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）

今回の話題：
さまざまな確率モデル

- ロジスティック回帰の発展：
  - 多クラスロジスティック回帰
  - 順序回帰
  - ランキング
  - 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の発展

ロジスティック回帰の発展：
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

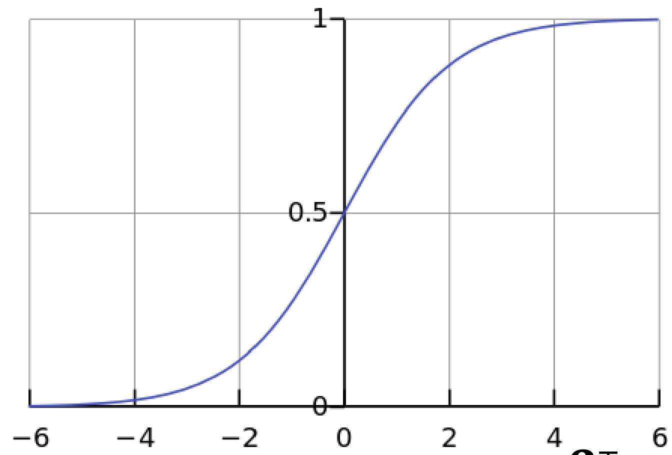
ロジスティック回帰：
ダミー変数を従属変数とするモデル

- 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

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

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

$\sigma(\quad)$



$\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}$

多値ロジスティック回帰：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（$Y \in \mathcal{Y} = \{1,2,\ldots,k\}$）
  - ただし、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$y \in \mathcal{Y}$ごとにパラメータ$\boldsymbol{\beta}_y$をもつ

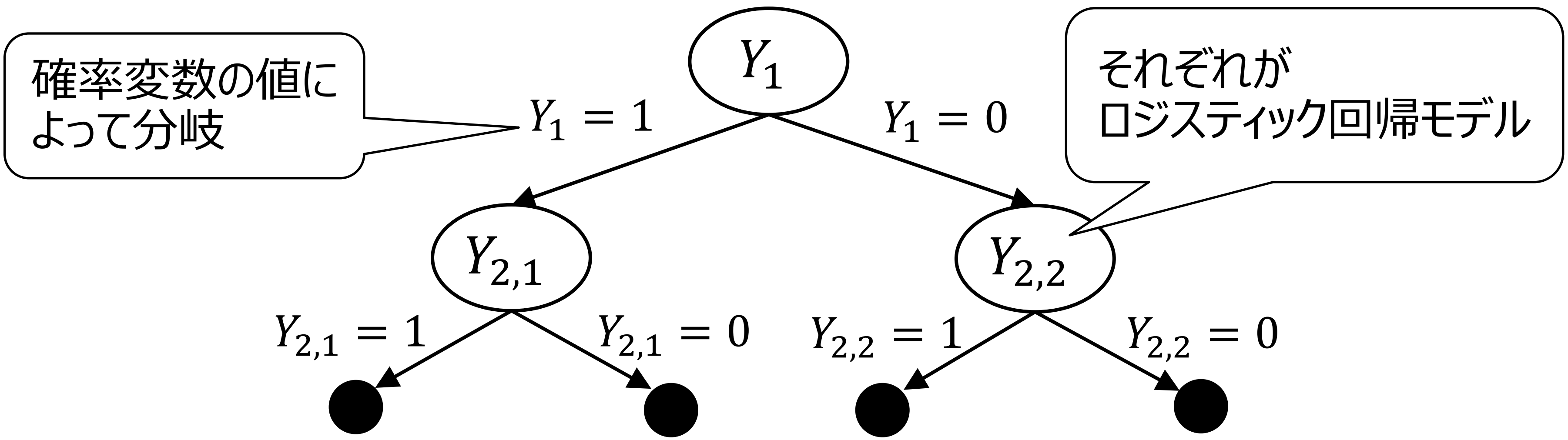
いわゆるソフトマックス関数

$$P\left(Y = y \middle| \mathbf{x}, \left\{\boldsymbol{\beta}_{y'}\right\}_{y' \in \mathcal{Y}}\right) = \frac{\exp\left(\boldsymbol{\beta}_y{}^{\top}\mathbf{x}\right)}{\sum_{y' \in \mathcal{Y}} \exp\left(\boldsymbol{\beta}_{y'}{}^{\top}\mathbf{x}\right)}$$

  - $\mathcal{Y} = \{+1, -1\}$のときは$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_{+1} - \boldsymbol{\beta}_{-1}$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：
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

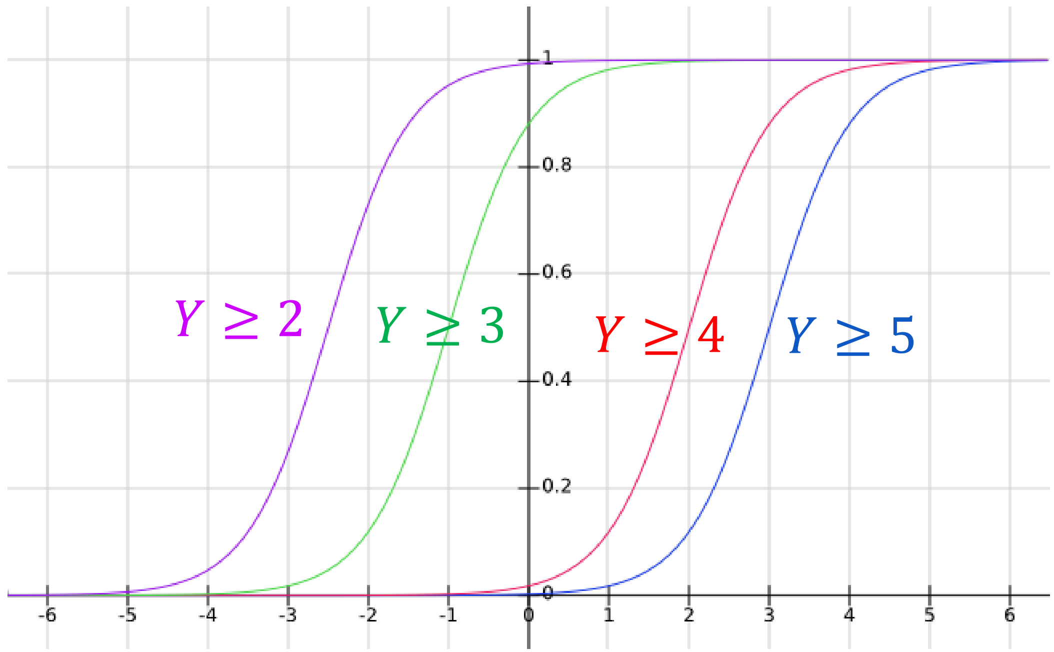
- Yが多値で順序尺度をもつ場合（$Y \in \mathcal{Y} = \{1,2,\dots,k\}$）

5段階評価など

- $Y \geq y$となる確率を与える：

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

  - $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \cdots \leq \alpha_k$



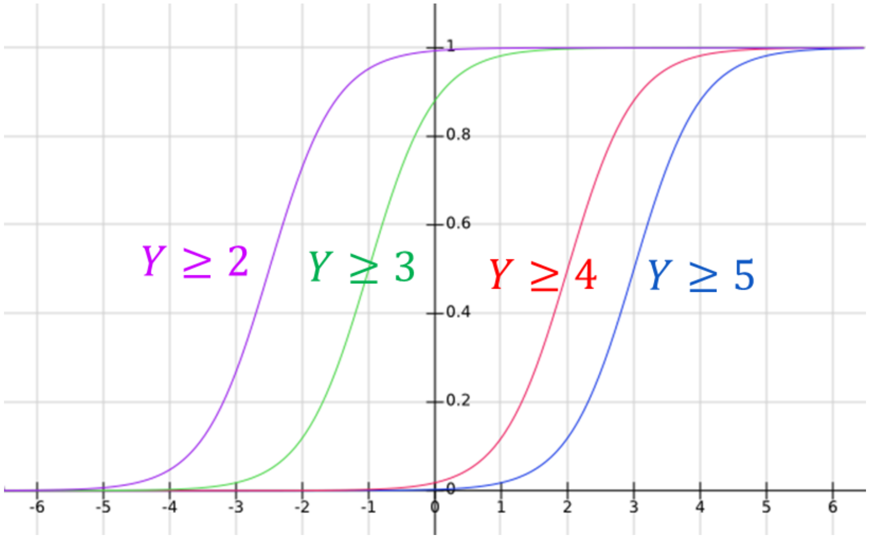
順序回帰：
順序尺度をもつ従属変数を説明するモデル

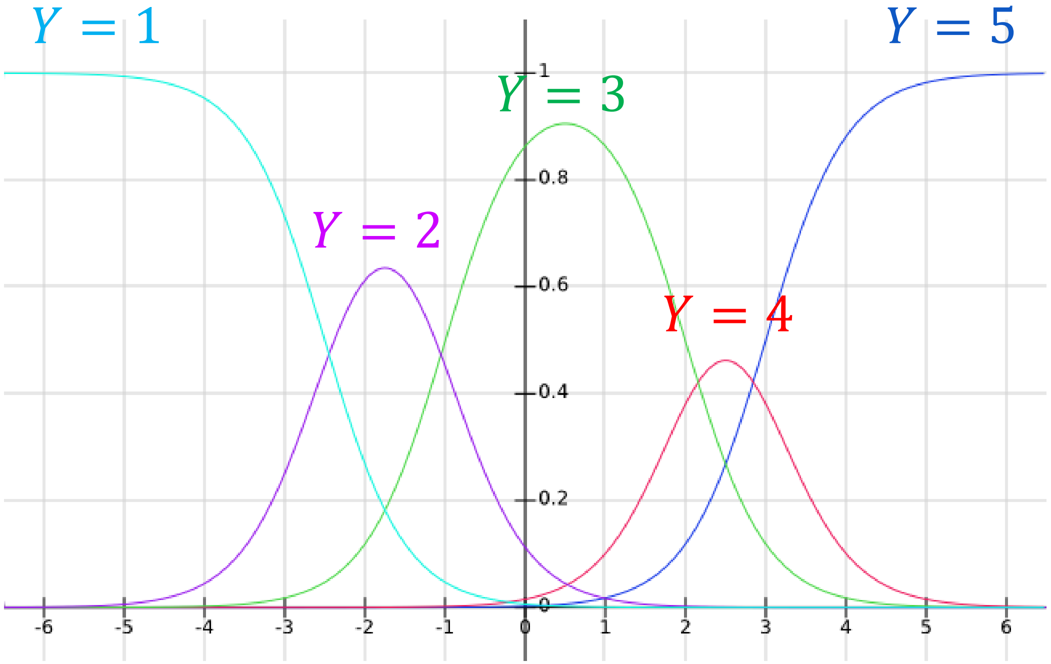
- 順序回帰モデルは$Y \geq y$となる確率がロジスティック回帰モデル：

$$P(Y \geq y|\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \sigma(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} - \alpha_y)$$

- $Y = y$ である確率は上記の差を用いて表現：

$$P(Y = y|\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = P(Y \geq y|\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) - P(Y \geq y - 1|\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$$





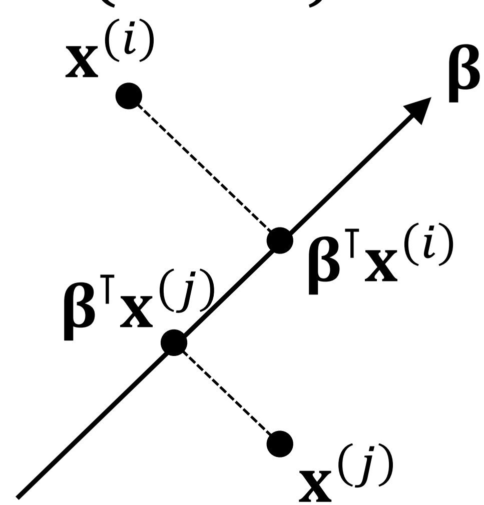
ランキング：一対比較のモデル

- 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（$i \succ j$）確率：

$$P\left(i \succ j \middle| \mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}, \boldsymbol{\beta}\right) = \frac{\exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right)}{\exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}\right) + \exp\left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(j)}\right)}$$

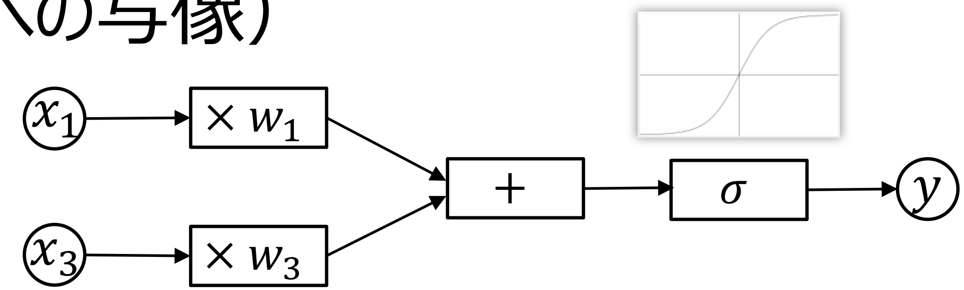
$$= \sigma\left(-\boldsymbol{\beta}^\top \left(\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\right)\right)$$

  - 2つのデータの独立変数の差をペアに対する独立変数としたロジスティック回帰モデル

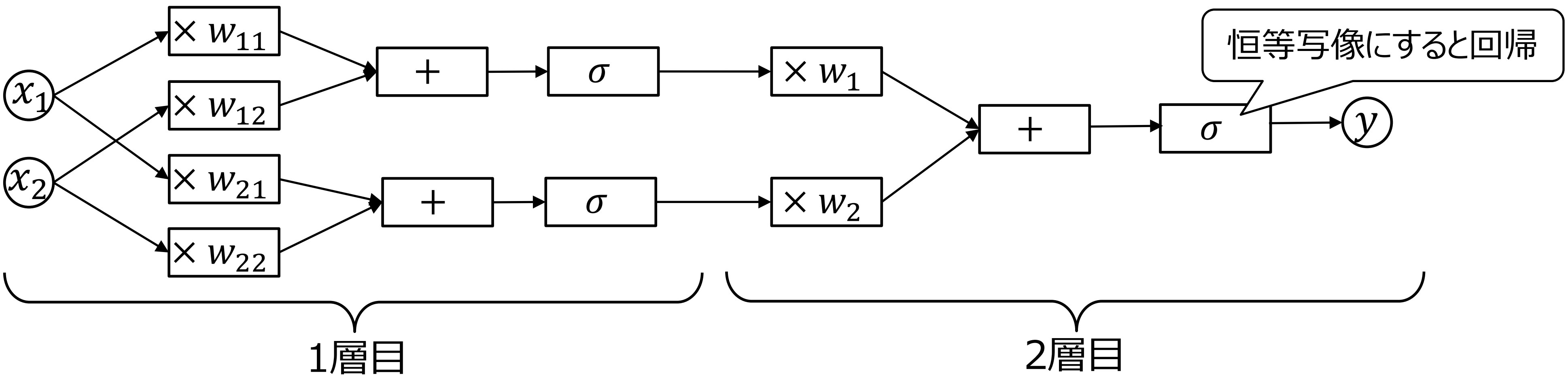


ニューラルネットワーク：ロジスティック回帰の多層化

- 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

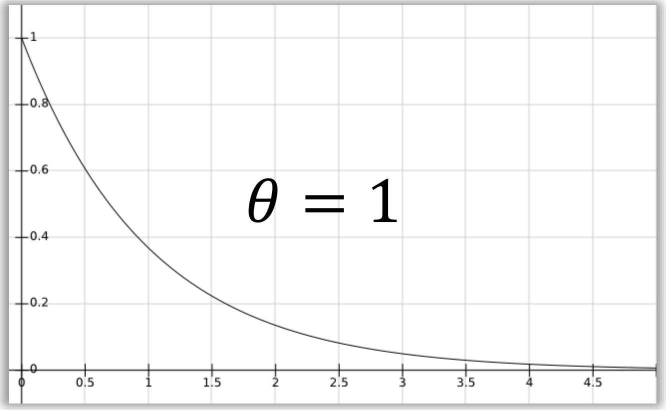
生存期間のモデル：期間を確率変数とするモデル

- 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：$\Pr(T \le t) = F(t) = \int_0^t f(\tau)\,\mathrm{d}\tau$
  - 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）

生存関数

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が$f(t)\Delta t$（「時刻tまで生存」かつ「 $t \sim t+\Delta t$ で死亡」）
- 指数分布モデル：$f(t) = \theta \exp(-\theta t)$
  - $\theta > 0$ ：モデルパラメータ



- 生存期間T：

$$\Pr(T \leq t) = F(t) = \int_0^t f(\tau)\,\mathrm{d}\tau = 1 - \exp(-\theta t)$$

  - $\mathrm{E}[T] = \frac{1}{\theta}, \mathrm{Var}[T] = \frac{1}{\theta^2}$
- 独立変数によってパラメータが変わる場合：$\theta = \exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x})$

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： $h(t) = \dfrac{f(t)}{S(t)} = -\dfrac{\mathrm{d}\log S(t)}{\mathrm{d}t}$

$S(t) = 1 - F(t)$ ：
生存関数（少なくとも時刻tまでは生存する確率）

- ハザード関数の時間変化：

$\dfrac{\mathrm{d}h(t)}{\mathrm{d}t} > 0$ 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：

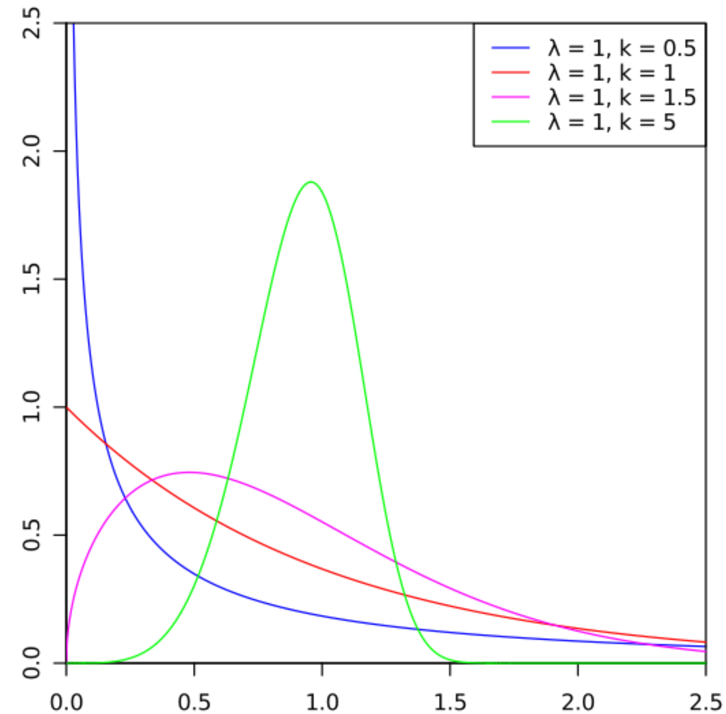
$$f(t) = \frac{k}{\lambda}\left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k-1} \exp\left\{-\left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k}\right\}, k, \lambda > 0$$

  - $k = 1$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：

$$\lambda = \exp(\boldsymbol{\beta}^{\top}\mathbf{x})$$



https://en.wikipedia.org/wiki/Weibull_distribution#/media/File:Weibull_PDF.svg

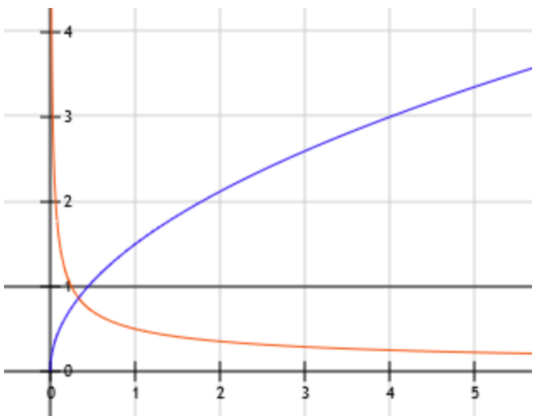
ワイブル分布：
パラメータによってハザード関数の時間的増減が決まる

- ワイブル分布の生存関数：

$$S(t) = \int_t^{\infty} \frac{k}{\lambda}\left(\frac{t}{\lambda}\right)^{k-1} \exp\left\{-\left(\frac{t}{\lambda}\right)^k\right\} \mathrm{d}t = \exp\left\{-\left(\frac{t}{\lambda}\right)^k\right\}$$

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

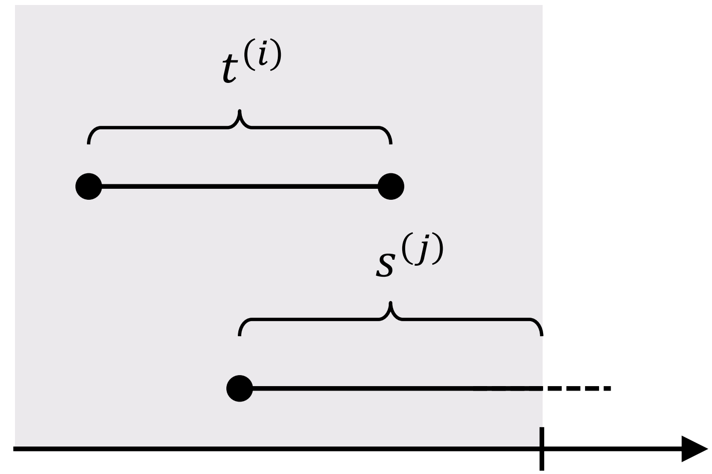
- データ $\{t^{(1)}, t^{(2)}, \ldots, t^{(N)}\}$ ：
  - N個の独立な観測（生存期間がちょうど$t^{(i)}$）

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

- 尤度関数$L(\theta) = \prod_{i=1}^{N} f\left(t^{(i)}\right)$
  - 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：$L(\theta) = \prod_{i=1}^{N} \theta \exp\left(-\theta t^{(i)}\right)$
    - 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 $\hat{\theta} = \dfrac{N}{\sum_{i=1}^{N} t^{(i)}}$

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 $\{t^{(1)}, t^{(2)}, \dots, t^{(N)}\} \cup \{s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(M)}\}$：
  - 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：



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

  - 生存関数 $S(t) = \int_t^\infty f(t)\mathrm{d}t$：
    少なくとも t 期間は生存している確率
  - 指数分布の場合：$S(t) = \exp(-\theta t)$
    - $\log L(\theta) = N \log \theta - \theta\left(\sum_{i=1}^{N} t^{(i)} + \sum_{j=1}^{M} s^{(j)}\right)$