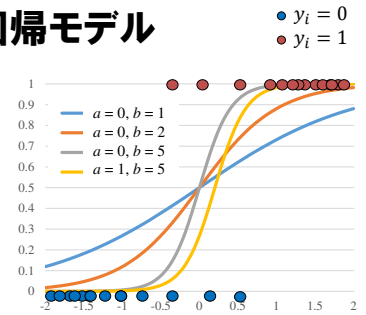
数理統計 補助資料
～ロジスティック回帰モデル～

2024年度2学期：　月曜1限, 水曜3限
担当教員：　石垣　司

ロジスティック回帰モデル #1

説明変数が1つのロジスティック回帰モデル

- **データ：** $\{x_i, y_i\}\ (i = 1, \ldots, N)$
- **目的変数：** $y \in \{0,1\}$
- **説明変数：** $x \in \mathbb{R}$
- **パラメータ：** $\boldsymbol{\theta} = \{a, b\}$
- **関数形：** $f(x) = \frac{1}{1+e^{-(a+bx)}}$



ロジスティック回帰モデルの特徴

- $f(x) = \Pr(y = 1)$
  関数 $f(x)$ の値は $y = 1$ となる確率 $\Pr(y = 1)$ の値
- $\Pr(y = 0) = 1 - f(x)$
  $y = 0$ となる確率 $\Pr(y_i = 0)$ の値は $1 - f(x)$

ロジスティック回帰モデル #2

説明変数が複数あるロジスティック回帰モデル

- **目的変数：** 変数 y
- **説明変数：** 変数 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_P]^T$
- **データ：** $D = \{y_i, \boldsymbol{x}_i\}\ (i = 1, \cdots, N)$
  $\boldsymbol{x}_i = [1 \quad x_{i1} \quad \cdots \quad x_{iP}]^T$（行列 X の i 番目の行）
- **回帰係数：** 係数 $b_0, b_1, \cdots, b_P$（パラメータ）

$$\boldsymbol{b} = [b_0 \quad b_1 \quad \cdots \quad b_P]^T$$

$$\Pr(y = 1|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{-(b_0+b_1x_1+,\cdots,+b_Px_P)}} = \frac{1}{1+e^{-x^T\boldsymbol{b}}}$$

ロジスティック回帰分析をやってみよう

ポルトガルの金融機関のダイレクトマーケティングデータ

- 2008年から2013年の実データ ($N = 45{,}211$)
- 消費者にマーケティングプロモーションを実施

- **目的変数：** 長期定期預金への加入 or 非加入
- **説明変数：** 年齢（連続変数）, 預金残高（連続変数）, 住宅ローンの有無（2値変数）, ローンの有無（2値変数）, 債務不履行の経験の有無（2値変数）, 結婚（未婚, 既婚, 離婚の3カテゴリ）, 教育（初等, 中等, 高等, 不明の4カテゴリ）

#メモ　UCI Machine Learning Repository (http://archive.ics.uci.edu/ml)でBank Marketing Data Setとして無料でダウンロード可能

Rによるロジスティック回帰分析

Rのコードと出力

Rのコード

```
Data = read.csv("bank-full.csv",header=T)
Data$y = factor (Data$y,label=c("no","yes"))
logistic =
glm(y~age+balance+housing+loan+default+ma
rital+education, family = binomial, data=Data)
summary(logistic)
```

データ

```
> head(Data)
  age          job marital education default balance housing loan contact day
1  58   management married  tertiary      no    2143     yes   no unknown   5
2  44   technician  single secondary      no      29     yes   no unknown   5
3  33 entrepreneur married secondary      no       2     yes  yes unknown   5
4  47  blue-collar married   unknown      no    1506     yes   no unknown   5
5  33      unknown  single   unknown      no       1      no   no unknown   5
6  35   management married  tertiary      no     231     yes   no unknown   5
  month duration campaign pdays previous poutcome  y
1   may      261        1    -1        0  unknown no
2   may      151        1    -1        0  unknown no
3   may       76        1    -1        0  unknown no
4   may       92        1    -1        0  unknown no
5   may      198        1    -1        0  unknown no
6   may      139        1    -1        0  unknown no
```

ロジスティク回帰分析の結果

```
Call:
glm(formula = y ~ age + balance + housing + loan + default +
    marital + education, family = binomial, data = Data)

Deviance Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-1.8055  -0.5550  -0.4309  -0.3516   2.8196

Coefficients:
                    Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)       -2.352e+00  1.032e-01 -22.797  < 2e-16 ***
age                1.053e-02  1.563e-03   6.734 1.65e-11 ***
balance            2.358e-05  3.937e-06   5.991 2.08e-09 ***
housingyes        -7.888e-01  3.124e-02 -25.249  < 2e-16 ***
loanyes           -5.920e-01  5.033e-02 -11.761  < 2e-16 ***
defaultyes        -5.167e-01  1.458e-01  -3.543 0.000395 ***
maritalmarried    -1.695e-01  4.814e-02  -3.522 0.000428 ***
maritalsingle      3.128e-01  5.424e-02   5.767 8.07e-09 ***
educationsecondary 2.678e-01  4.972e-02   5.386 7.20e-08 ***
educationtertiary  5.060e-01  5.161e-02   9.805  < 2e-16 ***
educationunknown   3.188e-01  8.166e-02   3.904 9.44e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 32631  on 45210  degrees of freedom
Residual deviance: 31177  on 45200  degrees of freedom
AIC: 31199

Number of Fisher Scoring iterations: 5
```


ロジスティック回帰係数の解釈 #1

ロジスティック回帰係数の推定結果（最尤推定）

	Estimate (推定値)	Std.Error (標準誤差)	t value (t値)	Pr(>|t|) (p値)
切片 (b_0)	-2.35244	0.10319	-22.79711	0.00000***
年齢 (b_1)	0.01053	0.00156	6.73369	0.00000***
預金残高 (b_2)	0.00002	0.00000	5.99123	0.00000***
住宅ローンあり (b_3)	-0.78878	0.03124	-25.24911	0.00000***
ローンあり (b_4)	-0.59198	0.05033	-11.76101	0.00000***
既婚 (b_5)	-0.51667	0.14582	-3.54310	0.00040***
未婚 (b_6)	-0.16954	0.04814	-3.52216	0.00043***
中等教育 (b_7)	0.31283	0.05424	5.76702	0.00000***
高等教育 (b_8)	0.26781	0.04972	5.38621	0.00000***
教育歴不明 (b_9)	0.50603	0.05161	9.80508	0.00000***

- ロジスティック回帰係数の最尤推定量は一致推定量
- 線形回帰モデルと同様の t 検定や Wald 検定が可能

#メモ1　一致推定量は分布収束、Wald検定はWald統計量の知識が必要。この授業では取り扱わない
#メモ2　推定の方法は次回以降の授業で紹介

ロジスティック回帰係数の解釈 #2

回帰係数と対数オッズ比

- $\Pr(y=1|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{-x^T b}}$
- $\Pr(y=0|\boldsymbol{x}) = 1 - \Pr(y=1|x) = 1 - \frac{1}{1+e^{-x^T b}} = \frac{e^{-x^T b}}{1+e^{-x^T b}}$
- **オッズ比：** $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} = e^{x^T b}$
- **対数オッズ比：** $\log\left(\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)}\right) = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{b}$

ロジスティック回帰係数の解釈

- 説明変数 x_p が1単位増減すると対数オッズ比がロジスティック回帰係数 b_p の分だけ増減する
- 線形回帰モデルと解釈が異なるので注意

ロジスティック回帰係数の解釈 #3

オッズ比 $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)}$ の意味

- 説明変数 x が与えられた時の $y=1$ の出やすさの度合い
  - $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} > 1$ なら $y=1$ が出やすい
  - $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} < 1$ なら $y=0$ が出やすい
  - $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} = 1$ なら $y=1$ と $y=0$ の出やすさは等確率
  - **例：** $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} = 2$ のとき, $\Pr(y=1|\boldsymbol{x}) : \Pr(y=0|\boldsymbol{x}) = 2:1$
  - **例：** $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} = 0.5$ のとき, $\Pr(y=1|\boldsymbol{x}) : \Pr(y=0|\boldsymbol{x}) = 1:2$

ロジスティック回帰係数の解釈 #4

オッズ比とロジスティック回帰係数の関係

– $\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} = e^{a+bx} = e^a e^{bx}$

e^a： 説明変数 x に関係しない元々の $y=1$ の出やすさ

e^{bx}：説明変数 x が与えられた時のオッズ比の増減

線形回帰モデル：$y = a + bx$ のとき $a + b(x+\Delta) \rightarrow y + b\Delta$

ロジスティック回帰モデル：

$\frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} = e^a e^{bx}$ のとき $e^a e^{b(x+\Delta)} \rightarrow \frac{\Pr(y=1|x)}{\Pr(y=0|x)} e^{b\Delta}$

ロジスティック回帰係数のオッズ比での解釈

– 説明変数が1単位増減するとオッズ比が e^b 倍になる

$b > 0$ なら $e^{b\Delta} > 1$ なので x が増加で $y=1$ が出やすくなる

$b < 0$ なら $e^{b\Delta} < 1$ なので x が増加で $y=0$ が出やすくなる

ロジスティック回帰係数の解釈 #5

ロジスティック回帰係数の推定結果（抜粋）

	Estimate (推定値)		Pr(>|t|) (p値)
年齢 (b_1)	0.01053	exp(0.01053) = 1.01	0.00000***
住宅ローンあり (b_3)	-0.78878	exp(-0.78878) = 0.45	0.00000***
既婚 (b_5)	-0.51667	exp(-0.51667) = 0.60	0.00040***
未婚 (b_6)	-0.16954	exp(-0.16954) = 0.84	0.00043***

推定されたロジスティック回帰係数の解釈

– 年齢が1歳増えるとオッズ比が 1.01 倍

（10歳増える⇒ $1.01^{10} = 1.11$, 30歳増える⇒ $1.01^{30} = 1.37$）

– 住宅ローンありと比べて，無しはオッズ比が 0.45 倍

– 離婚者と比べて，既婚の人はオッズ比が 0.6 倍，未婚の人は 0.84 倍

統計モデルのモデル選択 #1

ある観測データに対する複数の統計モデルのあてはまりの良さを比較し，より良いモデルを選び出すこと

観測データ D

比較したいモデル群

説明変数が4種類の場合のロジスティック回帰モデル $\Pr(y=1|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{-\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}}}$

Model 1: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1$

Model 2: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_2x_2$

Model 3: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_3$

Model 4: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_4$

Model 5: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$

Model 6: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_3$

Model 7: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_4$

Model 8: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_2 + b_2x_3$

Model 9: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_2 + b_2x_4$

Model 10: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_3 + b_2x_4$

Model 11: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$

Model 12: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_4$

Model 13: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_3 + b_3x_4$

Model 14: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_2 + b_2x_3 + b_3x_4$

Model 15: $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4$

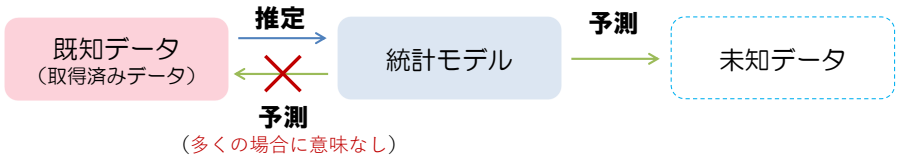
当てはまりの良さの指標に基づいてモデル選択

⇒ どのような意味で「良い」のか？

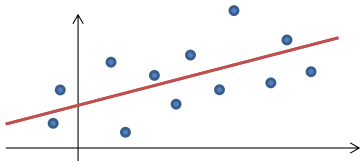
統計モデルのモデル選択 #2

基準の一つ：未知データの予測の良さで評価を考える

– 実問題への応用の多くで必要なのは未知データの予測

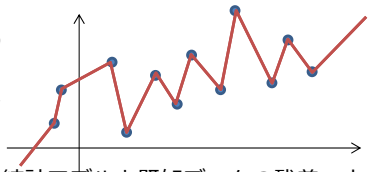


– 既知データのみへの過剰適合（過学習）は未知データの予測の良さを妨げる



統計モデルと既知データの残差：中
未知データの予測性能：良

未知データとの誤差が平均的に小さくなるのは左のモデル



統計モデルと既知データの残差：小
未知データの予測性能：悪

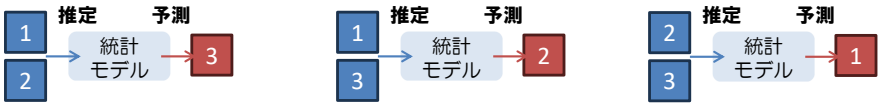
未知データへの対応力(汎化性能)の測り方

汎化性能

- 統計モデルや機械学習モデルが未知データに対しても上手く対応できる能力のこと

交差検証法(クロスバリデーション)

- 例: 3-fold クロスバリデーション　　全観測データ 1 2 3
- データを3分割し, その3つの予測性能の平均で性能を評価



- ◎: 単純かつ直感的に理解しやすい
- ×: サンプルサイズが小のとき正確な性能評価が難しい

情報量規準

赤池情報量規準(AIC)

- 想定したモデルが真のモデルの近くにある場合, 将来に得られる未知データの予測の平均的な良さの評価

AIC = -2×対数尤度 + 2×パラメータ数
(値が小さい方が良い指標)

#メモ　具体的な数式の導出は本授業の範囲を大きく超えるため紹介できない。詳しくは小西・北川「情報量規準」, 朝倉書店, 2004 を参照

2017年11月5日のGoogleロゴ

- 予測性能が同程度であれば, より単純なモデルを選択
- その他の情報量規準: BIC, MDL, WAIC など多数あり
  それぞれ, 計っている「良さ」が異なる点に注意

AICでモデル選択をしてみよう #1

ダイレクトマーケティングデータ＋ロジスティック回帰モデル

$$\Pr(y = \text{加入}|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}}}$$

$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1$年齢$ + b_2$預金$ + b_3$住宅
$+b_4$ローン$ + b_5$不履行$ + b_6$結婚$ + b_7$教育

```
> ll = step(logistic)
Start:  AIC=31199.32
y ~ age + balance + housing +

            Df Deviance   AIC
<none>           31177 31199
- default    1    31192 31212
- balance    1    31211 31231
- age        1    31222 31242
- education  3    31289 31305
- loan       1    31334 31354
- marital    2    31349 31367
- housing    1    31835 31855
```

AICの値から, すべての説明変数を利用したモデルが"良いモデル"と判断

$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} = b_0 + b_1$年齢$ + b_2$預金$ + b_3$住宅
$+b_4$ローン$ + b_5$乱数$ + b_6$結婚$ + b_7$教育

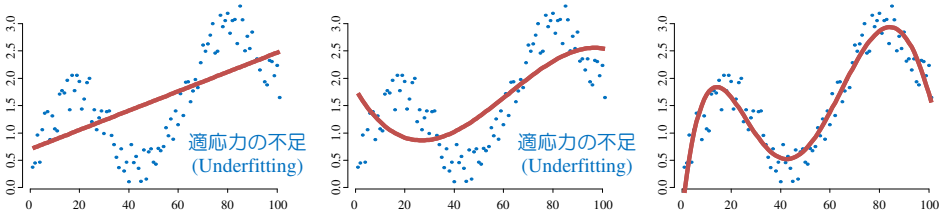
```
> ll = step(logistic)
Start:  AIC=31213.77
y ~ age + balance + housing +

            Df Deviance   AIC
- Random     1    31192 31212
<none>           31192 31214
- balance    1    31228 31248
- age        1    31237 31257
- education  3    31305 31321
- loan       1    31357 31377
- marital    2    31363 31381
- housing    1    31848 31868
```

AICの値から, 変数「乱数」を取り除いたモデルが"良いモデル"と判断

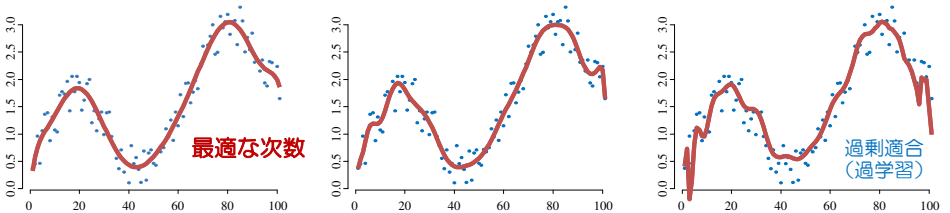
AICでモデル選択をしてみよう #2

AICを用いることで最適な多項式の次数を選択可能

- 複雑な関数による過剰適合(過学習)を回避できる



1次の多項式 (AIC = 215.5)　3次の多項式 (AIC = 196.0)　5次の多項式 (AIC = 47.1)



10次の多項式 (AIC = 7.8)　20次の多項式 (AIC = 19.0)　50次の多項式 (AIC = 99.9)

演習問題

1. 目的変数が2値変数の場合に，線形回帰モデルを適用してデータ分析を行うことを考える。このとき，予測と実証の両方の観点から，その問題点を指摘しなさい

2. 「決定係数」，「尤度（または，対数尤度）」の両方は，モデル選択の基準として不適格となることがある。その理由をそれぞれについて答えなさい