# 統計的モデリング基礎(9) ~さまざまな確率モデル~(ロジスティック回帰の発展と生存期間のモデル)

鹿島久嗣 (情報学科 計算機科学コース)

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE
AND TECHNOLOGY

## 今回の話題: さまざまな確率モデル

- ロジスティック回帰モデルの発展:
  - 多クラスロジスティック回帰モデル
  - 順序回帰モデル
  - ランキング(一対比較)モデル
  - ニューラルネットワーク
- 生存期間のモデル
  - ・ハザード関数
  - 生存期間モデルの最尤推定

## ロジスティック回帰モデルの発展

## ロジスティック回帰モデルの発展: 従属変数の型に合わせた発展

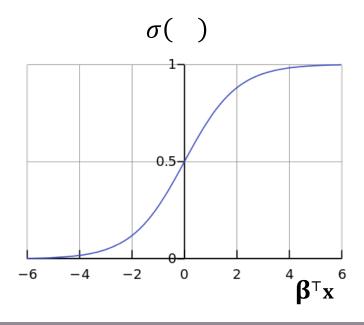
- 確率モデルはデータの生成モデル
- 分析対象のデータに合わせてモデルが変わる
  - ●質的変数 (ダミー変数0,1) の場合:ロジスティック回帰モデル
    → 選択肢が複数の場合:多値ロジスティック回帰
  - 量的変数(連続値)の場合:線形回帰モデル→順序尺度(例えば5段階評価)の場合:順序回帰
  - ・比較:一対比較のモデル(例:2つのうちどちらがよいか?)
- 多層化による非線形モデルの実現:ニューラルネットワーク

## ロジスティック回帰モデル: ダミー変数を従属変数とするモデル

- 従属変数Yが(2値の)ダミー変数であるモデル
- ロジスティック回帰モデル: Y = +1となる確率

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

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



## 多値ロジスティック回帰モデル: 多値の従属変数を説明するモデル

- 従属変数Yが多値である場合( $Y \in \mathcal{Y} = \{1,2,...,k\}$ )
  - ただし、1,2,...,k の並び順に意味はないことに注意
- 多値ロジスティック回帰モデル: Y = yである確率
  - 各 $y \in y$ ごとにパラメータ $\beta_y$ をもつ

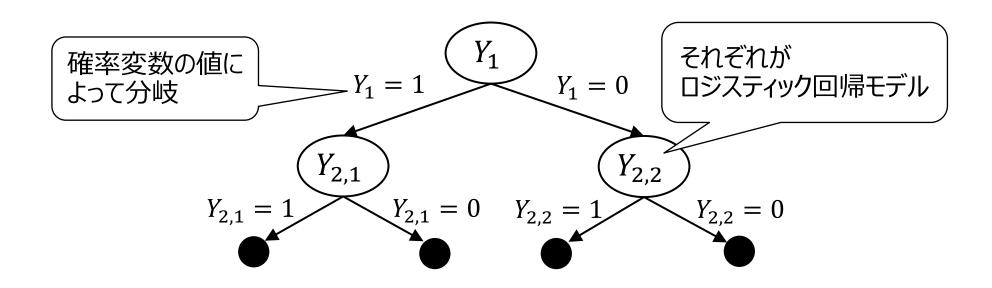
7

$$P(Y = y | \mathbf{x}, \{\mathbf{\beta}_{y'}\}_{y' \in \mathcal{Y}}) = \frac{\exp(\mathbf{\beta}_{y}^{\mathsf{T}} \mathbf{x})}{\sum_{y' \in \mathcal{Y}} \exp(\mathbf{\beta}_{y'}^{\mathsf{T}} \mathbf{x})}$$

•  $y = \{+1, -1\}$ のときは $\beta = \beta_{+1} - \beta_{-1}$ とすると通常のロジスティック回帰に一致

## 多段ロジスティック回帰モデル: 多段に連結されたロジスティック回帰モデル

- 複数の連続した従属変数:
  - 階層的な分類(大カテゴリ→中カテゴリ→小カテゴリ)
  - 段階的な意思決定プロセス (購入の有無→商品)
- ロジスティック回帰モデルを連結する



## 順序回帰:

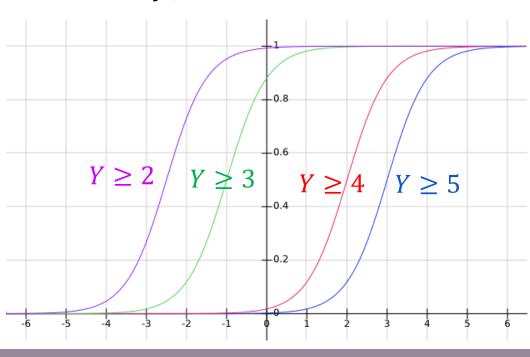
## 順序尺度をもつ従属変数を説明するモデル

この順序に意味がある場合 (5段階評価など)

- Yが多値で順序尺度をもつ場合( $Y \in \mathcal{Y} = \{1,2,...,k\}$ )
- Y ≥ yとなる確率を与えるモデルを考える:

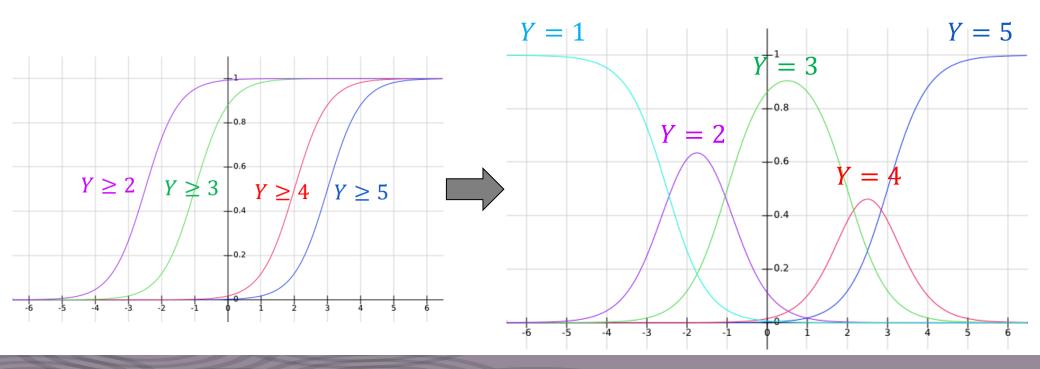
$$P(Y \ge y | \mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{1 + \exp(-\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + \alpha_y)} = \sigma(\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} - \alpha_y)$$

- パラメータβはyによらず共通
- •「切片」がyごとに異なる:  $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \cdots \leq \alpha_k$  (平行移動)



## 順序回帰モデル: 順序尺度をもつ従属変数を説明するモデル

- 順序回帰モデルは $Y \ge y$ となる確率がロジスティック回帰モデル: $P(Y \ge y | \mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \sigma(\boldsymbol{\beta}^\mathsf{T} \mathbf{x} \alpha_y)$
- Y = y である確率は上記モデルの差を用いて表現できる:  $P(Y = y | \mathbf{x}, \mathbf{\beta}) = P(Y \ge y | \mathbf{x}, \mathbf{\beta}) P(Y \ge y + 1 | \mathbf{x}, \mathbf{\beta})$



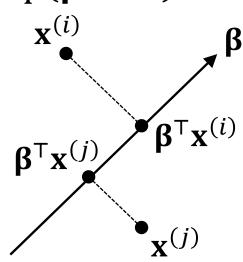
## ランキングの確率モデル:

- 一対比較のモデル
- 感性評価などは絶対評価を与えにくい
- 一対比較:「どちらがよいか」のほうが答えやすい
- データiがデータjよりも上位である(i > j)確率:

$$P(i > j | \mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{\exp(\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}^{(i)})}{\exp(\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}^{(i)}) + \exp(\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}^{(j)})}$$
$$= \sigma(-\boldsymbol{\beta}^{\mathsf{T}} (\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)})) \qquad \qquad \mathbf{x}^{(i)}$$

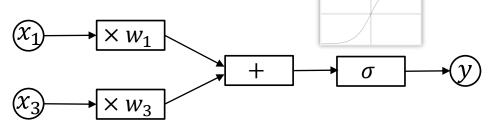
2つのデータの独立変数の差を、ペアに対する

・2つのテータの独立変数の差を、ペノに対する 独立変数としたロジスティック回帰モデル

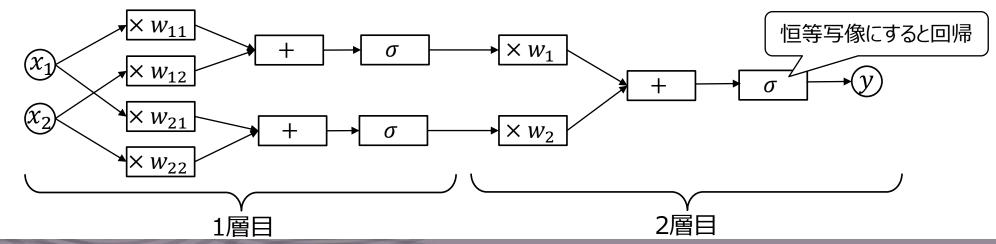


## ニューラルネットワーク: ロジスティック回帰の多層化

■ ロジスティック回帰は線形回帰モデルの出力に非線形写像を適用 ((0,1)区間への写像)



- ニューラルネットワークはこれを多層化し非線形性を導入したもの
  - 非線形写像は必ずしもロジスティック関数である必要はない



## 生存期間のモデル

## 生存期間のモデル: 期間を確率変数とするモデル

- 期間(非負の実数)を確率変数とするようなモデル:
  - 商品の寿命、患者の生存期間、...
  - 一方、ポアソン分布は回数(非零の整数)のモデル
- 生存期間の確率変数 $T: \Pr(T \le t) = F(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau$ 
  - 確率密度関数f(t): 時刻tまで生存していて、時刻 $t + \Delta t$ までの間の死亡確率が $f(t)\Delta t$  (「時刻tまで生存」かつ「 $t \sim t + \Delta t$  で死亡」)

• 
$$f(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{F(t+\Delta t) - F(t)}{\Delta t}$$

•  $\Pr(T > t) = S(t) = 1 - F(t)$  : 時刻t以降も生存する確率 (少なくとも時刻tまでは生存する)

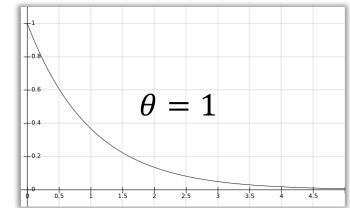
### 指数分布モデル: もっとも単純な生存期間のモデル

- f(t) : 時刻tまで生存していて、時刻 $t + \Delta t$ までの間の死亡確率  $f(t)\Delta t$  (「時刻tまで生存」かつ「 $t \sim t + \Delta t$  で死亡」)
- 指数分布モデル:  $f(t) = \theta \exp(-\theta t)$ 
  - $\theta > 0$  :  $\exists \forall \theta \in \mathcal{E}$
- 生存期間T:

$$\Pr(T \le t) = F(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau = 1 - \exp(-\theta t)$$

• 
$$E[T] = \frac{1}{\theta}$$
,  $Var[T] = \frac{1}{\theta^2}$ 

• 独立変数によってパラメータが変わる場合:  $\theta = \exp(\beta^T x)$ 



## ハザード関数: ある時刻の死亡リスクを表す関数

- *f(t)* は「時刻*t*まで生存している」かつ「次の瞬間に死亡する」可能 性を表す(ちょっと解釈しにくい)
- 瞬間瞬間の死亡リスクをみたほうがわかりやすい?
  - 「時刻tまで生存している」という条件のもとでの「次の瞬間に死亡する」可能性(条件付確率)をみる
- ハザード関数の時間変化:  $\frac{dh(t)}{dt} > 0$  のとき、リスクが時間とともに増加( < 0 であれば減少)

## ワイブル分布: 指数分布の一般化

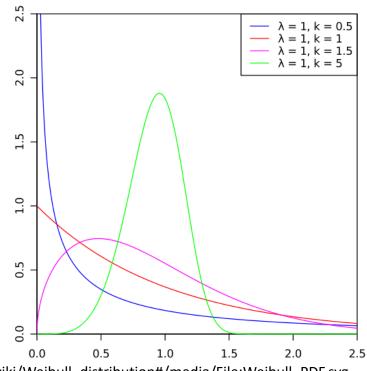
■ 指数分布モデルはリスクが時間に関わらず一定

• 指数分布のハザード関数: 
$$h(t) = \frac{f(t)}{S(t)} = \frac{\theta \exp(-\theta t)}{\exp(-\theta t)} = \theta$$
 (定数)

■ ワイブル分布モデル:

$$f(t) = \frac{k}{\lambda} \left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k-1} \exp\left\{-\left(\frac{t}{\lambda}\right)^k\right\}, k, \lambda > 0$$

- k = 1のとき指数分布( $\theta = 1/\lambda$ )  $f(t) = \theta \exp(-\theta t)$
- 独立変数を取り込む場合:  $\lambda = \exp(\mathbf{\beta}^{\mathsf{T}}\mathbf{x})$



https://en.wikipedia.org/wiki/Weibull\_distribution#/media/File:Weibull\_PDF.svg

#### ワイブル分布: パラメータによってハザード関数の時間的増減が決まる

■ ワイブル分布の生存関数:

$$S(t) = \int_{t}^{\infty} \frac{k}{\lambda} \left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k-1} \exp\left\{-\left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k}\right\} dt = \exp\left\{-\left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k}\right\}$$

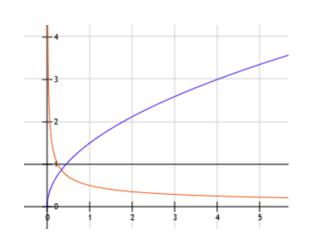
■ ハザード関数 : 
$$h(t) = \frac{k}{\lambda} \left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k-1}$$

$$\bullet k = 1$$
 ගද්ප්  $h(t) = 1/\lambda$ 

• 
$$k > 1$$
 のとき  $\frac{\mathrm{d}h(t)}{\mathrm{d}t} > 0$ 

• 
$$k < 1$$
 のとき  $\frac{\mathrm{d}h(t)}{\mathrm{d}t} < 0$ 

#### kによって決まる



## 生存時間モデルの最尤推定: 生存期間の確率密度関数f(t)を最尤推定

- $\vec{\tau}$   $\mathcal{P} \{ t^{(1)}, t^{(2)}, ..., t^{(N)} \}$ :
  - N個の独立な観測(生存期間がちょうどt<sup>(i)</sup>)
- 尤度関数 $L(\theta) = \prod_{i=1}^{N} f(t^{(i)})$

言い換えれば、 $t^{(i)}$ まで生きていて 次の瞬間死亡したという観測データ

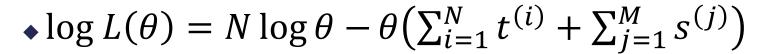
- 確率密度関数f(t): 時刻tまで生存していて、時刻 $t + \Delta t$ まで の間の死亡確率が $f(t)\Delta t$
- 指数分布モデルの場合: $L(\theta) = \prod_{i=1}^N \theta \exp(-\theta t^{(i)}) \Delta t$ 
  - ◆対数尤度にすると log  $L(\theta) = N \log \theta \theta \sum_{i=1}^{N} t^{(i)}$
  - ◆最尤推定量は $\hat{\theta} = \frac{N}{\sum_{i=1}^{N} t^{(i)}}$

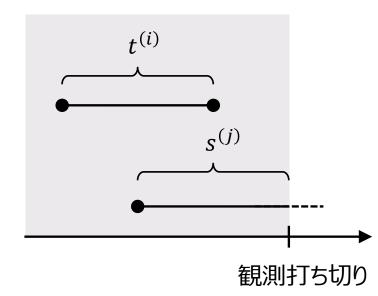
## 打ち切りがある場合の最尤推定: 打ち切りデータに対して生存関数S(t)を当てはめる

- データ  $\{t^{(1)}, t^{(2)}, ..., t^{(N)}\} \cup \{s^{(1)}, s^{(2)}, ..., s^{(M)}\}$ :
  - N個の生存期間データに加えて、M個の打ち切りデータ(少なくとも $s^{(i)}$ 期間生存)
- 尤度関数:

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{N} f(t^{(i)}) \cdot \prod_{j=1}^{M} S(t^{(j)})$$

- 生存関数 $S(t) = \int_{t}^{\infty} f(t) dt$ : 少なくともt期間は生存している確率
- 指数分布の場合:  $S(t) = \exp(-\theta t)$





## 今回の話題: さまざまな確率モデル

- ロジスティック回帰モデルの発展:
  - 多クラスロジスティック回帰モデル
  - 順序回帰モデル
  - ランキング(一対比較)モデル
  - ニューラルネットワーク
- 生存期間のモデル
  - ・ハザード関数
  - 生存期間モデルの最尤推定