KYOTO UNIVERSITY

統計的モデリング基礎⑤
～ロジスティック回帰とニューラルネットワーク～

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

ロジスティック回帰

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）：

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

実際には対数尤度で扱うことが多い

- 尤度最大になるパラメータを推定値$\hat{\theta}$とする

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

  - もっともデータを生成する確率が高い（「最も尤もらしい」）

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（一応、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

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：$\left(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(n)}\right)$
  - （ダミー）従属変数：$\left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(n)}\right), y^{(i)} \in \{+1, -1\}$

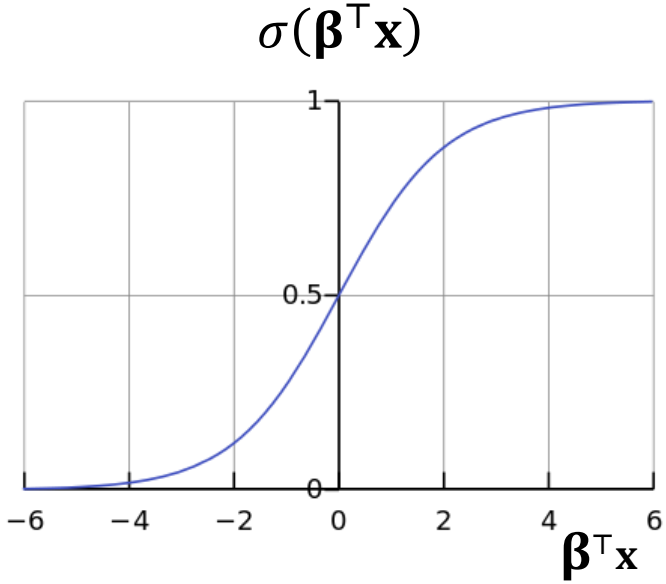
以降、表記上の利便性からダミー従属変数を
$\{0,1\}$ でなく $\{+1, -1\}$ と表記する
（本質的な違いはナシ）

ロジスティック回帰モデル：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 → もっときちんと扱いたい
  - 重回帰モデル$y = \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$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：

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

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



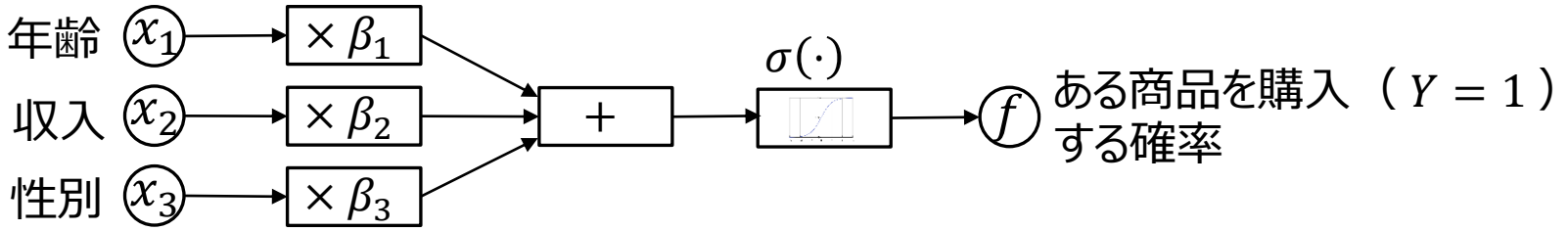
ロジスティック回帰モデルの例：線形回帰モデルの出力を[0,1]に変換

- ロジスティック回帰モデルは従属変数$Y = 1$となる確率を与える：

$$P(Y = 1|\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}) = \sigma(\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_D x_D + \alpha)$$

  - σ：ロジスティック関数（$\sigma: \mathbb{R} \to (0,1)$）
  - $\sigma(\cdot)$の中身は線形回帰モデルと同じ（$\in \mathbb{R}$）

- モデルパラメータ $\beta = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_D, \alpha)^\top$において
  - β_d：独立変数x_dが従属変数に与える影響
  - $\beta_d > 0$のとき、$x_d > 0$は$Y = 1$となる方向に貢献；
    $x_d < 0$は$Y = 1$となる方向に貢献している



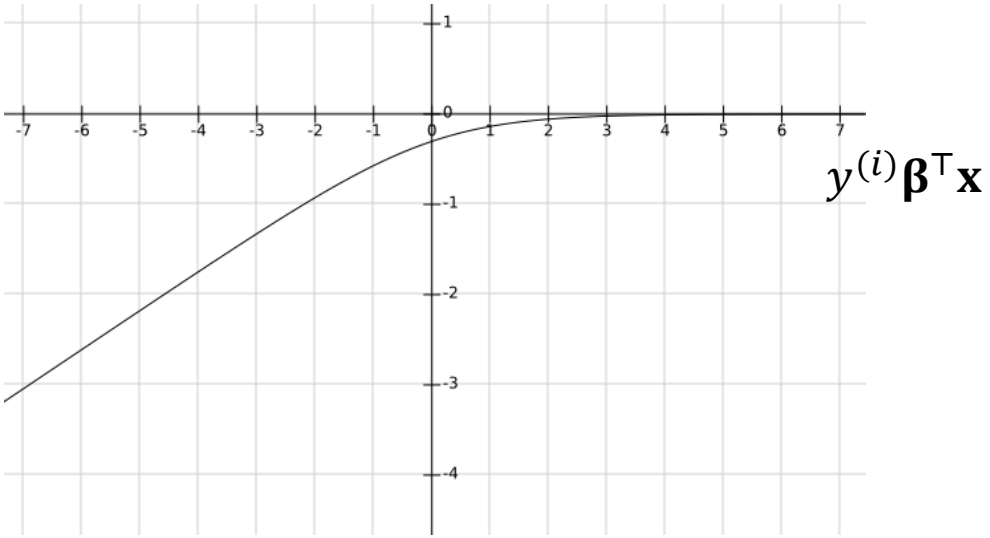
ロジスティック回帰モデルの対数尤度：凸関数なので大局解が存在するが解析解はない

- 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：非線形最適化法によって、パラメータ更新を繰り返す

- 最尤推定の目的関数（最大化）：

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

  - 解析解は得られないが、凸関数（1次元の場合、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： $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \mathbf{d}$

パラメータの更新：
目的関数をもっとも改善するような更新を行う

- 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：

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

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

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

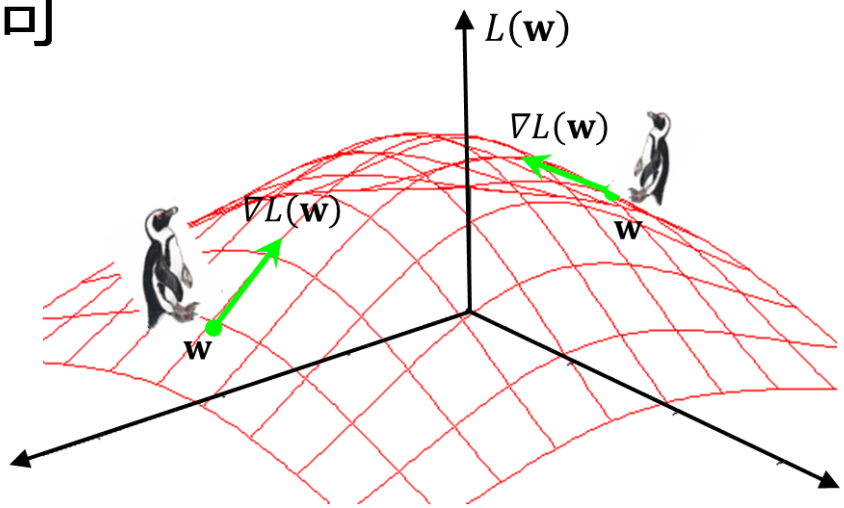
最良のパラメータ更新差分の決定：目的関数をテイラー展開で2次近似

- 目的関数のテイラー展開：

3次以上の項

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

  - 勾配：$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \left(\frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_1}, \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_2}, \ldots, \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_D}\right)^{\mathsf{T}}$
    - $\boldsymbol{\beta}$ において目的関数が最も急な方向
  - ヘッセ行列：$[H(\boldsymbol{\beta})]_{i,j} = \frac{\partial^2 L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_i \partial \beta_j}$
    - $\boldsymbol{\beta}$ 周辺での目的関数の「曲がり方」



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

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

- 最大化するために$\mathbf{d}$で微分：$\frac{\partial L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} \approx \nabla L(\boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})\mathbf{d}$
- 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：

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

線形探索付きニュートン法：近似は厳密には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：

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

  - 近似なので、厳密には正しくない
- そこで、更新の向きのみを採用して、更新の量ηは別途決める：$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \eta\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}\nabla L(\boldsymbol{\beta})$
- 更新の量（学習率） $\eta > 0$ の決定法：
  - ステップ数とともに適当に減衰させる
  - あるいは、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に、シンプルで軽い更新を繰り返す

- 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 $-\boldsymbol{I}$ で置き換える：（単位行列）

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

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

※ 最急降下法の名前は、最小化問題を想定しているが、ここでは最大化問題としているので降下じゃなくて上昇しているが、便宜上こう呼ぶことにする

確率的最適化とミニバッチ学習：データの部分集合を用いた効率的な推定

- 目的関数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$\ell^{(t)}$を使う）
- ミニバッチ学習：$1 < m < n$ 個のデータで勾配を近似：

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

ロジスティック回帰の勾配計算：比較的簡単に計算可能

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

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

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

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

現在のパラメータでのモデルが与える確率

練習問題：
ポアソン回帰の最尤推定

- （前回出てきた）ポアソン回帰の最尤推定
  - 対数尤度：

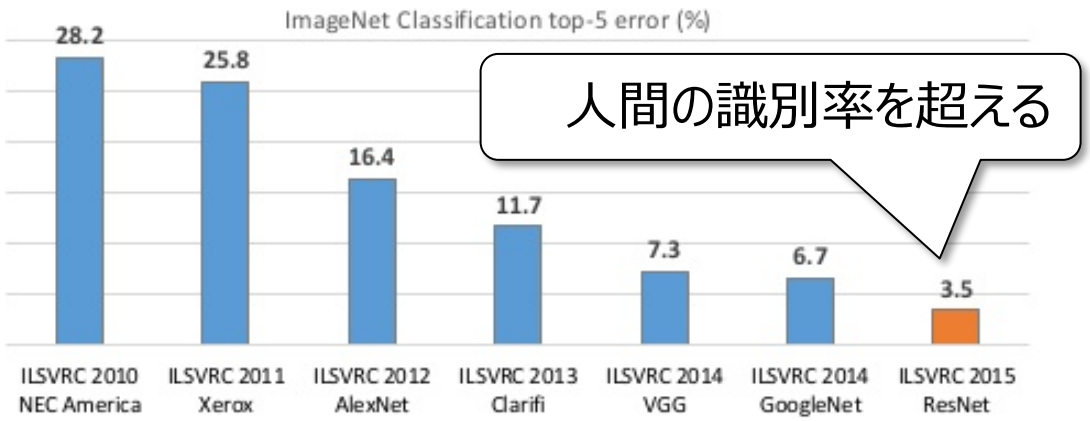
$$L(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}^{(i)} - \sum_{i=1}^{n} \exp\left(\boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x}^{(i)}\right) + \text{const.}$$

  - 解析解は求まらない
- 最急勾配法の更新式を求めてみる

ニューラルネットワーク

深層学習（ディープラーニング）の出現：機械による認識の大幅な精度向上

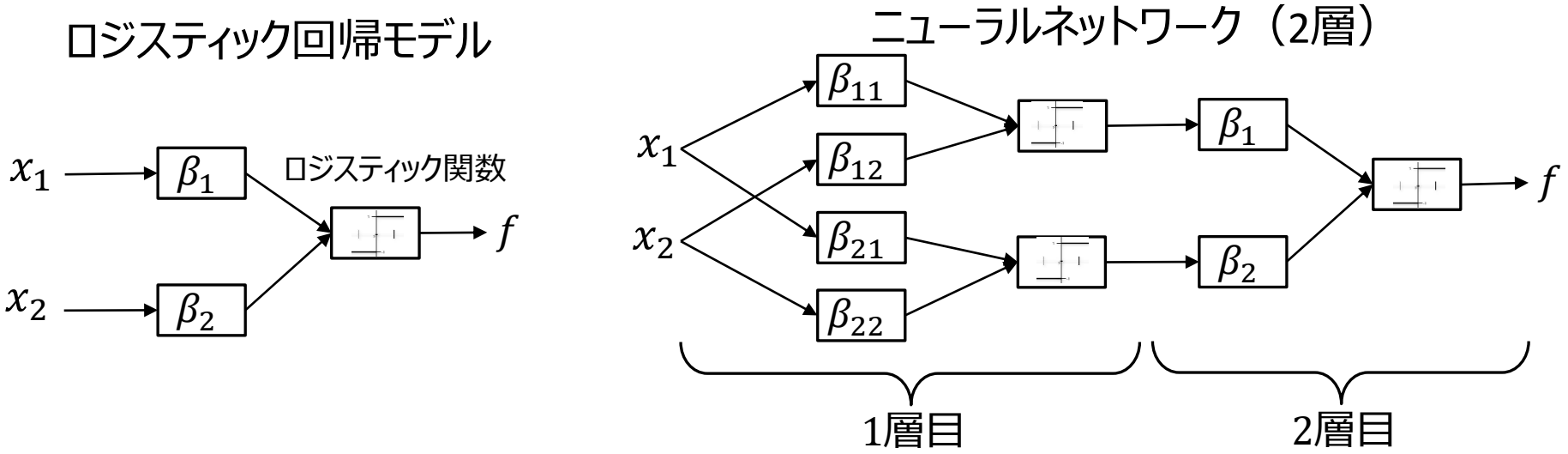
- ニューラルネットワーク：
  1980年代に盛んに研究がされていたがその後下火に
- 画像識別で10%以上の記録更新、一躍注目を浴びる
  → 畳み込みニューラルネットがデファクト・スタンダードに
- GAFAを筆頭に数々の企業が深層学習に大きな投資
- 研究・開発のトレンドも
  深層学習が中心に



Microsoftの発表資料より抜粋

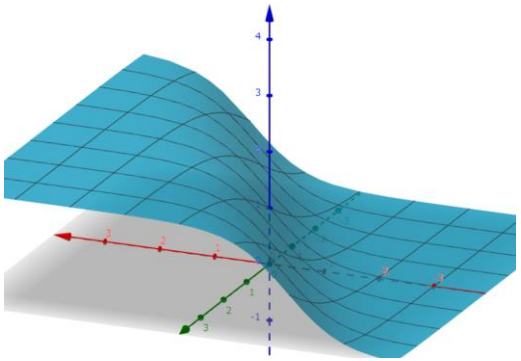
ニューラルネットワーク：（ざっくりいえば）ロジスティック回帰モデルを連結したもの

- 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
  - 両者ともに、$y = +1$である確率$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$を出力するモデル

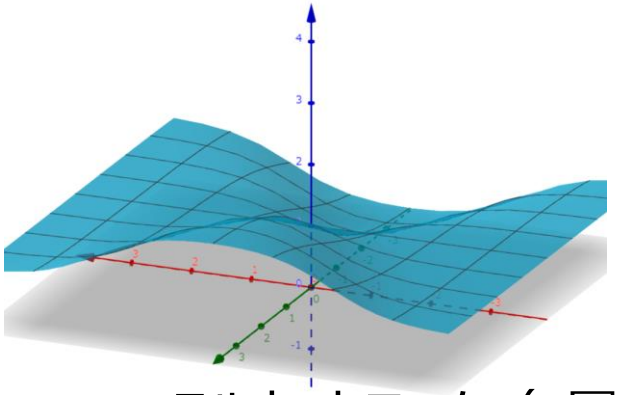


ニューラルネットワークの非線形性の例：ロジスティック回帰を2層積むと非線形分類が可能

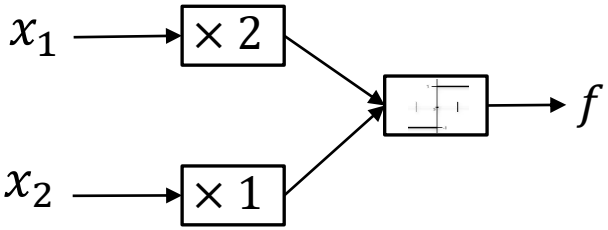
- ロジスティック回帰は1層では線形判別しかできない（AND/OR）
- 2層以上積むことで非線形の表現力を獲得（XOR）

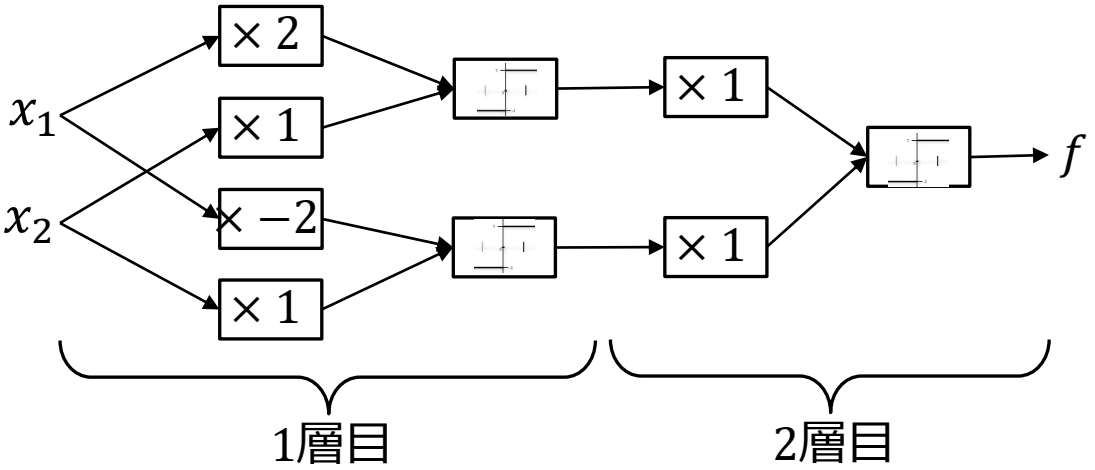


ロジスティック回帰モデル



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

- 対数尤度関数$L(\boldsymbol{\beta})$を最大化するパラメータ$\boldsymbol{\beta}$を求める：

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

  - $f\left(x^{(i)}\right)$は$x^{(i)}$に対するニューラルネットの出力（$y^{(i)} = 1$である確率）

- 勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$が計算できれば最急降下法を適用できる：

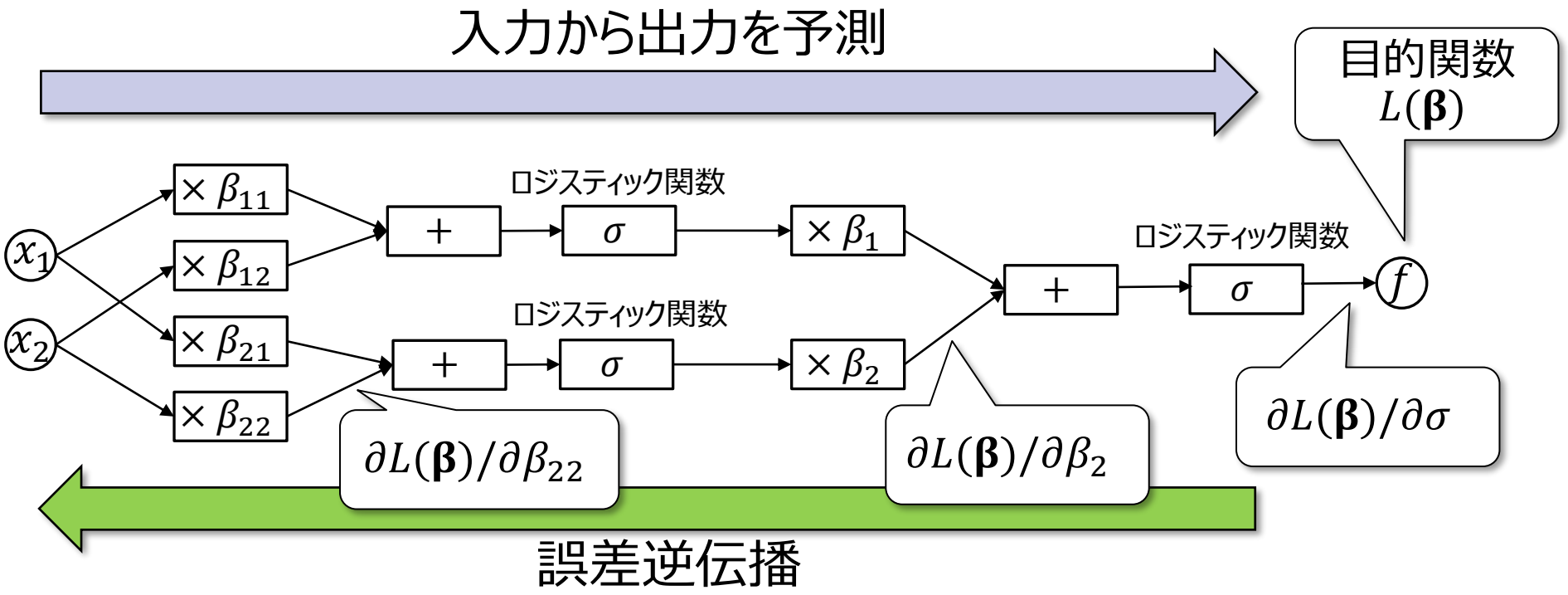
$$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \eta \nabla L(\boldsymbol{\beta})$$

  - 実際は確率的最適化やミニバッチを用いることも多い

ニューラルネットワークのパラメータ推定法：

誤差逆伝播法（自動微分）による勾配法でパラメータ推定

- 対数尤度$L(\boldsymbol{\beta})$をパラメータで微分できれば勾配法で推定できる
- 誤差逆伝播法（自動微分）：層を遡って微分計算



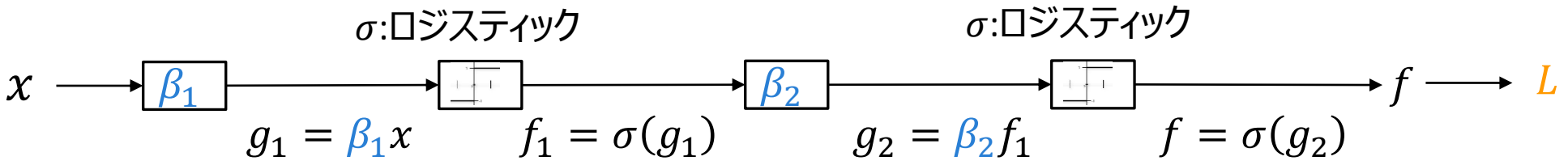
誤差逆伝播法：勾配を再帰的に効率的に計算できる

- 誤差逆伝播法：$L(\boldsymbol{\beta})$の勾配$\nabla L(\boldsymbol{\beta}) = \dfrac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$を計算する方法

- 1次元の場合の例：
  - fから「後ろ向きに」遡っていく計算（微分の連鎖率）
  - $\dfrac{\partial L}{\partial \beta_2} = \dfrac{\partial L}{\partial f} \cdot \dfrac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \dfrac{\partial g_2}{\partial \beta_2}$
  - $\dfrac{\partial L}{\partial \beta_1} = \dfrac{\partial L}{\partial f} \cdot \dfrac{\partial f}{\partial g_2} \cdot \dfrac{\partial g_2}{\partial f_1} \cdot \dfrac{\partial f_1}{\partial g_1} \cdot \dfrac{\partial g_1}{\partial \beta_1}$

共通なので層をまたいで使いまわし可能

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



まとめ：
ロジスティック回帰と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$y \in \{+1, -1\}$を従属変数とするモデル
    - $y = +1$である確率を出力する
  - 最尤推定の対数尤度は、大域解をもつが、解析解をもたない
  - 非線形最適化法によって、最適解を求める
    - ニュートン法、再急降下法、確率的勾配法、…
- ニューラルネットワーク：
  - （乱暴にいえば）ロジスティック回帰の多層化
  - （ロジスティック回帰と異なり）非線形の識別が可能
  - 誤差逆伝播法によって、効率的に勾配が計算可能