

統計的モデリング基礎⑤ ～ロジスティック回帰～

鹿島久嗣
(情報学科 計算機科学コース)

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 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}$ から確率モデル $f_{\theta}(x)$ 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）：

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n f_{\theta}(x^{(i)})$$

- 尤度最大になるパラメータを推定値 $\hat{\theta}$ とする

実際には対数尤度で扱うことが多い

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta} \prod_{i=1}^n f_{\theta}(x^{(i)}) = \operatorname{argmax}_{\theta} \sum_{i=1}^n \log f_{\theta}(x^{(i)})$$

- もっともデータを生成する確率が高い（「最も尤もらしい」）

条件付き分布の最尤推定：

従属変数の値を最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： $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), (x^{(2)}, y^{(2)}), \dots, (x^{(n)}, y^{(n)})\}$ から確率モデル $f_{\theta}(y^{(i)} \mid x^{(i)})$ 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）：

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n f_{\theta}(y^{(i)} \mid x^{(i)})$$

- 尤度最大になるパラメータを推定値 $\hat{\theta}$ とする

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta} \prod_{i=1}^n f_{\theta}(y^{(i)} \mid x^{(i)}) = \operatorname{argmax}_{\theta} \sum_{i=1}^n \log f_{\theta}(y^{(i)} \mid x^{(i)})$$

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

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)

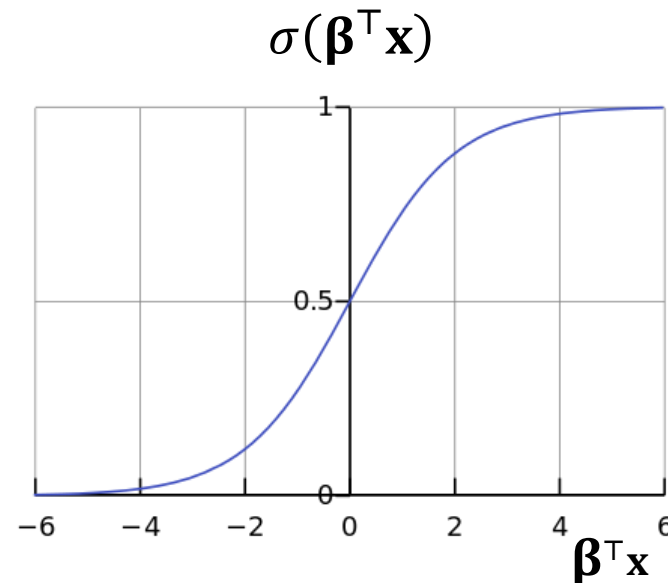
ロジスティック回帰モデル： ダミー変数を従属変数とするモデル

- 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 $y = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}$ 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 ($\sigma: \mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$)

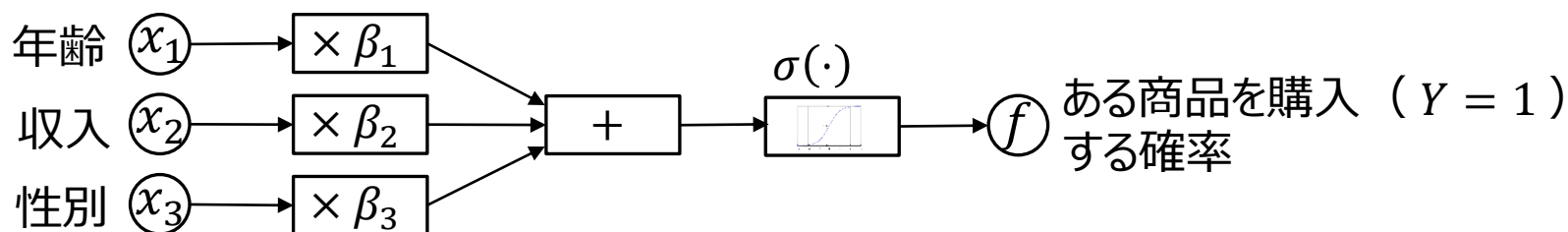


ロジスティック回帰モデルの例： 線形回帰モデルの出力を[0,1]に変換

- 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：

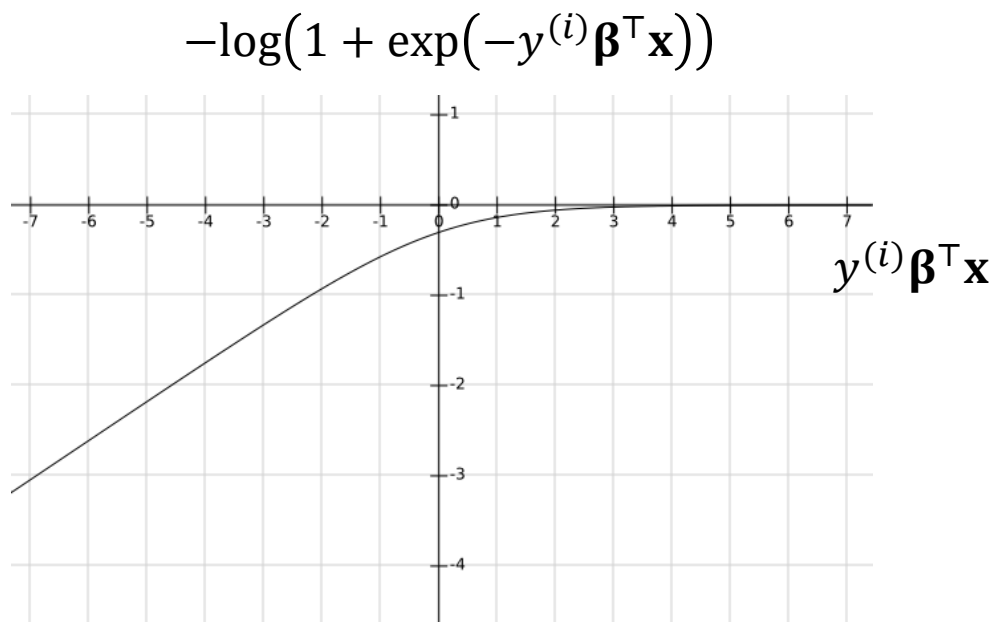
$$P(Y = 1 | \mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}) = \sigma(\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_D x_D + \alpha)$$

- σ ：ロジスティック関数 ($\sigma: \mathbb{R} \rightarrow (0,1)$)
- $\sigma(\cdot)$ 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 $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_D, \alpha)^\top$ 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： $L(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^n \log(1 + \exp(-y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}))$
 $\left(= \sum_{i=1}^n \delta(y^{(i)} = 1) \log \frac{1}{1 + \exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})} + \delta(y^{(i)} = -1) \log \left(1 - \frac{1}{1 + \exp(-\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})} \right) \right)$
- $L(\boldsymbol{\beta})$ は凸関数：
 - 大局解がある
 - 解析解はない



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）：

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

- 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： $\boldsymbol{\beta}^{\text{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} + \mathbf{d}$



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

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

- $L_{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{d})$ を最大化する更新差分 \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：

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

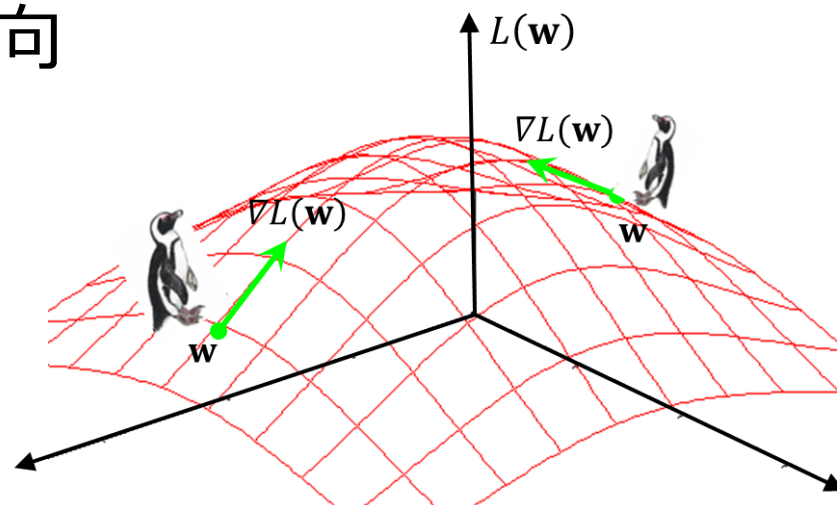
3次以上の項

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

- β において目的関数が最も急な方向

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

- β 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

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

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

- これを $= \mathbf{0}$ とおいて解くと： $\mathbf{d} = -\mathbf{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1} \nabla L(\boldsymbol{\beta})$

実際には連立方程式を解く

- ニュートン法：

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



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 $\boldsymbol{\beta}^{\text{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1} \nabla L(\boldsymbol{\beta})$ は2次近似が正しいことを仮定している：

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

- 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：
 $\boldsymbol{\beta}^{\text{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \eta \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1} \nabla L(\boldsymbol{\beta})$
- 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： $\eta^* = \operatorname{argmax}_{\eta} L(\boldsymbol{\beta} - \eta \boldsymbol{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1} \nabla L(\boldsymbol{\beta}))$

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： $\boldsymbol{\beta}^{\text{NEW}} \leftarrow \boldsymbol{\beta} - \eta \mathbf{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1} \nabla L(\boldsymbol{\beta})$

- 最急降下法：

単位行列

- ヘッセ行列の逆行列 $\mathbf{H}(\boldsymbol{\beta})^{-1}$ を $-\mathbf{I}$ で置き換える：

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

- 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：



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： $L(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n \ell^{(i)}$

- 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

i 番目のデータの
対数尤度

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

- $$\begin{aligned} \frac{\partial L(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} &= -\sum_{i=1}^n \frac{1}{1 + \exp(-y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})} \frac{\partial (1 + \exp(-y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}))}{\partial \boldsymbol{\beta}} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{1 + \exp(-y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})} \exp(-y^{(i)} \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}) y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)} \\ &= \sum_{i=1}^n (1 - f(y^{(i)} | \mathbf{x}^{(i)}; \boldsymbol{\beta})) y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)} \end{aligned}$$

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：

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

- 解析解は求まらない

- 最急勾配法の更新式を求めている

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

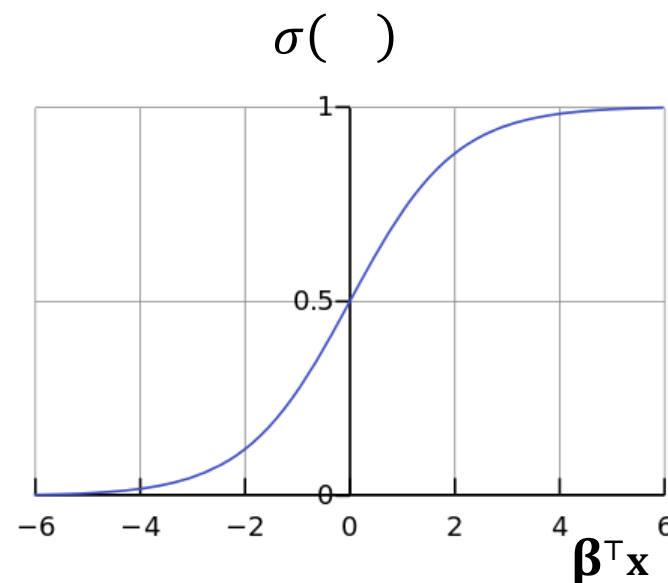
- 確率モデルはデータの生成モデル
- 分析対象のデータに合わせてモデルが変わる
 - 質的変数（ダミー変数0, 1）の場合：ロジスティック回帰モデル
→ 選択肢が複数の場合：多値ロジスティック回帰
 - 量的変数（連続値）の場合：線形回帰モデル
→ 順序尺度（例えば5段階評価）の場合：順序回帰
 - 比較：一対比較のモデル（例：2つのうちどちらがよいか？）
- 多層化による非線形モデルの実現：ニューラルネットワーク

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

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

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



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（ $Y \in \mathcal{Y} = \{1, 2, \dots, k\}$ ）
 - ただし、 $1, 2, \dots, k$ 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 $y \in \mathcal{Y}$ ごとにパラメータ $\boldsymbol{\beta}_y$ をもつ

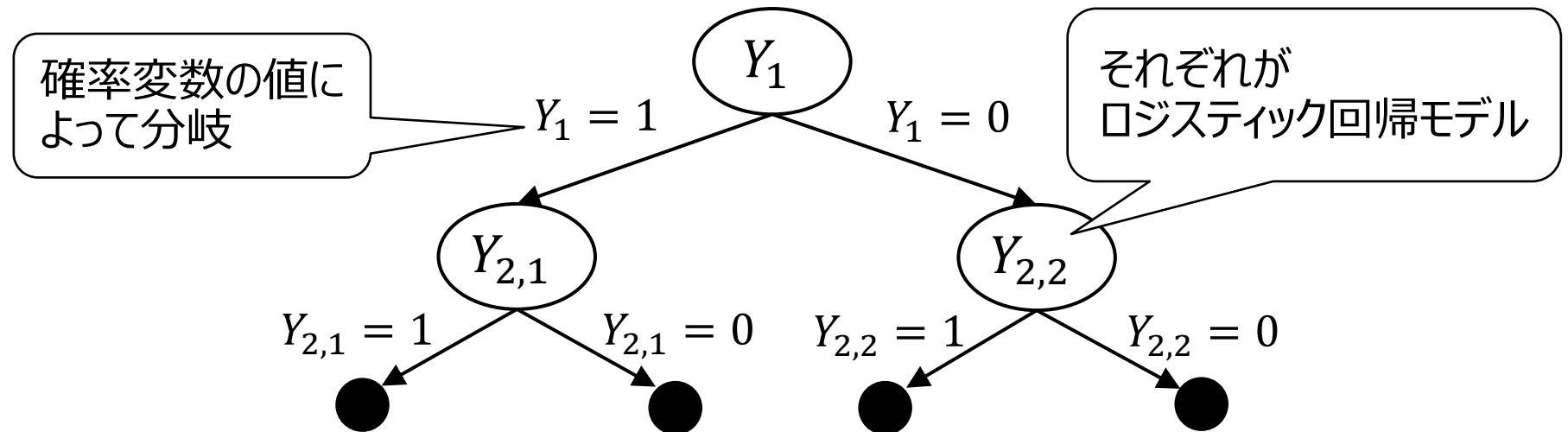
いわゆるソフトマックス関数

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

- $\mathcal{Y} = \{+1, -1\}$ 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：

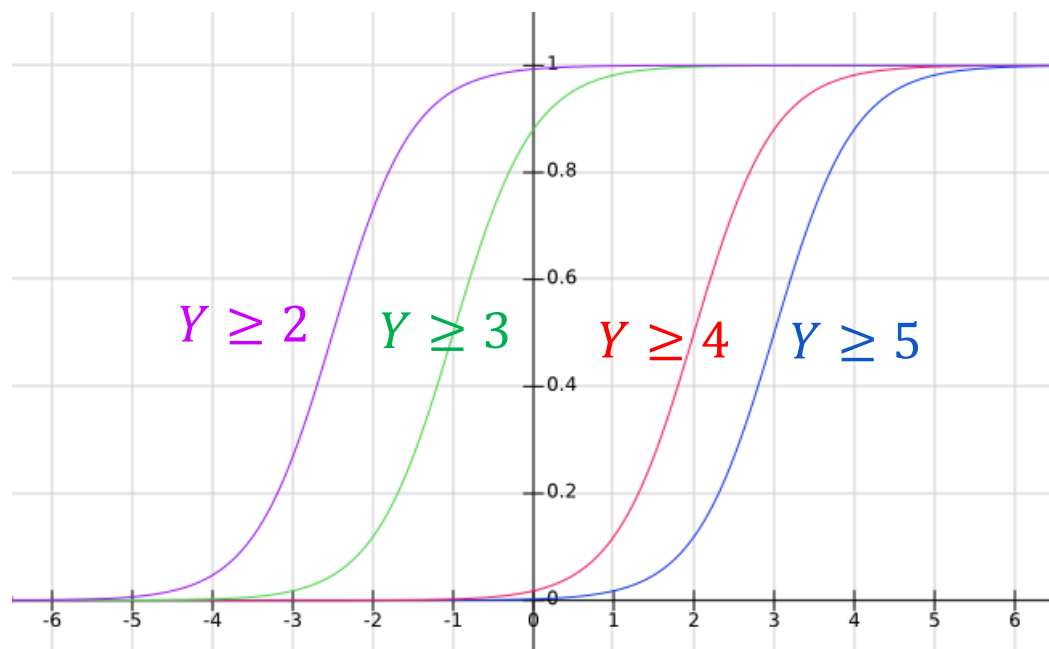
順序尺度をもつ従属変数を説明するモデル

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 ($Y \in \mathcal{Y} = \{1, 2, \dots, k\}$)
- $Y \geq y$ となる確率を与えるモデルを考える：

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

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



順序回帰モデル：

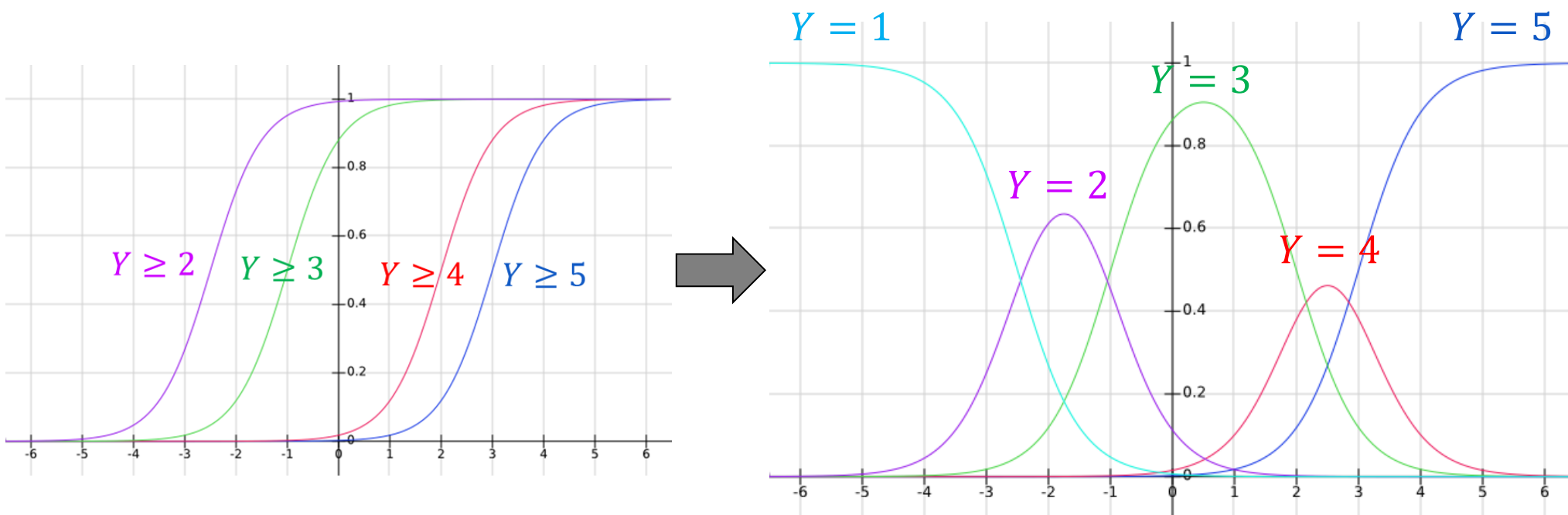
順序尺度をもつ従属変数を説明するモデル

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

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

- $Y = y$ である確率は上記モデルの差を用いて表現できる：

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

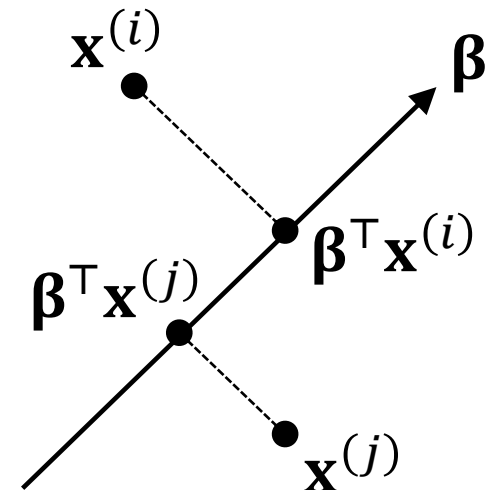


ランキングの確率モデル： 一対比較のモデル

- 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：

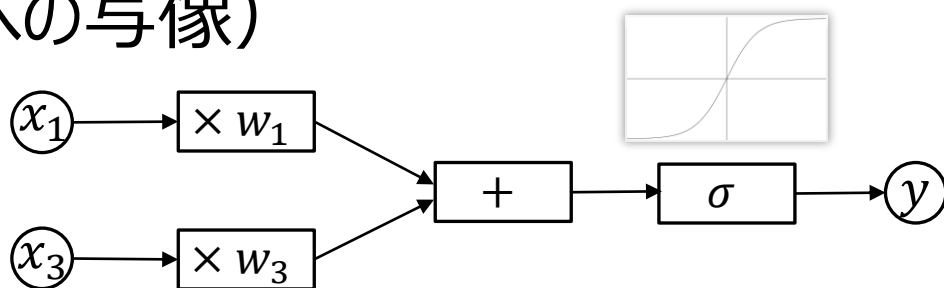
$$P(i > j | \mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{\exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)})}{\exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(i)}) + \exp(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}^{(j)})}$$
$$= \sigma(-\boldsymbol{\beta}^\top (\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}))$$

- 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

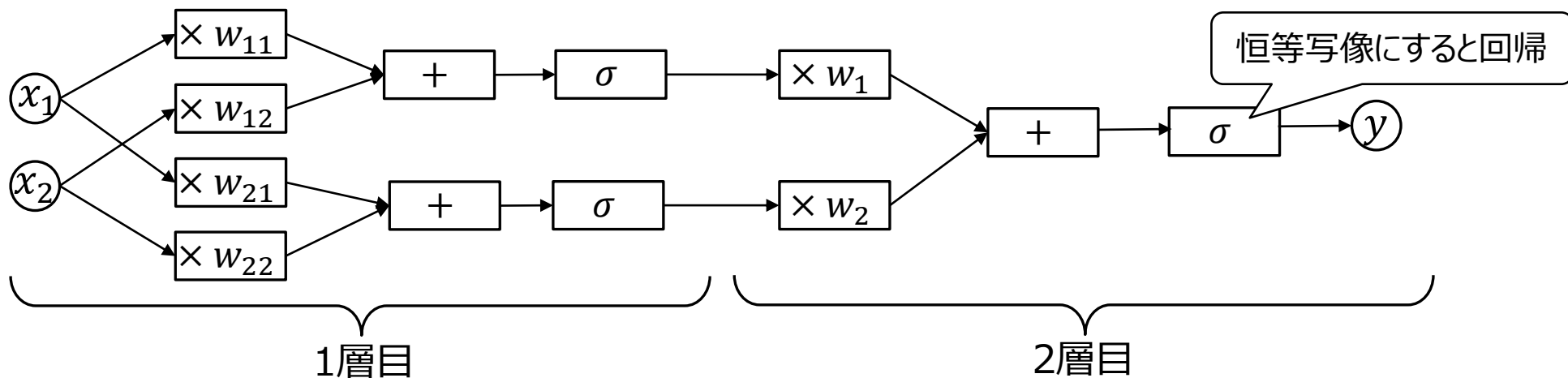


ニューラルネットワーク： ロジスティック回帰の多層化

- 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



まとめ：

ロジスティック回帰

■ 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、...

まとめ：

ロジスティック回帰

■ ロジスティック回帰：

- ダミー変数 $y \in \{+1, -1\}$ を従属変数として、 $y = +1$ である確率を出力するモデル
- 最尤推定対数尤度は、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、...

■ 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