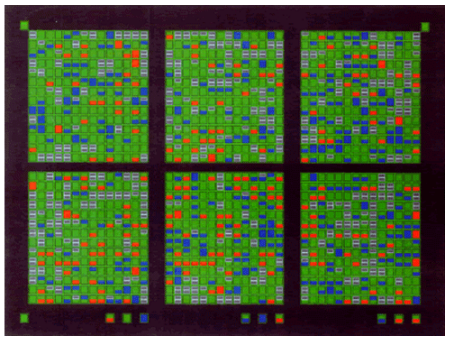
[End to End Learning for Self-Driving Cars, Nvidia 2016]

身近にあふれる機械学習

検索エンジン

推薦システム

遺伝子データ解析



音声認識

機械学習プラットフォーム

Google Cloud Platform

Microsoft Azure

amazon web services™

人工知能と機械学習

人工知能

本日の様相
「人工知能」≒「機械学習」

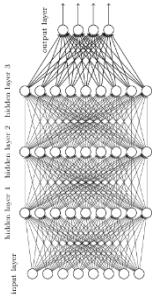
自分で問題設定ができ，
その解決もできる．

“汎用人工知能”

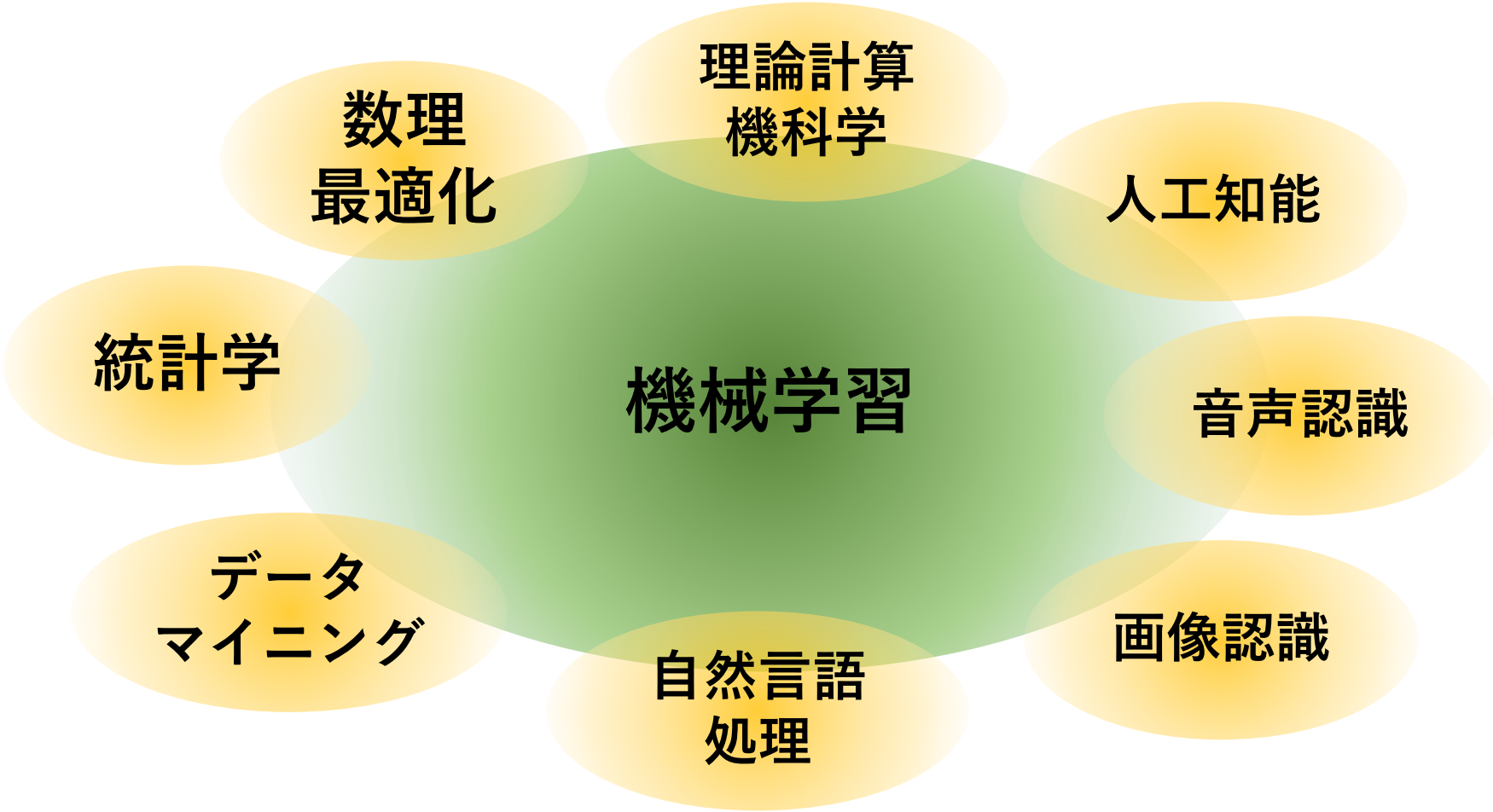
機械学習
統計的アプローチ

SVM
トピックモデル
スパース学習
テンソル学習
…

深層学習



機械学習の立ち位置



さまざまな分野の複合領域

機械学習コミュニティの実体

機械学習の主戦場は「**国際会議**」

NIPS (Neural Information Processing Systems)
ICML (International Conference of Machine Learning)
COLT (Conference of Learning Theory)
ICLR (International Conference on Learning Representations)
AISTATS, UAI, ECML, …

- 全て査読あり：ダブルブラインド，採択率20～25%
  - NIPS2016 (568/2500, 22.7%), ICML2016 (322/1327, 24.3%)
  - ストーリー＋理論＋実験＋読みやすさ
- これらの会議に論文が通っていることが重要
- 各国際会議はワークショップが併設

- 速報性
- テーマの変遷が速い
- 顔が見える

ICML2016@NYC

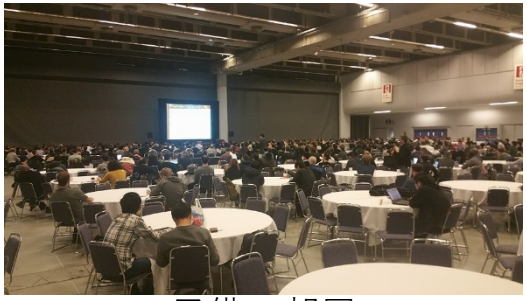

NIPS2015@Montreal

http://www.tml.cs.uni-tuebingen.de/team/luxburg/misc/nips2016/index.php

NIPS2015の様子

・初日はチュートリアル
・３日間の本会議
・２日間のワークショップ

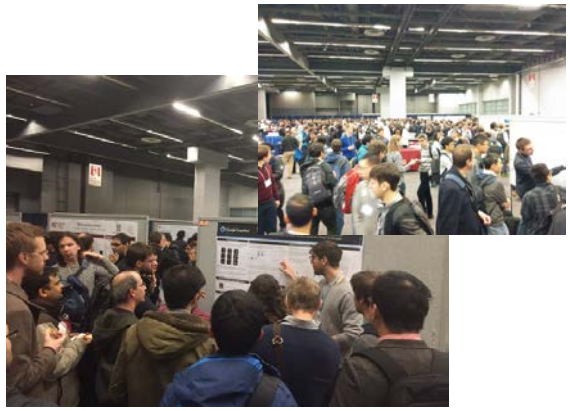
Deep learning tutorial



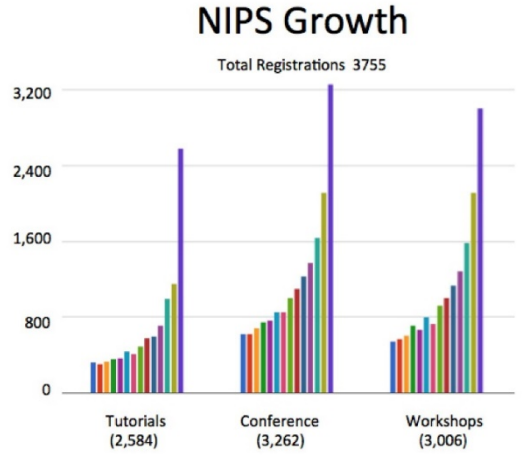
予備の部屋
入れなかった人たちはこちらへ

・本会議：
  - 朝から夕方までシングルトラック：招待講演＋オーラル発表(全体の3%!)
  - 夜はポスター（ほとんどの論文）：午後７時から**<u>午後１２時</u>**まで×**四日間.**
・ワークショップ：
  - 40種類のワークショップ＝20種類×２日間
  - Deep learning，最適化，ビッグデータ，機械学習ソフトウェア，…
・企業ブース多数，毎夜各企業のパーティーが開催（リクルーティング）

メイン会場
(2000人＋α)

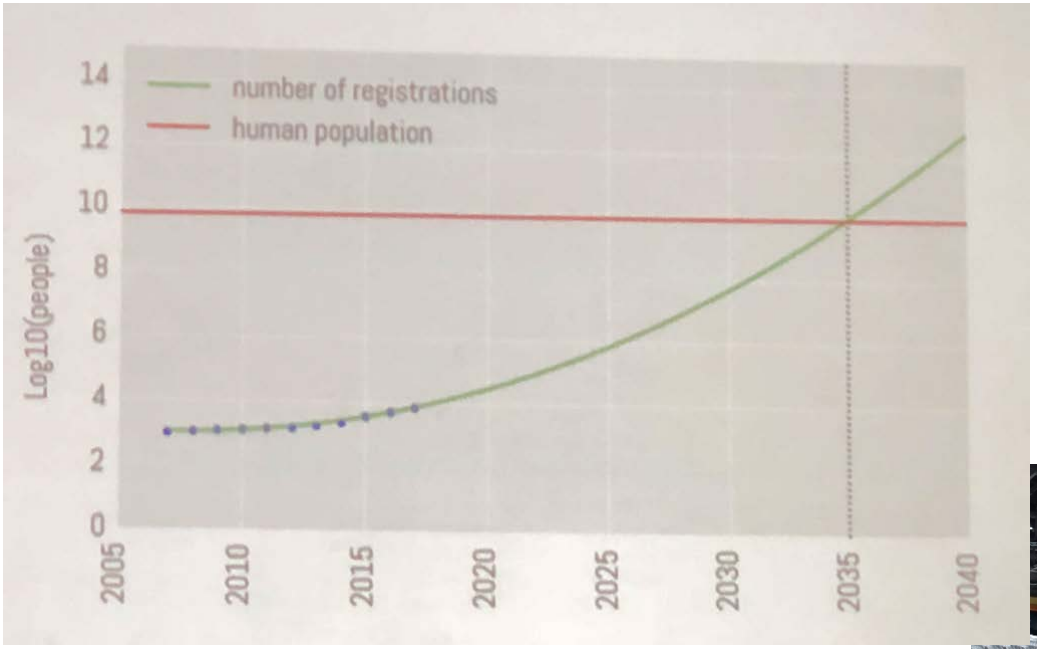


ポスター発表



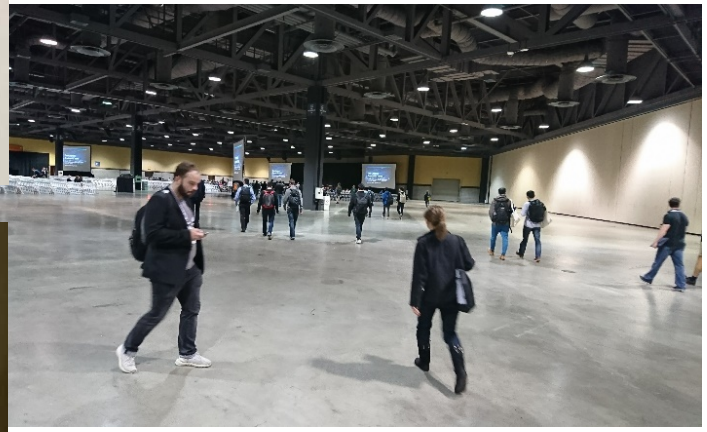
参加者は約4000人，2年で約2倍

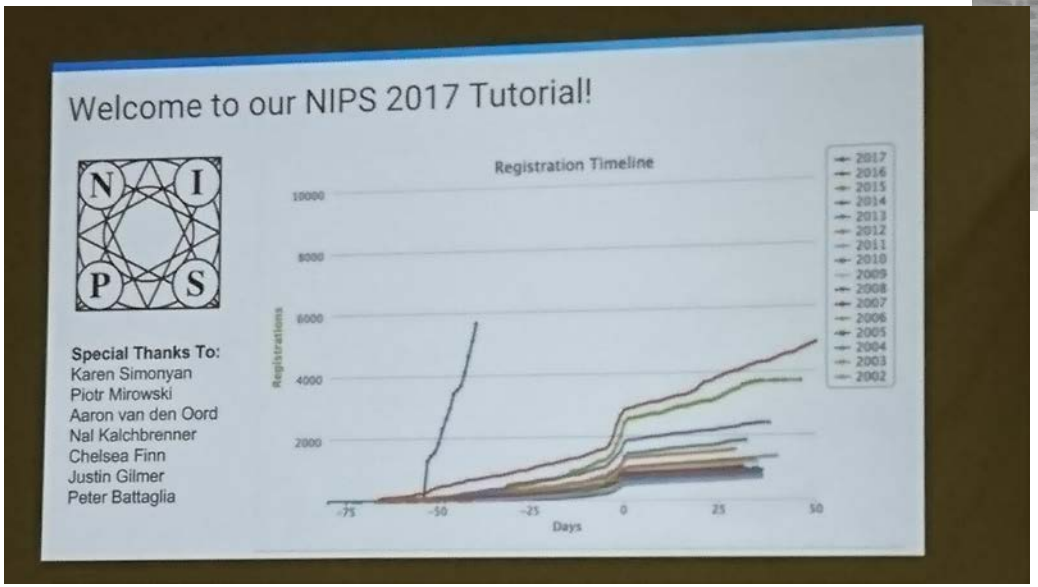
NIPS2017の状況



参加者の増加

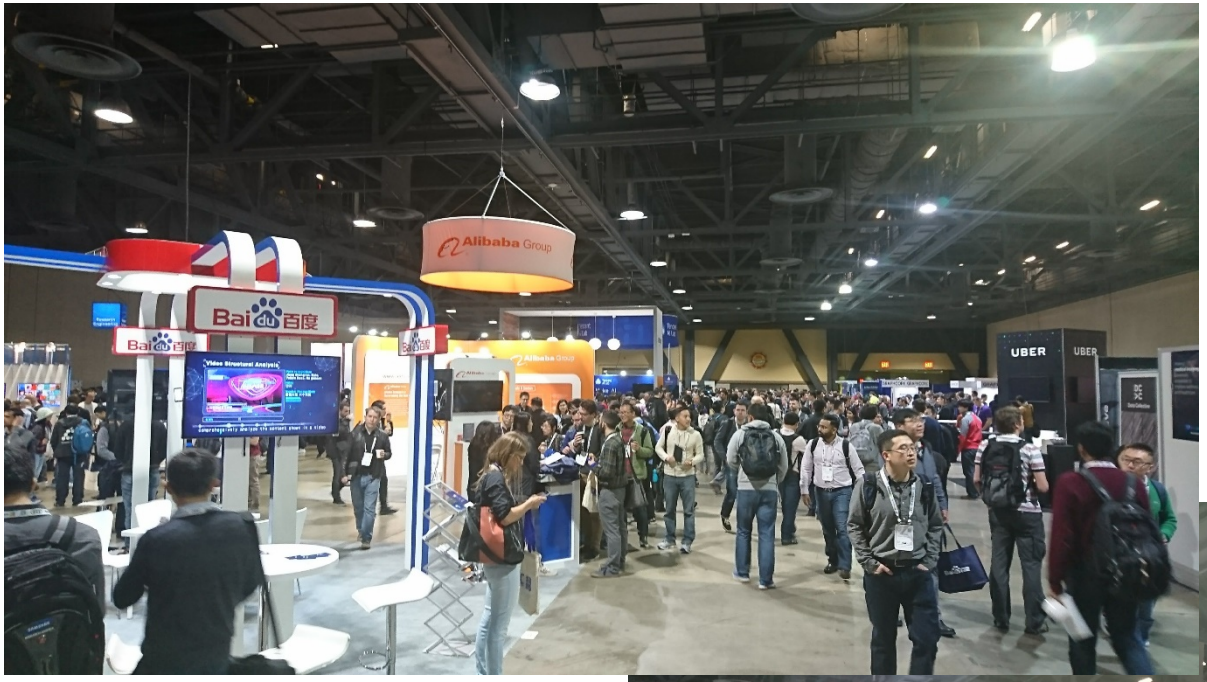
会場の様子

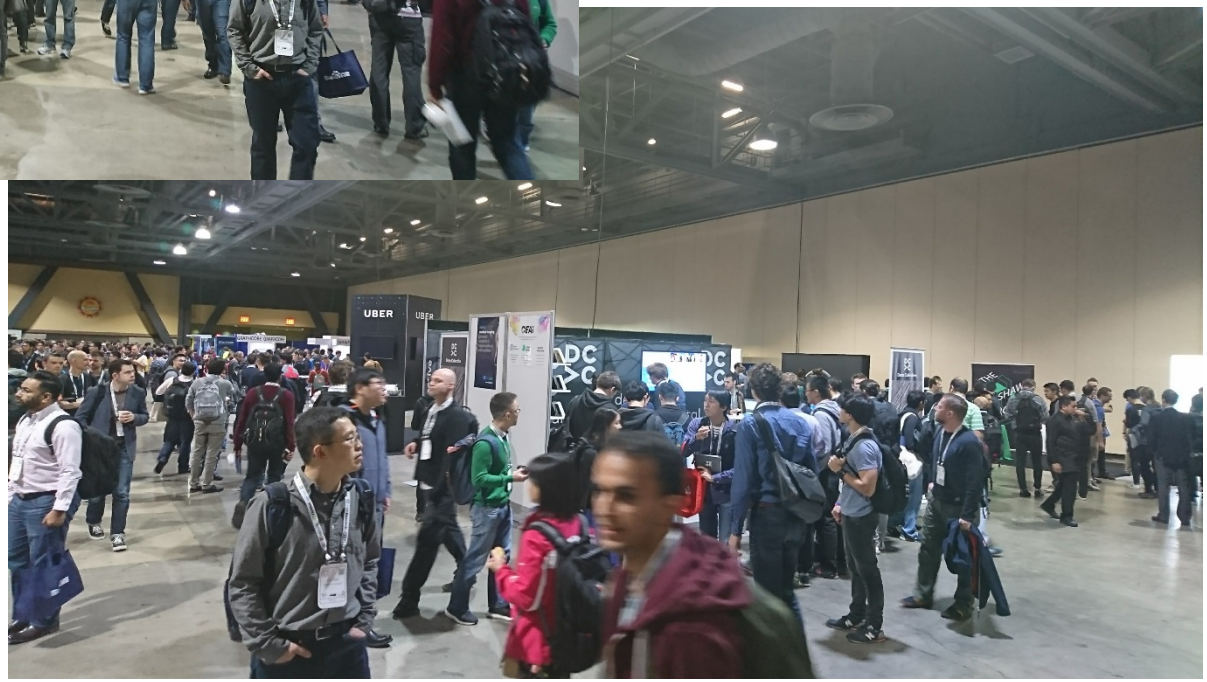




参加者登録数の遷移
２週間で売り切れ

企業ブースの様子（NIPS2017）





一方，日本は…？

日本経済新聞
2018年2月12日（月）

真相深層 **ＡＩ学会で人材争奪戦　米中韓などＩＴ70社以上集結**

日本企業は「不戦敗」

2017/12/21付 | 日本経済新聞　朝刊

人工知能（ＡＩ）への対応が世界の企業の競争軸となる中、人材の取り合いが激しさを増している。米国で今月開いたＡＩの国際学会は採用の場としての色合いが強まったが、日本企業の存在感はゼロに近い。未来の技術の土台づくりに向けた人材獲得で日本の「不戦敗」が始まっていないか。

７年で参加６倍

「デモンストレーション？　そんなものは無いね」。４日からロサンゼルスで開いたＡＩ学会「ＮＩＰＳ（ニューラル・インフォメ…

周辺分野の国際会議

- データマイニング
  KDD，ICDM，WWW，WISDM，SIGIR，SDM
- コンピュータビジョン
  CVPR，ICCV，ECCV
- 自然言語処理
  ACL，NAACL，EMNLP，COLING
- 人工知能
  IJCAI，AAAI
- 理論計算機科学
  STOC，FOCS，SODA
- データベース
  VLDB，ICDE

※機械学習に関係の深い統計学と数理(連続)最適化はジャーナル文化

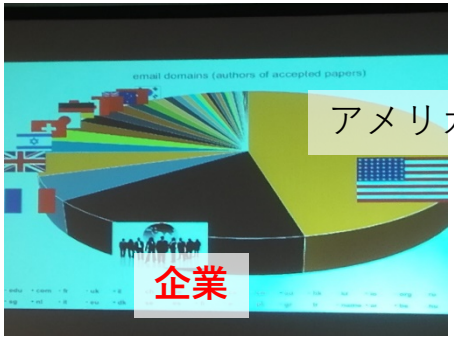
人の出入りと重複が激しい
会議文化としての共通点がある

企業との関係

- 多くの企業が論文を投稿/採録.
  Google, Facebook, Microsoft, Yahoo, Amazon, Baidu, …

例： NIPS2017に採択された論文中約30本に
Deep mindの著者

ICML2016採択比率



- 国際会議のスポンサー
  - 会議はリクルーティングの場でもある.
- 大学との共同研究，寄付
- インターン多数
  - 学生：実データを用いた研究＋経歴＋給料(月50万円～)
  - 企業：大学の優秀な学生と研究ができる．有名研究室とのコネ.
- 公開ライブラリ，公開データ
- 機械学習プラットフォーム

→ 良い研究をすることは企業のブランディングにとっても重要.
できるだけ若く優秀な研究者・開発者を雇用したい.

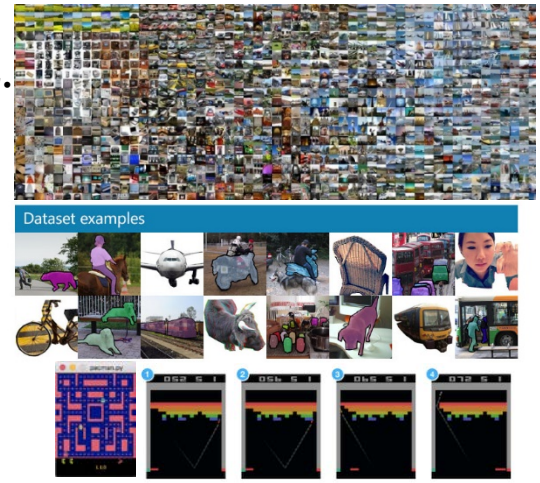
オープンデータ/オープンソース

オープンデータ

公開されているデータが多く，比較がしやすい．

古
- UCIリポジトリ：３５１データセット．回帰，判別，クラスタリングなど．数年前までの定番データセット．
- MNISTデータセット：文字認識データセット．
- Caltech101データセット：101ラベル．一般画像認識．
- 20 Newsgroups：自然言語処理データセット

新
- ImageNet：約1400万枚の画像．毎年コンペ．
- COCOデータセット：セグメンテーションなど．
- Yahoo Flickr Creative Commons 100M：画像+タグ
- OpenAI Gym:強化学習開発プラットフォーム



オープンソース：無料で使える機械学習ライブラリ

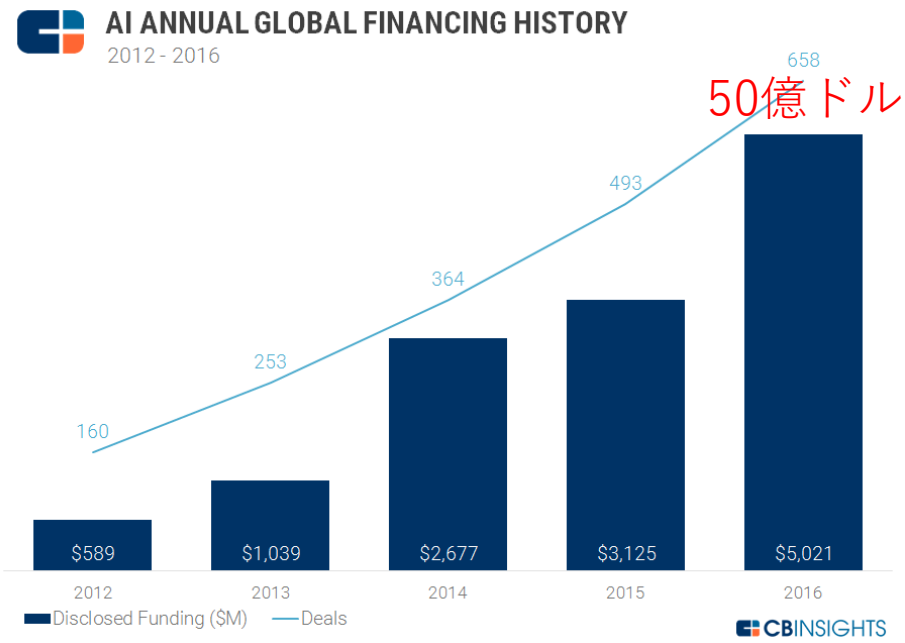
- scikit-learn for python
- LibSVM
- Spark MLlib

産学双方からの貢献

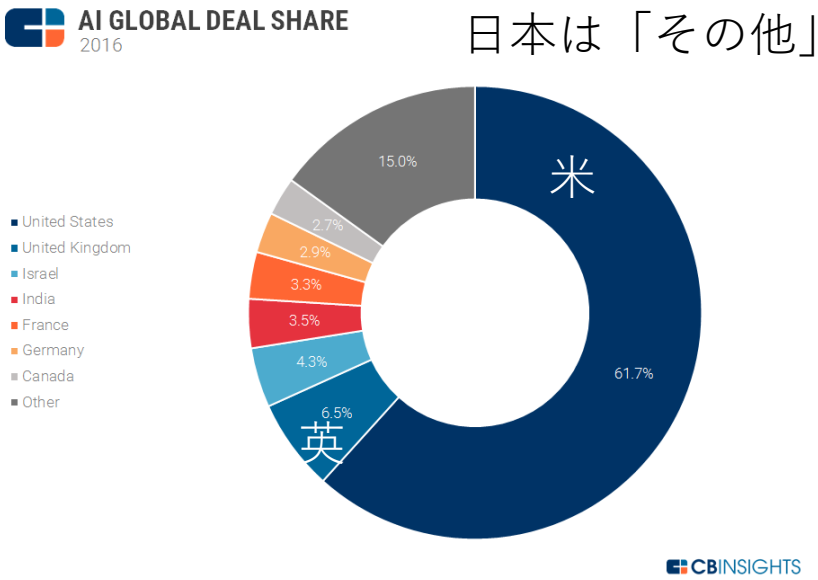
深層学習用ライブラリ

- TensorFlow (Google)
- MXNet (Microsoft)
- Caffe (UC Berkley)
- Theano (U. of Montreal)
- Torch (R. Collobert@Facebookら)
- Chainer (Preferred Networks)

人工知能投資額



世界のAI投資額



国別割合 (2016年)

[CB Insights, “The 2016 AI Recap: Startups See Record High In Deals And Funding ”]

電機各社、AIに3年で3000億円投資

2016/11/29 1:30 | 日本経済新聞 電子版

共有 保存 その他

日本の電機各社が人工知能（AI）の技術開発投資を積み増す。富士通は2018年度までに開発費などに最大1千億円を投じる。東芝も自動運転技術に活用する。大手8社のAIに向かう資金は集計できるだけでも今後3年間で3千億円程度と過去3年の数倍になる。ただIBMをはじめとする米IT（情報技術）大手がAIを活用したサービスで先行しており、日本勢は…れる。

AIはコールセンターの代替や…

日本経済新聞電子版

3年で3000億円

10億ドル出資

2015年12月13…

イーロン・マスク氏ら、人類に益する人工知能を目指…「OpenAI」立ち上げ　アラン・ケイ氏も参加

ピーター・ティール氏やイーロン・マスク氏などのPayPalマフィアの面々やY Combinator…ルトマン社長らが、人工知能（AI）を人類への脅威ではなく、人類に益する存在に発展させる…とした非営利の研究機関「OpenAI」を設立した。起業家らやAWS、Infosysなどが総額10億ドルを投じる。

[佐藤由紀子，ITmedia]

ITmediaエンタープライズ

ビッグデータ　ビッグデータ記事一覧へ

[市場動向]

トヨタ、シリコンバレーにAI技術の研究開発会社を設立へ、5年で1200億円投入

2015年11月6日(金)　河原 潤（IT Leaders編集委員／クラウド&データセンター完全ガイド編集長）

いいね！ シェア ツイート B! Bookmark G+ Pocket

PR ★10/20開催★レッドハットOSS最新事例が多数集結！NTTドコモ・NRI他

PR スマートグリッドからM2M/IoTまで　最新情報をメルマガでお届け！

トヨタ自動車は2015年11月6日、人工知能（AI）技術の研究開発拠点として、新会社TOYOTA RESEARCH INSTITUTE, INC（TRI）を、米カリフォルニア州シリコンバレー地区に設立すると発表した。新会社の設立は2016年1月で、今後5年間で約10億ドル（約1200億円）を投入してこの領域に注力する。

IT Leaders

5年で1200億円

日本の人工知能拠点

三省一体となって事業を推進

総務省
脳情報通信融合研究センター
情報通信研究機構

- 脳情報通信
- 音声認識
- 多言語音声翻訳
- 社会知解析
- 革新的ネットワーク

情報通信技術の統合的なプラットフォームの構築

文部科学省
革新知能統合研究センター
理化学研究所

- 基礎研究
- 革新的な科学技術成果の創出
- 次世代の萌芽的な基盤技術の創出
- 大型計算機資源
- 人材育成

卓越した科学技術研究を活用するためのプラットフォームの構築

経済産業省
人工知能研究センター
産業技術総合研究所

- 応用研究、実用化・社会への適用
- 標準的評価手法等の共通基盤技術の整備
- 標準化
- 大規模目的研究

基礎研究を社会実装につなげるセンター

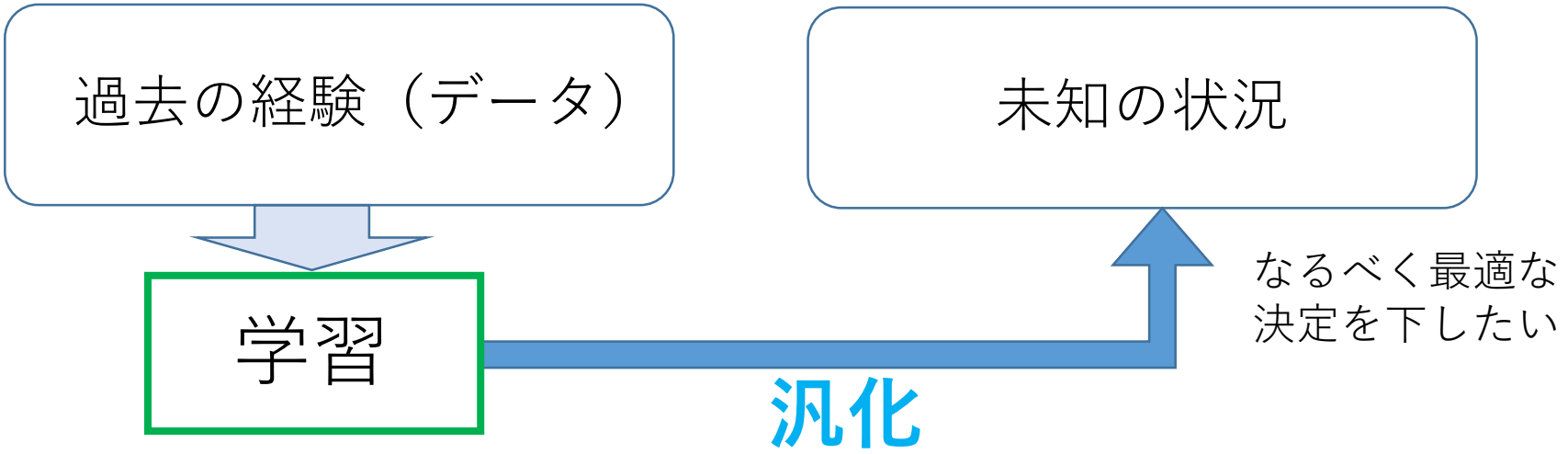
- 機械学習は一つのコア要素
- 人材の育成や基礎研究も重要な課題

第13回科学技術・学術審議会 総合政策特別委員会（H28.6.14）資料1－5より

機械学習の目的

- 人間と同様の知的情報処理を計算機で実現するための技術・手法

Arthur Samuel 「Field of study that gives computers the ability to learn without being explicitly programmed 」（1959）



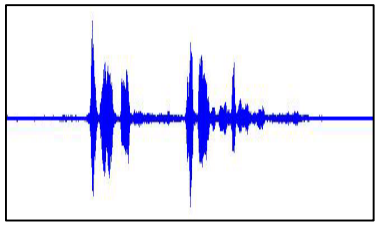
予測と推測

機械学習の活用法

予測

（より機械学習的）

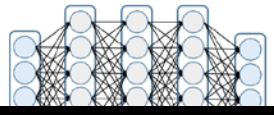
➡ 船



➡ “Hello”

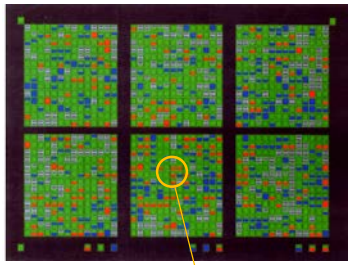
- Outcomeを正しく当てる.
- 解釈よりも予測精度を重視.

例：深層学習



推測

（より数理統計的）

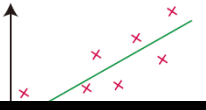


⟷ 肺癌

第〇〇遺伝子が肺癌に寄与
有意水準5%

- 原因の究明.
- 仮説検定は典型例.

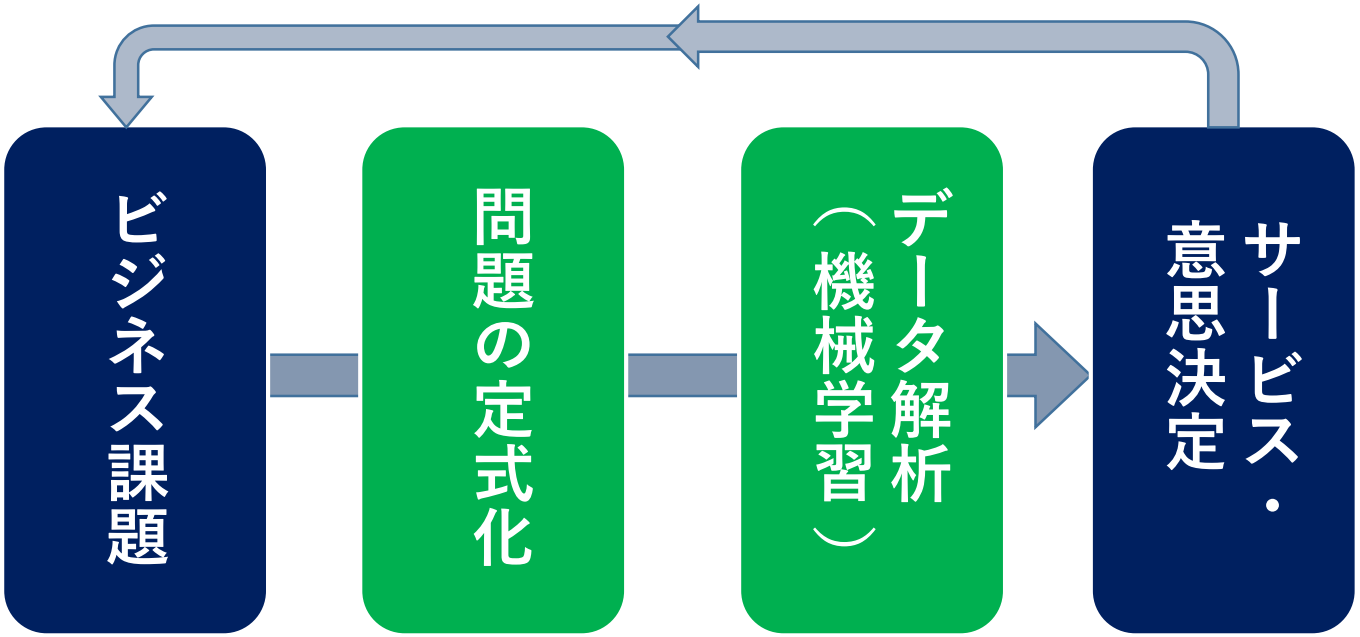
例：線形回帰分析



理論的にはこの二つはある種のトレードオフの関係にある.

機械学習のビジネス利活用

- 目的に応じて手法を選択する必要



Q:収益を上げたい.（予測？推測？）

- 収益を正確に予測？→予測精度が良くてもそれ自体は意味がない.
- どうすれば収益を上げられるか，そのファクターを見つけたい.

各種機械学習手法で何ができるのか？
→仕組み/理論を把握する重要性

現在必要とされる「人工知能人材」像

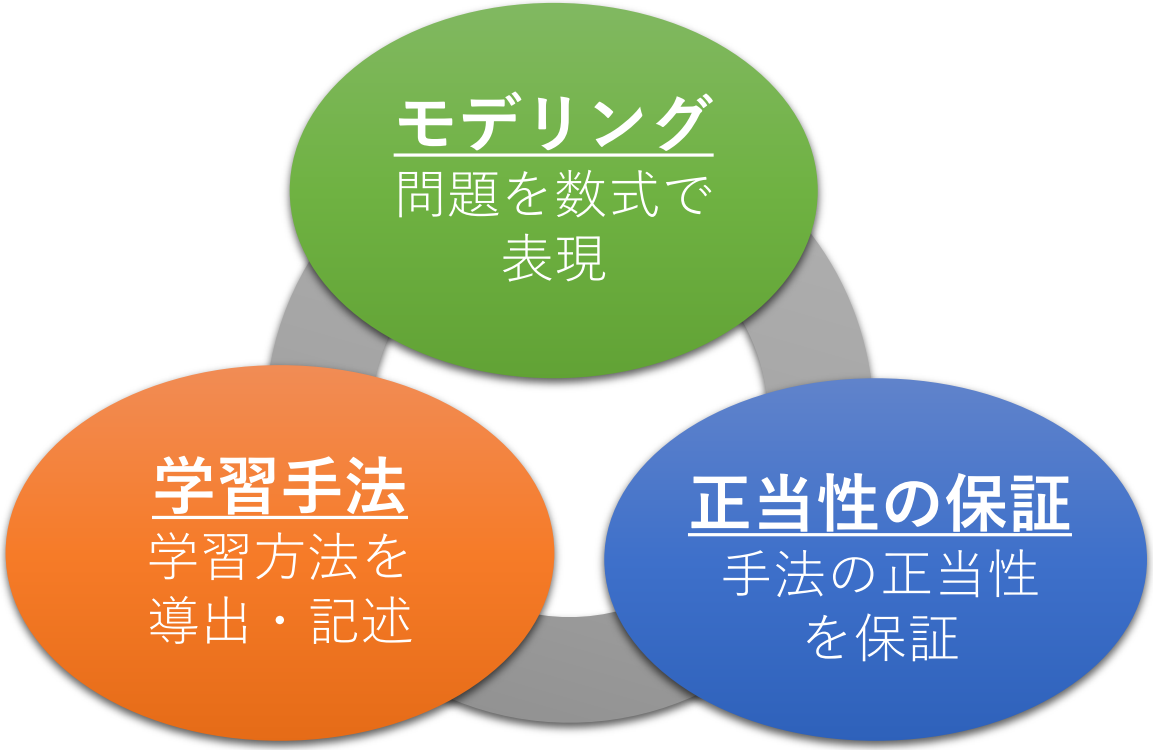
- データサイエンティスト
    - 問題発見能力
    - 問題定式化能力
    - 問題解決能力

- 各種手法の正しい理解と強固な基礎
- 最新情報へのキャッチアップ
    - ➢毎日arXivに最新論文が掲載
    - ➢眉唾な結果もあるので，正しい知識と経験が重要

数理的基礎
×「公式を当てはめる能力」
○「論理的考察力」

機械学習における数学の役割

1. 問題の数学的定式化（モデリング）
2. 手法の導出と記述（アルゴリズム）
3. 正当性の保証（学習理論）



記述言語：数学

- 確率-統計，線形代数，関数解析，最適化理論

機械学習の歴史

機械学習と人工知能の歴史

1946： ENIAC，高い計算能力
フォン・ノイマン「俺の次に頭の良い奴ができた」
1952： A. Samuelによるチェッカーズプログラム

統計的学習

ルールベース

1960年代前半：
ELIZA（イライザ），
擬似心理療法士

1980年代：
エキスパートシステム

人手による学習ルールの作りこみの限界
「膨大な数の例外」

Siriなどにつながる

1957：Perceptron，ニューラルネットワークの先駆け
第一次ニューラルネットワークブーム
1963：線形サポートベクトルマシン

線形モデルの限界

1980年代：多層パーセプトロン，誤差逆伝搬，
畳み込みネット
第二次ニューラルネットワークブーム
1992： 非線形サポートベクトルマシン
（カーネル法）

非凸性の問題

1996： スパース学習（Lasso）
2003： トピックモデル（LDA）
2012： Supervision（Alex-net）
第三次ニューラルネットワークブーム

データの増加
＋計算機の強化

人間

四則演算

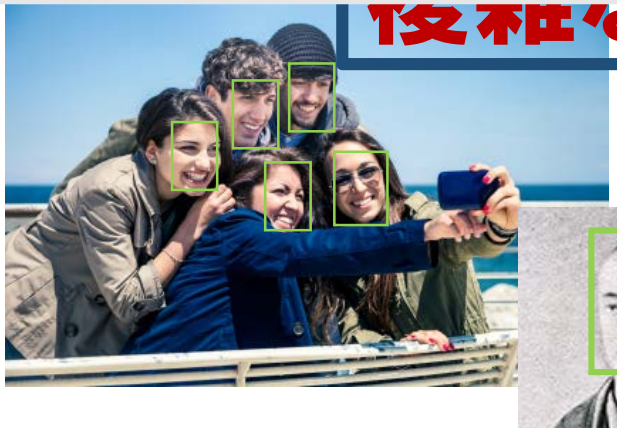
単純なルール

機械

難 $193707721 \times 761838257287 - 2^{67} = -1$ 易

人の手でプログラムするのは無理

learn without being explicitly programmed



易

難

人によって顔が違う，照明の当たり方で見え方・色が変わる，
表情の違い，髪型の違い，顔の向きの違い，．．．．

統計的学習の考え方

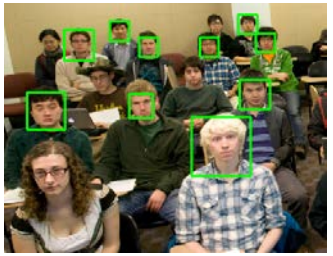
- 人がプログラムするのは認識の仕方ではなく学習の仕方

→数学が必要

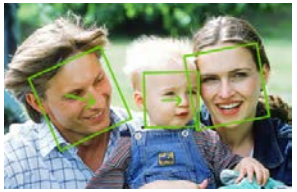
大量画像データ

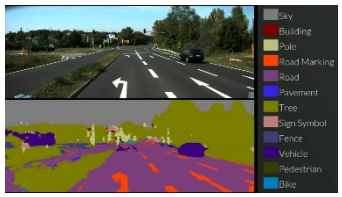
学習

初見の画像も
正しく認識
(汎化)



- 強い将棋ソフトを作りたい → 大量の棋譜データで学習
- 顔認識ソフトを作りたい → 大量の画像データで学習
- 車道を認識したい → 大量の車載カメラ画像で学習





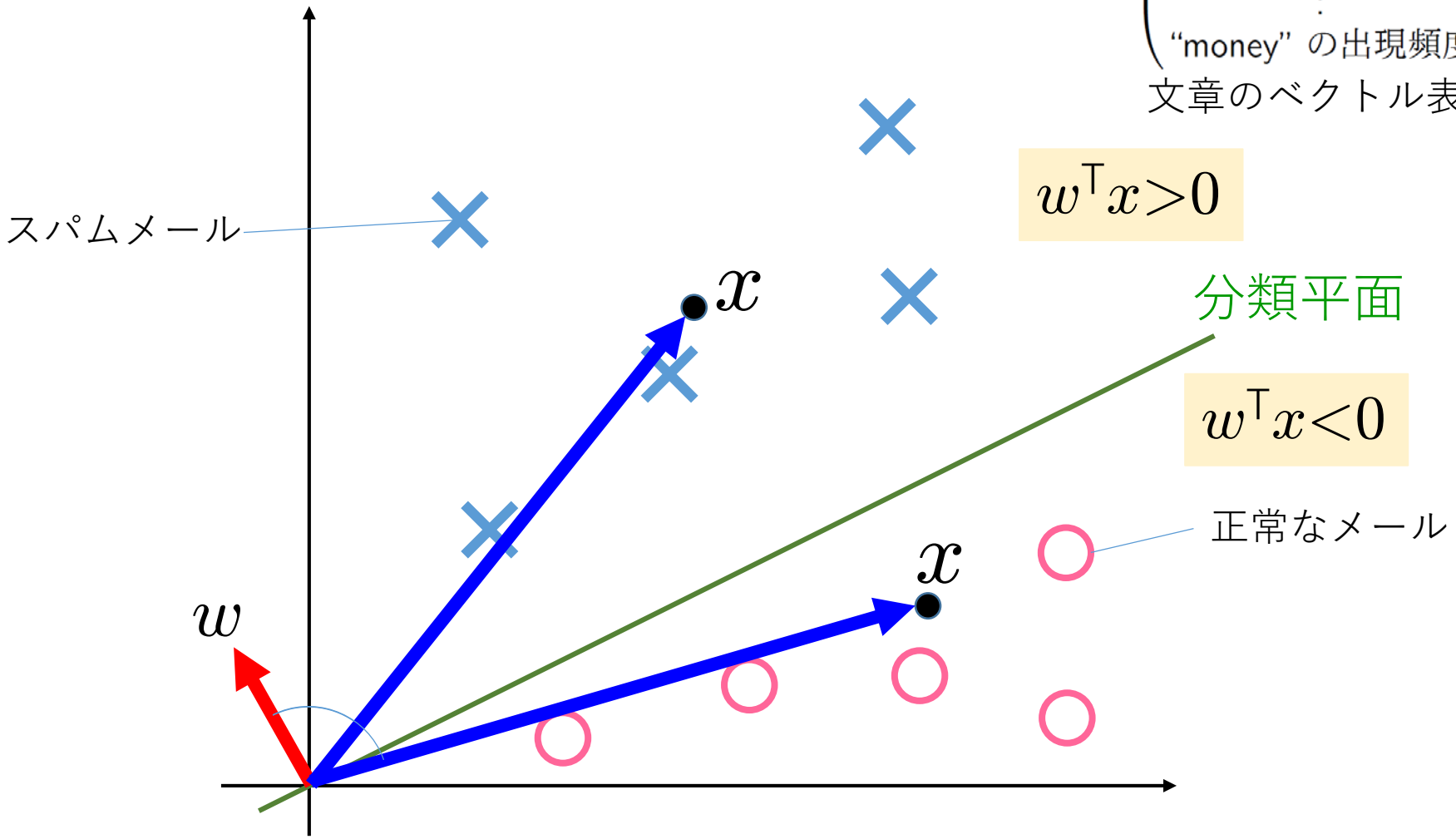
線形分類機

$$w^\top x = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_d x_d$$

Bag-of-words

$$x = \begin{pmatrix} \text{“please” の出現頻度} \\ \text{“credit” の出現頻度} \\ \vdots \\ \text{“money” の出現頻度} \end{pmatrix}$$

文章のベクトル表現例



サポートベクトルマシン（SVM）

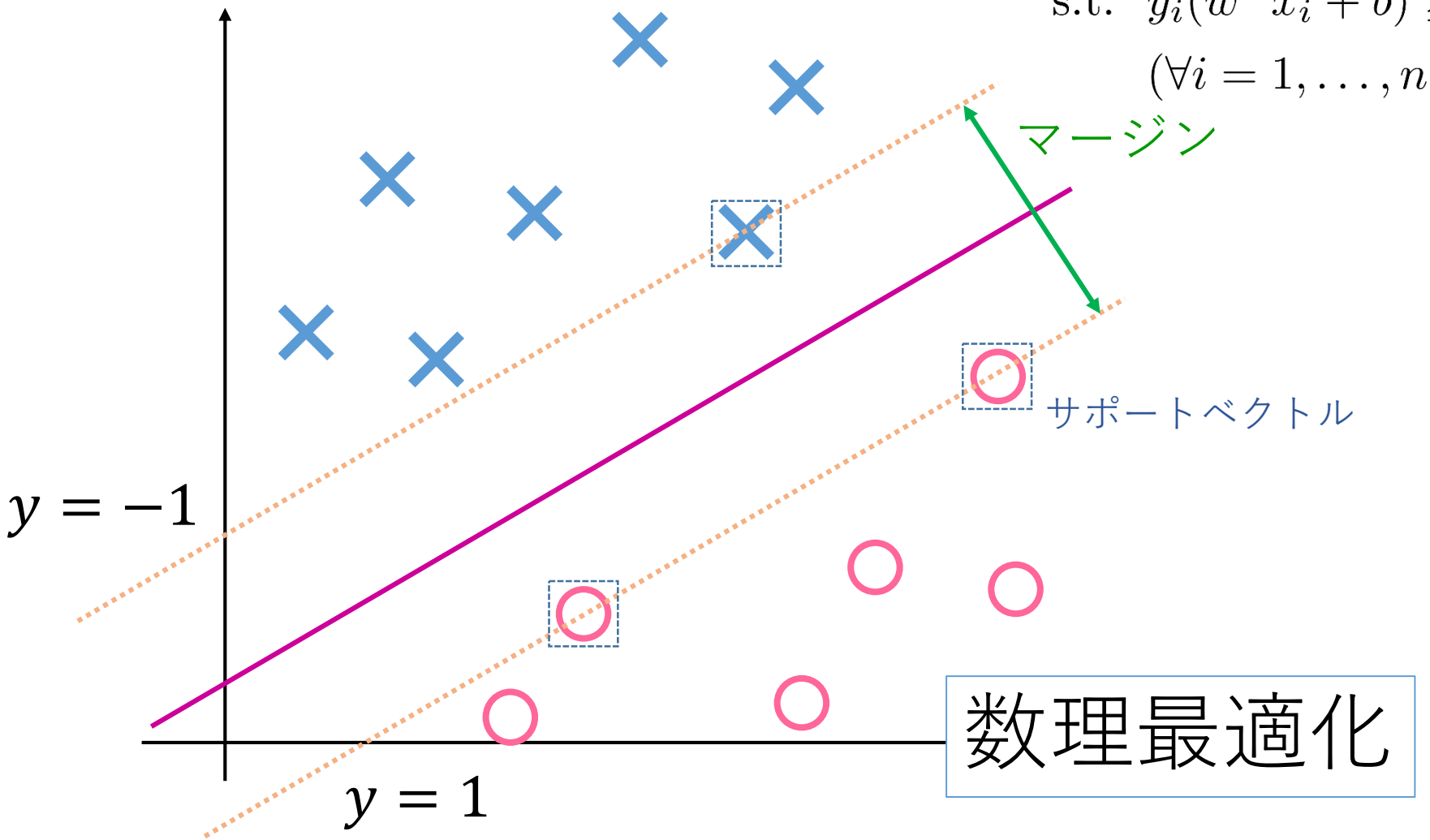
[Vapnik,63]

マージンを最大化

VC (Vapnik-Chervonenkis) 理論による正当化

$$\min_{w,b} \frac{\|w\|^2}{2}$$

$$\text{s.t. } y_i(w^\top x_i + b) \geq 1 \quad (\forall i = 1, \ldots, n)$$



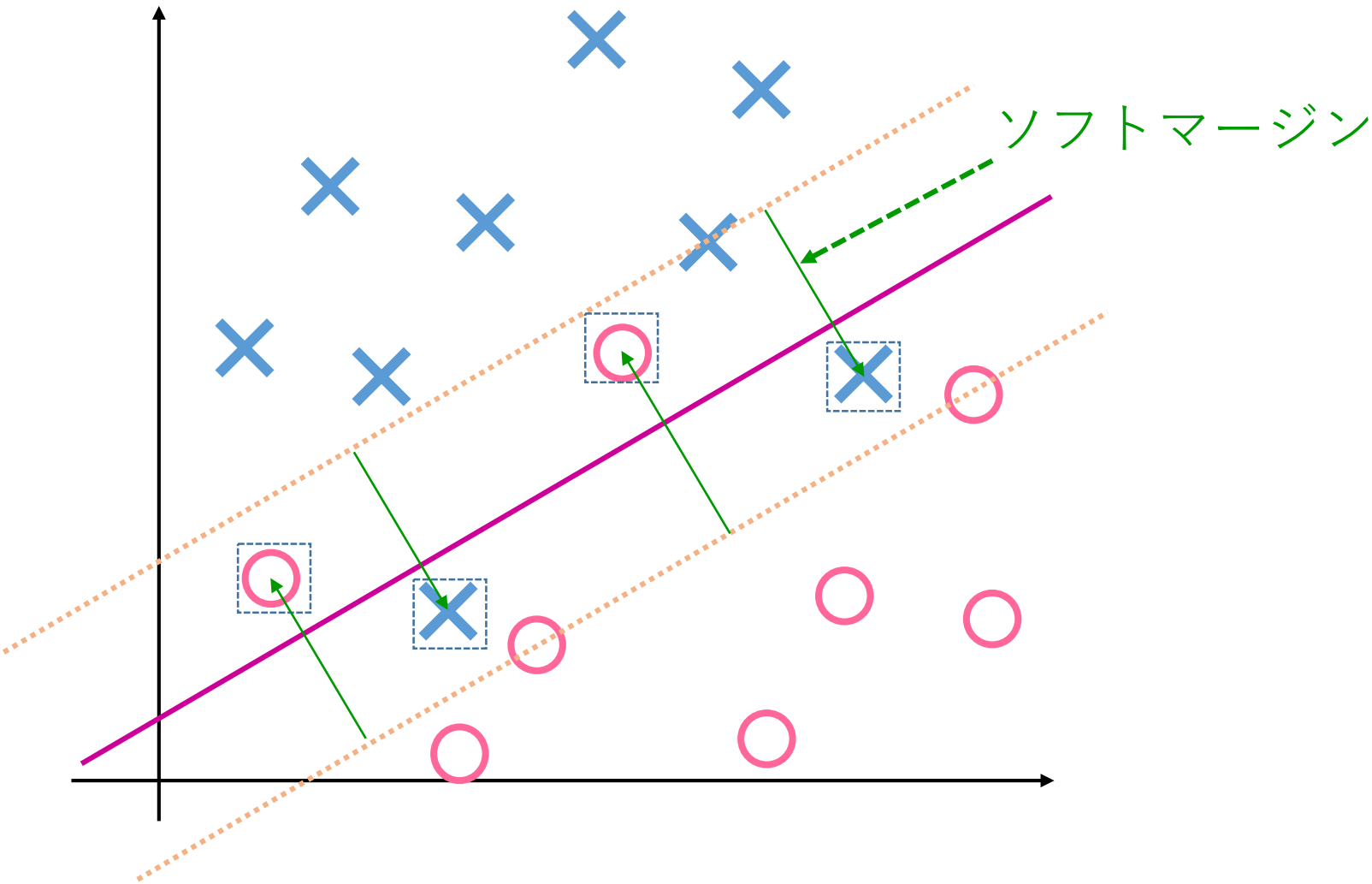
数理最適化

ソフトマージンSVM

[Cortes+Vapnik,95]

マージンを最大化
誤分類も許す

$$\min_{w,b} \sum_{i=1}^{n} \max\{1 - y_i(w^\top x_i + b), 0\} + C\frac{\|w\|^2}{2}$$



機械学習と人工知能の歴史

1946： ENIAC，高い計算能力
フォン・ノイマン「俺の次に頭の良い奴ができた」
1952： A. Samuelによるチェッカーズプログラム

統計的学習

1957：Perceptron，ニューラルネットワークの先駆け
第一次ニューラルネットワークブーム
1963：線形サポートベクトルマシン

線形モデルの限界

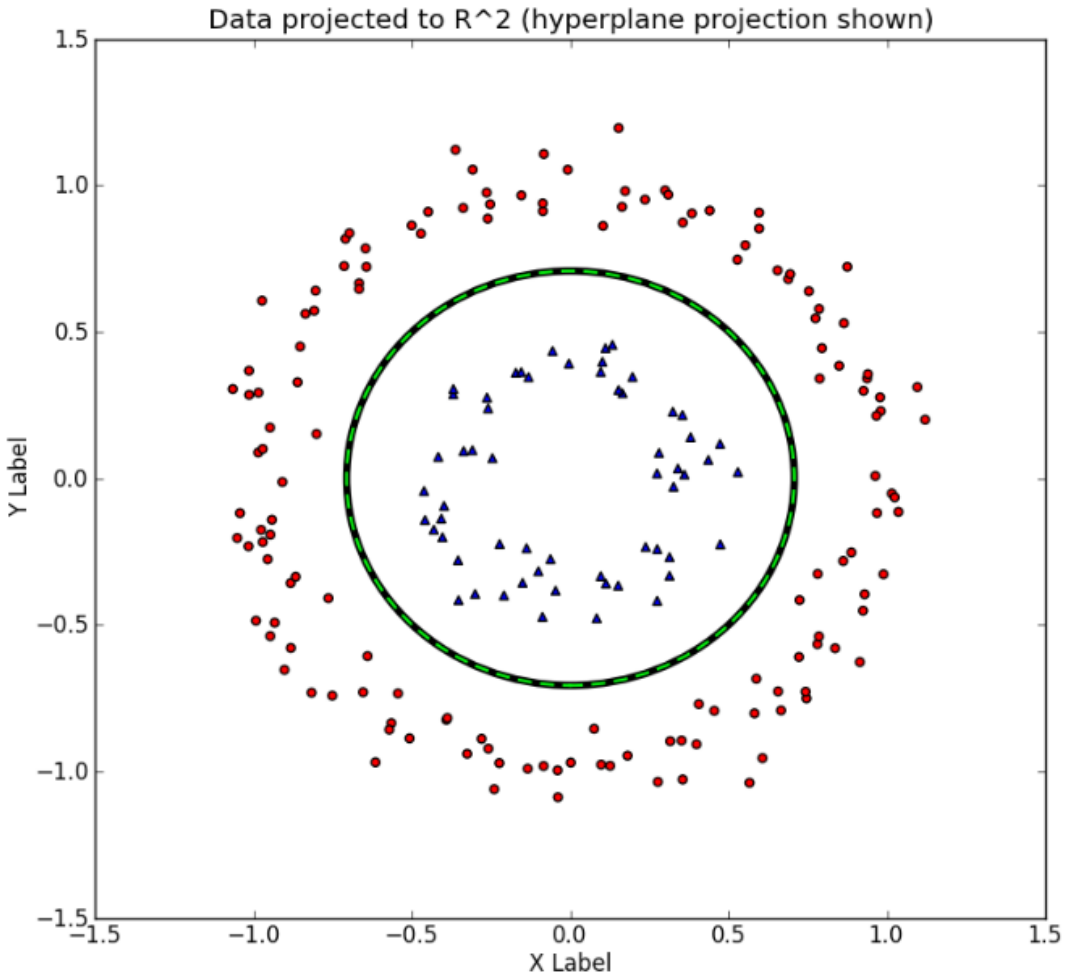
1980年代：多層パーセプトロン，誤差逆伝搬，
畳み込みネット
第二次ニューラルネットワークブーム

非凸性の問題

1992： 非線形サポートベクトルマシン
（カーネル法）
1996： スパース学習（Lasso）
2003： トピックモデル（LDA）
2012： Supervision（Alex-net）
第三次ニューラルネットワークブーム

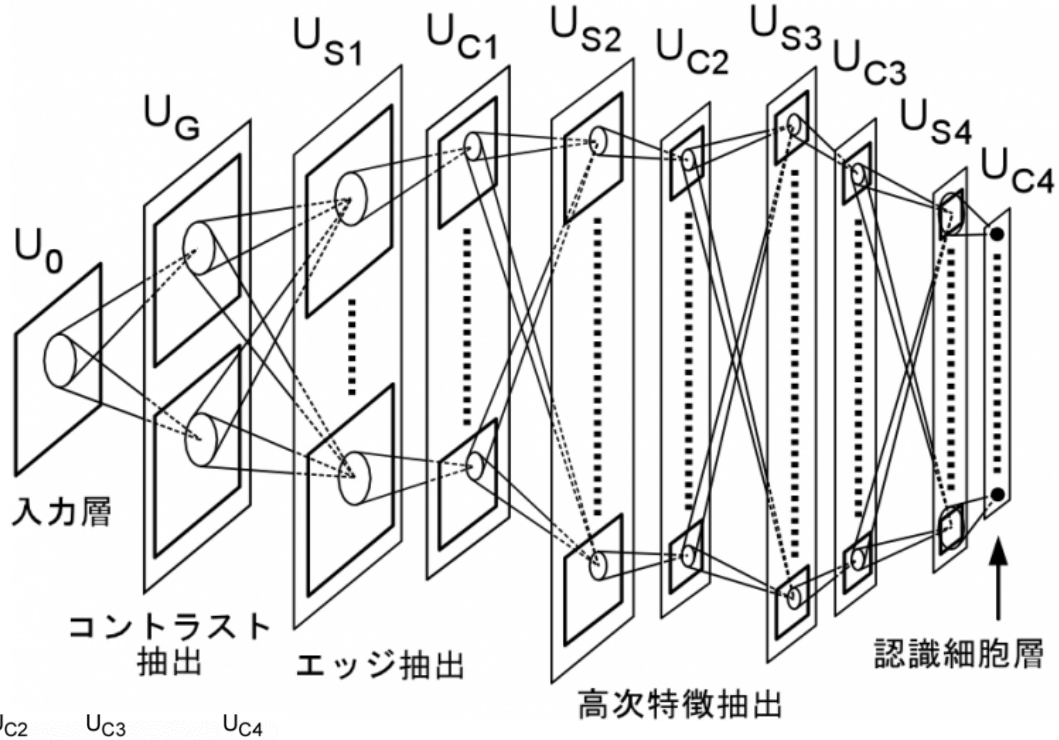
データの増加
＋計算機の強化

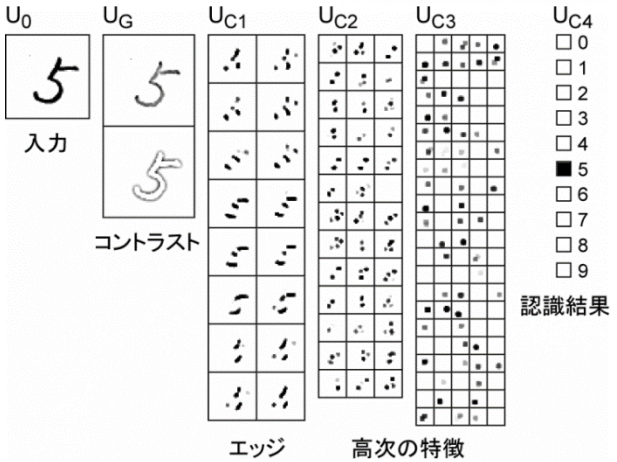
非線形判別

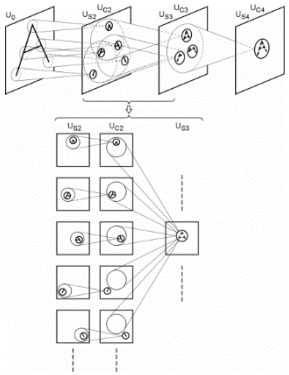

Data projected to R^2 (hyperplane projection shown)
Y Label
X Label
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−1.5
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
1.5

ネオコグニトロン

[福島,79]



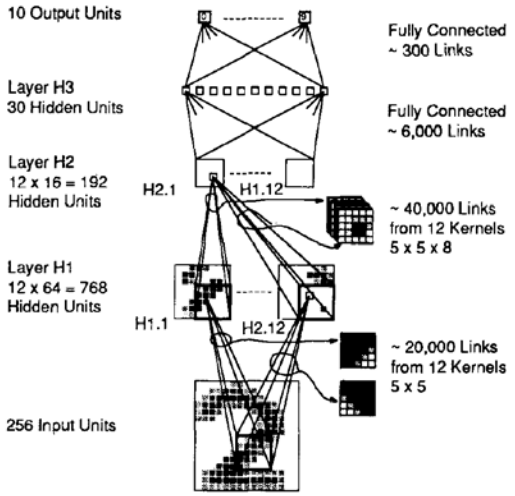




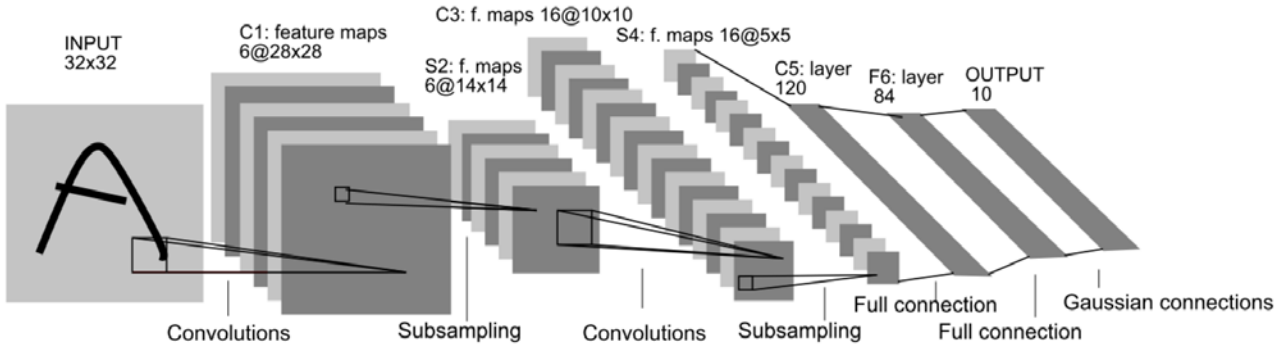
- 人間の脳を模倣
- 畳み込みネットの初期型
- 自己組織型学習
  →素子を足してゆく

LeNet

[LeCun+etal,89]



LeNet-5
[LeCun etal,98]



- 畳み込み＋プーリング：現在も使われている構造
- 誤差逆伝搬法でパラメータを更新
- 手書き文字認識データセット（MNIST）で９９％の精度を達成

機械学習と人工知能の歴史

1946： ENIAC，高い計算能力
フォン・ノイマン「俺の次に頭の良い奴ができた」
1952： A. Samuelによるチェッカーズプログラム

統計的学習

ルールベース

1960年代前半：
ELIZA（イライザ），
擬似心理療法士

1980年代：
エキスパートシステム

人手による学習ルールの作りこみの限界
「膨大な数の例外」

Siriなどにつながる

1957：Perceptron，ニューラルネットワークの先駆け
第一次ニューラルネットワークブーム
1963：線形サポートベクトルマシン

線形モデルの限界

1980年代：多層パーセプトロン，誤差逆伝搬，
畳み込みネット
第二次ニューラルネットワークブーム
1992： 非線形サポートベクトルマシン
（カーネル法）

非凸性の問題

1996： スパース学習（Lasso）
2003： トピックモデル（LDA）
2012： Supervision（Alex-net）
第三次ニューラルネットワークブーム

データの増加
＋計算機の強化

問題点

- 誰でも実装できるわけではなかった.

  e.g. 「LeNetはYan LeCunしか実装できない」といった噂
- 様々な職人芸的なノウハウが存在.
  - パラメータのチューニング：学習率，層の数，層の幅
- 大域的最適解の計算が難しい.

  局所最適解しか得られない.

→これらは現代でも未解決

(実装に関してはライブラリの充実でかなり解決)

誰でも実装できて，最適解が一つの手法が欲しい.

→　カーネルを用いたサポートベクトルマシン

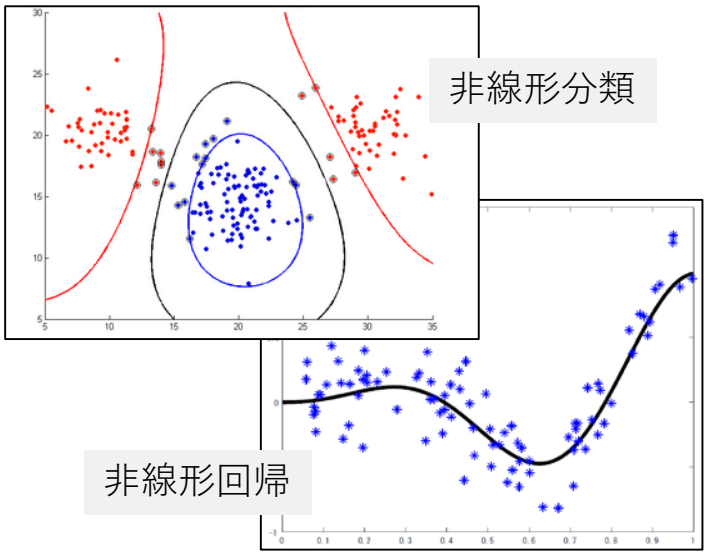
カーネル法

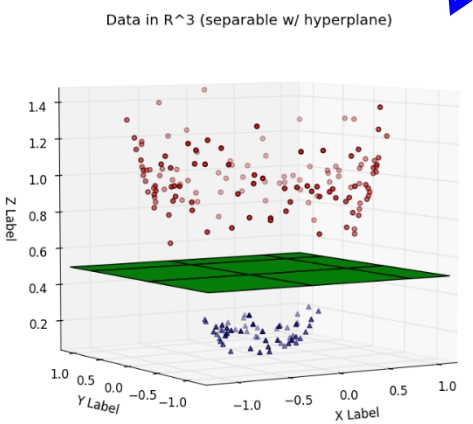
$$\min_{\alpha_i, b} \sum_{i=1}^{n} \max\left\{1 - y_i\left(\sum_{j=1}^{n} k(x_j, x_i)\alpha_j + b\right), 0\right\} + C\sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j k(x_i, x_j)$$

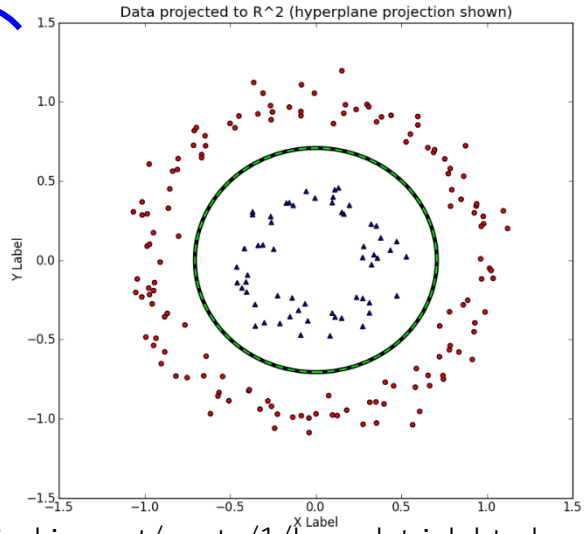
カーネルトリック

$$k(x, x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle_{\mathcal{H}}$$

非線形写像 ϕ







http://wiki.eigenvector.com/index.php?title=Svmda

http://www.eric-kim.net/eric-kim-net/posts/1/kernel_trick.html

関数解析：再生核ヒルベルト空間の理論

- **凸最適化問題**で解ける.
  - ✓ 効率的な最適化手法が存在.
  - ✓ 解は一つ. 誰が解いても同じ答えが返ってくる.
- **VC理論・経験過程の理論**による汎化誤差の保証.

$$\|\hat{f} - f_0\|_{L_2}^2 \leq O_p(n^{-\frac{1}{1+s}})$$

Vladimir Vapnik

９０年代以降

データ解析としての機械学習

統計学やデータマイニングとの融合

- 高次元スパース学習
- ベイズモデリング
- オンライン学習，確率的最適化

→　ビッグデータ解析への活用

メディアに出る「人工知能」はここに属することが多い

- データの増加＋計算機の強化

→深層学習再興，**第三次ニューラルネットワークブーム**へ

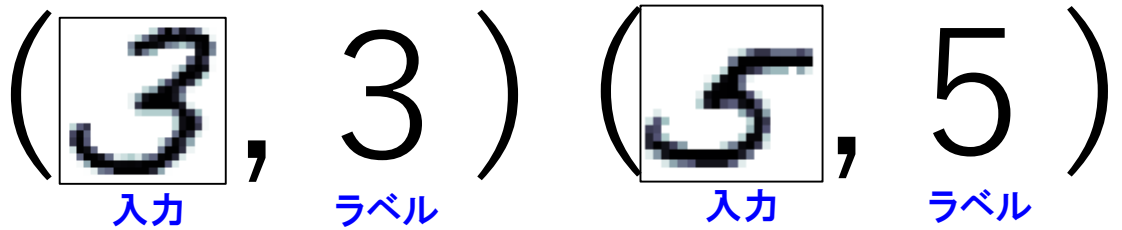
機械学習の数理

機械学習の問題設定

教師あり学習：

データ：(x,y)←ある入力xとそれに対するラベルyの組

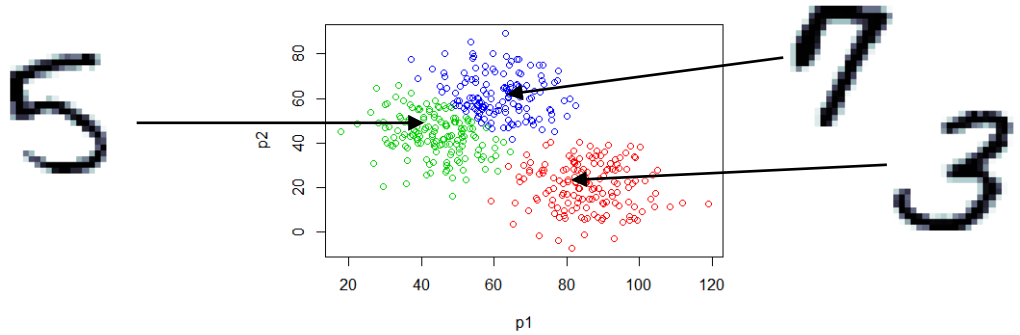
問題の例：回帰，判別



教師なし学習：

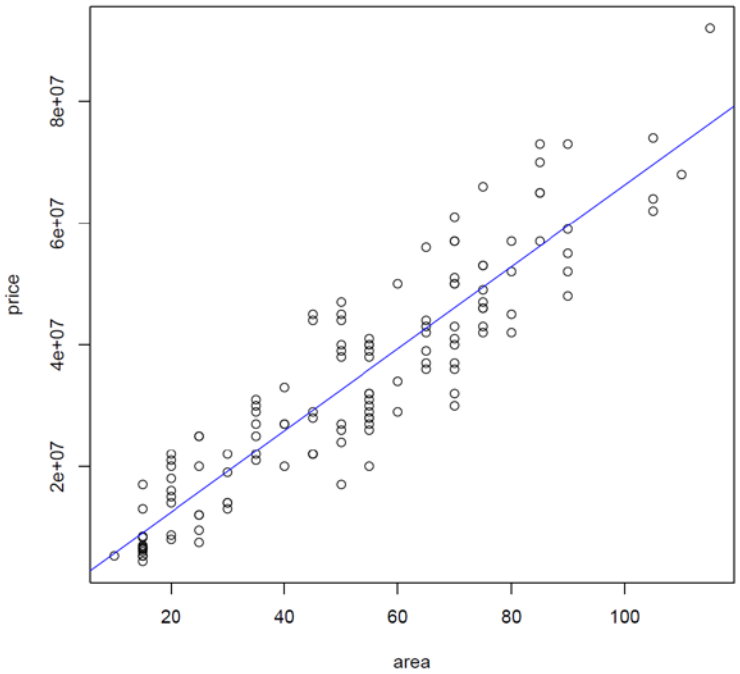
データ：(x) ←ラベルがない

問題の例：クラスタリング，音源分離，異常検知

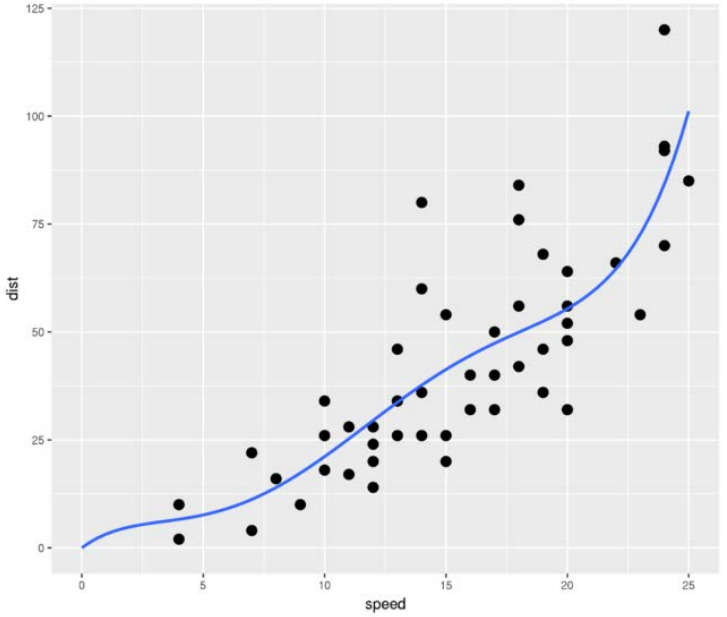


半教師有り学習：ラベルの付いているデータと付いてないデータが混在

回帰



線形

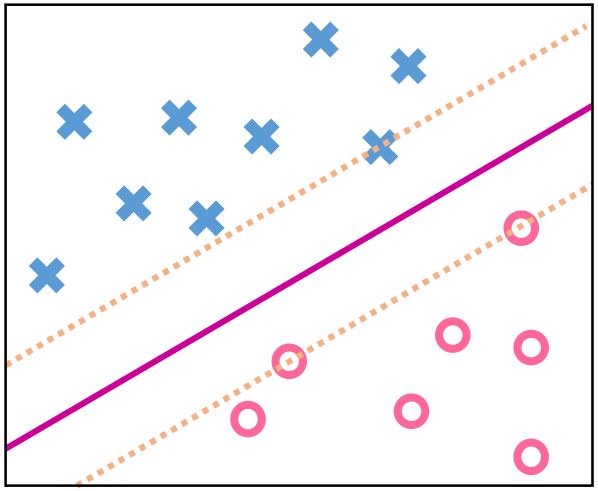


非線形

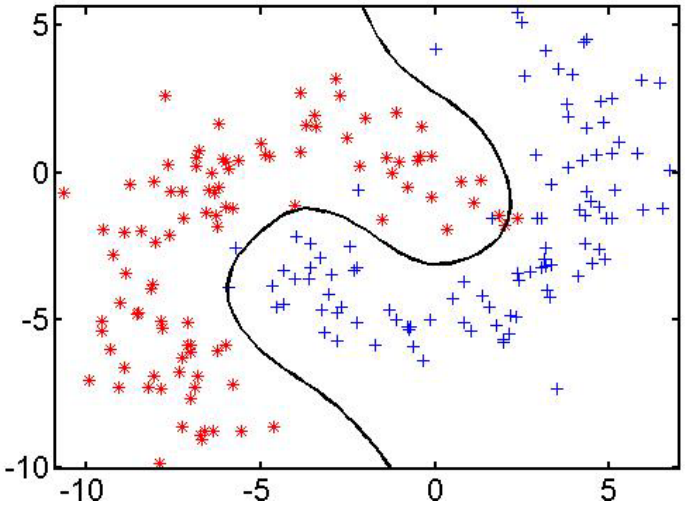
入力xから実数の出力yを予測

- 線形
- 非線形

判別



線形

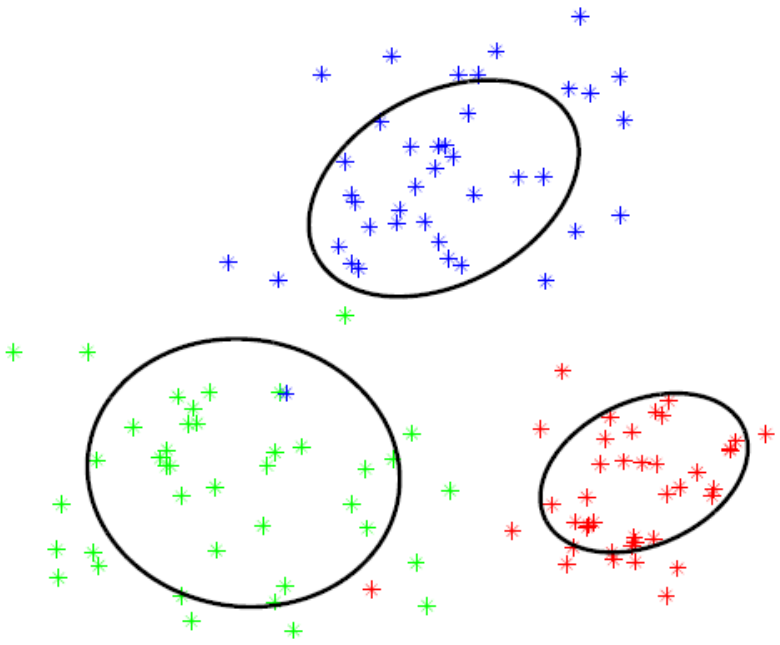


非線形

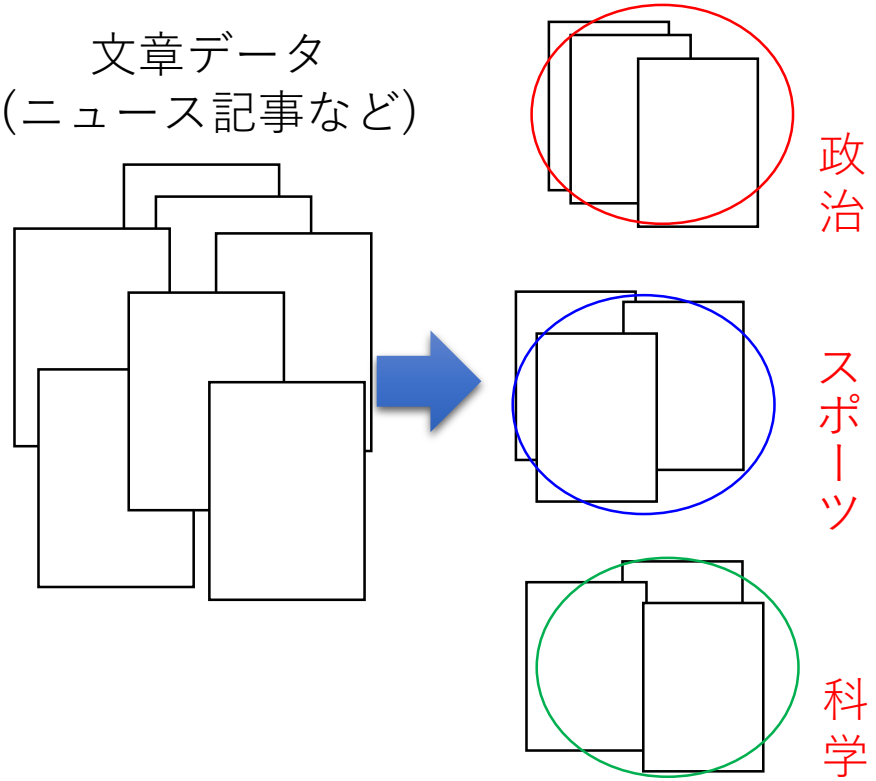
入力xからカテゴリーの出力yを予測

- 線形
- 非線形

クラスタリング



混合ガウス分布によるクラスタリング

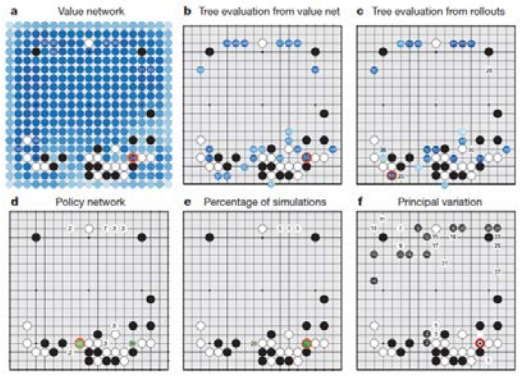


トピックモデル

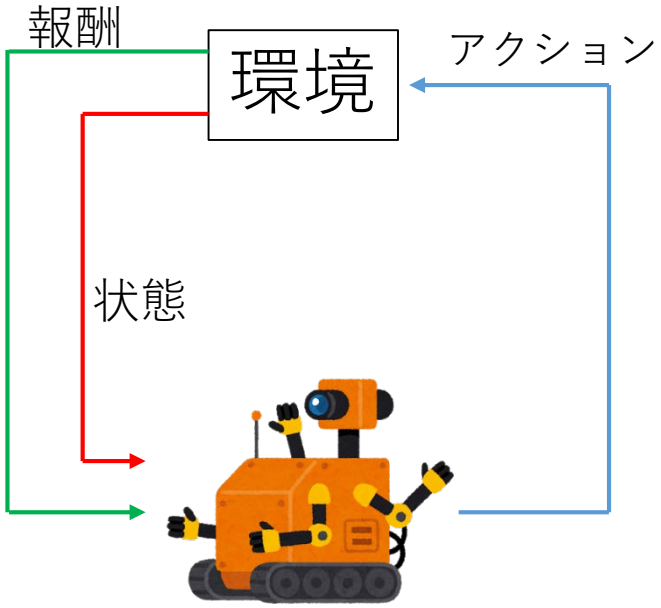
- 文章分類

強化学習

Google research blog, 8/March/2016.
“Deep Learning for Robots: Learning from Large-Scale Interaction.”

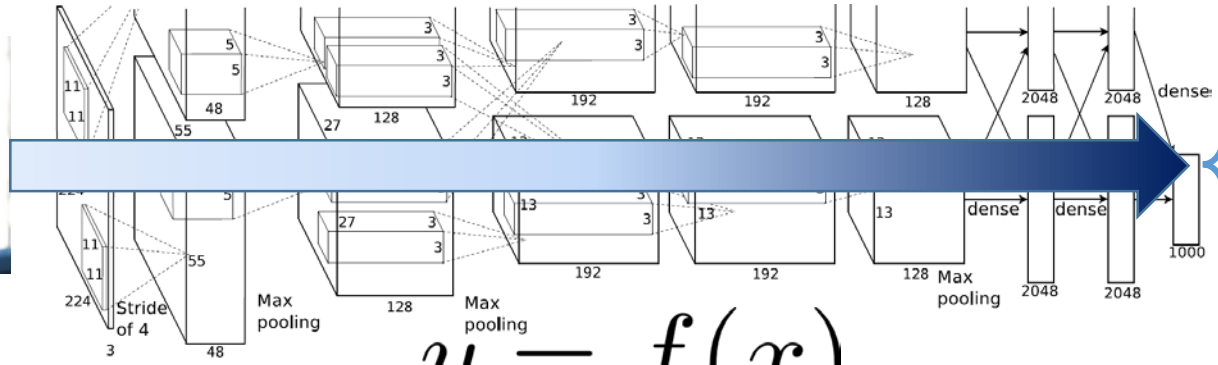


[Silver et al. (Google Deep Mind): Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search,
Nature, 529, 484—489, 2016]



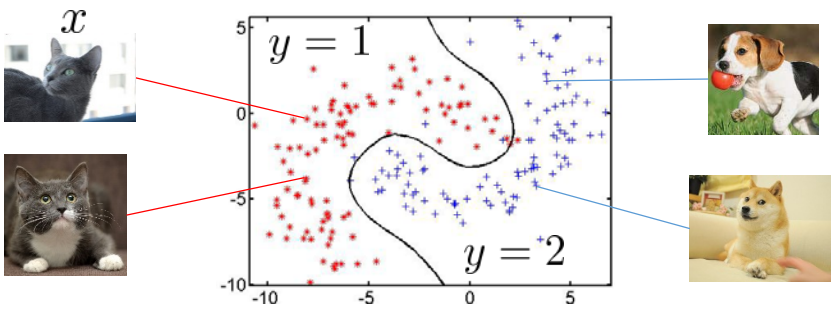
教師あり学習

画像



-猫　(y=1)
-犬　(y=2)
-人間 (y=3)

$$x \qquad y = f(x) \qquad y$$



学習：「関数」をデータに当てはめる
モデル：関数の集合（例：深層NNの表せる関数の集合）

予測モデルの学習

問題ごと

共有化可能

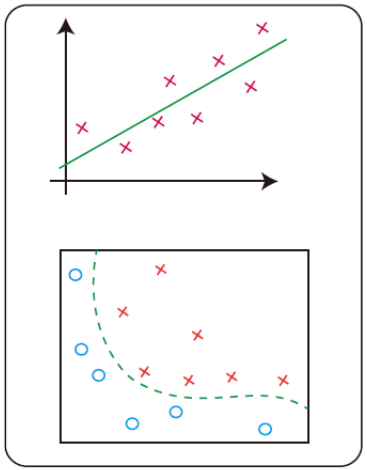
特徴抽出

特徴ベクトル

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{bmatrix}$$

分析

パラメータ推定



判別・回帰など

学習規準：汎化誤差最小化

分野ごとに様々なノウハウ
深層学習（Deep learning）
自動的に特徴量を抽出

予測モデルの構築

$$y = f(x;\theta)$$

モデルの
パラメータ

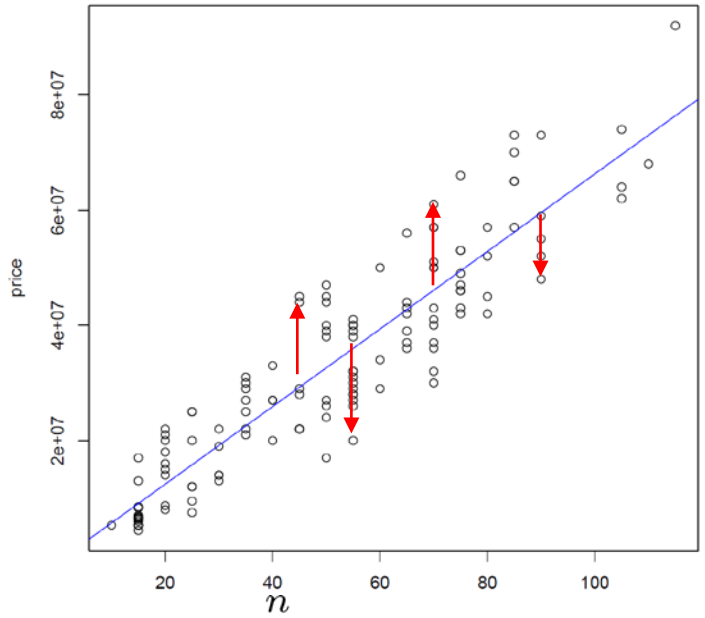
一度特徴ベクトルに変換してしまえばあとは統計の問題.
→ 汎用的な手法（機械学習）を適用できる.

線形モデル

$$y = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_p x_p + \beta_0 + \epsilon$$

y:従属変数, x:特徴ベクトル

マンション価格=β_1 × 床面積 + β_2 × 築年数 + β_3+(揺らぎ)



最小二乗法 $\min_{\beta_0,\beta_1,\beta_2,\beta_3} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_1 x_{i,1} - \beta_2 x_{i,2} - \beta_3 x_{i,3} - \beta_0)^2$

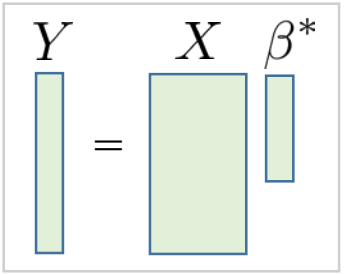
最小二乗法

n個の観測値（サンプル）：　$(y_i, \boldsymbol{x}_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \ (i = 1, \ldots, n)$

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \ X = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^\top & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_n^\top & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times (d+1)}, \ \boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

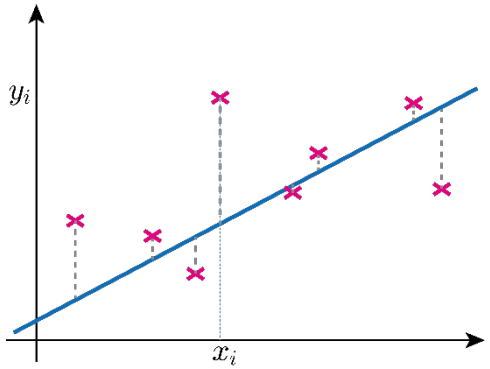
β^*を真の回帰係数（これを推定したい）とすると,

$$Y = X\beta^* + \boldsymbol{\epsilon}$$



最小二乗推定量 (最尤推定量)：

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\beta}} &= \arg\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{d+1}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - [\boldsymbol{x}_i^\top 1]\boldsymbol{\beta})^2 \\ &= \arg\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{d+1}} \|Y - X\boldsymbol{\beta}\|^2 \\ &= (X^\top X)^{-1} X^\top Y \end{aligned}$$



訓練誤差と汎化誤差

パラメータ θ：データの構造を表す変数（例：判別平面）
損失関数 $\ell(Y, f(X, \theta))$：パラメータ θ がデータをどれだけ説明しているか

汎化誤差：損失の期待値

$$\mathrm{E}[\ell(Y, f(X, \theta))]$$

本当は最小化したいもの.

訓練誤差：有限個のデータで代用

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, f(x_i, \theta))$$

代わりに最小化するもの.

※クラスタリング等，教師なし学習も尤度を使ってこのように書ける.

この二つには大きなギャップがある.
[過学習]

基本的な考え方

- パラメータをθとしたときに，観測されたデータが観測される確率（尤度）

尤度　$\prod_{i=1}^{n} p(z_i|\theta)$　：確率モデル

尤度が高ければ，観測データが観測される確率が高い→「尤もらしい」

負の対数尤度　$\sum_{i=1}^{n} \underbrace{-\log(p(z_i|\theta))}_{\ell(z_i,\theta)}$

→最小化で観測データを良く表現するパラメータが得られる．

「最尤推定」

（ベイズ推定も重要だがここでは割愛）

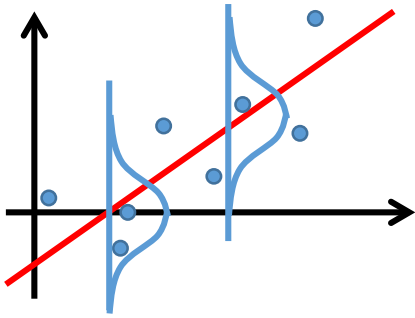
線形回帰

$$p(y_i|x_i,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_i - x_i^\top\theta)^2}{2}\right)$$

正規分布
平均$x_i^\top\theta$, 分散1

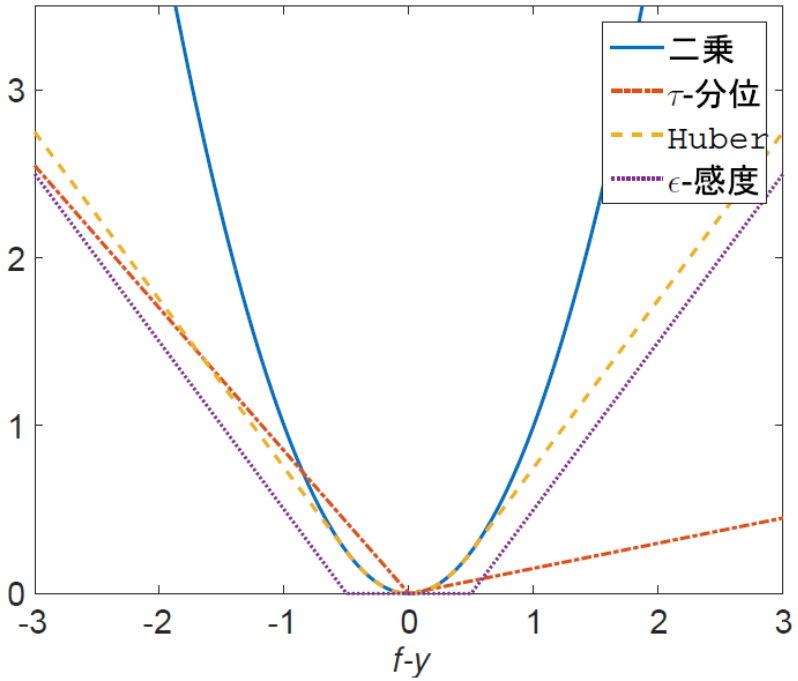
$$-\log(p(y_i|x_i,\theta)) = \frac{(y_i - x_i^\top\theta)^2}{2} + C$$

→最小二乗法



回帰の損失関数

- 二乗損失: $\ell(y, f) = \frac{1}{2}(y - f)^2$.
- τ-分位点損失: $\ell(y, f) = (1 - \tau)\max\{f - y, 0\} + \tau \max\{y - f, 0\}$.
  ただし，$\tau \in (0, 1)$. 分位点回帰に用いられる.
- ϵ-感度損失: $\ell(y, f) = \max\{|y - f| - \epsilon, 0\}$,
  ただし，$\epsilon > 0$. サポートベクトル回帰に用いられる.



判別

- 判別

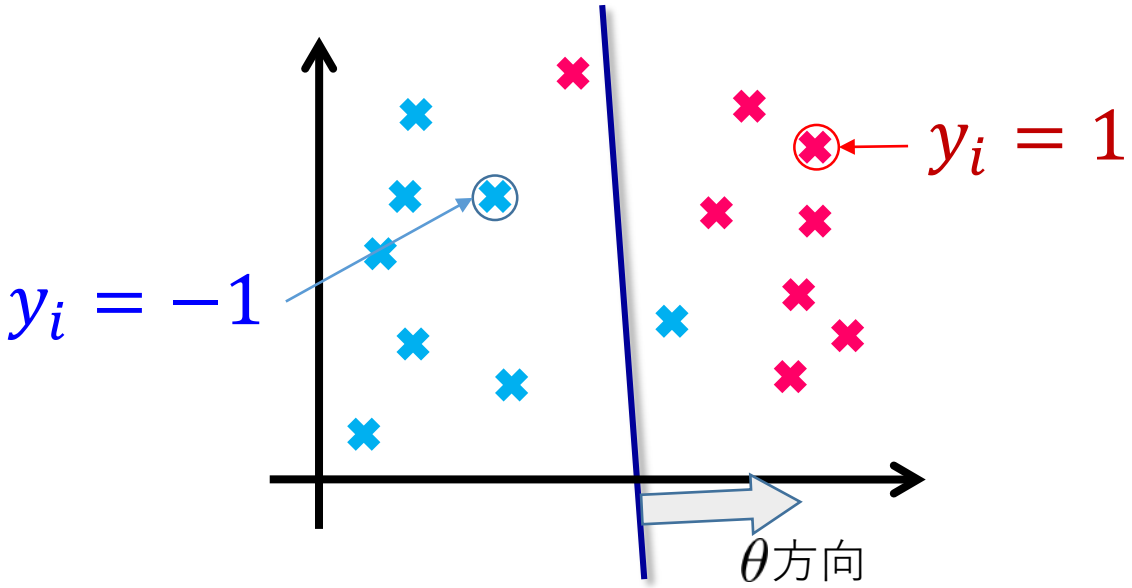
損失関数

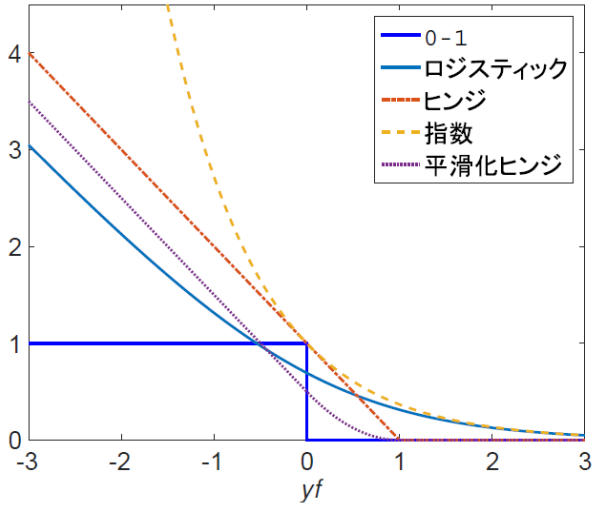
$$\ell(y, x^\top \theta) = \log(1 + \exp(-yx^\top \theta))$$ （ロジスティック損失）

訓練誤差最小化

$$\min_{\theta \in \mathbb{R}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, x_i^\top \theta) = \min_{\theta \in \mathbb{R}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log(1 + \exp(-y_i x_i^\top \theta))$$

（ロジスティック回帰）



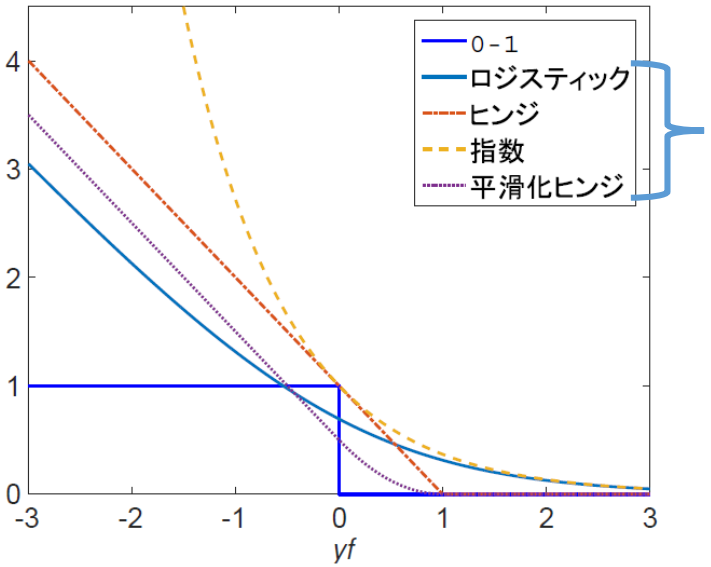


判別の損失関数

$y \in \{\pm 1\}$

- ロジスティック損失: $\ell(y, f) = \log((1 + \exp(-yf))/2)$.
- ヒンジ損失: $\ell(y, f) = \max\{1 - yf, 0\}$.
- 指数損失: $\ell(y, f) = \exp(-yf)$.
- 平滑化ヒンジ損失:

$$\ell(y, f) = \begin{cases} 0, & (yf \geq 1), \\ \frac{1}{2} - yf, & (yf < 0), \\ \frac{1}{2}(1 - yf)^2, & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

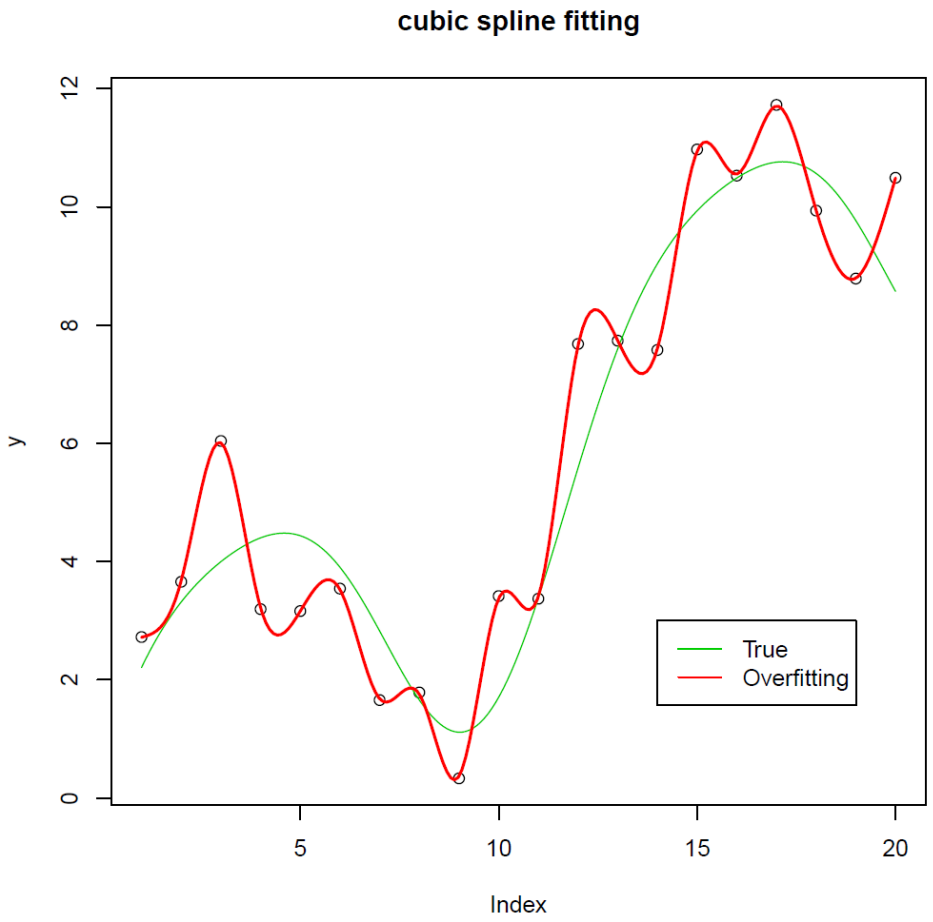


凸代理損失

過学習

複雑なモデル（例えば深層ニューラルネット）を用いるのが常に良い選択か？

→ そうとは限らない．「**過学習**」に注意する必要あり．



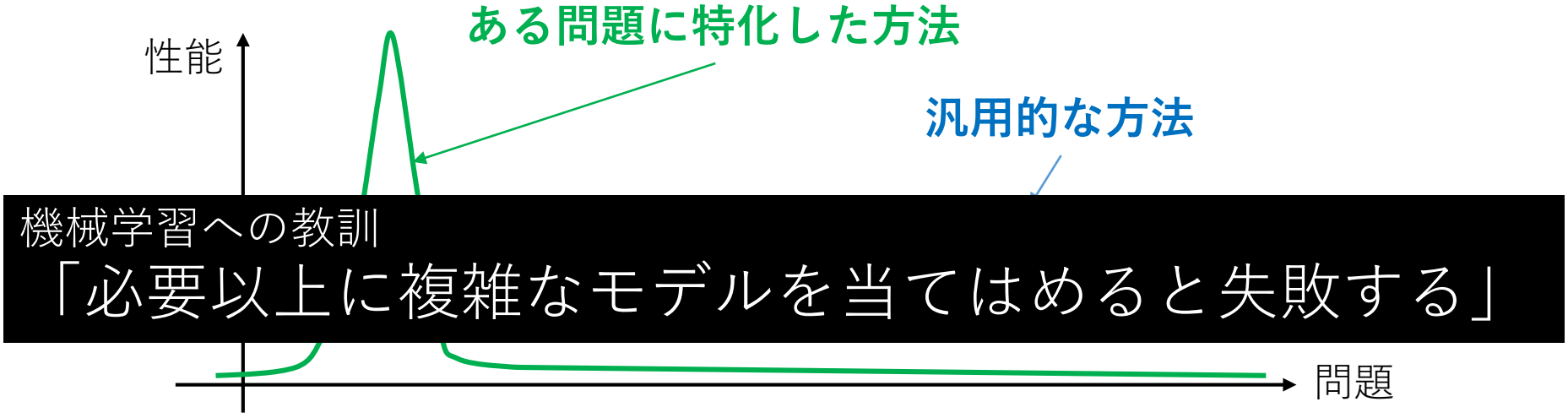
学習機の複雑さと学習能力

- オッカムの剃刀

「ある事柄を説明するためには、必要以上に多くを仮定するべきでない」とする指針

- No free lunch theorem

「あらゆる問題で性能の良い汎用的学習機は実現不可能であり，ある問題に特殊化された手法に勝てない」

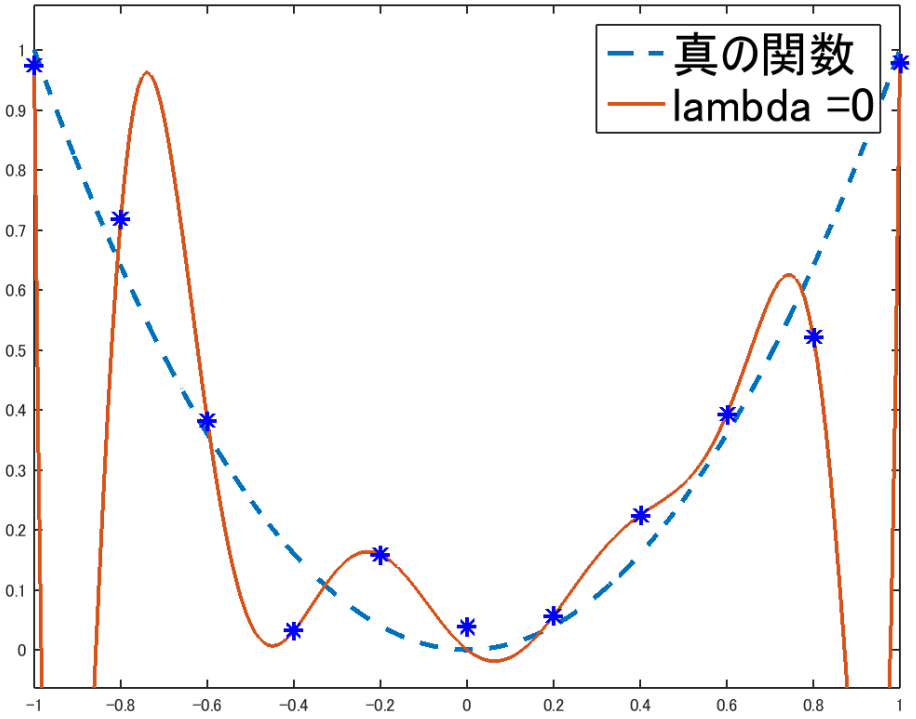


William of Ockham：1285-1347．スコラ学の神学者，哲学者．

No free lunch theorem: [D.H.Wolpert and W.G. Macready: 1995,1997][Y.C. Ho and D.L. Pepyne: 2002]

多項式回帰の過学習

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{15}} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (\beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_{15} x_i^{15})\}^2$$



正則化学習法

正則化：データに合った単純なモデルを当てはめる

→ 過学習を回避

正則化訓練誤差最小化

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i^\top \beta)^2 + \lambda \psi(\beta)$$

手元にあるデータへの当てはまり　　正則化項

複雑さへの罰則

代表的な例：リッジ正則化（L2ノルム）

$$\psi(\theta) = \|\theta\|_2^2 = \sum_{j=1}^{d} \theta_j^2$$

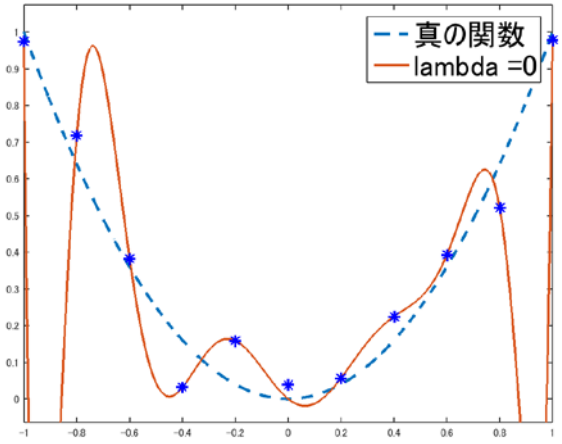
正則化の代表例

多項式回帰（１５次多項式，リッジ回帰）

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{15}} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (\beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_{15} x_i^{15})\}^2 + \lambda \|\beta\|_2^2$$

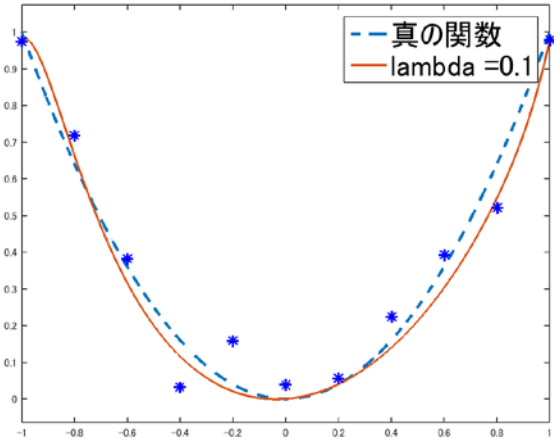
リッジ正則化と言う

手元のデータには良くあてはまるが真の関数からは遠い



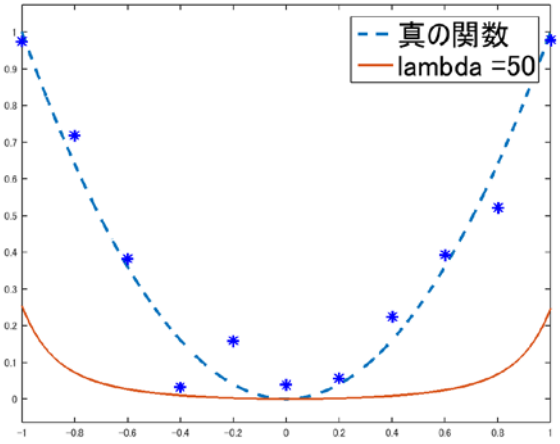
$\lambda = 0$

過学習



$\lambda = 0.1$

良い推定



$\lambda = 50$

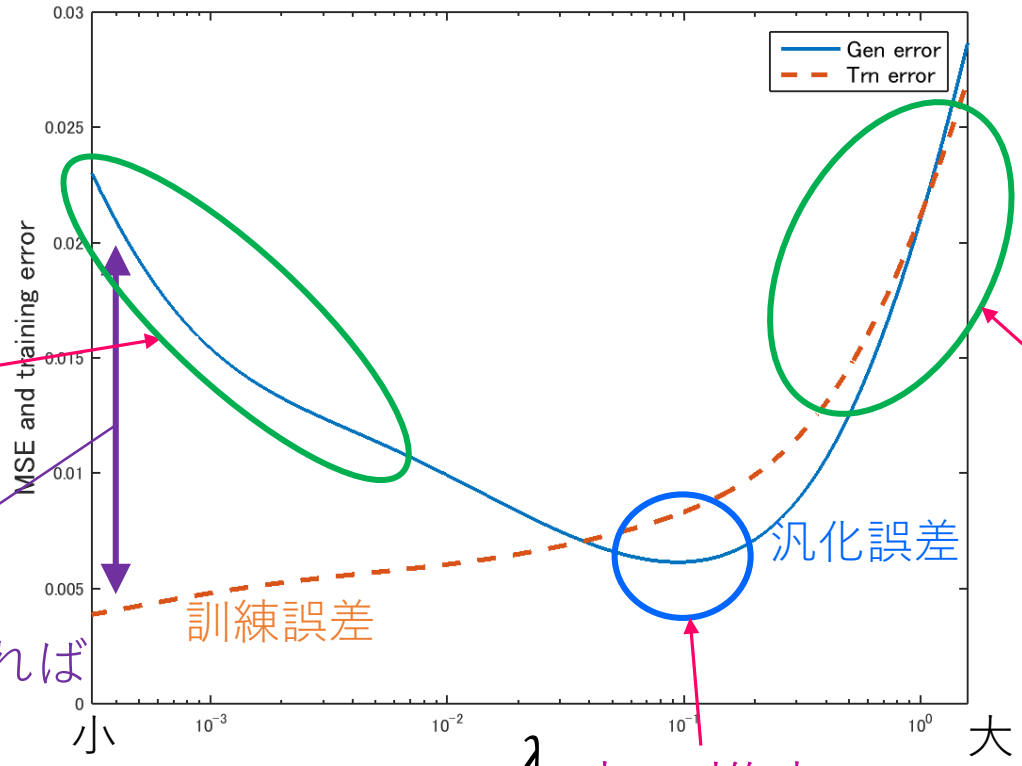
過小学習

正則化によってあまり複雑にならないよう制御がかかる

正則化の強さと汎化誤差の関係

多項式回帰（１５次多項式，リッジ回帰）

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{15}} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (\beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_{15} x_i^{15})\}^2 + \lambda \|\beta\|_2^2$$



横軸：正則化パラメータ(log-スケール)．　縦軸：汎化誤差（青），訓練誤差（赤）．

適切な λ を選ぶ方法→交差検証法，Mallows' Cp

バイアスとバリアンスの分解

線形モデル（ノイズは平均0，分散 σ^2 ）：

$$Y = X\beta^* + \epsilon$$

任意の推定量に対して以下の分解が成り立つ：

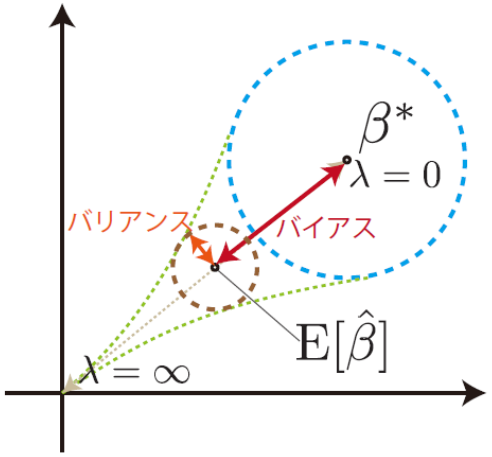
$$\mathrm{E}[\|\hat{\beta} - \beta^*\|^2] = \underbrace{\mathrm{E}[\|\mathrm{E}(\hat{\beta}) - \beta^*\|^2]}_{\text{バイアス項}} + \underbrace{\mathrm{E}[\|\hat{\beta} - \mathrm{E}(\hat{\beta})\|^2]}_{\text{バリアンス項}}$$

リッジ正則化の場合：$\hat{\beta}_{(\lambda)} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\mathrm{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i^\top \beta)^2 + \lambda \|\beta\|^2 \right\}$

$$= \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\mathrm{argmin}} \{ \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|^2 \}$$

正則化パラメータとバイアス-バリアンス

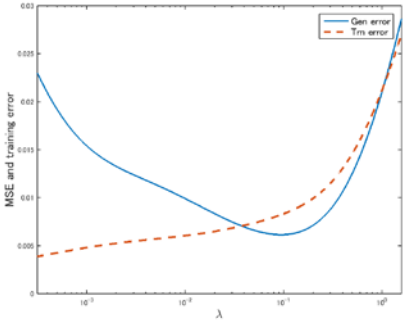
	バイアス	バリアンス
$\lambda = 0$	0	$\sigma^2 \mathrm{Tr}[(X^\top X)^{-1}]$
$\lambda = \infty$	$\|\beta^*\|^2$	0



※両方を同時に小さくすることはできない．

Mallows' CP規準

$$\hat{\beta}_{(\lambda)} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \left\{ \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i^\top \beta)^2 + \lambda \|\beta\|^2 \right\}$$
$$= \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{argmin}} \{ \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|^2 \}$$



Mallows' CP規準

$$\hat{L}(\lambda) := \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i^\top \hat{\beta}_{(\lambda)})^2 + 2\hat{\sigma}^2 \mathrm{Tr}[X(X^\top X + \lambda \mathrm{I})^{-1} X^\top]$$

訓練誤差　　補正項

$\hat{L}(\lambda)$ を最小にする λ を選択.

- Mallows' CP 規準 $\hat{L}(\lambda)$ は予測誤差 $\mathrm{E}_{x,y}[(y - x^\top \hat{\beta})^2]$ の推定量.
- $\hat{\sigma}^2$ としては最小二乗推定量 $\hat{\beta}_{\mathrm{LS}}$ を用いて $\hat{\sigma}^2 = \|Y - X\hat{\beta}_{\mathrm{LS}}\|^2/n$ を用いることが多い.

※ λ =0の時，AICと一致する.

クロスバリデーション (Cross-Validation)

適切なハイパーパラメータを選ぶ方法

- 観測データへの当てはまりではなく予測誤差を最小化.
- 観測データへの当てはまりを最良にするのは $\lambda = 0$.

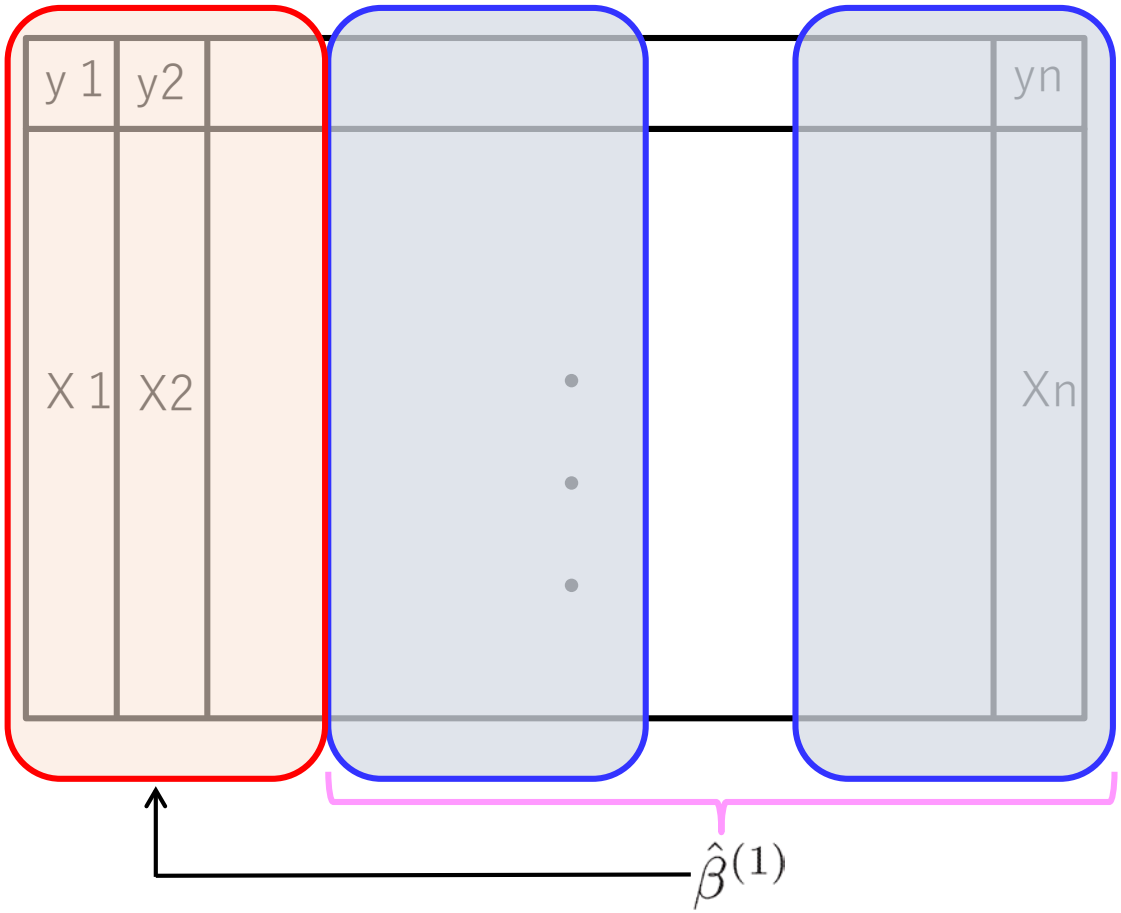
とにかくあらゆる問題に適用可能
「とりあえずクロスバリデーション」

k-fold クロスバリデーション

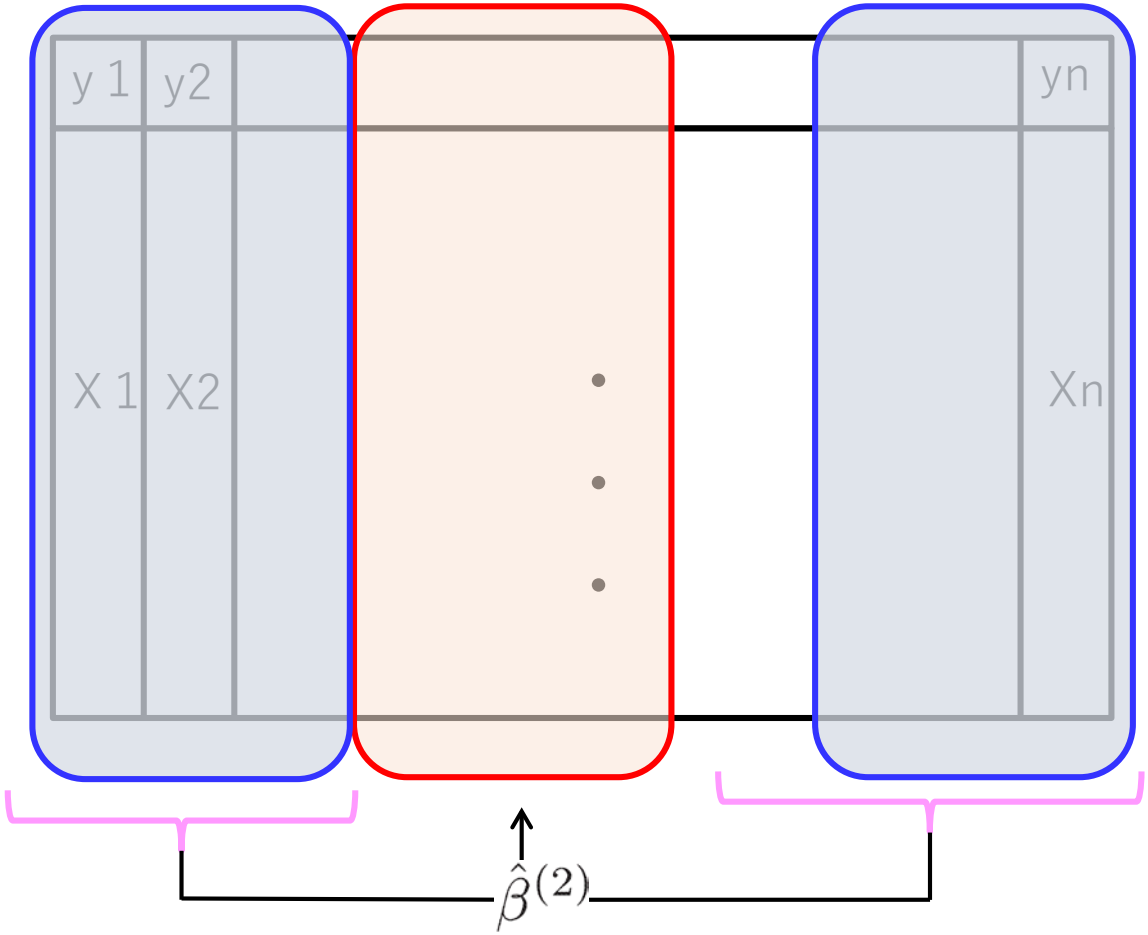
1. まずデータを k 個に分割する.
2. 分割したデータの一つをテストデータとしてとっておき，残りのデータで推定.
3. テストデータ上での予測誤差を計算.
4. 手順 2-3 を k 個のテストデータの取り方について繰り返す.
5. k 回繰り返しの予測誤差の平均を取る=CV スコア.

CV スコアを最小にする λ を選べば良い.

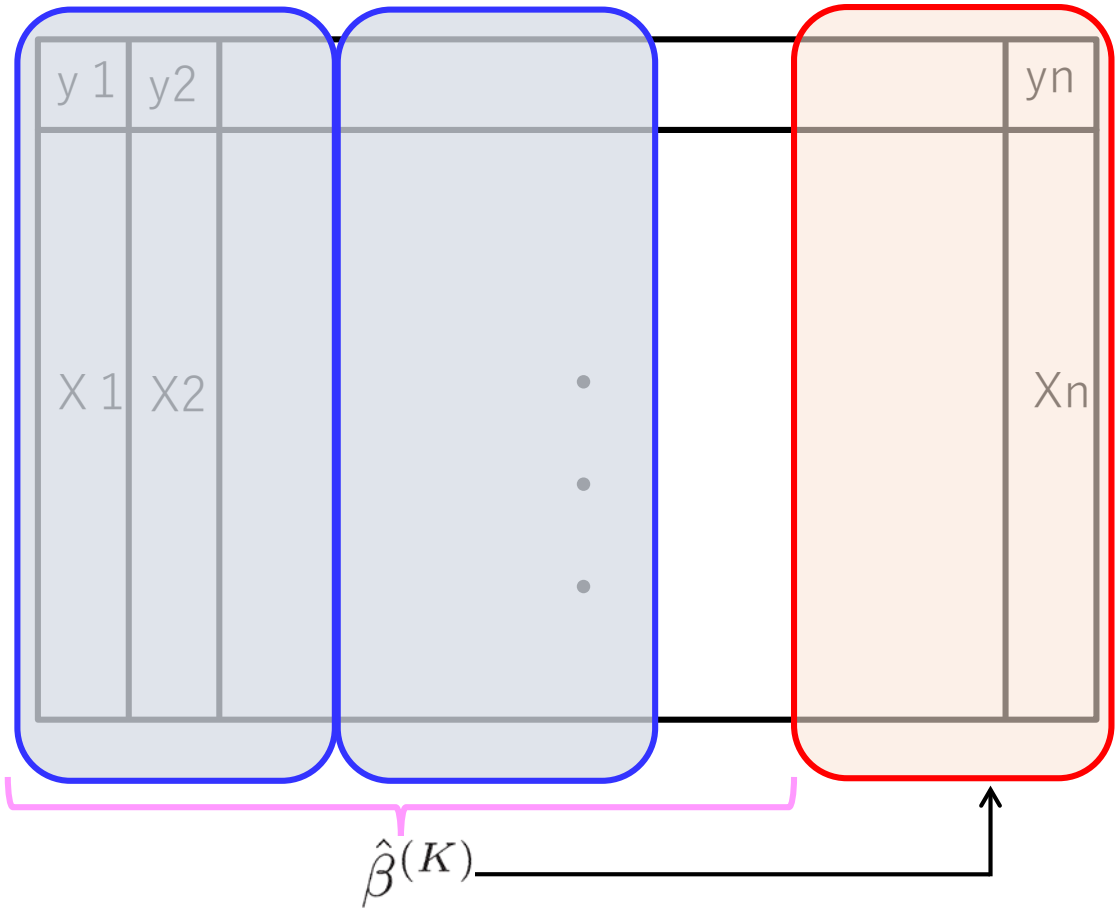
特に $k = n$ (サンプルサイズ) の時，Leave-One-Out-CV (LOOCV) と呼ぶ.



$$\frac{1}{|I_1|}\sum_{i\in I_1}\ell(y_i, \hat{\beta}^{(1)\top}x_i)$$



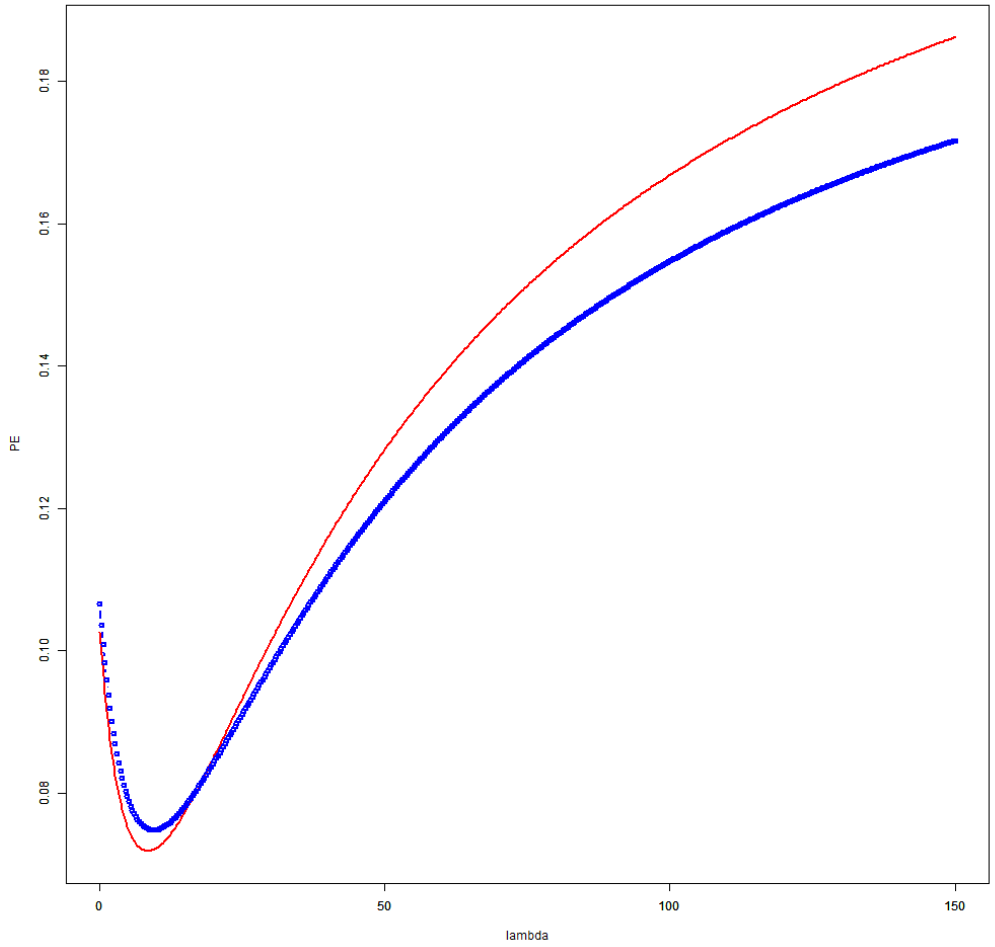
$$\frac{1}{|I_2|}\sum_{i\in I_2}\ell(y_i, \hat{\beta}^{(2)\top}x_i)$$



$$\frac{1}{|I_K|} \sum_{i \in I_K} \ell(y_i, \hat{\beta}^{(K)\top} x_i)$$

実例

$n = 100,\ d = 10$ のリッジ回帰 (ガウスマルコフモデル+二乗ノルム正則化)



予測誤差 (赤線) とCVスコア (青線)

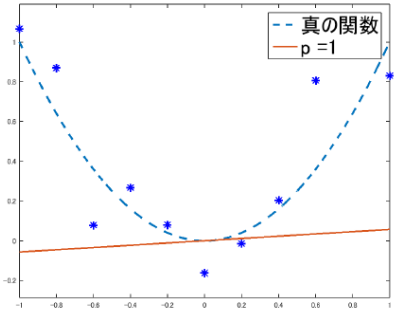
特徴選択

- 重回帰分析では説明変数を追加するごとに残差は小さくなってゆく.
- 余分な説明変数を使うと過学習を起こしてしまう.
  - 観測済みデータによく当てはまっても，未観測のデータへの当てはまりが悪くなることがある.
  - サンプルサイズに比して複雑なモデルは使うべきではない.

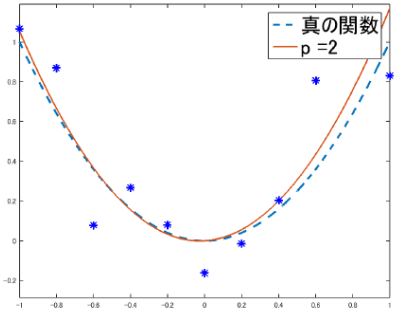
中古マンション価格の予測：床面積，築年数，駅からの距離，建ぺい率，...

例：多項式回帰

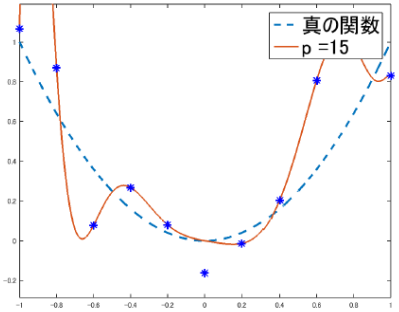
$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (\beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_d x_i^d)\}^2$$



$d = 1$



$d = 2$



$d = 15$

AICによる特徴選択

赤池情報量規準，AIC（Akaike Information Criterion）

予測精度が一番良いモデルを選択するための規準

$\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(d)} = [\widehat{\beta}_1, \ldots, \widehat{\beta}_d, 0, \ldots, 0]^\top$　：d変数のみを用いた最小二乗推定量

$$\mathrm{AIC} = \frac{\| Y - X\widehat{\boldsymbol{\beta}}^{(d)} \|^2}{\sigma^2} + 2d$$

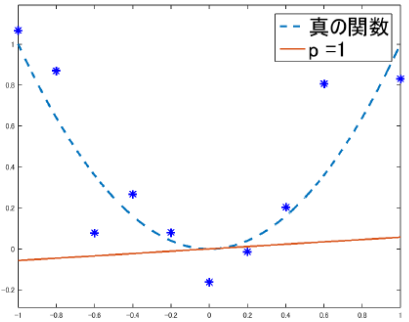
AICを最小化する変数の組を探す．

AIC = データへの当てはまりの良さ + モデルの複雑さ

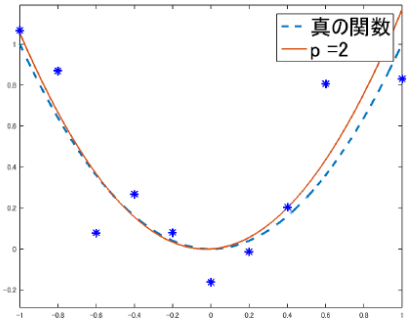
- d変数を用いた推定は最初のd変数である必要はない．
- dを増やせばAICの第一項は減少し，第二項は増大．
- AICの期待値は予測誤差になることが示せる．

例：多項式回帰

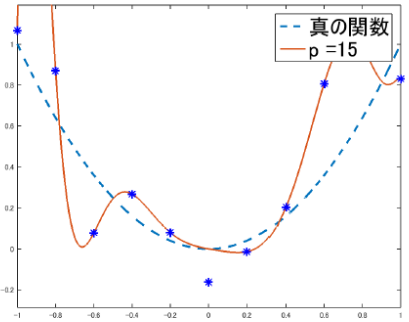
$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^d} \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (\beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_d x_i^d)\}^2$$



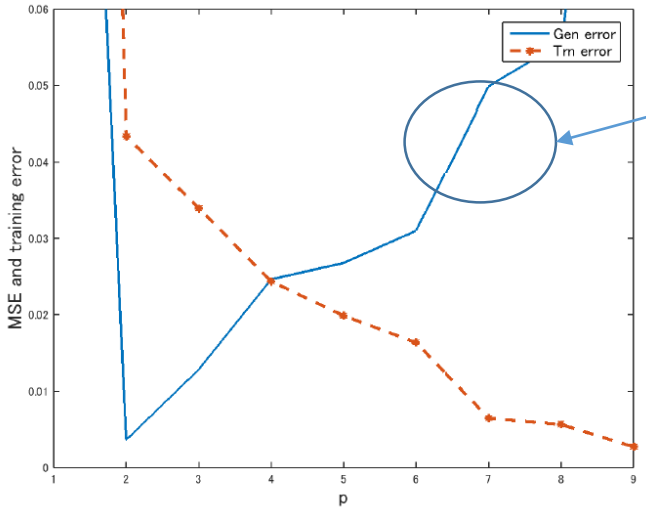
$d = 1$



$d = 2$



$d = 15$



過学習

汎化誤差と次元dの関係

訓練誤差は単調に減少するが，
汎化誤差は途中で増大する．
AIC により適切な次元が選ばれる．

中古マンション価格データの分析

国土交通省が公開している不動産取引価格情報から世田谷区の中古マンション取引価格データ (平成２５年度第３四半期分) を取得．ここから一部を抜粋したデータで回帰分析をやってみる．
http://www.land.mlit.go.jp/webland/download.html

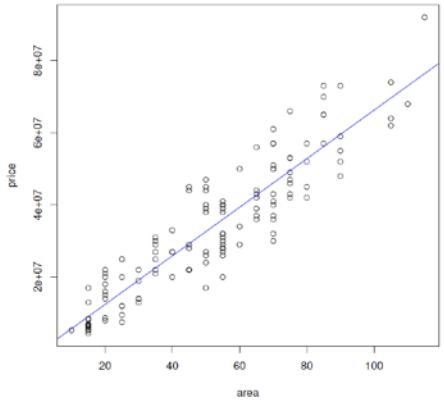
従属変数：価格
説明変数：
1. 最寄駅からの距離（徒歩）
2. 延床面積
3. 建物の構造
4. 建ぺい率
5. 容積率
6. 建築年
7. 最寄り駅に急行が止まるか (0-1変数で表現)

Rの関数 lm を使って分析.

回帰分析関数（lm）

最小二乗法の計算

```
sman.lm <- lm(price ~ area,data=sman)  #回帰分析はこの一行で OK
plot(sman$area,sman$price, xlab="area",ylab="price")  #結果をプロット
abline(sman.lm , lwd=1 , col="blue")
```



AICによる特徴選択

```
sman.lmall <- lm(price ~., data=sman)
sman.lmAIC <- step(sman.lmall)
summary(sman.lmAIC)
```

step() でAIC 最小のモデル(説明変数の組) を探索.

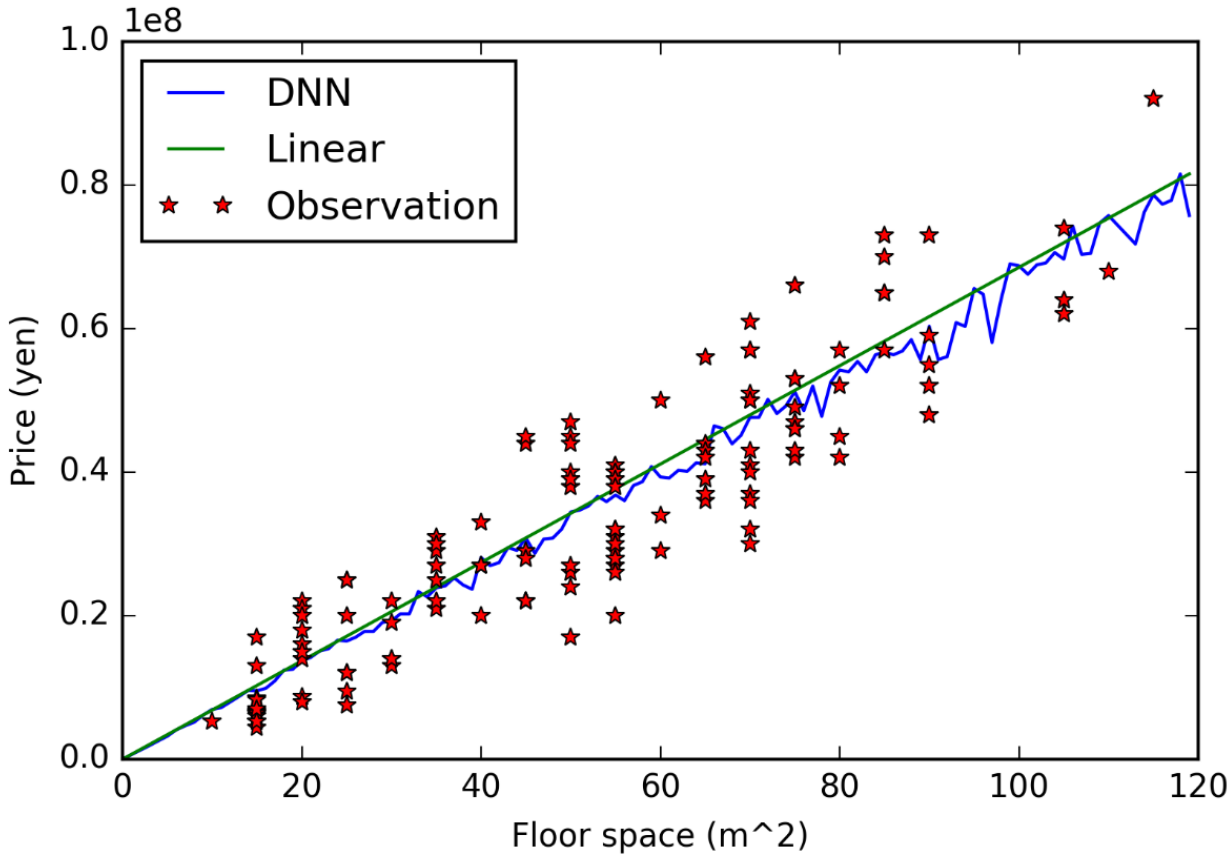
最寄駅からの距離 + 床面積 + 築年数

の三変数モデルが採用された.

1. 最寄駅からの距離（徒歩）
2. 延床面積
3. 建物の構造
4. 建ぺい率
5. 容積率
6. 築年数
7. 最寄り駅に急行が止まるか

線形モデル vs 深層学習

過学習の例



深層学習を使うには簡単&データが少なすぎる

マンションの価格推定

DNN: 中間層２層横幅100の深層NN, **Linear**: 単回帰モデル

汎化誤差（平均二乗誤差）： DNN: 1.30×10^{15}, Linear: 6.26×10^{13}

一概に何でもかんでも深層学習が良いとは言えない

これまでのまとめ

- 機械学習の歴史
- 機械学習の考え方
  - 複雑な規則をデータから学ぶ
- モデルと損失
  - 学習：期待損失最小化
- 過学習の問題
  - 複雑なモデルを当てはめれば良いわけではない.
  - 正則化
  - 変数選択

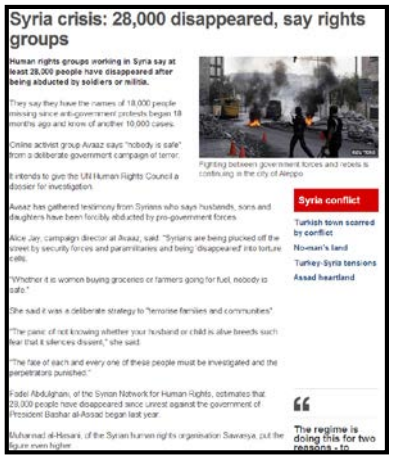
高次元スパース推定

高次元データ

インターネットや計測機器の発達により多様なデータが取得可能

多くの場合で高次元

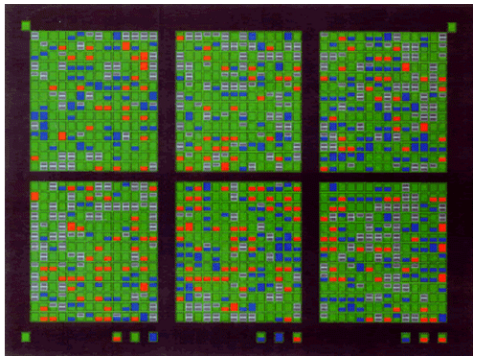
- 遺伝子データ
- テキストデータ
- マーケティングデータ
- 金融データ



Bag of words

数百万次元

Syria	13
people	5
bomb	7
economy	1
immigrants	2
soccer	0
walk	1

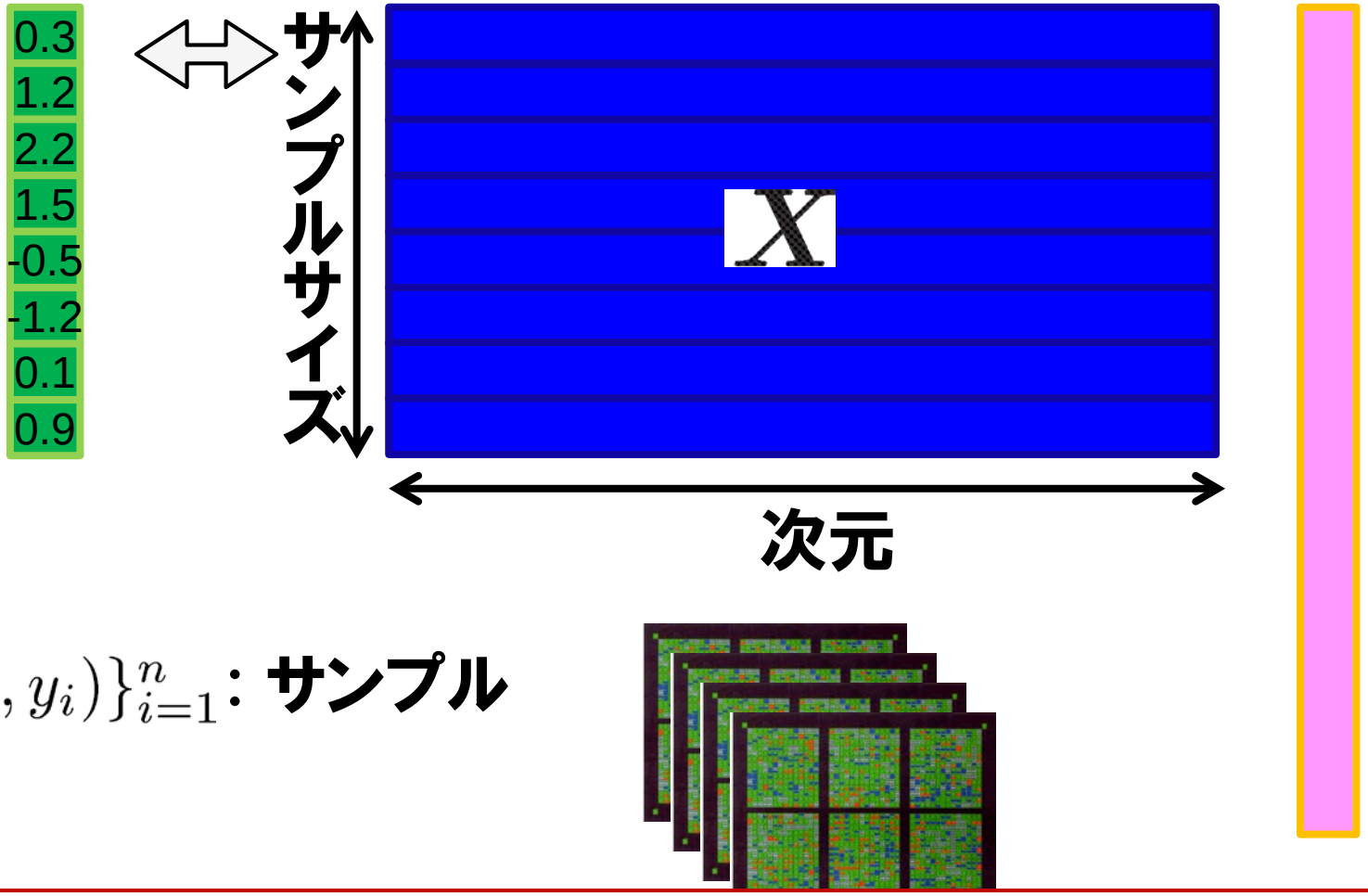


遺伝子発現量

数万次元

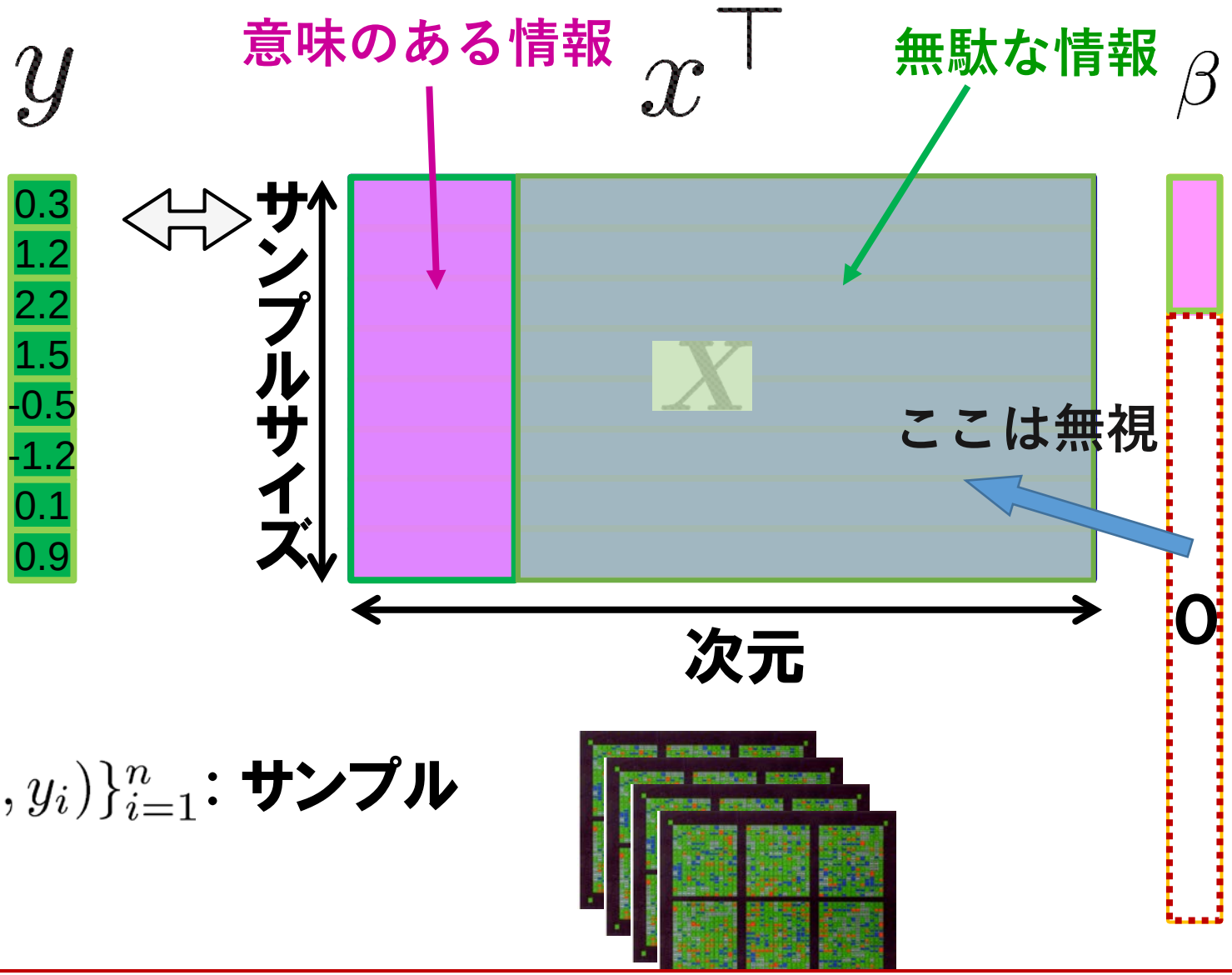
0.5
2.4
4.2
0.2
1.3
0.1
5.3

y $x^\top$ β



$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$: サンプル

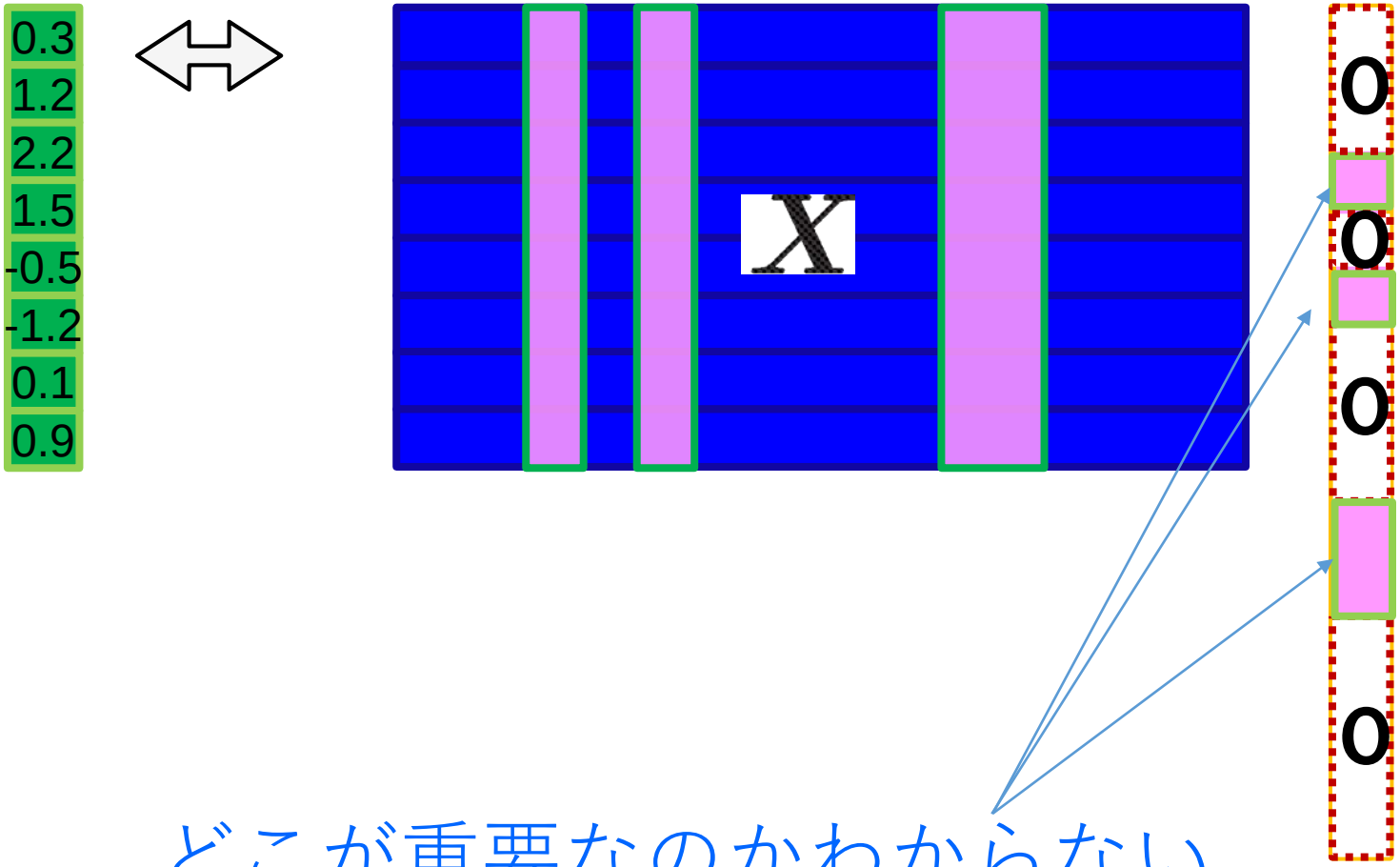
次元 > サンプルサイズ → 余分な情報を落としたい



$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$: サンプル

次元 > サンプルサイズ → 余分な情報を落としたい

スパースモデリング



どこが重要なのかわからない

→ 特徴選択：データから学習

予測に寄与する特徴量を特定できれば解釈性も上がる

AICによる特徴選択（組み合わせ的方法）

AIC: 赤池情報量規準 → 最尤推定量の予測誤差の不偏推定量

AIC最小化

$$\hat{\beta}_{\mathrm{AIC}} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \|Y - X\beta\|^2 + 2\sigma^2 \|\beta\|_0$$

データへの当てはまり

次元に対する罰則（正則化）

ただし$\|\beta\|_0 = \beta$の非ゼロ要素の個数 ：L_0ノルムと言う.

- 予測誤差を近似的に最小化
- 変数の組み合わせの数：2^p個の候補（膨大）
- NP困難

線形モデルを仮定

$$Y = X\beta^* + \xi$$

サンプルサイズn，次元p

観測ノイズ：分散σ^2の正規分布

LASSOによる特徴選択（凸最適化）

Lasso [L_1正則化] (R. Tsibshirani (1996))

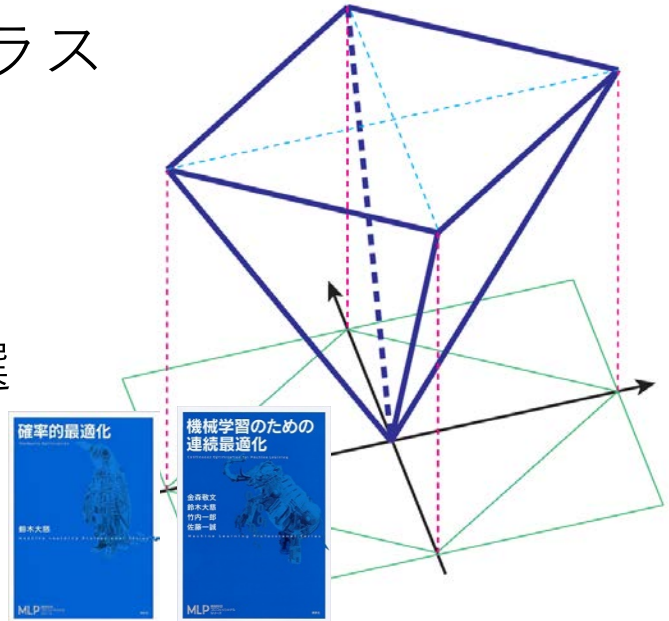
$$\hat{\beta}_{\text{Lasso}} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \|Y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_1$$

データへの当てはまり　　次元に対する罰則（正則化）

ただし $\|\beta\|_1 = \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$ ：L_1ノルムと言う.

Lassoは**凸最適化**と呼ばれる問題のクラス

- **高速に解ける（近接勾配法等）**
- L_1ノルムはL_0ノルムを最も良く近似する凸関数
- パラメータλはクロスバリデーションで選べば良い.
- 理論が豊富.

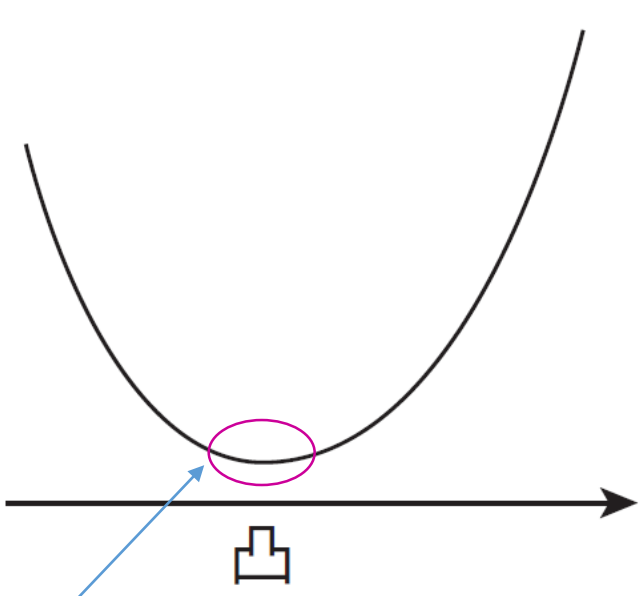


書籍：確率的最適化，機械学習のための連続最適化

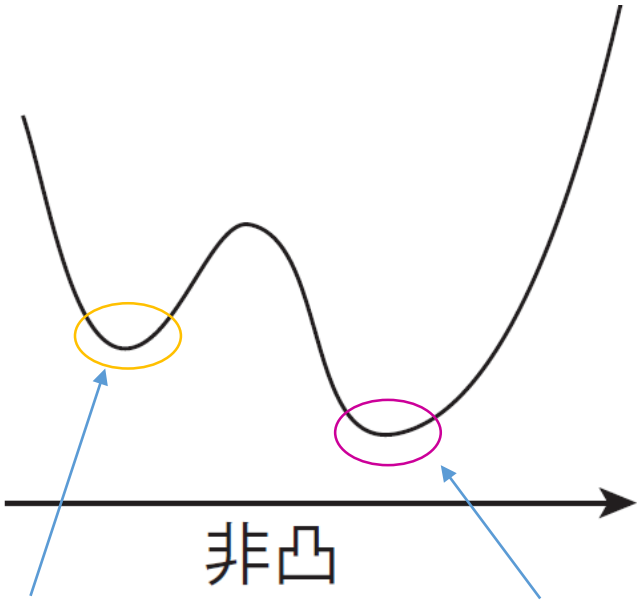
凸関数

凸最適化　＝　凸関数の最適化

$$\theta f(x) + (1-\theta) f(y) \geq f(\theta x + (1-\theta) y) \quad (\forall x, y \in \mathbb{R}^p, \theta \in [0,1])$$



局所最適解＝大域的最適解



局所最適解　　大域的最適解

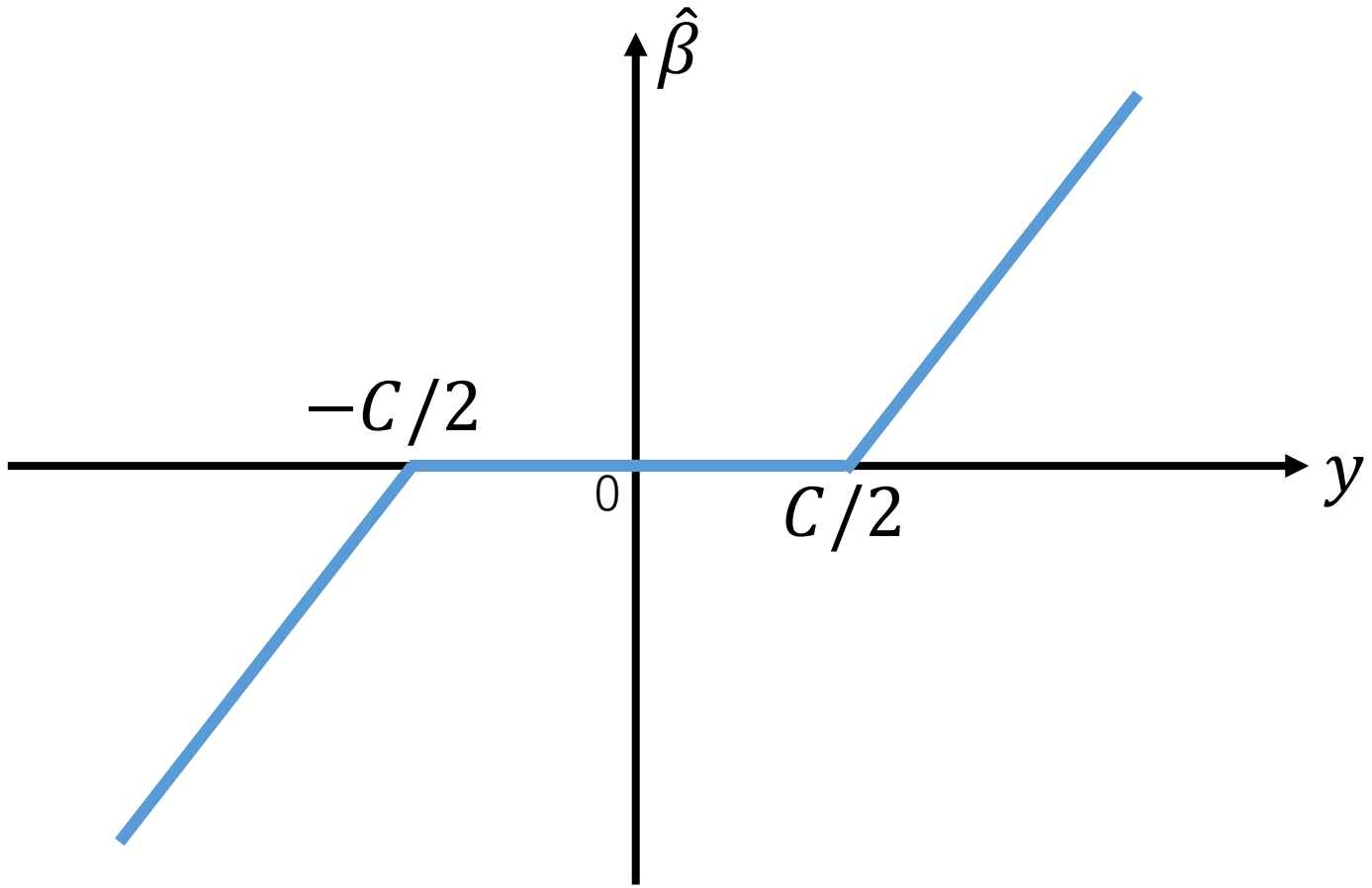
凸関数は局所最適解が大域的最適解

→ 効率的な最適化が可能な場合が多い

簡単な例

1 次元の場合

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}} (y - \beta)^2 + C|\beta|$$



Lassoのスパース性

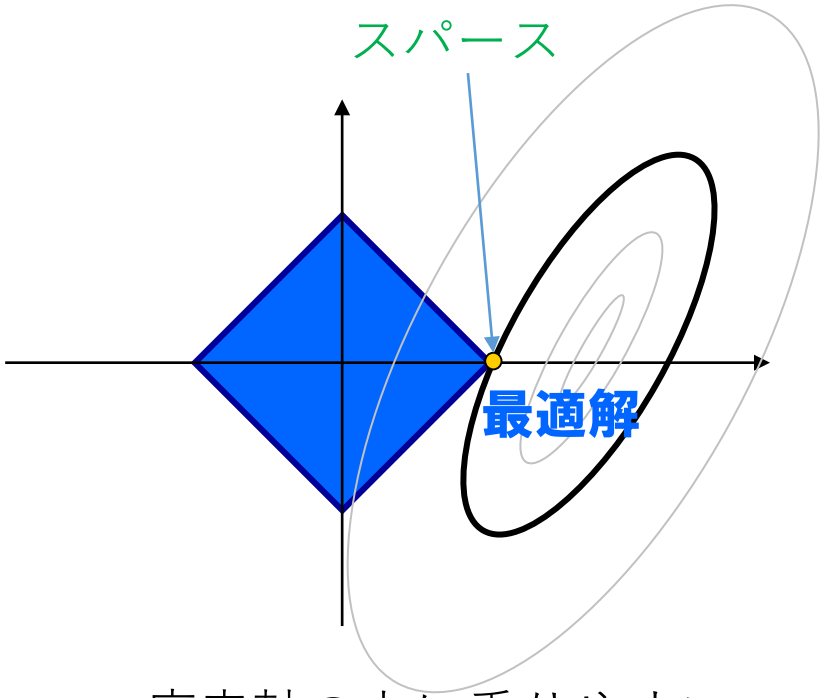
$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \|X\beta - Y\|_2^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|. \quad \Leftrightarrow \quad \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \|X\beta - Y\|^2 \text{ s.t. } \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \leq C$$

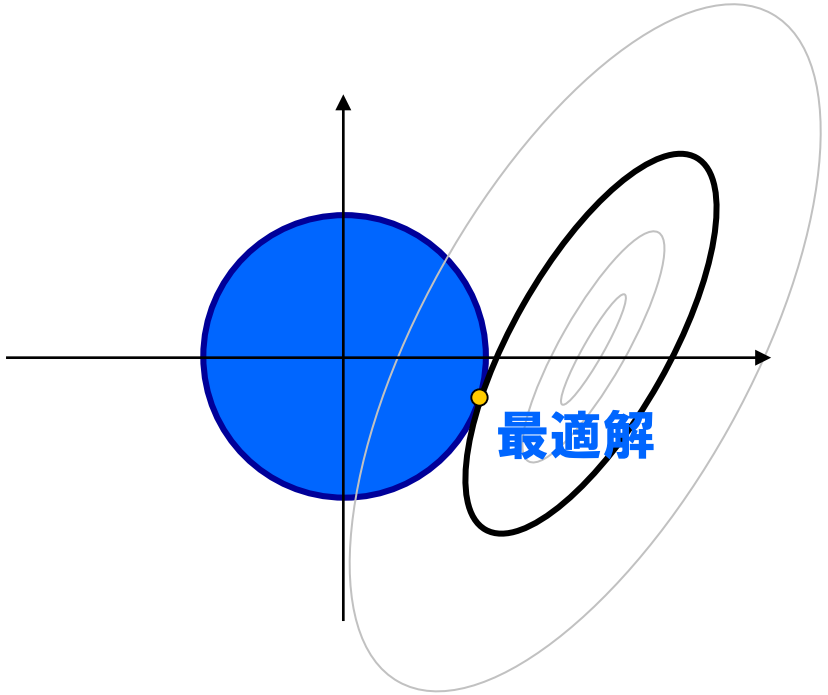
L1正則化

$$\|\beta\|_1 = |\beta_1| + \cdots + |\beta_p|$$

L２正則化（リッジ正則化）

$$\|\beta\|_2^2 = \beta_1^2 + \cdots + \beta_p^2$$





座表軸の上に乗りやすい

スパース推定によって予測に必要な変数が自動的に選ばれる

スパース性の恩恵

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{n} \|X\beta - Y\|_2^2 + \lambda_n \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$

d = 真のベクトルβ^*の非ゼロ要素の数 (予測に寄与する変数の数)

定理 (Lassoの収束レート (Bickel et al., 2009; Zhang, 2009))

ある条件のもと（制限等長性など），ある定数Cが存在して，

$$\|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2 \leq C \frac{d \log(p)}{n}$$

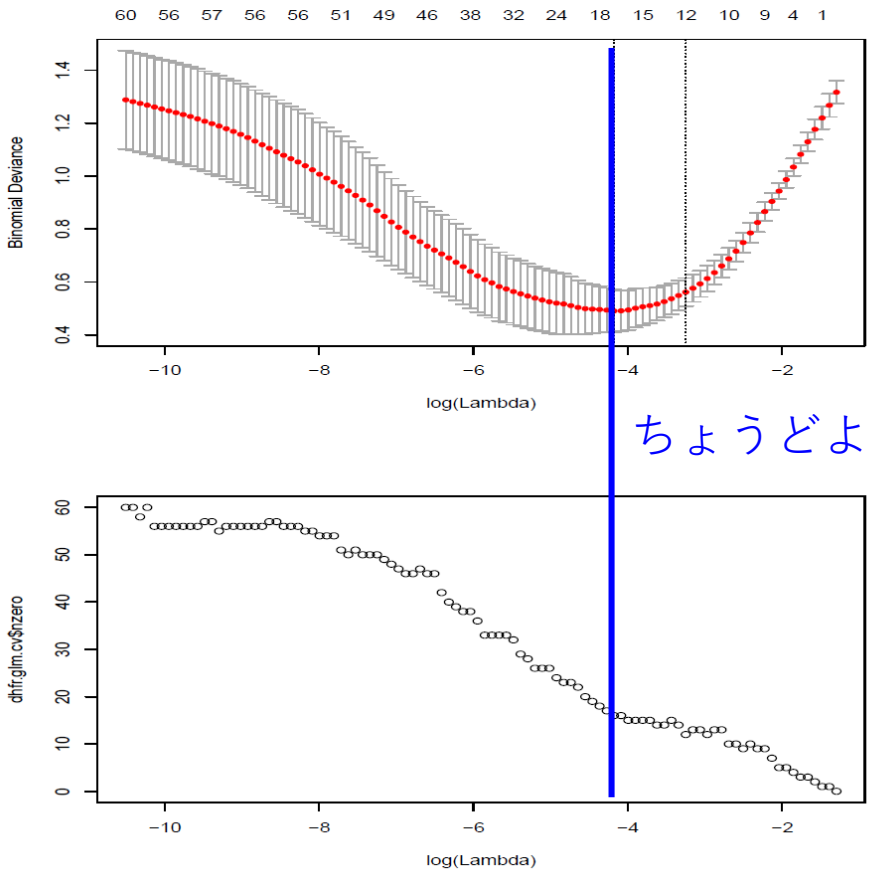
- 全体の次元pはたかだか$O(\log(p))$でしか影響しない!
- 実質的次元dが支配的.
- 高次元スパースな問題を精度よく解くことができる.

} **過学習を防止**

推定誤差 $\frac{d \log(p)}{n} \ll \frac{p}{n}$ (最小二乗法)
過学習してしまう

低次元性（スパース性）をうまく利用できている.

ジヒドロ葉酸レダクターゼデータにおける実験



CVスコア
(予測精度)

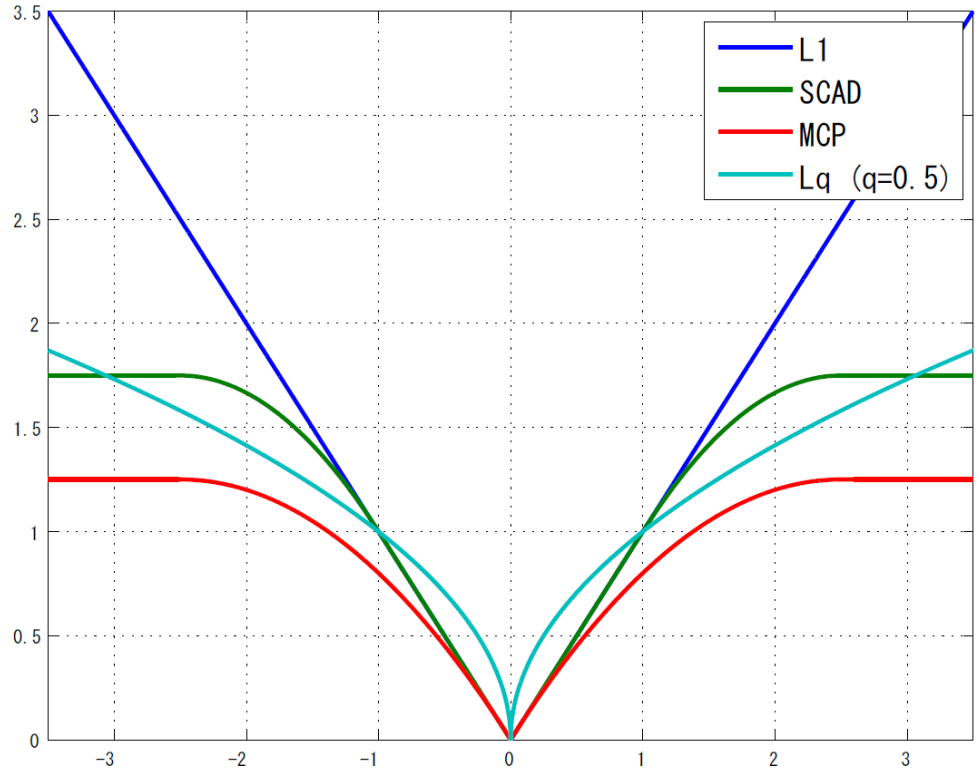
ちょうどよい正則化

非ゼロ要素の個数

スパース性と汎化誤差

横軸：正則化パラメータ．縦軸：(上段) CV スコア, (下段) 非ゼロ要素個数

非凸正則化



SCAD

$$\rho(|\beta|,\lambda) = \begin{cases} \lambda|\beta| & (|\beta| \le \lambda) \\ \frac{-|\beta|^2+2a\lambda|\beta|-\lambda^2}{2(a-1)}| & (\lambda < |\beta| \le a\lambda) \\ \frac{(a+1)\lambda^2}{2}| & (|\beta| \le a\lambda) \end{cases}$$

MCP

$$\rho(|\beta|;\lambda) = \lambda \int_0^{|\beta|} (1 - x/(\gamma\lambda))_+ \mathrm{d}x$$

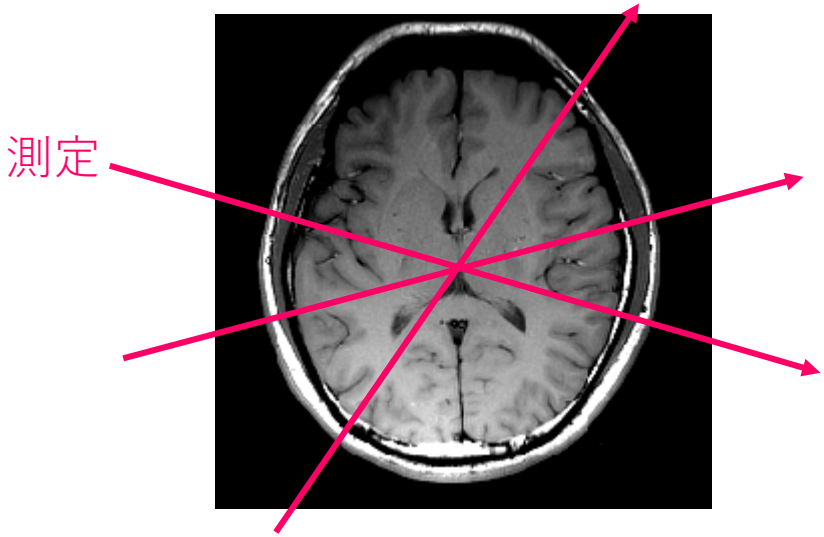
- SCAD (Smoothly Clipped Absolute Deviation) (Fan and Li, 2001)
- MCP (Minimax Concave Penalty) (Zhang, 2010)
- Lq 正則化(q < 1), Bridge 正則化(Frank and Friedman, 1993)

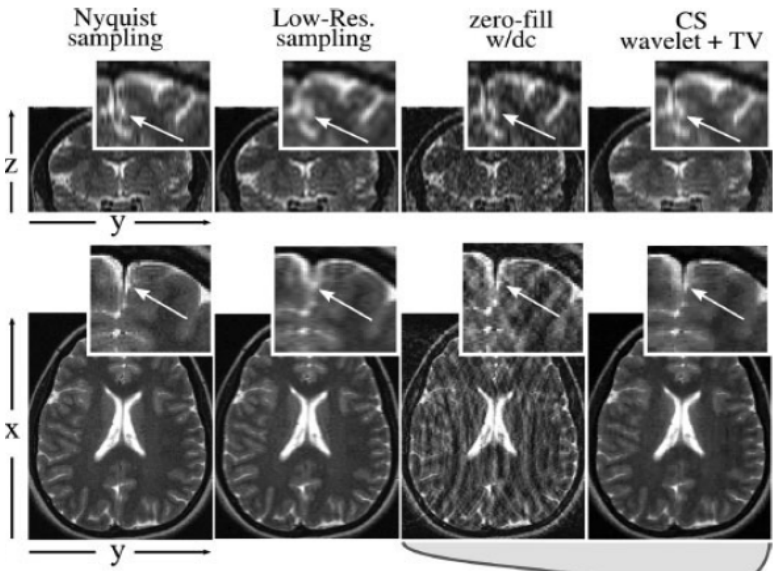
よりスパースな解．その代わり最適化は難しくなる．

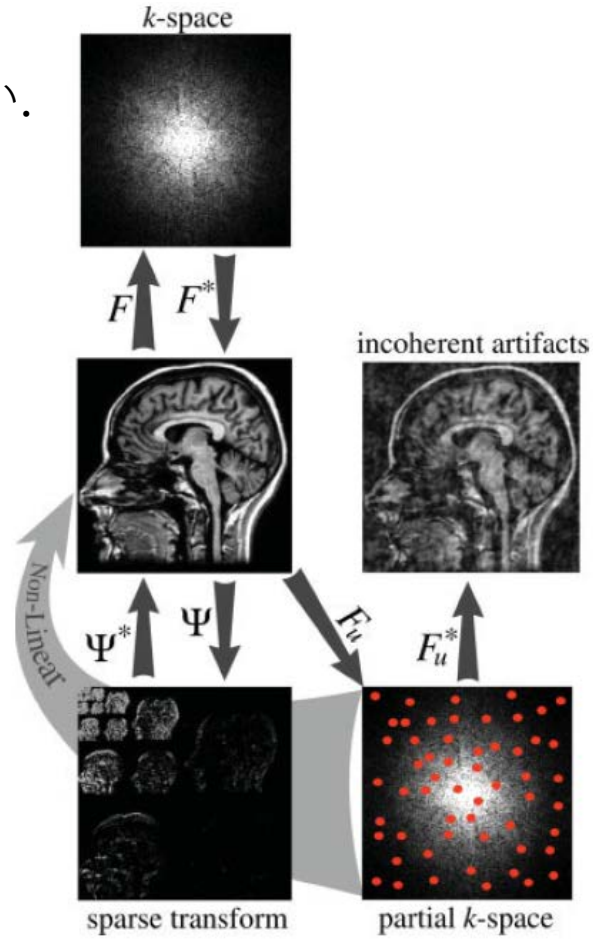
ただし，最近は局所最適解でも統計的性質は良いことが示されている．

MRIへの応用

なるべく測定時間（観測回数）を減らしたい.







画像はwavelet基底に関して[スパース](#)
→少数の観測（サンプル）でも大丈夫

[Lustig, Donoho and Pauly: Sparse MRI: The application of compressed sensing for rapid MR imaging, 2007]

スパース共分散選択

$$x_k \sim N(0,\Sigma)\ \ (\text{i.i.d.}, \Sigma \in \mathbb{R}^{p\times p}), \qquad \widehat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k x_k^\top$$

$$\hat{S} = \underset{S:\text{半正定対称}}{\arg\min} \left\{ -\log(\det(S)) + \mathrm{Tr}[S\widehat{\Sigma}] + \lambda \sum_{i,j=1}^{p} |S_{i,j}| \right\}.$$

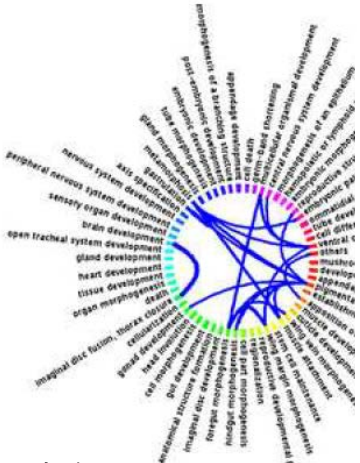
データへの当てはまり（正規分布の負対数尤度）

L1正則化

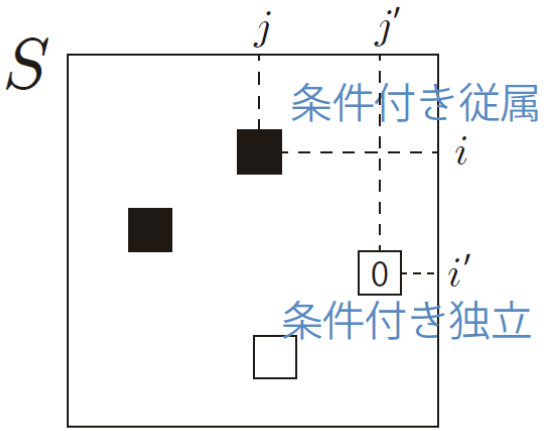
[Meinshausen and Buhlmann, 2006, Yuan and Lin, 2007, Banerjee et al., 2008]

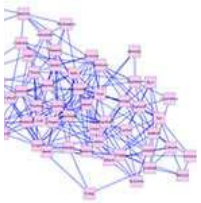
- Σの逆行列Sを推定
- S_{ij}=0 ⇔ 「X_iとX_jが条件付き独立」
- S_{ij}=0なら変数X_iと変数X_jは直接的に相互作用しないという意味

グラフィカルモデルが凸最適化で推定可能



遺伝子ネットワ

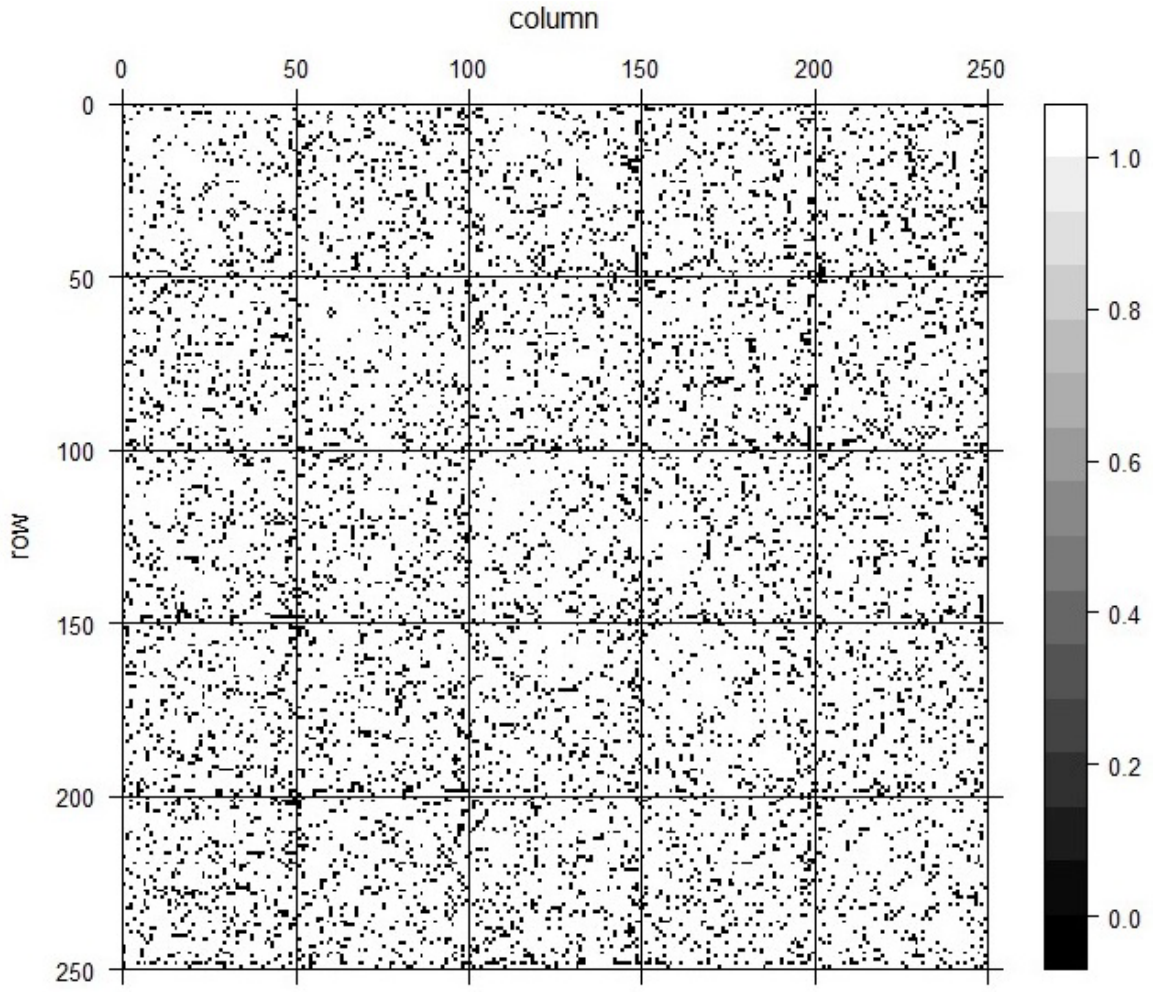




員間の関係

から推定）

[Kolar+etal,2010]



NASDAQ 銘柄からランダム抽出した50 銘柄.
株価データを用いた分散共分散選択. 時間差も考慮.
(2011 年1 月4 日から2014 年12 月31 日まで)
(Lie Michael, Bachelor thesis)

最適化法

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, x_i^\top \beta) \; + \; \psi(\beta)$$

手元にあるデータへの当てはまり（損失関数）

正則化項

記法を簡略化

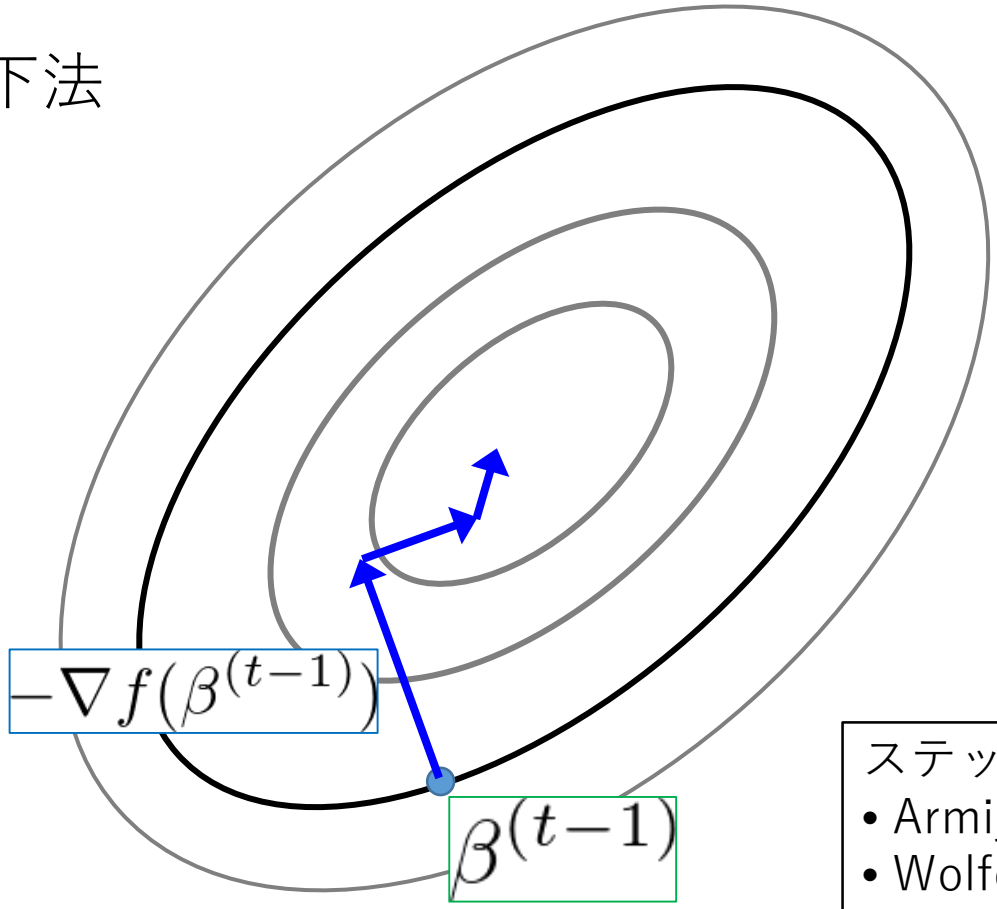
$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \quad f(\beta) + \psi(\beta)$$

最適化法：どうやってこの最適化問題を解く？

- 勾配法
- 座標降下法
- 交互方向乗数法

正則化項がない場合の最適化

- 最急降下法



ステップサイズの決定には
- Armijoの規準
- Wolfeの規準

等がある.

$$\beta^{(t)} = \beta^{(t-1)} - \alpha_t \nabla f(\beta^{(t-1)})$$

正則化項がある場合：近接勾配法

$$f(\beta) + \psi(\beta)$$

線形近似

正則化項はそのまま
（正則化項は微分不可能）

$$g_t = \nabla f(\beta^{(t-1)})$$

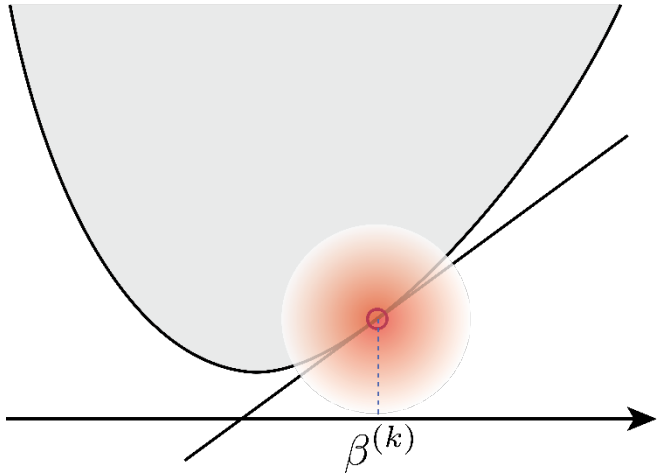
$$\beta^{(t)} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \left\{ g_t^\top \beta + \psi(\beta) + \frac{\eta_t}{2} \|\beta - \beta^{(t-1)}\|^2 \right\}$$

遠くへ離れないようにする項

鍵となる計算：**近接写像**

$$\mathrm{prox}(\mathbf{q}|\psi) := \underset{\mathbf{x}}{\arg\min} \left\{ \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{q}\|^2 \right\}$$

→　L1正則化なら簡単に計算可能.
（Soft-thresholding関数）



近接写像を用いた表記

$$g_t = \nabla f(\beta^{(t-1)})$$

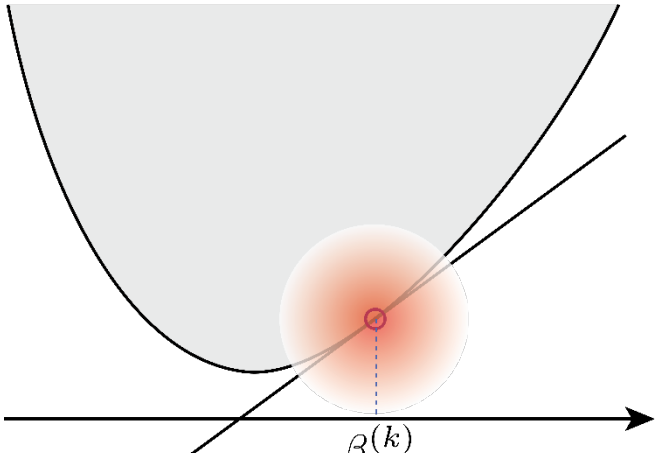
$$\begin{aligned}\beta^{(t)} &= \arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^p}\left\{g_t^\top\beta + \psi(\beta) + \frac{\eta_t}{2}\|\beta-\beta^{(t-1)}\|^2\right\}\\ &= \arg\min_{\beta\in\mathbb{R}^p}\left\{\frac{\psi(\beta)}{\eta_t} + \frac{1}{2}\left\|\beta-\left(\beta^{(t-1)}-\frac{g_t}{\eta_t}\right)\right\|^2\right\}\\ &= \mathrm{prox}(\beta^{(t-1)} - g_t/\eta_t|\psi/\eta_t)\end{aligned}$$

- Ψ=0なら単なる最急降下法
- Ψがある凸集合の標示関数なら射影勾配法

鍵となる計算：**近接写像**

$$\mathrm{prox}(\mathbf{q}|\psi) := \arg\min_{\mathbf{x}}\left\{\psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{q}\|^2\right\}$$

→ L1正則化なら簡単に計算可能.
（Soft-thresholding関数）



具体例：L1正則化

座標ごとにわかれている！

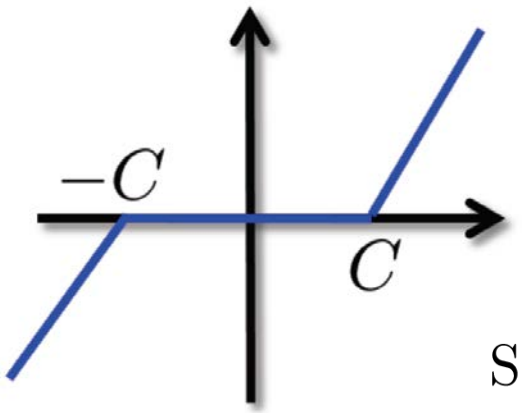
$$\beta_j^{(t)} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \left\{ g_{t,j} + \lambda |\beta_j| + \frac{\eta_t}{2} (\beta_j - \beta_j^{(t-1)})^2 \right\}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{prox}(\mathbf{q}|C\|\cdot\|_1) &= \underset{\mathbf{x}}{\arg\min} \left\{ C\|\mathbf{x}\|_1 + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{q}\|^2 \right\} \\ &= (\mathrm{sign}(q_j)\max(|q_j| - C, 0))_j. \end{aligned}$$

$\mathrm{sign}(q_j)\max(|q_j| - C, 0)$ を $\mathrm{ST}_C(q_j)$ とおく

$$\beta_j^{(t)} = \mathrm{ST}_{\lambda/\eta_t}\left(\beta_j^{(t-1)} - \frac{g_{t,j}}{\eta_t}\right)$$

解が陽に書ける！



$\mathrm{ST}_C(q_j)$のグラフ

近接勾配法の収束速度

$$\beta^{(t)} = \mathrm{prox}(\beta^{(t-1)} - g_t/\eta_t | \psi/\eta_t)$$

f の性質	μ-強凸	非強凸
L-平滑	$\exp\left(-t\frac{\mu}{L}\right)$	$\frac{L}{t}$
非平滑	$\frac{1}{\mu t}$	$\frac{1}{\sqrt{t}}$

- 滑らかなほど・強凸なほど速い.
- Nesterov の加速法を用いれば滑らかな場合に速くなる (Nesterov, 2007, Zhang et al., 2010).
- 上のオーダーは勾配情報のみを用いる方法 (First order method) の中で最適.

η_t の設定	強凸	非強凸
平滑	L	L
非平滑	$\frac{\mu t}{2}$	$\sqrt{t}$

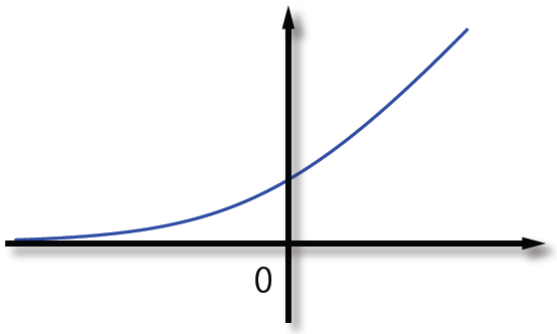
強凸性と平滑性

- 平滑性： 勾配の変化がゆっくり

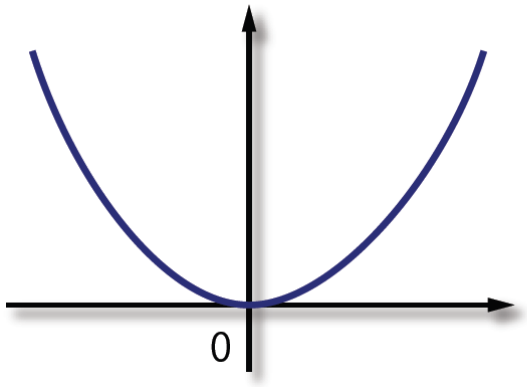
$$\|\nabla f(x) - \nabla f(x')\| \leq L\|x - x'\|$$

- 強凸性： 2 次関数以上に曲がっている

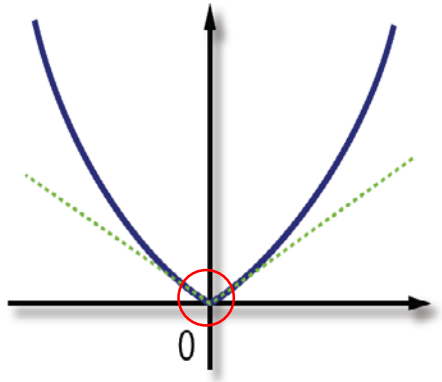
$$\frac{\mu}{2}\theta(1-\theta)\|x-y\|^2 + f(\theta x + (1-\theta)y) \leq \theta f(x) + (1-\theta)f(y)$$



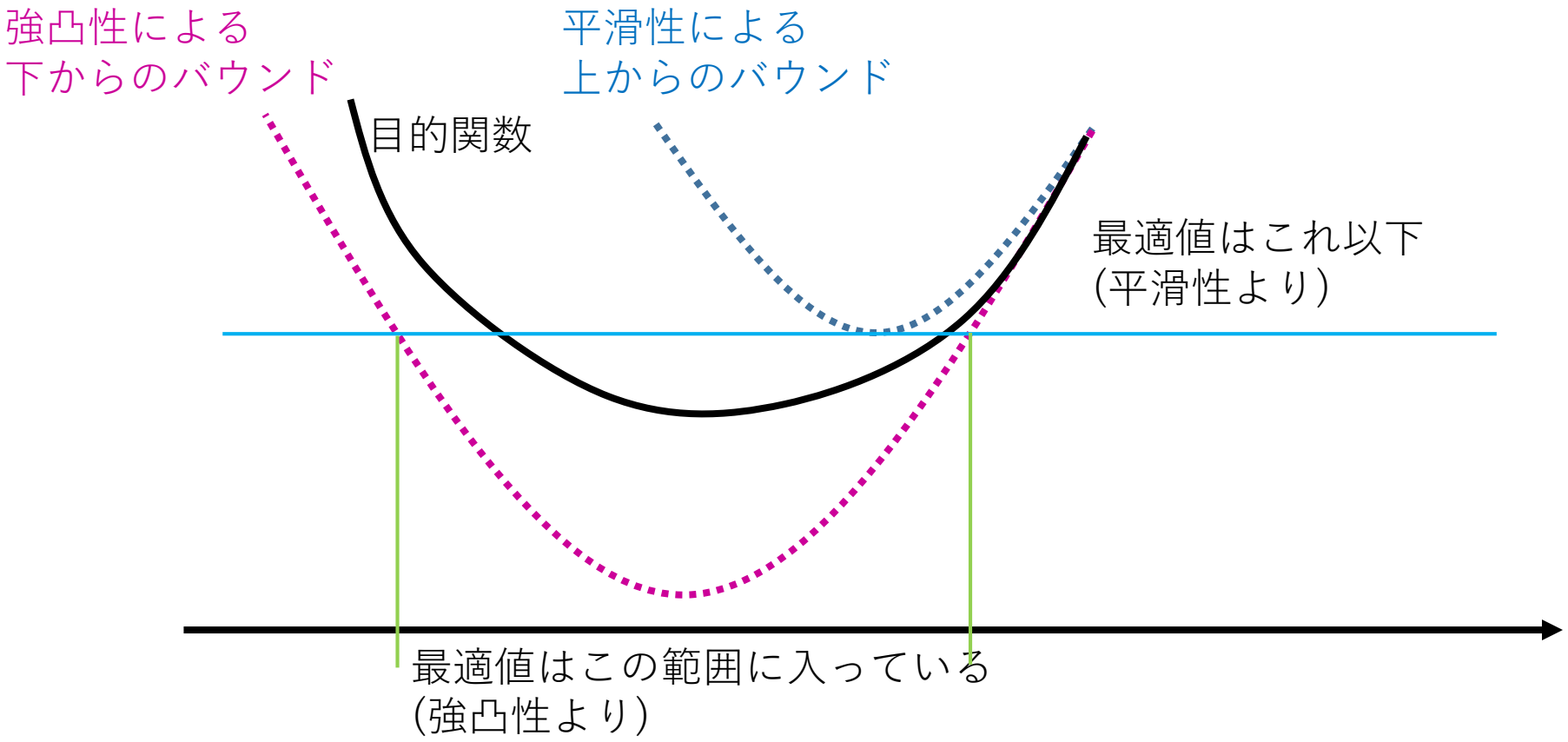
平滑だが強凸ではない



平滑かつ強凸



強凸だが平滑ではない



平滑性→最適値を上から抑えられる.
強凸性→最適値の範囲を限定できる.

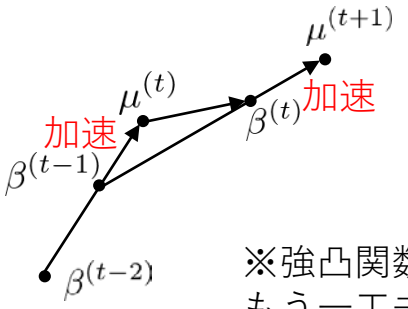
近接勾配法の収束速度

Nesterovの加速法

$$\beta^{(t)} = \mathrm{prox}(\mu^{(t)} - g_t/\eta|\psi/\eta)$$

$$s_{t+1} = \frac{1+\sqrt{1+4s_t^2}}{2}$$

$$\mu^{(t+1)} = \beta^{(t)} + \left(\frac{s_t - 1}{s_{t+1}}\right)(\beta^{(t)} - \beta^{(t-1)})$$



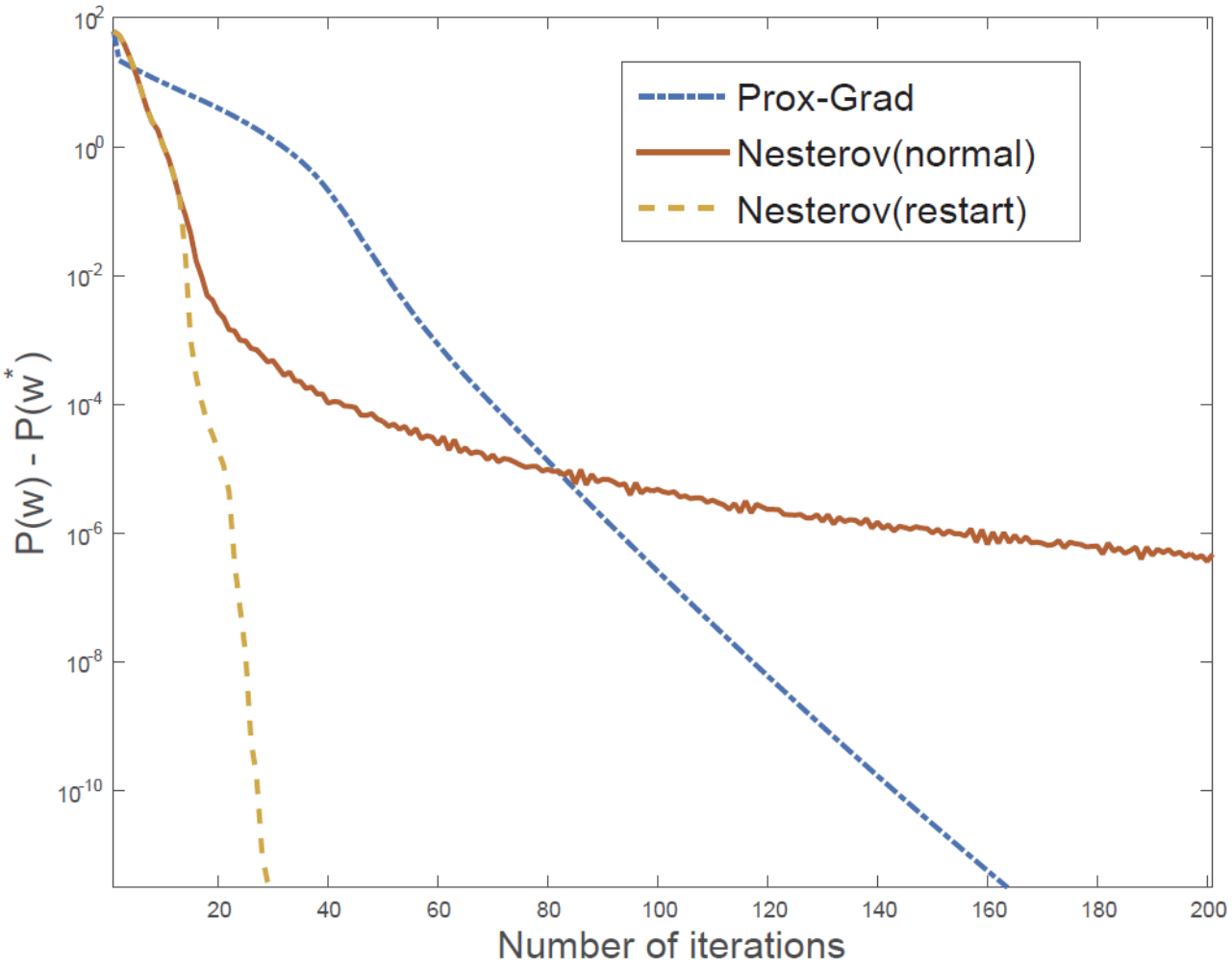
※強凸関数にはもう一工夫必要

f の性質	μ-強凸	非強凸
L-平滑	$\exp\left(-t\sqrt{\frac{\mu}{L}}\right)$	$\frac{L}{t^2}$
非平滑	$\frac{1}{\mu t}$	$\frac{1}{\sqrt{t}}$

- 滑らかなほど・強凸なほど速い.
- Nesterov の加速法を用いれば滑らかな場合に速くなる (Nesterov, 2007, Zhang et al., 2010).
- 上のオーダーは勾配情報のみを用いる方法 (First order method) の中で最適.

η_t の設定	強凸	非強凸
平滑	L	L
非平滑	$\frac{\mu t}{2}$	$\sqrt{t}$

数値実験例



サンプルサイズ$n = 700$，次元$p = 1000$，100成分のみ非ゼロ

総計算量

経験損失はO(1/n)まで下げる必要がある．（汎化誤差ミニマックスレートがO(1/n)）

$\kappa = \frac{L}{\mu}$ ：条件数

一回の更新にかかる計算量
$O(n)$

$\nabla f(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \nabla_\beta \ell(z_i, \beta)$：$n$個の和

×

1/nまで下げるのに必要な更新回数
$O\left(\sqrt{\kappa}\log(n)\right)$

Nesterovの加速法

＝

総計算量
$O(n\sqrt{\kappa}\log(n))$

- サンプルサイズnが強く効いてくる
- 大規模データの最適化が難しい

→ 確率的最適化が有用

まとめ

- 機械学習の歴史
- 機械学習の考え方
  - 複雑な規則をデータから学ぶ
- モデルと損失
  - 学習：期待損失最小化
- 過学習の問題
  - 複雑なモデルを当てはめれば良いわけではない.
  - 正則化
  - 変数選択
- スパース高次元データ解析
  - Lasso

次回：
- 低ランク行列/テンソル分解
- 深層学習

講義第二回目

その他のスパース性

スパース正則化はL1正則化だけではない.

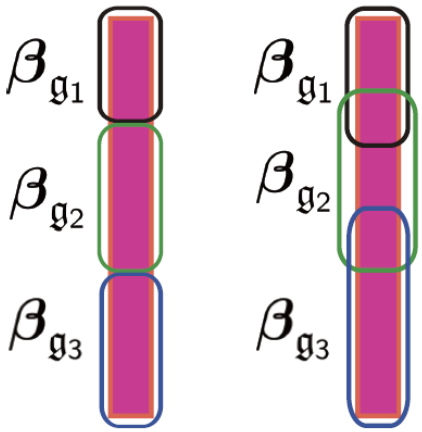
他にも以下のようなより構造を持った正則化がある.

構造的正則化

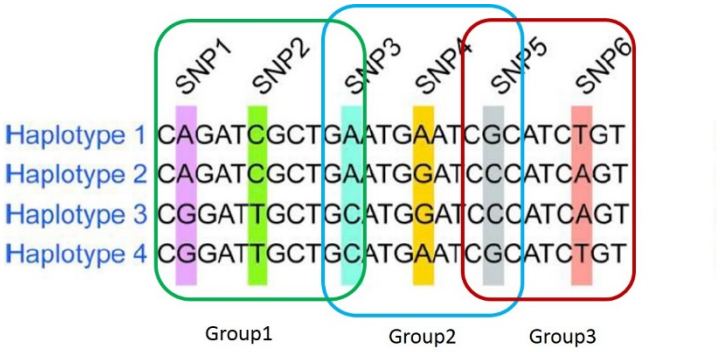
- グループ正則化：変数のグループごと 0 にする.
- 一般化連結正則化
- トレースノルム正則化

グループ正則化

$$\psi(\beta) = C \sum_{\mathfrak{g} \in \mathfrak{G}} \|\beta_{\mathfrak{g}}\|$$



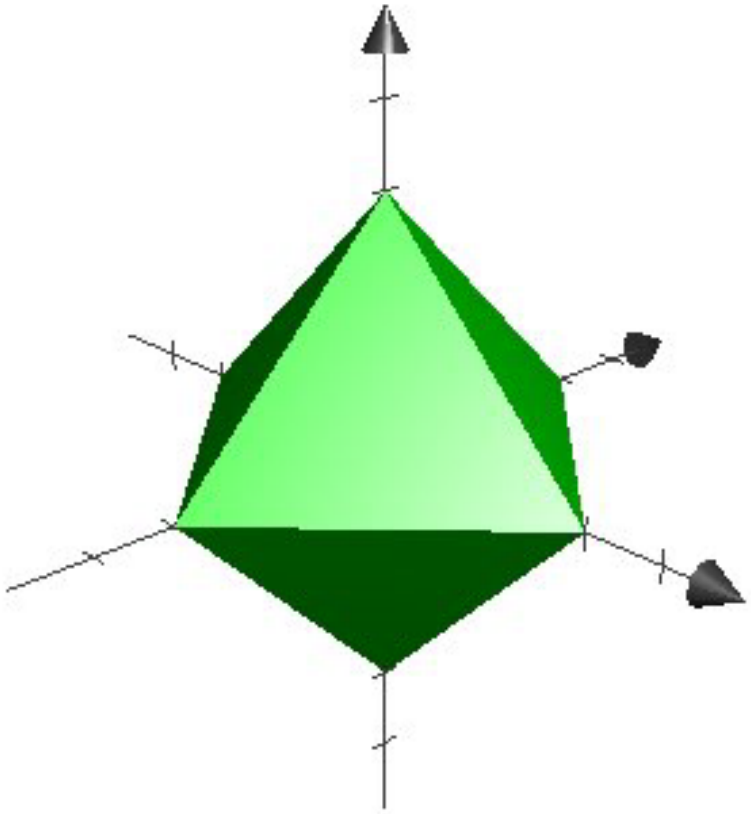
- グループごとに正則化
- グループ全体が0になりやすい.



Genome Wide Association Study (GWAS)
[Balding `06, McCarthy et al. `08]

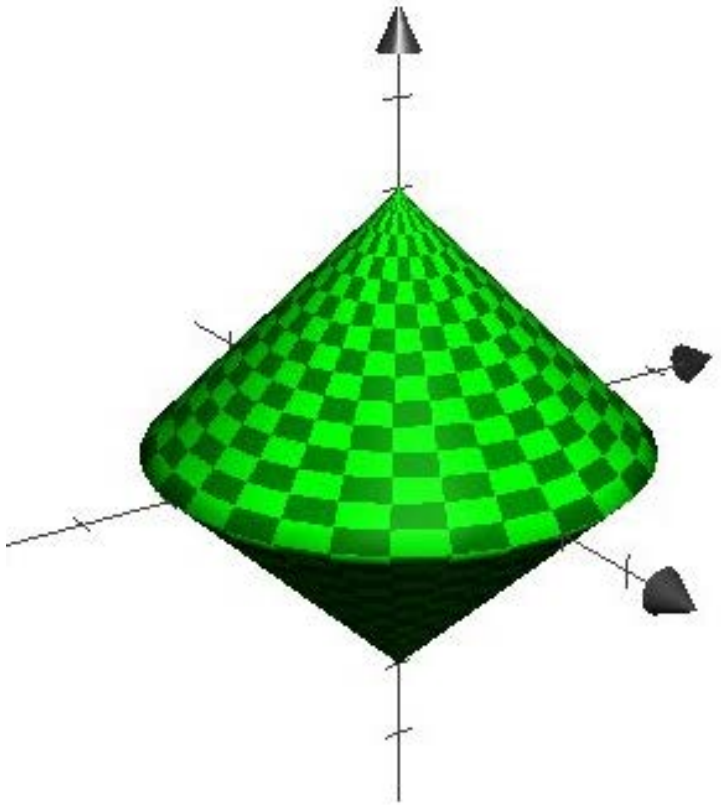
グループ正則化の概形

Lasso



$$|\beta_1| + |\beta_2| + |\beta_3| \leq 1$$

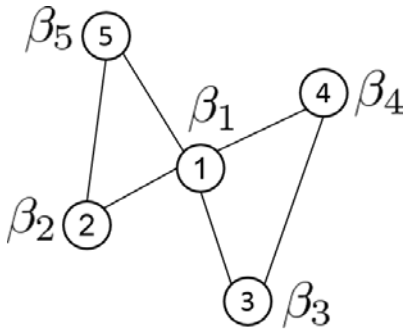
Group Lasso

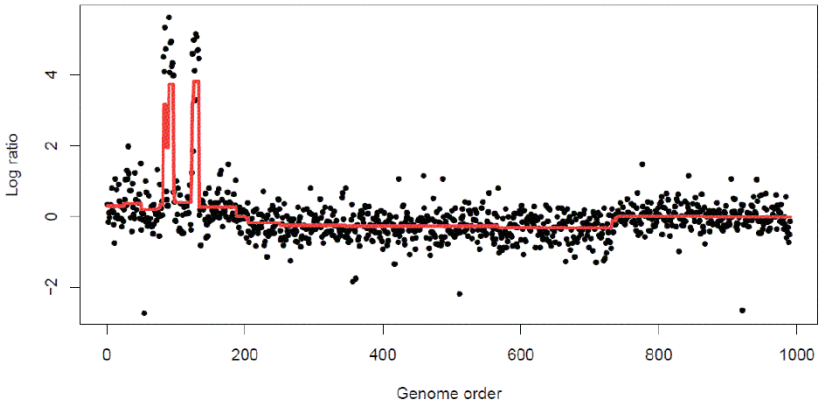


$$\sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2} + |\beta_3| \leq 1$$

一般化連結正則化（Fused Lasso）

$$\psi(\beta) = \sum_{(i,j)\in E} |\beta_i - \beta_j|$$





Fused lasso による遺伝子データ解析
[Tibshirani and Taylor `11]

TVデノイジング
（パッチを使わないデノイジング）
[Chambolle `04, Mairal et al., 2009]

背景切り出し [Mairal et al.: 2011]

テスト画像　L1正則化　L1/L2グループ正則化　一般化連結正則化

低ランク行列補完

ベクトルから**行列**の学習へ

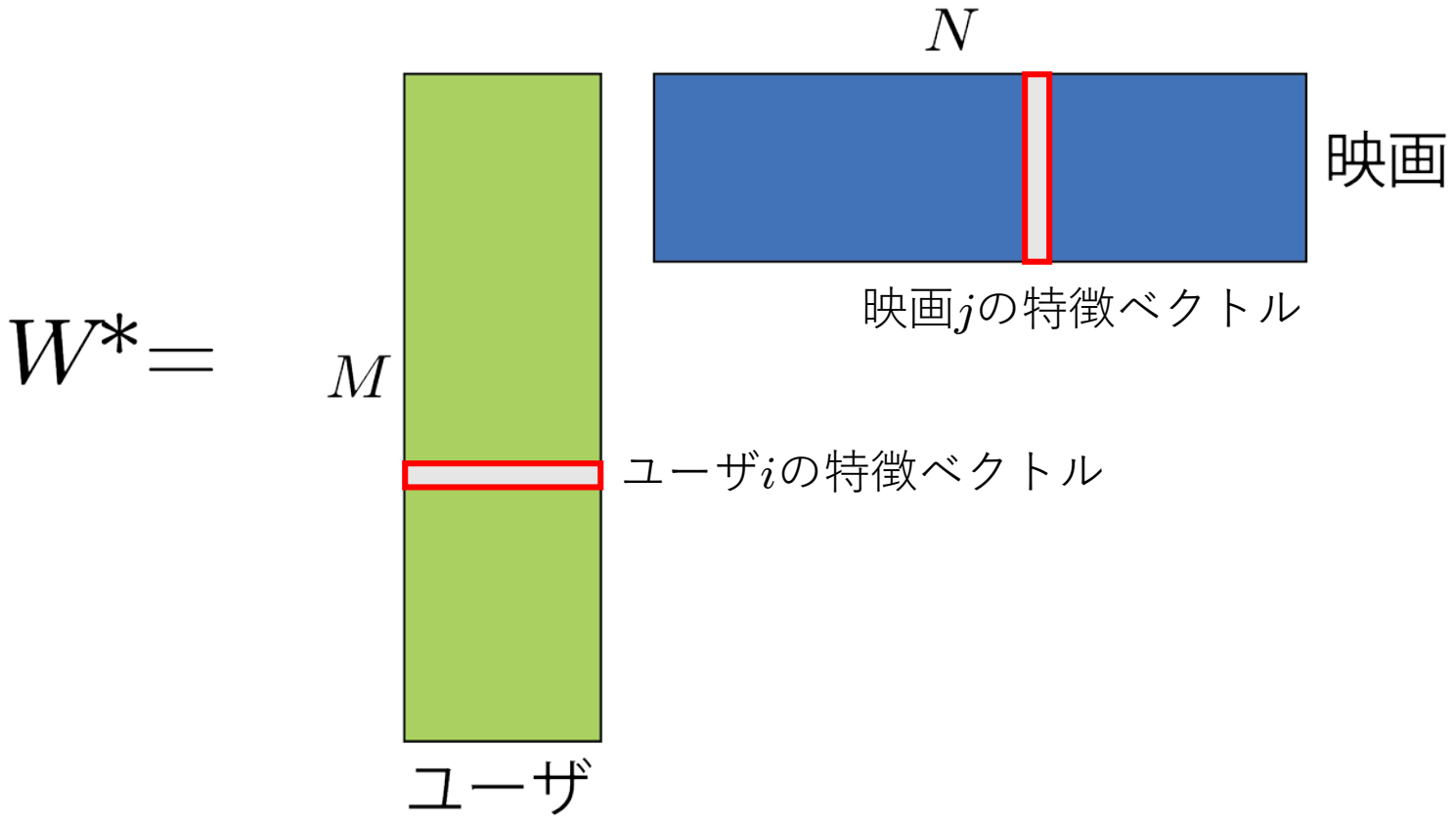
- 推薦システム

	映画 A	映画 B	映画 C	・・・	映画 X
ユーザ 1	4	8	4	・・・	2
ユーザ 2	2	4	2	・・・	1
ユーザ 3	2	4	2	・・・	1
⋮					

ランク 1 と仮定

各ユーザーが各映画をどれだけ好むかという部分的情報がある.
→　残りの部分（*の部分）を埋めたい.
　　低ランク行列補完で可能.

e.g., Netflix prize (100万ドルの賞金,　48万ユーザ×１万8千映画)



低ランク行列の学習は「ユーザ」と「映画」の低次元表現を学習することに他ならない.
→交互最適化法やトレースノルム正則化法で学習可能

推定誤差 $O\left(\frac{r(M+N)}{n}\right) \ll O\left(\frac{MN}{n}\right)$ (低ランク性を利用しない最小二乗法)

r:ランク

スパース表現，辞書学習

(a) (b)

Mairal, Elad and Sapiro: Sparse Representation for Color Image Restoration. *IEEE Transactions on Image Processing*, Vol. 17, No. 1, 2008.

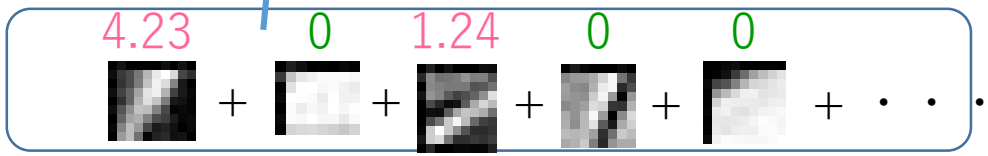
低ランク行列推定による辞書学習

スパースコーディング

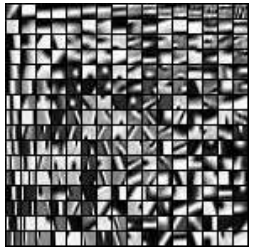
辞書（イメージパッチ）　スパースな係数　ノイズ

観測画像

$$x = D\alpha + \xi$$



学習された辞書



$$(\hat{D}, \hat{\alpha}) = \underset{D \in \mathbb{R}^{p \times k}, \alpha_i \in \mathbb{R}^k}{\arg\min} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|x_i - D\alpha_i\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} \|\alpha_i\|_1$$

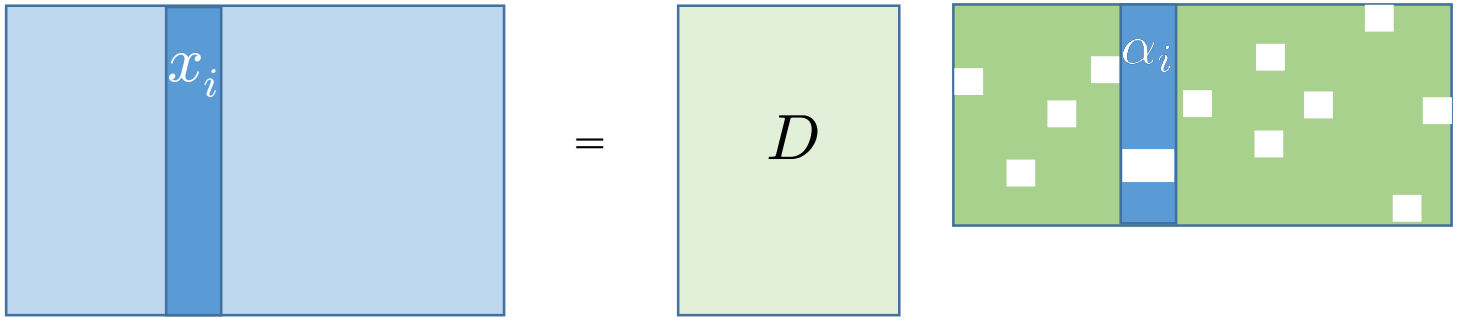
$$\text{s.t.} \quad \|D_{:,j}\| \leq 1 \quad (j = 1, \ldots, k)$$

各画像がスパースな係数で表現できるような辞書を構成

x_i $(i=1,\ldots,n)$ ：n枚の画像

$\alpha_i (i=1,\ldots,n)$ ：n枚の画像それぞれの係数（学習対象）

D：全画像共通の辞書（学習対象）



実際はイメージパッチ（D）と係数（α）を交互に最適化して学習.

スパースコーディングを用いたデノイジング

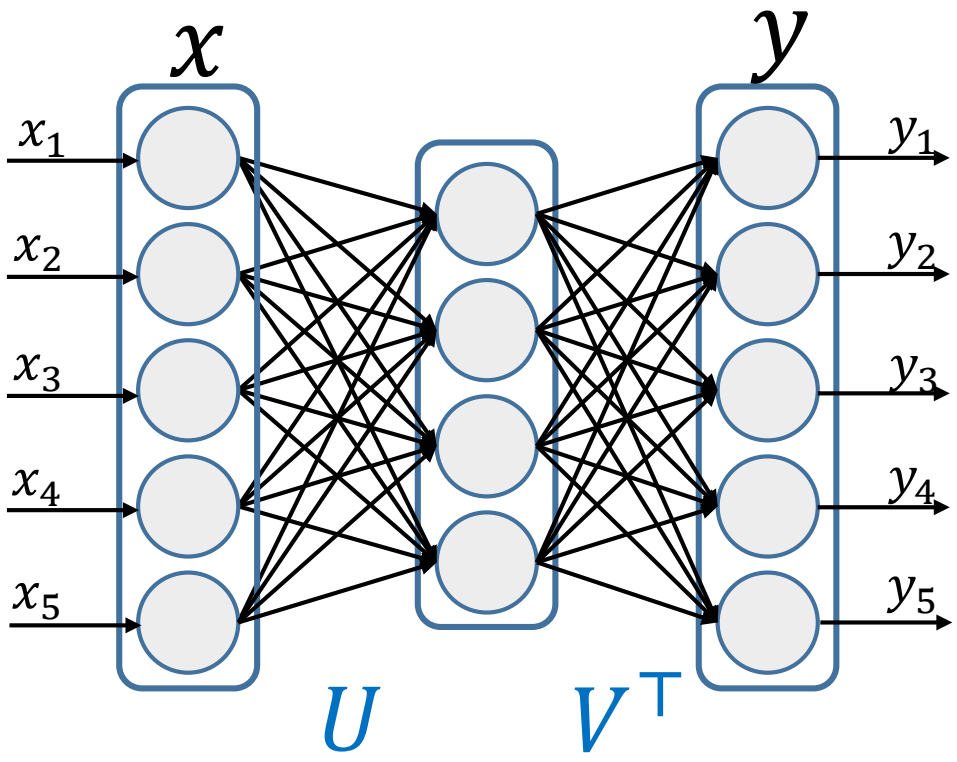
This image is taken from MLSS2012 tutorial by F. Bach.

Mairal et al.: Non-local sparse models for image restoration.
In *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2009.

スパース表現を用いた画像補完

Mairal, Elad and Sapiro: Sparse Representation for Color Image Restoration. *IEEE Transactions on Image Processing*, Vol. 17, No. 1, 2008.

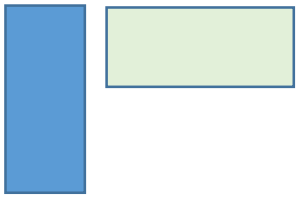
3層ニューラルネットワーク



$$f(x) = V^\top U x$$

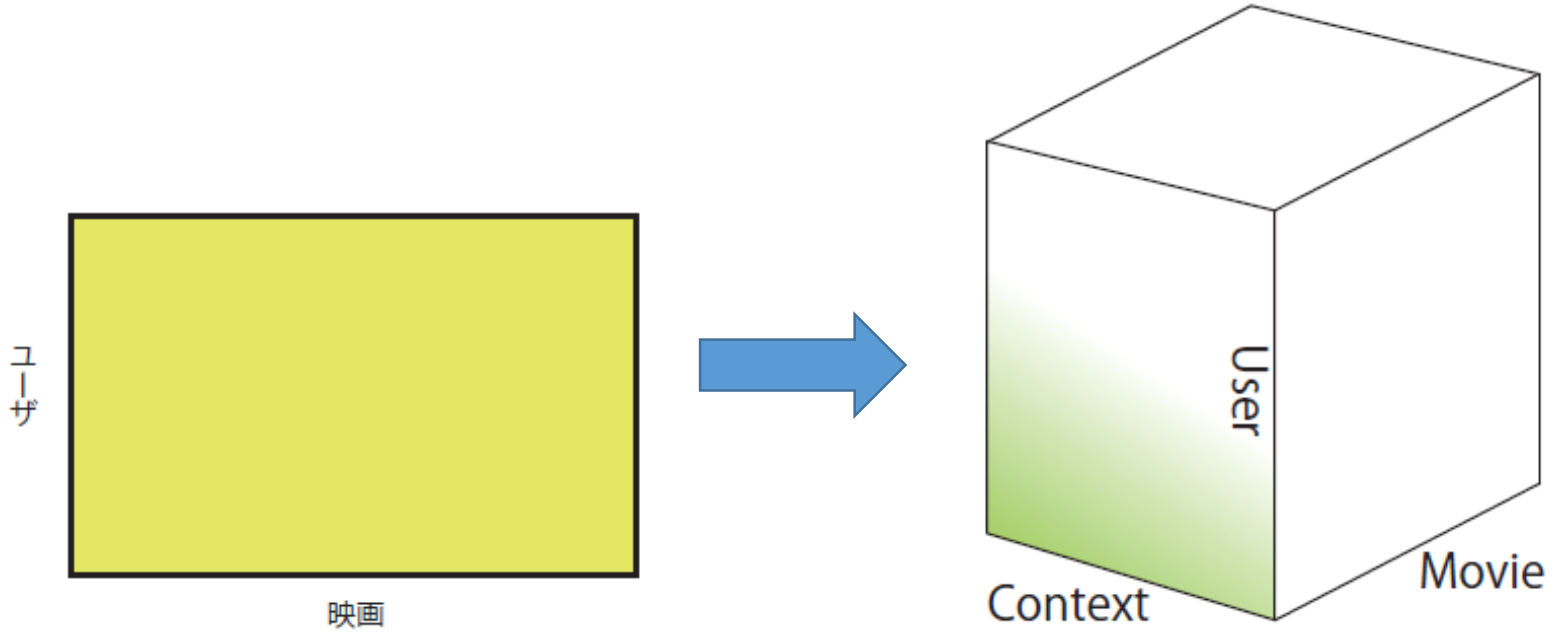
$$f(x) = V^\top h(Ux)$$

低ランク行列



- 縮小ランク回帰
- マルチタスク学習

テンソルへの拡張



行列

$$X_{ij} = \sum_{r=1}^{d} u_{r,i}^{(1)} u_{r,j}^{(2)}$$

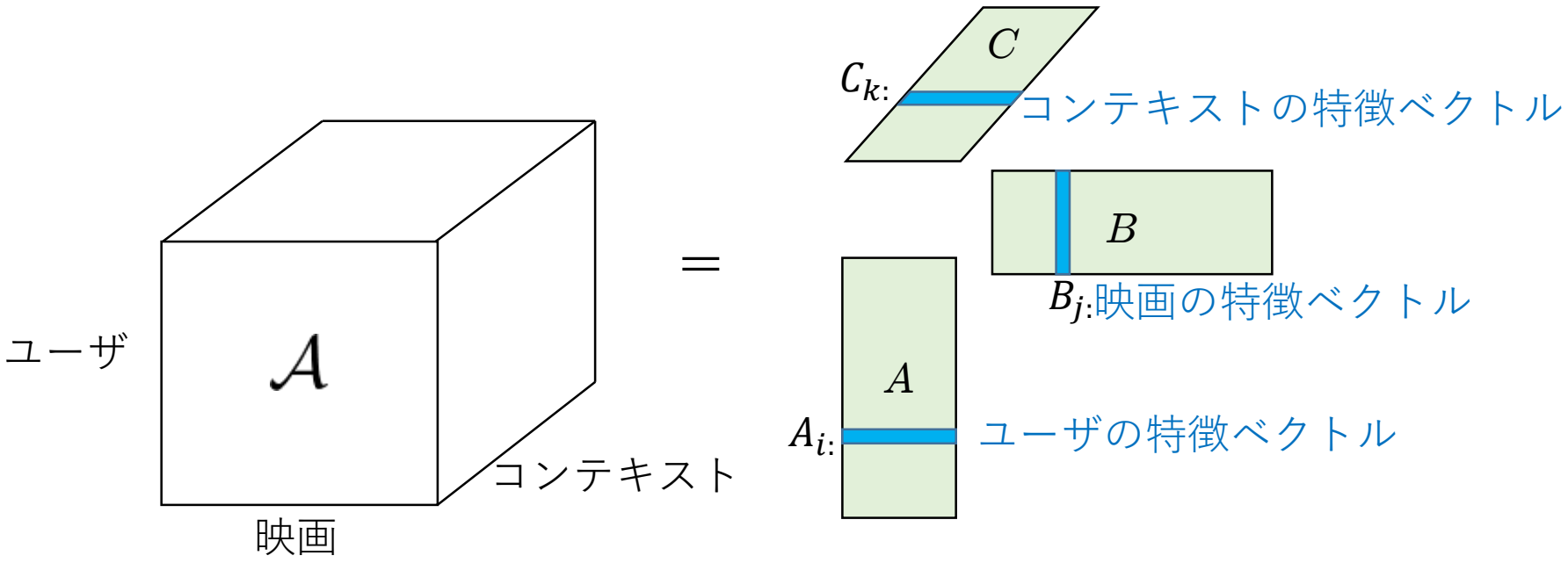
テンソル

$$X_{ijk} = \sum_{r=1}^{d} u_{r,i}^{(1)} u_{r,j}^{(2)} u_{r,k}^{(3)}$$

応用

- 推薦システム
- 自然言語処理（単語のベクトル表現）
- 時空間データ解析
- 関係データ解析
- マルチタスク学習

低ランクテンソルモデル



$$\mathcal{A}_{ijk} = A_{i1}B_{j1}C_{k1} + A_{i2}B_{j2}C_{k2} + \cdots + A_{id}B_{jd}C_{kd}$$

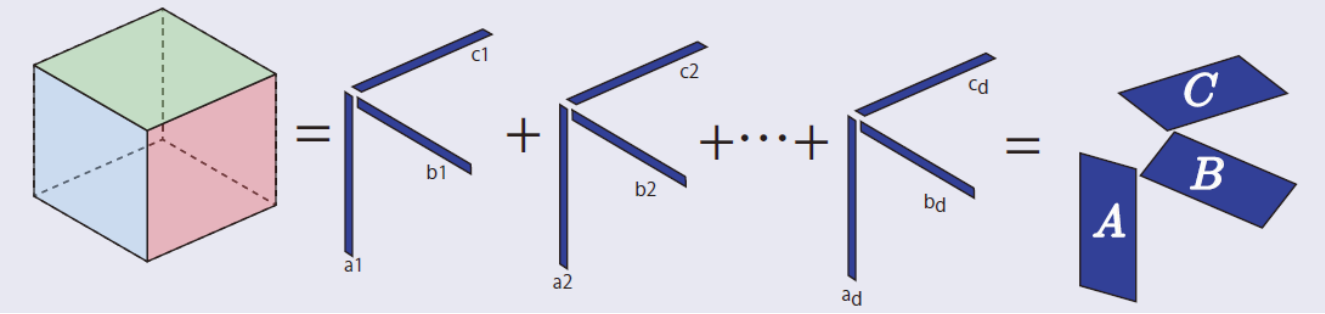
ユーザiが持つ因子1の重み

映画jが持つ因子1の重み

コンテキストkが持つ因子1の重み

テンソル分解

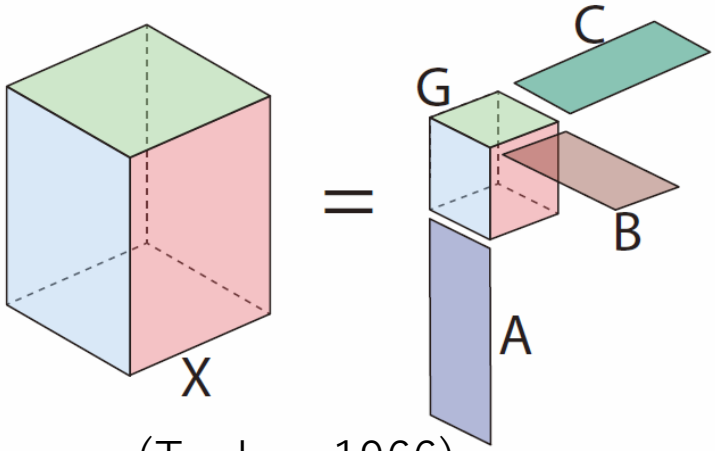
CP-分解/ランク



Canonical Polyadic 分解(Hitchcock, 1927; Hitchcock, 1927)
CANDECOMP/PARAFAC (Carroll & Chang, 1970; Harshman, 1970)

計算はNP困難，ある条件の元で分解の一意性あり

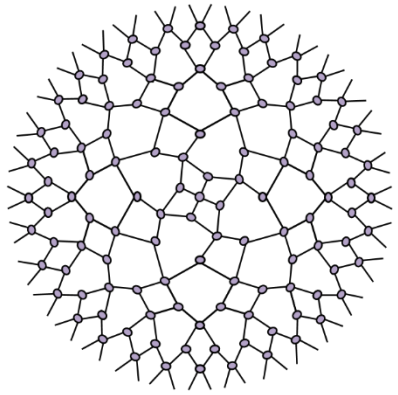
Tucker-分解/ランク



(Tucker, 1966)

特異値分解で計算可能

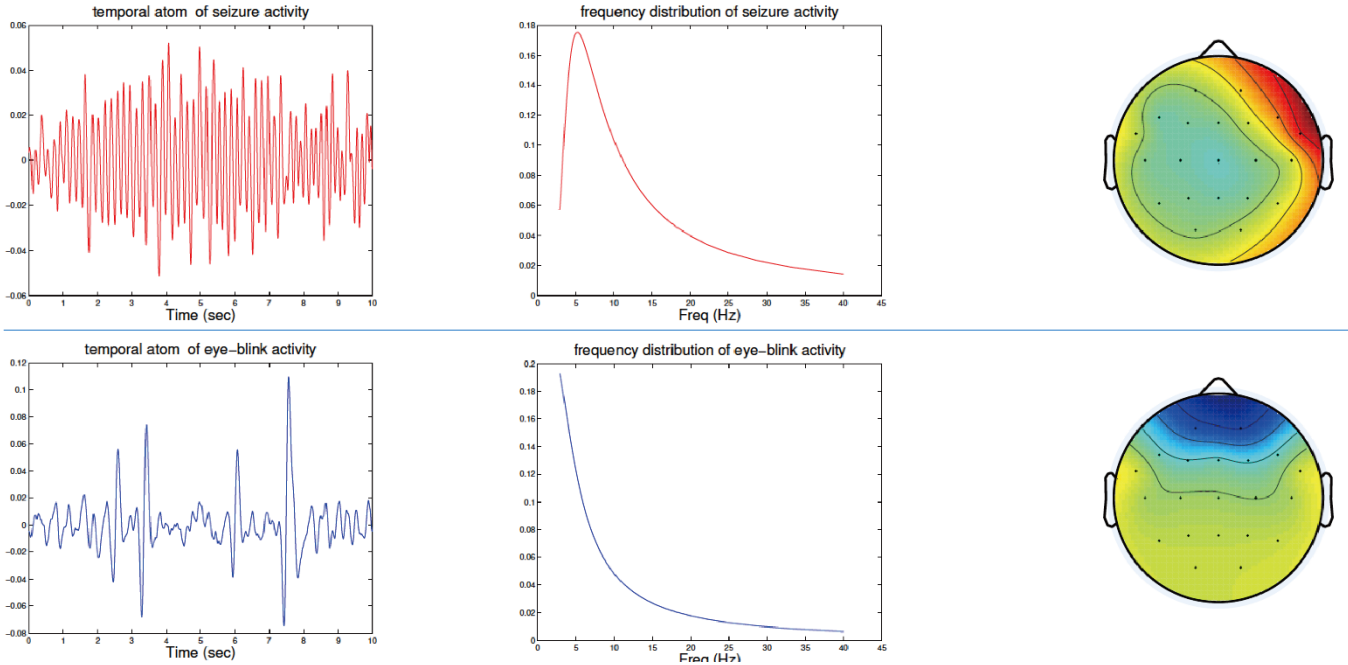
テンソルネットワーク



(物理学で発展)

時空間解析への応用例

EEGデータ解析

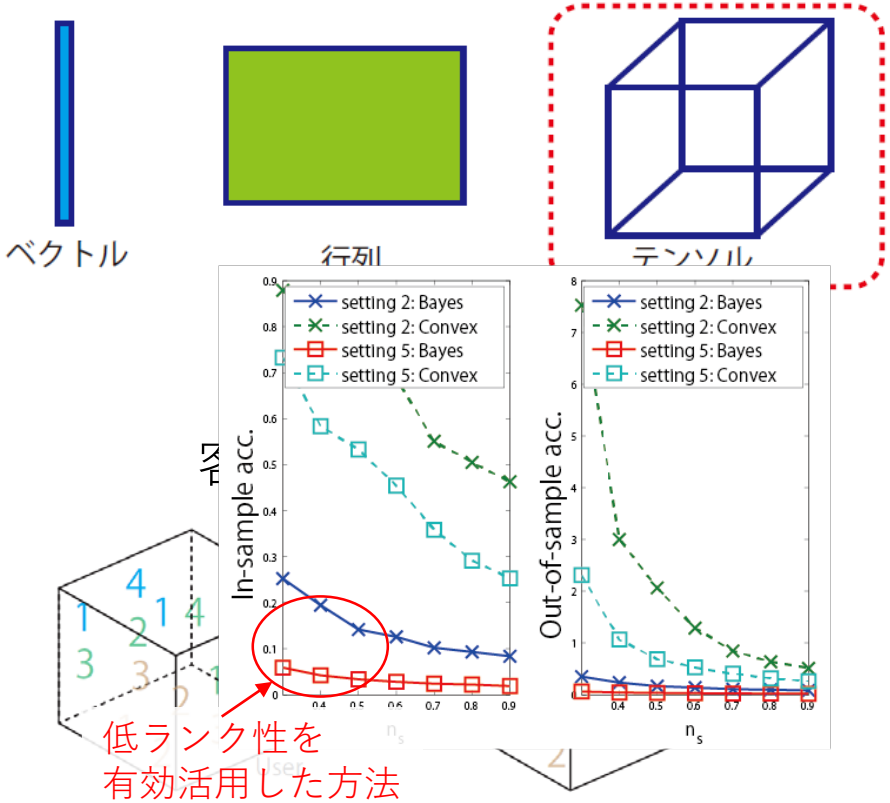


time × frequency × space

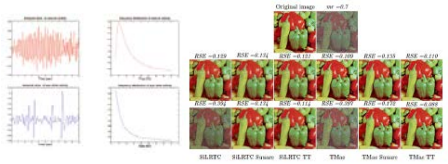
CP分解

EEG monitoring: Epileptic seizure onset localization (De Vos et al., 2007)

テンソルの学習

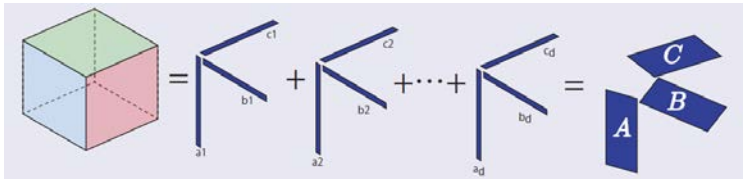


他の応用例：
- 時空間データ解析
- 画像処理
- 自然言語処理
- 深層学習



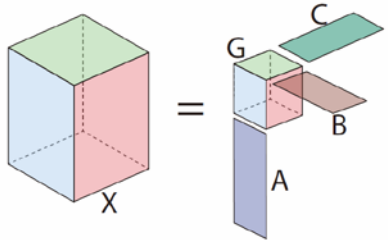
テンソルの“ランク”

CP-分解/ランク



Canonical Polyadic 分解(Hitchcock, 1927; Hitchcock, 1927)
CANDECOMP/PARAFAC (Carroll & Chang, 1970; Harshman, 1970)

Tucker-分解/ランク

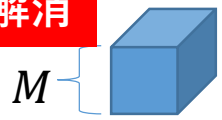


(Tucker, 1966)

通常(最小二乗法)　　低ランク性を利用した方法
(ベイズ推定法等)

$$M^K/n \Rightarrow dKM/n$$

次元の呪いを解消



K:次元
d:ランク($\ll M$)

[Suzuki,ICML2015;Kanagawa+et al.,ICML2016;Suzuki+et al.,NIPS2016]

補足資料

自然言語処理に現れる低ランク性

トピックモデリング

- ゲッツェの１点でドイツが世界制覇
- フィオレンティーナはDF ゴンサロ・ロドリゲスとの契約を延長

どちらもサッカーにまつわる話だとわかる.
しかし，「サッカー」という単語は出ていない.
→ 文章に表れる単語がサッカーに関係する記事で目にするものばかり.
→ トピック：単語頻度の傾向．同じ記事に現れやすい単語は同じトピックに属するだろう.

単語の共起関係が単語の意味を定める.

Bag of Words

	単語１	単語２	単語３	…	単語M
文章１	4	8	0	…	2
文章２	2	0	1	…	6
文章３	7	0	8	…	4
文章４	3	4	3	…	1
⋮	⋮	⋮	⋮	…	⋮
文章N	0	2	5	…	6

Bag of words

Syria	13
people	5
bomb	7
economy	1
immigrants	2
soccer	0
walk	1

文章数×単語数の単語頻度行列.
基本的に単語頻度行列は超スパース (ほとんどの要素が0).

この表だけからトピックを抽出し文章をトピックに分類(クラスタリング)

Latend Dirichlet Allocation（LDA）

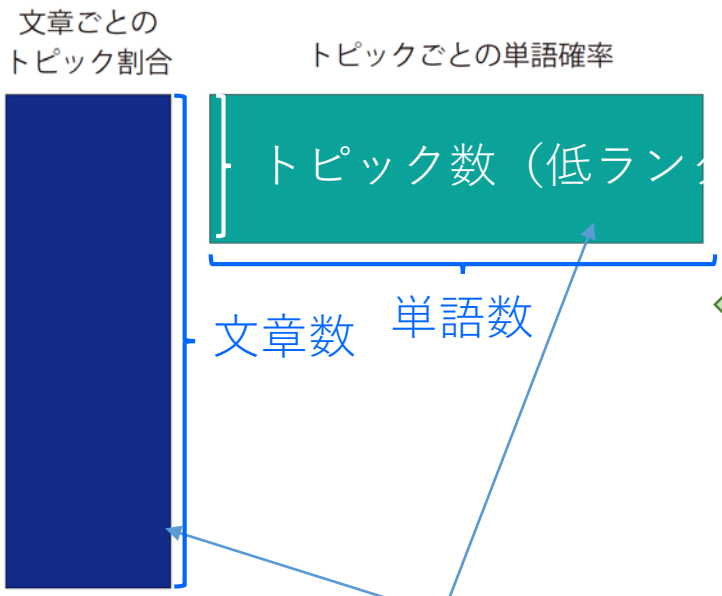
LDAでは各文章に出現する単語の頻度を確率モデルでモデル化
出現確率を少数のトピックで表現

$$
\begin{aligned}
&\text{文章 } d \text{ 内で単語 } w \text{ が出現する確率 } (P(w|d)) \\
=&\sum_{k=1}^{K} \text{文章 } d \text{ 内のトピック } k \text{ の割合 } (P(k|d)) \\
&\times \text{トピック } k \text{ で単語 } w \text{ が出現する確率 } (P(w|k))
\end{aligned}
$$

トピック数 << 単語数，文章数　（低ランク）

$(P(w|d))_{w,d} =$

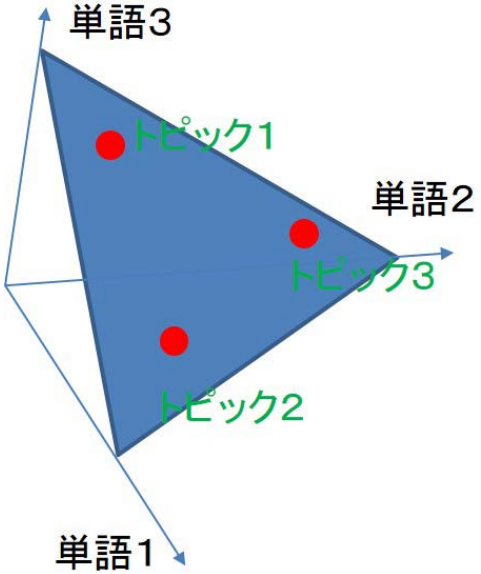
各文章d内で単語wが出現する確率



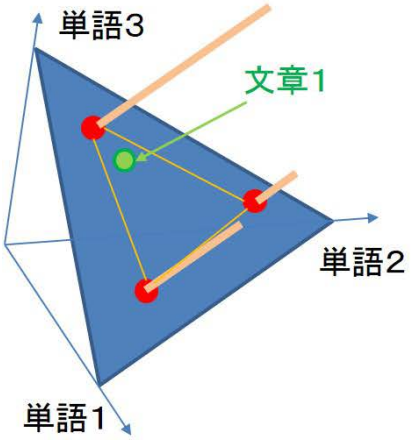
データ

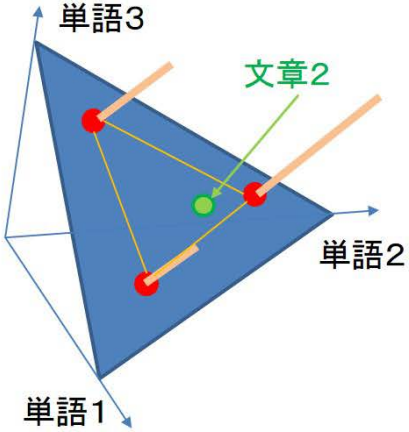
	単語1	単語2	単語3
文章1	4	8	0
文章2	2	0	1
文章3	7	0	8
文章4	3	4	3

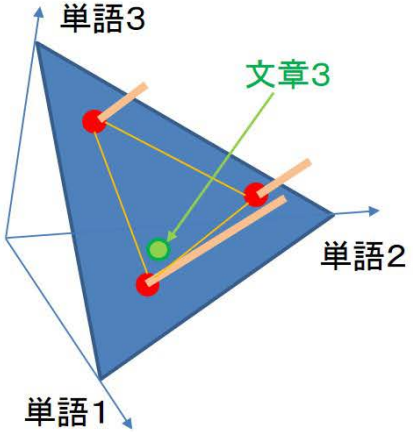
これらをデータに合うよう学習
（ベイズ推定）



各トピックは単語の出現頻度で特徴付けられる
（サッカーに関するトピックならサッカー関係の単語が出やすい）



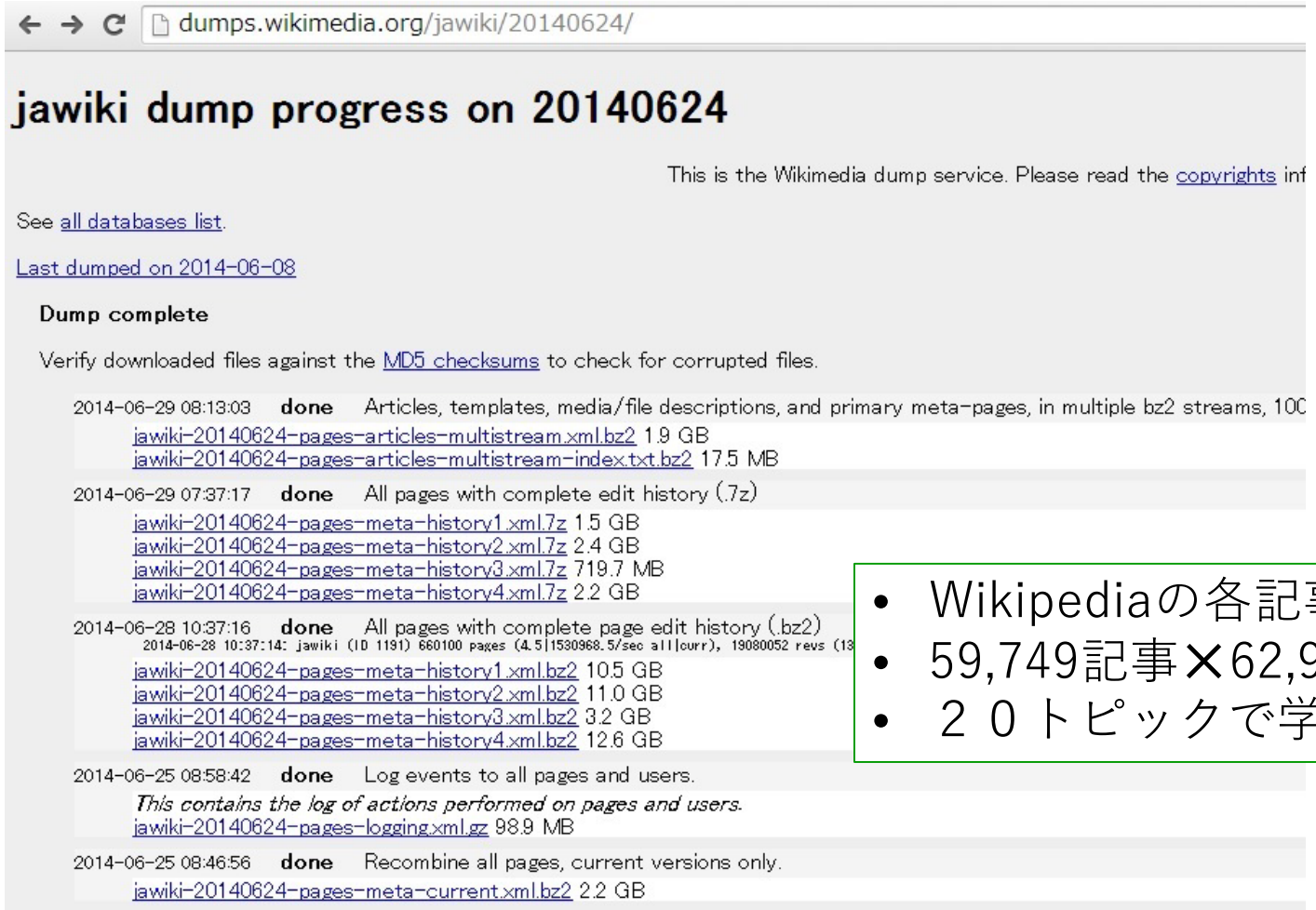




各文章における単語の出現頻度はトピックの混合で決ま

日本語WikipediaでLDA

2014 年 6 月の日本語Wikipedia の記事データ.
http://dumps.wikimedia.org/jawiki/20140624/ からjawiki-20140624-pages-articles1.xml.bz2 をダウンロード.
pythonライブラリのgensimでLDAを実行.



- Wikipediaの各記事が各文章
- 59,749記事×62,999単語
- ２０トピックで学習（低ランク

トピックごとの主要単語

	Topic 1	Topic 2	Topic 3	Topic 4	Topic 5
[1,]	"丁目"	"de"	"オブ"	"windows"	"モハ"
[2,]	"人口"	"la"	"シリーズ"	"gt"	"mm"
[3,]	"交通"	"サン"	"ゲーム"	"pc"	"クハ"
[4,]	"教育"	"cc"	"ドラマ cd"	"lt"	"km"
[5,]	"地理"	"file"	"vol"	"例えば"	"番台"
[6,]	"道路"	"フォン"	"アニメ"	"os"	"キハ"
[7,]	"中学校"	"年頃"	"名探偵コナン"	"ms"	"両編成"
[8,]	"北海道道"	"ルイ"	"機動戦士ガンダム"	"ii"	"編成"
[9,]	"高等学校"	"フランス"	"one"	"mhz"	"系電車"
[10,]	"小学校"	"ドイツ"	"ナレーション"	"mb"	"サハ"
[11,]	"年生"	"le"	"劇場版"	"vs"	"国鉄"
[12,]	"鉄道"	"マリア"	"テレビ朝日版"	"minus"	"cm"
[13,]	"行政"	"ジャン"	"ドラえもん"	"for"	"クモハ"
[14,]	"自由民主党"	"image"	"テレビアニメ"	"mac"	"形電車"
[15,]	"番地"	"パリ"	"それいけ"	"system"	"dd"

トピックごとの主要単語

	Topic 15	Topic 16	Topic 17	Topic 18
[1,]	"and"	"km"	"ch"	"紀元前"
[2,]	"in"	"text"	"土曜"	"在位"
[3,]	"file"	"style"	"金曜"	"年頃"
[4,]	"to"	"東京都"	"日曜"	"天正"
[5,]	"university"	"億円"	"月曜"	"年代"
[6,]	"new"	"北海道"	"月から"	"には"
[7,]	"on"	"center"	"日から"	"慶長"
[8,]	"by"	"align"	"木曜"	"代藩主"
[9,]	"with"	"bar"	"月まで"	"在位紀元前"
[10,]	"press"	"県道"	"kw"	"万石"
[11,]	"for"	"時間"	"日本テレビ系列"	"ユリウス暦"
[12,]	"at"	"部リーグ"	"出力"	"天文"
[13,]	"en"	"大阪府"	"備考"	"寛永"
[14,]	"white"	"新潟県"	"火曜"	"世紀"
[15,]	"black"	"bull"	"fm"	"任官"

出現しやすい単語からトピックの意味がよくわかる.

各トピックの成分が大きい記事タイトル

"Topic 3 :"
"架空の国一覧 | 岡村明美 | 佐久間レイ | 三木眞一郎 | 石田彰 | うえだゆうじ | 山口勝平 | 根谷美智子 | 広瀬正志 | 小西克幸 | 八奈見乗児 | 山口由里子 | 進藤尚美 | くまいもとこ | 関俊彦 | 千葉一伸 | 草尾毅 | 坂本千夏 | 飛田展男 | 三宅健太"

"Topic 4 :"
"Xeon | PC-9821シリーズ | 順序数 | ThinkCentre | Safari | Microsoftオン化傾向 | X68000 | Unicode一覧 E0000-E0FFF | MC68000 | .NET Framew

"Topic 18 :"
"中国帝王一覧 | 元号一覧（日本） | 天文（元号） | 従一位 | 後白河天皇 | 延暦 | 享保 | 紀元前1千年紀 | 文化（元号） | 伺候席 | 征夷大将軍 | 夏商周年表 | 宝暦 | 備前国 | 守護代 | 醍醐天皇 | 伊勢国 | 摂津国 | 相模国 | 紀元前4世紀"

記事タイトルから関連した話題が集まっていることがわかる
※単語の出現頻度のみから学習されていることに注意

LDAとスパース性

- 単語の出現頻度行列は巨大
- 出現確率行列を低ランク行列で表すことでトピック（意味）が取り出せる.

データを低次元表現することで一見して高次元のデータから意味のある潜在的な情報が復元できる.

最近，事象の意味を低次元ベクトルで表現できることがわかってきた.

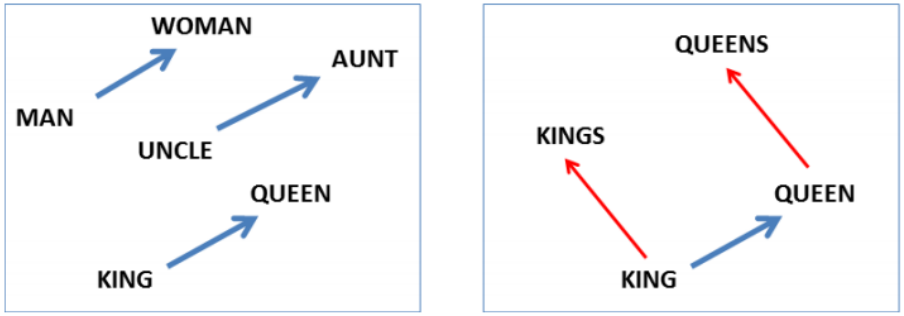
⇒　**Word2vec**

Word2vec [Mikolov et al., 2013]

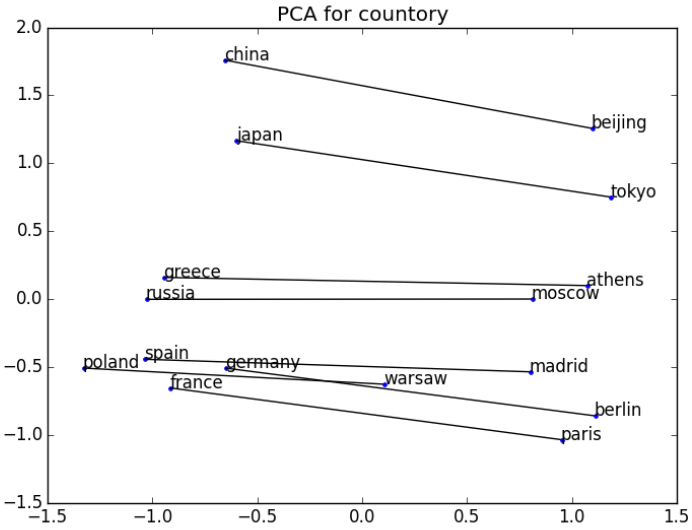
- 単語のベクトル表現を得る方法

“King” – “Man” + “Woman” = “Queen”
“Tokyo” – “Japan” + “China” = “Beijing”

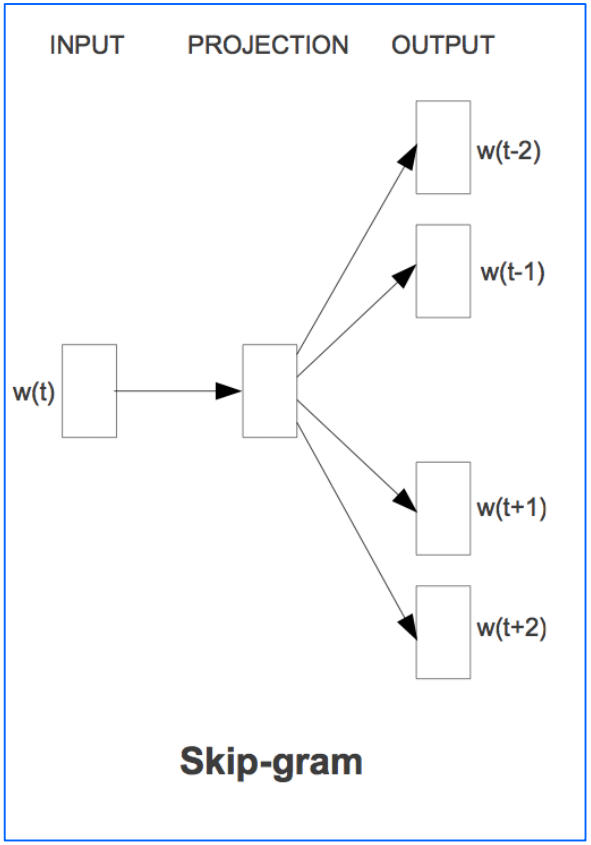
意味を足し引きできるような表現が得られる.



(Mikolov et al., NAACL HLT, 2013)

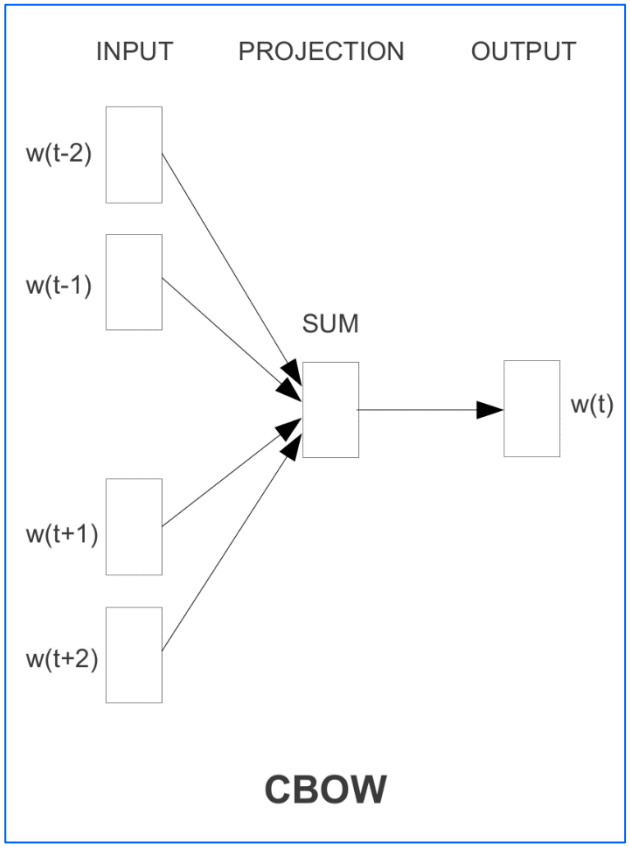


skip-gramとContinuous Bag-of-Words (CBOW)



skip-gramモデル

ある単語のまわりに出現する
単語の確率分布をモデル化



CBOWモデル

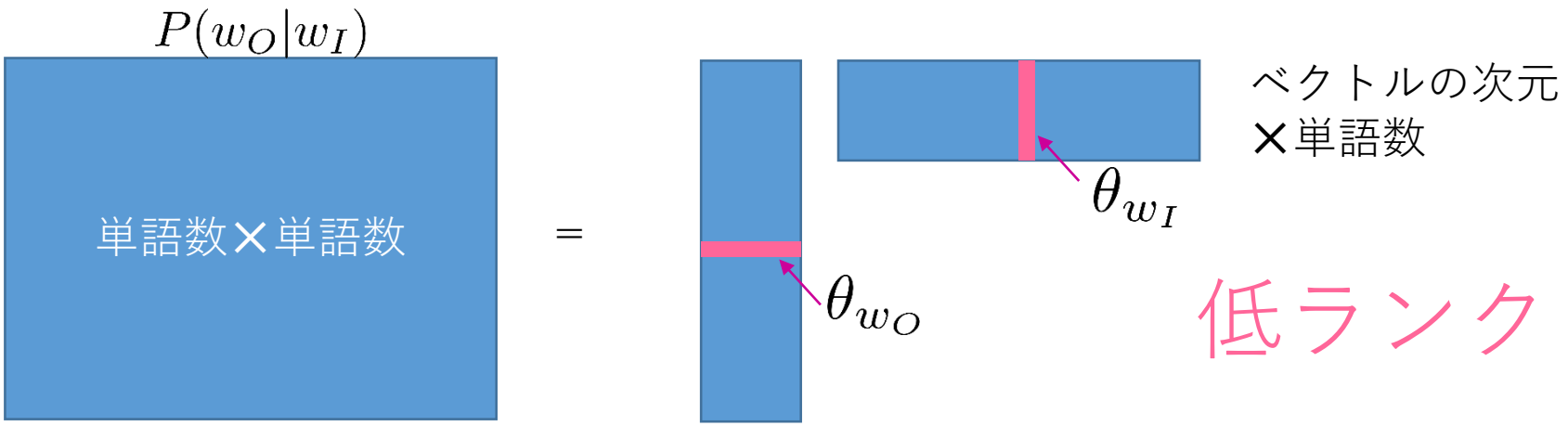
まわりの単語からその場所に
ある単語が出現する確率をモデル化

Skip-gramモデル

単語w_Oがw_Iの周辺（前後１０単語ほど）に現れる確率

$$P(w_O|w_I) = \frac{\exp(\langle \theta_{w_O}, \theta_{w_I} \rangle)}{\sum_{w'} \exp(\langle \theta_{w'}, \theta_{w_I} \rangle)}$$
$$\propto \exp(\langle \theta_{w_O}, \theta_{w_I} \rangle)$$

- 単語のベクトル表現θ_{w_O}　θ_{w_I}と　　の内積で表現.
- ベクトルの次元はせいぜい500ほど



実際の挙動

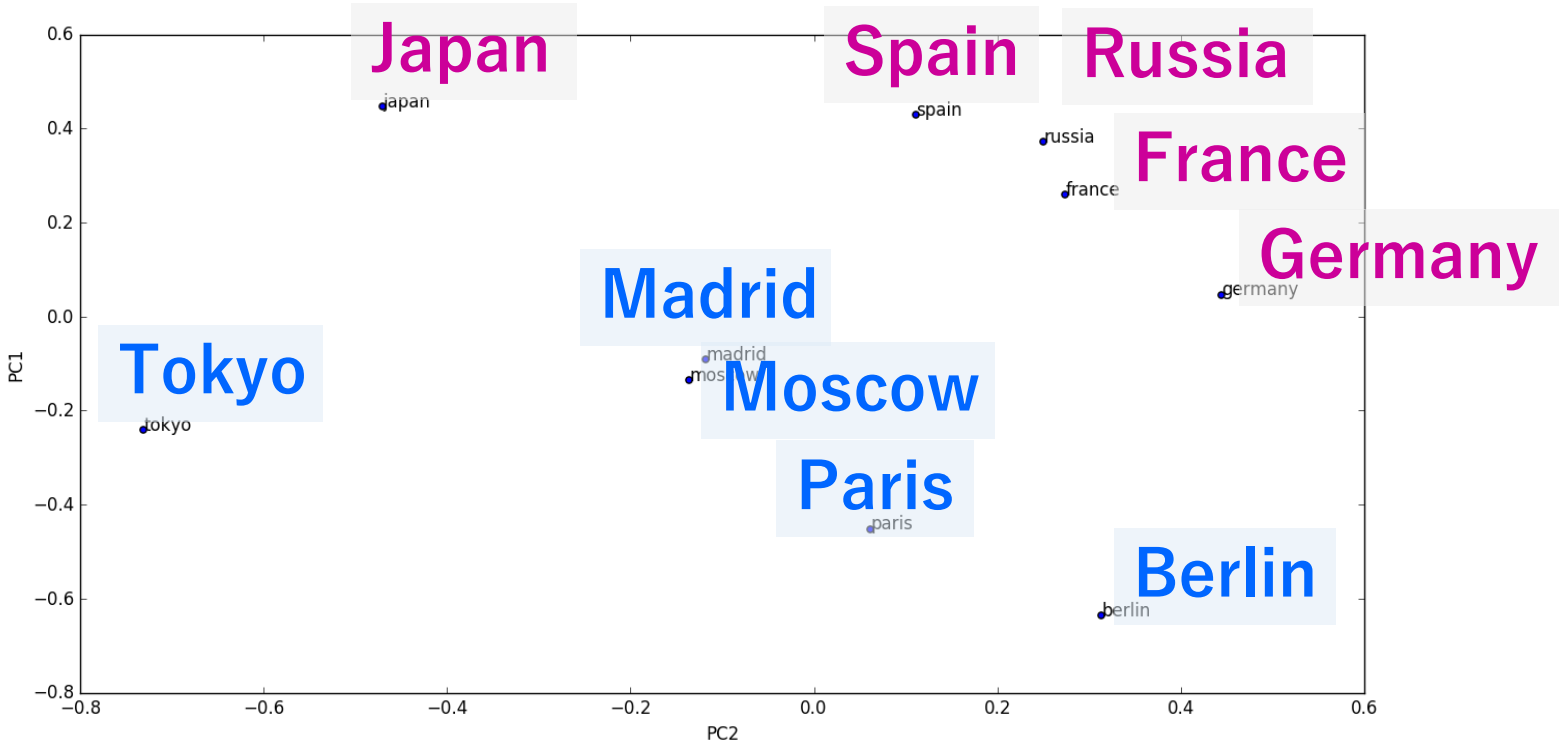

```
from gensim.models import word2vec

train_file = "./mldata/text8"

data = word2vec.Text8Corpus(train_file)
model = word2vec.Word2Vec(size=100, window=5, min_count=5, workers=7)

model.build_vocab(data)
model.train(data)
```

次元１００，前後５単語の出現頻度をモデル化，５回以下の出現単語は無視

“Queen” + “Man” - “Woman” = “King” ?

```
>>> model.most_similar(positive=['queen','man'],negative=['woman'])
[('king', 0.6050819158554077), ('scotland', 0.587989091873169), ('prince', 0.573
6681222915649), ('elizabeth', 0.571208119392395), ('lord', 0.5638244152069092),
('duchess', 0.5520190000534058), ('duke', 0.5498123168945312), ('crown', 0.54618
62087249756), ('sir', 0.5441839694976807), ('lorraine', 0.5441141128540039)]
```

国と首都



word2vecの貢献：

データの「意味」を低次元ベクトルとして表現できることを実験的に示した.

→ 深層学習にもつながる考え方.