

確率変数 Y が実数 μ を用いて

$$P(Y = k) = \frac{\mu^k}{k!} e^{-\mu}$$

で表される分布に従うとき、 Y はポアソン分布に従うという。このとき

$$\begin{aligned} E[Y] &= \sum_{k=0}^{\infty} k \cdot \frac{\mu^k}{k!} e^{-\mu} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\mu \cdot \mu^{k-1}}{(k-1)!} e^{-\mu} \\ &= \mu e^{-\mu} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\mu^l}{l!} = \mu \end{aligned}$$

となることから Y の期待値は μ になることがわかる。

ポアソン分布のパラメータ μ に関して、 p を自然数とし $x \in \mathbb{R}^p$ に対してある $\beta_0 \in \mathbb{R}, \beta \in \mathbb{R}^p$ が存在して

$$\mu(x) := E[Y \mid X = x] = e^{\beta_0 + x\beta}$$

とかけることを仮定する。この場合 N 個の観測値 $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$ ($x_i \in \mathbb{R}^p, y_i \in \mathbb{Z}_+$) についての尤度関数は

$$\mu_i := \mu(x_i) = e^{\beta_0 + x_i\beta}$$

とすれば

$$\prod_{i=1}^N \frac{\mu_i^{y_i}}{y_i!} e^{-\mu_i} \tag{1}$$

とかくことができる。各 i に対して

$$\begin{aligned} \log \frac{\mu_i^{y_i}}{y_i!} e^{-\mu_i} &= y_i \log \mu_i + \log e^{-\mu_i} - \log(y_i!) \\ &= y_i(\beta_0 + x_i\beta) - e^{\beta_0 + x_i\beta} - \log(y_i!) \end{aligned}$$

が成立していることより, (1) 式のマイナス対数をとると

$$\begin{aligned}
-\log \left(\prod_{i=1}^N \frac{\mu_i^{y_i}}{y_i!} e^{-\mu_i} \right) &= - \sum_{i=1}^N \log \left(\frac{\mu_i^{y_i}}{y_i!} e^{-\mu_i} \right) \\
&= - \sum_{i=1}^N \{y_i(\beta_0 + x_i\beta) - e^{\beta_0 + x_i\beta} - \log(y_i!)\} \\
&= - \sum_{i=1}^N \{y_i(\beta_0 + x_i\beta) - e^{\beta_0 + x_i\beta}\} + \sum_{i=1}^N \log(y_i!)
\end{aligned}$$

となることがわかる. したがって (1) 式のマイナス対数の $(\beta_0, \beta$ に関する) 最小化は上式の最終式第 1 項の最小化と同値になるのでこれに Lasso を適用することを考える. すなわち

$$L(\beta_0, \beta) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \{y_i(\beta_0 + x_i\beta) - e^{\beta_0 + x_i\beta}\}$$

とし, これに正則化項を付けた

$$L(\beta_0, \beta) + \lambda \|\beta\|$$

の最小化について考える.

ロジスティック回帰の場合と同様にニュートン法を用いることを考える. そのために $x_i = (x_{i,1}, \dots, x_{i,p})^T$ とし,

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \cdots & x_{N,p} \end{pmatrix}$$

としたうえで

$\nabla L = -\frac{1}{N}Xu, \nabla^2 L = \frac{1}{N}X^TWX$ を満たす $u \in \mathbb{R}^N, W \in \mathbb{R}^{N \times N}$ を求める.

L の $\beta_j (j = 0, \dots, p)$ での偏微分を考えると, $x_{i,j}$ を $x_i \in \mathbb{R}^p$ の第 j 成分

として

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \beta_0} &= -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - e^{\beta_0 + x_i \beta}) \\ \frac{\partial L}{\partial \beta_j} &= -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{i,j} - x_{i,j} e^{\beta_0 + x_i \beta}) \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i,j} (y_i - e^{\beta_0 + x_i \beta})\end{aligned}$$

と書くことができるので、 ∇L は

$$\begin{aligned}\nabla L &= -\frac{1}{N} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N (y_1 - e^{\beta_0 + x_i \beta_1}) \\ \sum_{i=1}^N x_{i,1} (y_i - e^{\beta_0 + x_i \beta_i}) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N x_{i,p} (y_i - e^{\beta_0 + x_i \beta_i}) \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \cdots & x_{N,p} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} y_1 - e^{\beta_0 + x_1 \beta} \\ \vdots \\ y_N - e^{\beta_0 + x_N \beta} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となり、したがって

$$u = \begin{pmatrix} y_1 - e^{\beta_0 + x_1 \beta} \\ \vdots \\ y_N - e^{\beta_0 + x_N \beta} \end{pmatrix}$$

とすればよいことがわかる。

また L の二階微分を考えると、 $x_{i,0} = 1 (i = 1, \dots, N)$ として

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \beta_j \partial \beta_k} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i,j} x_{i,k} e^{\beta_0 + x_i \beta} \quad (j, k \in \{0, 1, \dots, p\})$$

となることより

$$\begin{aligned}
\nabla^2 L &= \frac{1}{N} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N x_{i,1} x_{i,1} e^{\beta_0 + x_i \beta} & \cdots & \sum_{i=1}^N x_{i,1} x_{i,p} e^{\beta_0 + x_i \beta} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^N x_{i,N} x_{i,1} e^{\beta_0 + x_i \beta} & \cdots & \sum_{i=1}^N x_{i,N} x_{i,p} e^{\beta_0 + x_i \beta} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \cdots & x_{N,p} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} e^{\beta_0 + x_1 \beta} & e^{\beta_0 + x_1 \beta} x_{1,1} & \cdots & e^{\beta_0 + x_1 \beta} x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{\beta_0 + x_N \beta} & e^{\beta_0 + x_N \beta} x_{N,1} & \cdots & e^{\beta_0 + x_N \beta} x_{N,p} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \cdots & x_{N,p} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} e^{\beta_0 + x_1 \beta} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{\beta_0 + x_N \beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \cdots & x_{N,p} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

となり, したがって

$$W = \begin{pmatrix} e^{\beta_0 + x_1 \beta} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{\beta_0 + x_N \beta} \end{pmatrix}$$

とすればよいことがわかる.