Kyoto University

統計的モデリング基礎⑤
～最尤推定（続き）～

鹿島久嗣
（情報学科 計算機科学コース）

Department of Intelligence Science and Technology

マーケティング分野への応用を対象とした参考書

マーケティングの統計モデル

出版社：朝倉出版
発刊年月： 2015.8
ISBN ： 4254128533
A5判；192ページ

マーケティングを題材としながら、基本的な統計的モデリングの方法が学べる

最尤推定：データをもっともよく再現するパラメータを推定値とする

- n個のデータ $x_1, x_2, \ldots, x_n$ から確率モデル$f(x \mid \theta)$のパラメータθを推定したい

- n個のデータが（互いに独立に）生成される確率（尤度）：

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i \mid \theta)$$

- 尤度最大になるパラメータを推定値$\hat{\theta}$とする

$$\hat{\theta} = \mathrm{argmax}_\theta \prod_{i=1}^{n} f(x_i \mid \theta) = \mathrm{argmax}_\theta \sum_{i=1}^{n} \log f(x_i \mid \theta)$$

実際には対数尤度で扱うことが多い

– もっともデータを生成する確率が高い（「最も尤もらしい」）

線形回帰モデルの最尤推定：
線形回帰の確率モデル

- データ：$\mathbf{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)})$ と $\mathbf{y} = \left(y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(n)}\right)$ に線形モデル： $g(x) = \beta x + \alpha$ を当てはめる
- 最小二乗法：$\ell(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} - (\beta x^{(i)} + \alpha)\right)^2$ を最小化
- 一方、線形回帰モデルに対応する確率モデルを考えると：
  - 正規分布：$y^{(i)}$は平均$\beta x^{(i)} + \alpha$、分散σ^2の正規分布に従う
  - 確率密度：$f\left(y^{(i)} \mid x^{(i)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - (\beta x^{(i)} + \alpha)\right)^2}{2\sigma^2}\right)$
  - 「平均的に」回帰直線 $y = \beta x + \alpha$ に乗るデータを生成できる

線形回帰モデルの最尤推定：
線形回帰の確率モデルの最尤推定 ＝ 最小二乗法

- 線形回帰モデルに対応する確率モデルを考える：

- 確率密度関数：$f\left(y^{(i)} \mid x^{(i)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - (\beta x^{(i)} + \alpha)\right)^2}{2\sigma^2} \right)$

- 対数尤度：$L(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{n} \log f\left(y^{(i)} \mid x^{(i)}\right)$

$$= -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} \left(y^{(i)} - (\beta x^{(i)} + \alpha)\right)^2 + \text{const.}$$

- 対数尤度をα, βについて最大化すること（最尤推定）
＝二乗誤差をα, βについて最小化すること（最小二乗法）

線形回帰モデルの最尤推定：分散の最尤推定量

- 確率密度関数：$f\left(y^{(i)} \mid x^{(i)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)}-(\beta x^{(i)}+\alpha)\right)^2}{2\sigma^2}\right)$

- 分散については、対数尤度：

$$L(\sigma^2) \ = \frac{n}{2}\log\frac{1}{\sigma^2} - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\left(y^{(i)} - (\beta x^{(i)} + \alpha)\right)^2 + \text{const.}$$

- $L(\sigma^2)$を最大化する最尤推定量は：

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

※ 以上の議論は重回帰モデルの場合も同様

最尤推定の利点：
モデリングの自動化

- 最尤推定の利点：確率モデルの形（データの生成プロセスの仮定）を決めればモデルパラメータが自動的に決まる
  - ただし、最大化問題を解く必要がある
  - 離散分布、ポアソン分布、正規分布などは解析的に解が求まる
  - 線形回帰（正規分布でノイズが載る）は連立方程式（いちおう解析的な解）
  - 多くのモデルでは、最適化問題を数値的に解く必要がある

最尤推定量の性質：
一致性

- パラメータθの推定量として$\hat{\theta}$を得たとする（例えば最尤推定で）
- 推定量の良さはどのように評価するか？
  - 不偏性 $E\left[\hat{\theta}\right] = \theta$：推定量の期待値が真の値に一致する
    - Eは様々な標本の採り方についての期待値を表す
    - たとえば、平均の最尤推定量は不偏性をもつが、分散の最尤推定量はもたない
  - 一致性：標本サイズを大きくしていくと真の値に一致する：

$$\hat{\theta} \xrightarrow[n \to \infty]{} \theta$$

- 最尤推定は、適当な条件のもと一致性をもつ

漸近正規性：
最尤推定は漸近正規性をもつ

- 最尤推定量の分布は$n \to \infty$で、真のパラメータθを平均とする正規分布に従う

- もう少し厳密にいうと：
$\sqrt{n}\left(\hat{\theta} - \theta\right)$の分布が平均0、分散$I(\theta)^{-1}$の正規分布に近づく

  - $I(\theta)$はフィッシャー情報量：

$$I(\theta) = -E\left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \log f(x|\theta)\right]$$
$$= -\int \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \log f(x|\theta)\right) f(x|\theta) \mathrm{d}x$$

  - $n \to \infty$で$\hat{\theta} \to \theta$

ポアソン回帰：非負整数の回帰モデル

- 例えば、ある機械の各日の故障件数をモデル化したい
  - 曜日や気温などに依存して平均的な故障件数が変わるとする
- 独立変数に依存する回数のモデル：ポアソン回帰

$$P(Y = k \mid \mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})^k}{k!} \exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$$

  - ポアソン分布の平均が線形モデルで表される
    - ポアソン分布：$P(Y = k \mid \lambda) = \frac{\lambda^k}{k!} \exp(-\lambda)$
    - 重回帰モデル：$\lambda = \exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$

$$\left.\begin{array}{l} \text{ポアソン分布} \\ \text{重回帰モデル} \end{array}\right\} \text{組み合わせる}$$

ポアソン回帰の最尤推定：解析解は得られなさそう...

- 独立変数：$\left(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(n)}\right)$ # n日分の測定
- 従属変数：$\left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right)$ # n日分の故障数
- 対数尤度（最大化問題）：

$$L(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} \log \frac{\left(\exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)^{y^{(i)}}}{y^{(i)}!} \exp\left(-\exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)} - \sum_{i=1}^{n} \exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right) + \text{const.}$$

- これを最大化する$\boldsymbol{\beta}$を求めたいが、解析解は得られない

判別問題：
ダミー変数を従属変数として説明（予測）する問題

- データ（ n 組の独立変数と従属変数）
  - 独立変数：$\left(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)}\right)$
  - （ダミー）従属変数：$\left(y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(n)}\right), y^{(i)} \in \{+1, -1\}$

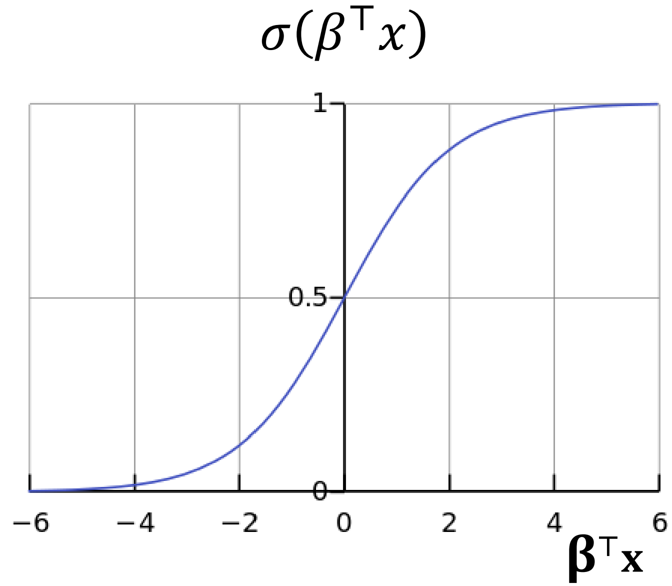
以降、表記上の利便性からダミー従属変数を$\{0,1\}$でなく$\{+1, -1\}$と表記する
（本質的な違いはナシ）

ロジスティック回帰：
ダミー変数を従属変数とするモデル

- 以前、重回帰モデルでダミー変数を従属変数とすると、厳密には少しおかしいという話だった → もっとちゃんと扱いたい
  - 重回帰モデル$y = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}$の従属変数の値域は実数全体
- 従属変数の値域が$\{-1, +1\}$もしくは、$(0,1)$（$Y = +1$となる確率）となるようにしたい
- ロジスティック回帰モデル：

$$P(Y = 1 | \mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{1+\exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})} = \sigma(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$$

  - σ：ロジスティック関数（$\sigma\colon \mathbb{R} \to (0,1)$）



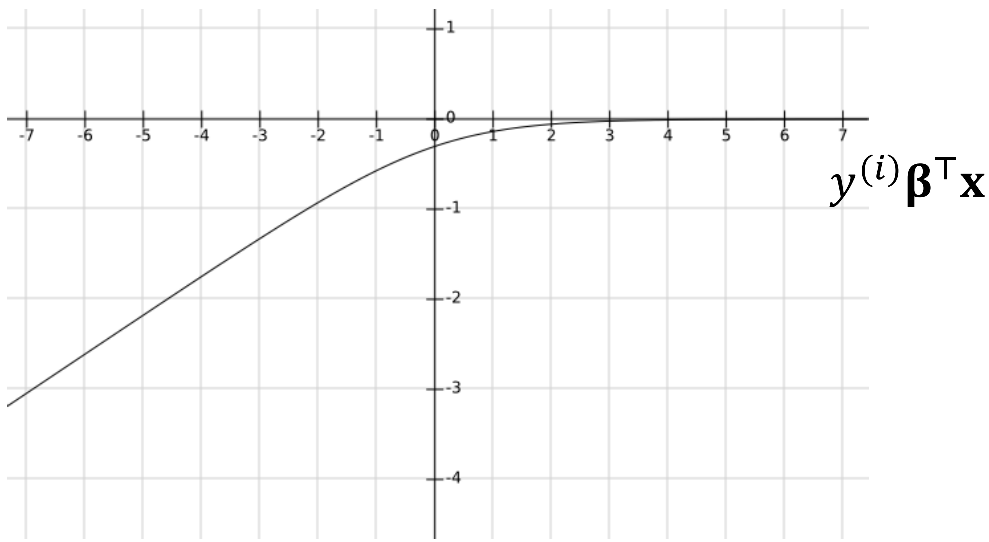
ロジスティック回帰モデルの対数尤度：凸関数なので大局解が存在するが解析解はない

- 対数尤度：$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n} \log\left(1 + \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$

$$\left(= \sum_{i=1}^{n} \delta\left(y^{(i)} = 1\right)\log\frac{1}{1 + \exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})} + \delta\left(y^{(i)} = -1\right)\log\left(1 - \frac{1}{1 + \exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})}\right)\right)$$

- $L(\boldsymbol{\beta})$は凸関数：
  - 大局解がある
  - 解析解はない

$-\log\left(1 + \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}\right)\right)$



ロジスティック回帰のパラメータ推定：非線形最適化

- 最尤推定の目的関数（最大化）：

$$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n} \log\left(1 + \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$$

  – 解析解は得られないが、凸関数（2階微分が≦0）

- 数値的な最適化手法を使う

  – パラメータの更新をくりかえす： $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \mathbf{d}$

パラメータ更新：
目的関数をもっとも改善する更新を行う

- 更新 $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \mathbf{d}$ によって目的関数の値が変化する：

$$L_{\mathbf{w}}(\mathbf{d}) = -\sum_{i=1}^{n} \ln\left(1 + \exp\left(-y^{(i)}(\boldsymbol{\beta} + \mathbf{d})^{\top}\mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$$

- $L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d})$を最大化する更新分 $\mathbf{d}^*$ を見つけよ：

$$-\mathbf{d}^* = \operatorname{argmax}_{\mathbf{d}} L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d})$$

最良のパラメータ更新：目的関数をテイラー展開で近似

- 目的関数のテイラー展開：

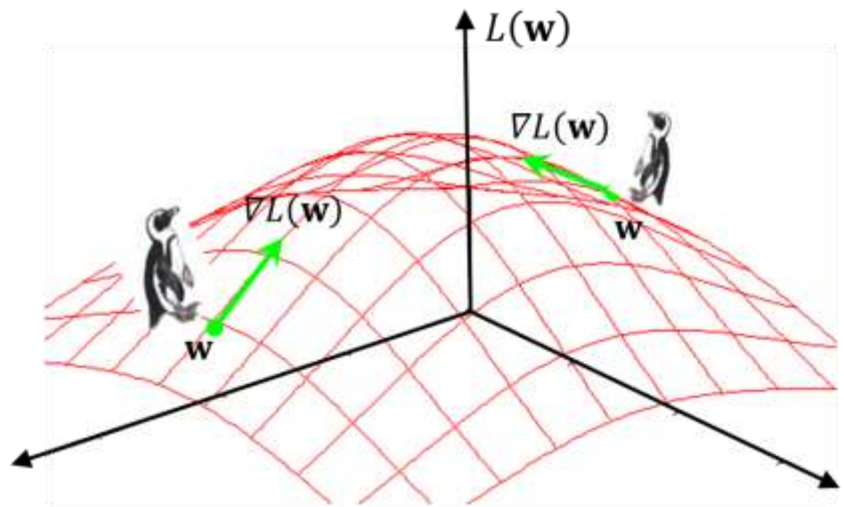
3次以上の項

$$L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d}) = L(\boldsymbol{\beta}) + \mathbf{d}^\top \nabla L(\boldsymbol{\beta}) + \frac{1}{2}\mathbf{d}^\top \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})\mathbf{d} + O(\mathbf{d}^3)$$

– 勾配：$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \left(\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_1}, \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_2}, \dots, \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_D}\right)^\top$

  - 目的関数が最も急な方向

– ヘッセ行列：$[H(\boldsymbol{\beta})]_{i,j} = \frac{\partial^2 L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_i \partial \beta_j}$



ニュートン法：2次近似した目的関数を最小化する解を求める

- テイラー展開で３次以降の項を無視する：

3次以上の項

$$L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d}) \approx L(\boldsymbol{\beta}) + \mathbf{d}^\top \nabla L(\boldsymbol{\beta}) + \frac{1}{2}\mathbf{d}^\top \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})\mathbf{d} \cancel{+ O(\mathbf{d}^3)}$$

- 最大化するために$\mathbf{d}$で微分：$\dfrac{\partial L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} \approx \nabla L(\boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})\mathbf{d}$
- これを$= \mathbf{0}$とおいて解くと： $\mathbf{d} = -\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$

実際には連立方程式を解く

- ニュートン法：

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

$$\boldsymbol{\beta} \xrightarrow{-\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

線形探索付きニュートン法：近似は必ずしも正しくないので線形探索と組み合わせる

- ニュートン法の更新 $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$ は 2 次近似が正しいことを仮定している：

$$L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d}) \approx L(\boldsymbol{\beta}) + \mathbf{d}^{\top}\nabla L(\boldsymbol{\beta}) + \frac{1}{2}\mathbf{d}^{\top}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})\mathbf{d}$$

  – 実際には正しくない

- そこで更新の向き $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$ のみを採用して：
  $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \eta\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$

- 学習率 $\eta > 0$ の決定法：
  – 適当にステップ数とともに適当に減衰
  – 線形探索：$\eta^* = \mathrm{argmax}_{\eta}\, L\left(\boldsymbol{\beta} - \eta\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})\right)$

適当な初期値から始めて、
目的関数が改善しない間
はηを半分にしていく

最急降下法：ヘッセ行列を使わずシンプルで軽い更新

- ヘッセ行列の逆行列（もしくは連立方程式を解く）は高コスト：
  - ニュートン法の更新：$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \eta \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1} \nabla L(\boldsymbol{\beta})$
- 最急降下法：
  - ヘッセ行列の逆行列 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}$ を単位行列 $\boldsymbol{I}$ で置き換え：

$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \eta \nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

勾配

    - $\nabla L(\boldsymbol{\beta})$ は最も急な（目的関数が最も変化する）向き
    - 学習率 η は線形探索で求める：

$$\boldsymbol{\beta} \xrightarrow{-\eta \nabla L(\boldsymbol{\beta})} \boldsymbol{\beta} - \eta \nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

ロジスティック回帰の場合の勾配：比較的簡単に計算可能

- 対数尤度：$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n} \ln\left(1 + \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)$

- $\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{1+\exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)} \frac{\partial\left(1+\exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)\right)}{\partial \boldsymbol{\beta}}$

$$= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{1+\exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)} \exp\left(-y^{(i)}\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right) y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left(1 - f\left(y^{(i)} | \mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\beta}\right)\right) y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$$

現在のパラメータでのモデルが与える確率

確率的最適化とミニバッチ：データの部分集合を用いた効率的な推定

- 対数尤度は各データの対数尤度の和：$L(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} \ell^{(i)}$

i番目のデータの
対数尤度

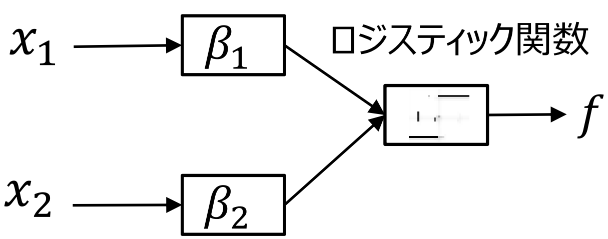
- 勾配 $\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \ell^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\beta}}$ の計算は $O(n)$ かかる
- 勾配をデータ1個で近似：$\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \approx n \frac{\partial \ell^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\beta}}$
  - 確率的最適化：毎回データをランダムに選ぶ
  - オンライン推定も可能（時刻tのデータの$\ell^{(i)}$を使う）
- ミニバッチ：$1 < m < n$ 個のデータで勾配を近似：

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} \approx \frac{n}{m} \sum_{j \in \mathrm{MiniBatch}} \frac{\partial \ell^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

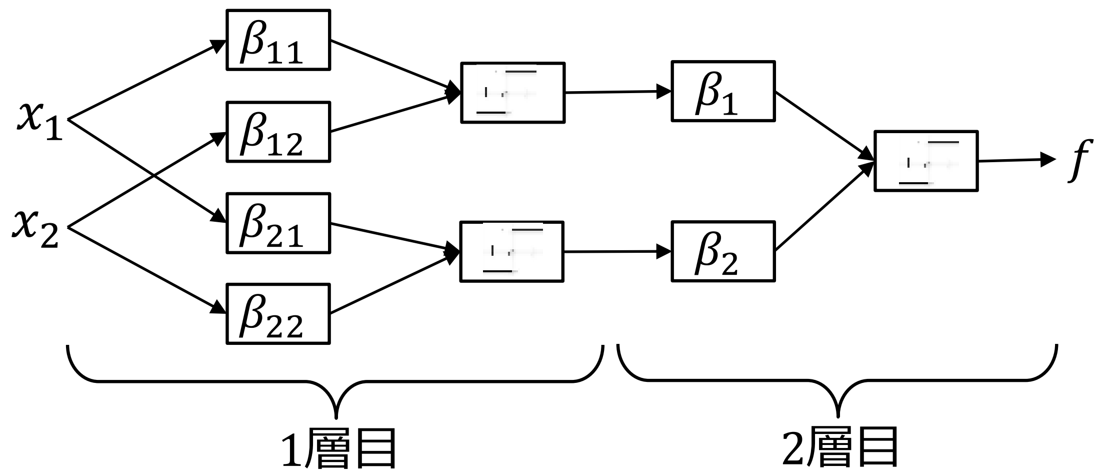
ニューラルネットワーク：（ざっくりいえば）ロジスティック回帰モデルを連結したもの

- ニューラルネットワークはロジスティック回帰モデルを連結したもの
  - 複数のロジスティック回帰モデルの出力が、別のロジスティック回帰モデルの入力になる
  - ロジスティック関数（非線形）によりモデルに非線形性を導入
  - 両者とも$Y = 1$である確率$f(\mathbf{x};\boldsymbol{\beta})$を出力するモデル

ロジスティック回帰モデル



ニューラルネットワーク（2層）



ニューラルネットワークのパラメータ推定：最急降下法を適用するために勾配の計算が必要

- パラメータ推定を最尤推定で行うとすると、目的関数は：

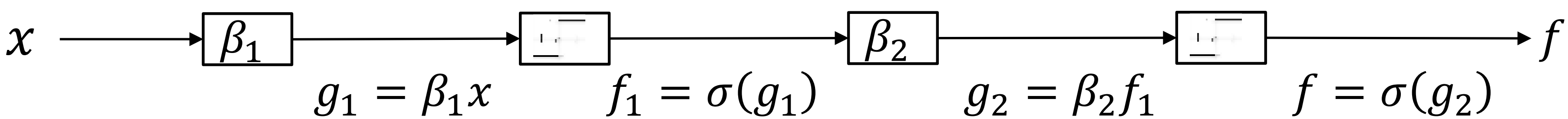
$$L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{n}\left(\delta\left(y^{(i)} = 1\right)\log f\left(x^{(i)}\right) + \delta\left(y^{(i)} = -1\right)\log\left(1 - f\left(x^{(i)}\right)\right)\right)$$

- $L(\boldsymbol{\beta})$の勾配$\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$が計算できれば最急降下法を適用できる
  – 実際は確率的最適化やミニバッチを用いることが多い

ニューラルネットワークの勾配計算：誤差逆伝播法によって計算する

- 誤差逆伝播法：$L(\boldsymbol{\beta})$の勾配$\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$を計算する方法
  - fから「後ろ向きに」遡っていく計算（微分の連鎖率）
- 1次元の場合で考える（多次元でもほぼそのまま）：
  - $\frac{\partial L}{\partial \beta_2} = \frac{\partial L}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \frac{\partial g_2}{\partial \beta_2}$
  - $\frac{\partial L}{\partial \beta_1} = \frac{\partial L}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \frac{\partial g_2}{\partial f_1} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial g_1} \cdot \frac{\partial g_1}{\partial \beta_1}$

共通



練習：
ポアソン回帰の最尤推定

- ポアソン回帰の最尤推定
  - 対数尤度：

$$L(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)} - \sum_{i=1}^{n} \exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right) + \text{const.}$$

  - 解析解は求まらない
- 最急勾配法の更新式を求めてみる