データ解析
第七回「L1 正則化法：高次元データ解析」

鈴木　大慈
理学部情報科学科
西八号館 W707 号室
s-taiji@is.titech.ac.jp

休講情報

6/24 は休講

今日の講義内容

- L_1 正則化
- バイオデータとスパムメール判別によるデモ
- レポート課題

モデル選択の難しさ

高次元データ：パラメータの次元 p が大きい．

AIC でモデル選択
→ 2^p 通り！ (NP 困難)
→ 計算に時間がかかりすぎる
→ L_1 正則化：凸最適化で変数選択

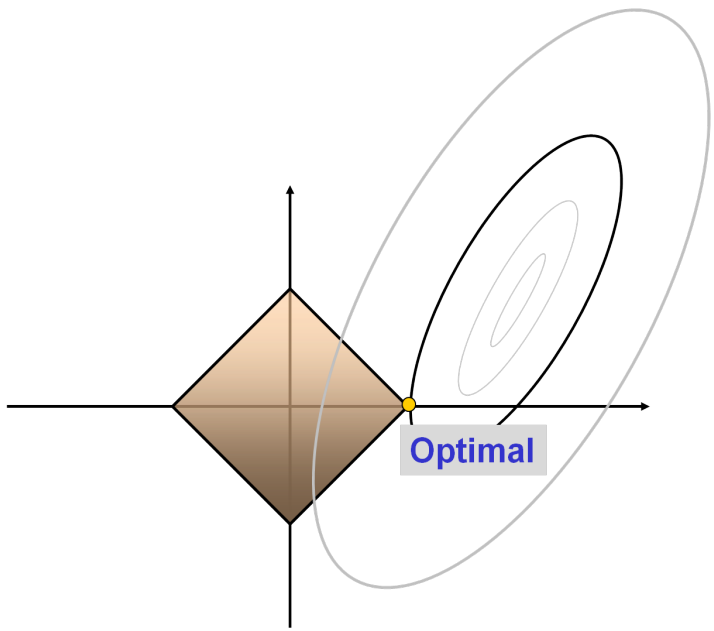
(R の step() では変数を一つ加えたり削ったりして最適なモデルを探索．初期値に大きく依存する．)

スパース推定 [Lasso]

デザイン行列 $X = (X_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times p}$.
p (次元) $\gg n$ (サンプル数).
真のベクトル $\beta^* \in \mathbb{R}^p$: 非ゼロ要素の個数がたかだか d 個 (スパース).

$$\text{モデル}: \quad Y = X\beta^* + \xi.$$

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



スパース推定 [Lasso]

デザイン行列 $X = (X_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times p}$.
p (次元) $\gg n$ (サンプル数).
真のベクトル $\beta^* \in \mathbb{R}^p$: 非ゼロ要素の個数がたかだか d 個 (スパース).

$$\text{モデル}: \quad Y = X\beta^* + \boldsymbol{\xi}.$$

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

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

デザイン行列が *Restricted eigenvalue condition Bickel et al. (2009)* かつ $\max_{i,j} |X_{ij}| \leq 1$ を満たし，ノイズが $\mathrm{E}[e^{\tau \xi_i}] \leq e^{\sigma^2 \tau^2 / 2}$ $(\forall \tau > 0)$ を満たすなら，確率 $1 - \delta$ で

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

※次元が高くても，たかだか $\log(p)$ でしか効いてこない．実質的な次元 d が支配的.

一般化加法モデルへの L_1 正則化の適用

L_1 正則化：

$$\hat{\beta} \leftarrow \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, x_i^\top \beta) + \lambda_n \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|.$$

L_2 正則化（前回の授業参照．Ridge regression はこれに含まれる）：

$$\hat{\beta} \leftarrow \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, x_i^\top \beta) + \lambda_n \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2.$$

glmnet で L_1 正則化

glmnet(x, y,..., alpha $= 1$)

alpha (デフォルト 1) で正則化項を L_1 と L_2 の間で調整：

$$\hat{\beta} \leftarrow \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(y_i, x_i^\top \beta) + \lambda_n \sum_{j=1}^{p} (\alpha |\beta_j| + \frac{1}{2}(1-\alpha)\beta_j^2).$$

この α の値を alpha で指定.（これを Elasticnet 正則化と呼ぶ）

$\alpha = 1 \to L_1$ 正則化
$\alpha = 0 \to L_2$ 正則化

LiblineR で L_1 正則化

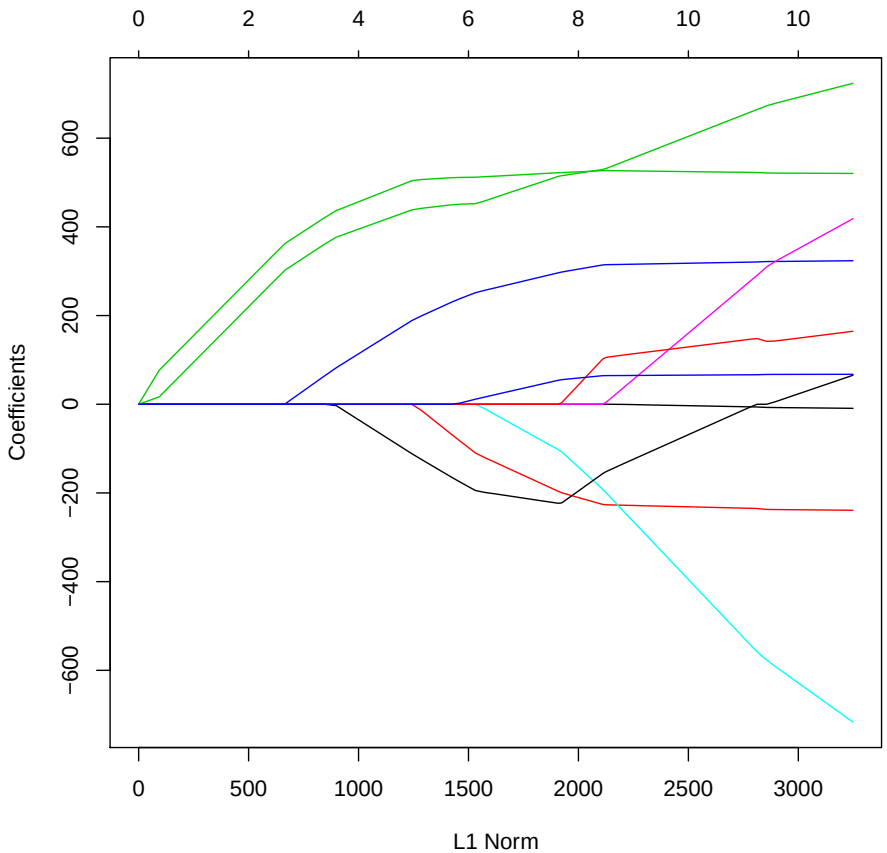
LiblineaR(x,y, type=6)

type で正則化の種類とロス関数を指定．デフォルトは type=0.

- 0 - L2-regularized logistic regression
- 1 - L2-regularized L2-loss support vector classification (dual)
- 2 - L2-regularized L2-loss support vector classification (primal)
- 3 - L2-regularized L1-loss support vector classification (dual)
- 4 - multi-class support vector classification by Crammer and Singer
- 5 - L1-regularized L2-loss support vector classification
- 6 - L1-regularized logistic regression
- 7 - L2-regularized logistic regression (dual)

※ LiblineaR は判別問題しか扱えない．

```
library(glmnet)
library(lars)
data(diabetes) #糖尿病データ．線形回帰問題．lars パケージに入っている．
lasso <- glmnet(diabetes$x, diabetes$y)
plot(lasso)
```



左図の意味：
λ を動かしていった時に，推定された係数がどうふるまうか．
λ が大きい時，つまり L_1 ノルムが小さい時は推定量がスパースになっていることがわかる．

正則化パス．横軸は推定量の L_1 ノルム．

スパムメール判別

メールをスパムかそうでないかを判別したい.
判別分析の枠組みに乗せるため，各メールを一つのベクトル x として表したい.

Bag of words: 出現した単語の頻度を並べたベクトル.
各要素が各単語の頻度に対応.
単語数分だけの次元になるため高次元になりやすい．自然言語処理では 100 万次元はザラ.

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

今回は UCI Machine Learning Repository の Spam e-mail database を利用.
これは 57 次元と次元は低い方.

レポート課題三回目

1. Ridge 回帰で k-fold CV を実行する関数を書け．入力は $Y \in \mathbb{R}^n$ (従属変数), $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ (説明変数), λ (正則化定数), k (k-fold CV) で，出力は二乗誤差 $((y - x^\top \hat{\beta})^2)$ の CV スコア.
2. 講義第五回に用いた手書き文字認識データで，正則化パラメータと判別精度の関係をグラフにせよ．その際，サンプル数をいくつか変えてみて，それらのグラフを重ね書きせよ．最良な判別精度を達成する正則化パラメータはサンプル数に依存してどう変化しているか？
3. 上のデータにさらに CV スコアを重ね書きせよ．LiblineR では cross=k とおくことで k-fold CV スコアが得られる．
   cvscore <- LiblineaR(..., cross = 10)
4. 自分で興味のあるデータを集め，これまで講義で紹介した手法を用いて解析せよ．線形回帰，線形判別，正則化付き線形判別，一般化線形モデルなど，説明変数から従属変数を予測する問題ならなんでも良い．なお，講義で使わなかった関数を用いても構わない．自分で工夫していればその分評価は上がる．

レポートの提出方法

- 私宛にメールにて提出.
- 件名に 必ず「データ解析第 n 回レポート」と明記し，R のソースコードと結果をまとめたレポートを送付のこと.
- 氏名と学籍番号も忘れず明記すること.
- レポートは本文に載せても良いが，pdf などの電子ファイルにレポートを出力して添付ファイルとして送付することが望ましい (これを期に tex の使い方を覚えることを推奨します).
- 提出期限は講義最終回まで.

※相談はしても良いですが，コピペは厳禁です.

講義情報ページ

`http://www.is.titech.ac.jp/~s-taiji/lecture/dataanalysis/dataanalysis.html`

P. J. Bickel, Y. Ritov, and A. B. Tsybakov. Simultaneous analysis of Lasso and Dantzig selector. *The Annals of Statistics*, 37(4):1705–1732, 2009.

T. Zhang. Some sharp performance bounds for least squares regression with l_1 regularization. *The Annals of Statistics*, 37(5):2109–2144, 2009.