

第 V 部 Logistic Model

1 確率の公理を満たすモデル

ポイント

- ロジスティック曲線
- ロジスティック変換

- 影響力の指標

1.1 はじめに

- 確率にはいくつかの要件があります。
- 確率を分析するためには、確率の要件を満たす必要があります。

1.2 確率の公理

確率の公理は以下の 3 つからなる。この公理を満たすならどのような数も確率と認められる。

1. すべての事象 A に対して $0 \leq \Pr(A) \leq 1$
2. $\Pr(\Omega) = 1$
3. 互いに排反な事象 $A_1, A_2, A_3, \dots$ に対して

$$\Pr(A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup \dots) = \Pr(A_1) + \Pr(A_2) + \Pr(A_3) + \dots$$

1.3 ロジスティックモデル

p を従属変数とし、 x を独立変数とする。 α, β をパラメータとする。以下の式をロジスティックモデルという。

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \quad (1)$$

問題 V-1-1

次の関数を微分しなさい。

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))}$$

解例 V-1-1

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha - \beta x)}$$

において、

$$u = -\alpha - \beta x$$

$$v = 1 + \exp(u)$$

$$f = v^{-1}$$

とおく。

それぞれを微分すると、

$$\frac{du}{dx} = -\beta$$

$$\frac{dv}{du} = \exp(u)$$

$$\frac{df}{dv} = -v^{-2}$$

合成関数の微分により、

$$\begin{aligned} \frac{df}{dx} &= \frac{df}{dv} \frac{dv}{du} \frac{du}{dx} = (-\beta)(\exp(u))(-v^{-2}) \\ &= \frac{(\beta)(\exp(-(\alpha + \beta x)))}{(1 + \exp(-(\alpha + \beta x)))^2} \\ &= \frac{\beta}{(1 + \exp(-(\alpha + \beta x)))(1 + \exp(\alpha + \beta x))} \end{aligned}$$

1.3.1 ロジスティックモデルの極限

$\beta > 0$ とする。

$$x \rightarrow +\infty \implies \beta x \rightarrow +\infty \quad (2)$$

$$\implies \alpha + \beta x \rightarrow +\infty \quad (3)$$

$$\implies -(\alpha + \beta x) \rightarrow -\infty \quad (4)$$

$$\implies \exp(-(\alpha + \beta x)) \rightarrow 0 \quad (5)$$

$$\implies \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \rightarrow 1 \quad (6)$$

$$\implies p \rightarrow 1 \quad (7)$$

$\beta > 0$ とする。

$$x \rightarrow -\infty \implies \beta x \rightarrow -\infty \quad (8)$$

$$\implies \alpha + \beta x \rightarrow -\infty \quad (9)$$

$$\implies -(\alpha + \beta x) \rightarrow +\infty \quad (10)$$

$$\implies \exp(-(\alpha + \beta x)) \rightarrow +\infty \quad (11)$$

$$\implies \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \rightarrow 0 \quad (12)$$

$$\implies p \rightarrow 0 \quad (13)$$

問題 V-1-2

$\beta < 0$ とする。以下の極限を求めなさい。

$$(1) \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))}$$

$$(2) \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))}$$

解例 V-1-2-(1)

$$\begin{aligned}x \rightarrow +\infty &\implies \beta x \rightarrow -\infty \\&\implies \alpha + \beta x \rightarrow -\infty \\&\implies -(\alpha + \beta x) \rightarrow +\infty \\&\implies \exp(-(\alpha + \beta x)) \rightarrow +\infty \\&\implies \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \rightarrow 0\end{aligned}$$

したがって

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} = 0$$

解例 V-1-2-(2)

$$\begin{aligned}x \rightarrow -\infty &\implies \beta x \rightarrow +\infty \\&\implies \alpha + \beta x \rightarrow +\infty \\&\implies -(\alpha + \beta x) \rightarrow -\infty \\&\implies \exp(-(\alpha + \beta x)) \rightarrow 0 \\&\implies \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \rightarrow 1\end{aligned}$$

したがって

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} = 1$$

1.3.2 ロジスティックモデルの値域

ロジスティックモデル

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \quad (1)$$

は $\beta > 0$ ならば単調増加関数であり

$$x \rightarrow \infty \implies p \rightarrow 1 \quad (14)$$

$$x \rightarrow -\infty \implies p \rightarrow 0 \quad (15)$$

である。

また $\beta < 0$ ならば単調減少関数であり、

$$x \rightarrow \infty \implies p \rightarrow 0 \quad (16)$$

$$x \rightarrow -\infty \implies p \rightarrow 1 \quad (17)$$

である。

したがって、定義域を

$$(-\infty, +\infty) \quad (18)$$

とすると、値域は

$$(0, 1) \quad (19)$$

である。

1.3.3 ロジスティックモデルの形状

ロジスティックモデル

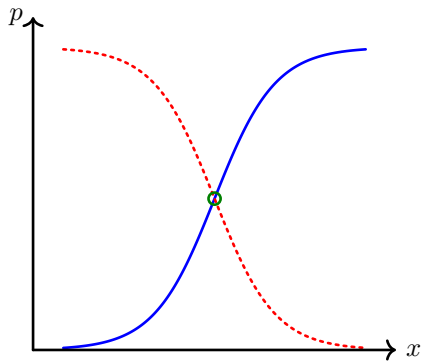
$$p = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \quad (1)$$

は、 $\left(-\frac{\alpha}{\beta}, 0.5\right)$ を対称の中心とする点対称の図形である。

図1中、青実線は $\beta > 0$ の時のグラフであり、赤破線は $\beta < 0$ の時のグラフである。また緑の円は対称の中心をあらわしている。

対称の中心に近いほど、曲線の傾きは急であり、離れるほど緩やかになる。

図1 ロジスティックモデル



1.3.4 パラメータのもたらす影響

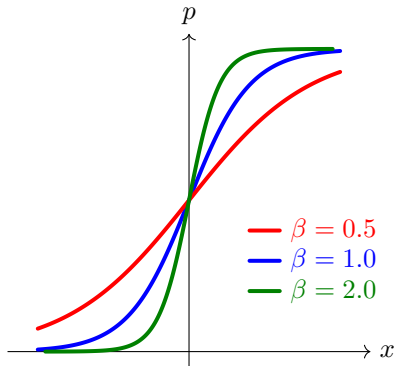
パラメータの符号並びに絶対値を変化させながらロジスティックモデルを描画する。

- $\alpha = 0.0$ として β を 0.5, 1.0, 2.0
- $\alpha = 0.0$ として β を -0.5, -1.0, -2.0
- $\beta = 1.0$ として α を -2.0, -1.0, 0.0, 1.0, 2.0,
- $\alpha = 1.0$ として β を 0.5, 1.0, 2.0
- $\alpha = -1.0$ として β を 0.5, 1.0, 2.0

$\alpha = 0, \beta > 0$ の場合

ロジスティックモデル (1) において $\alpha = 0$ として、以下のパラメータのときのグラフを描画した。

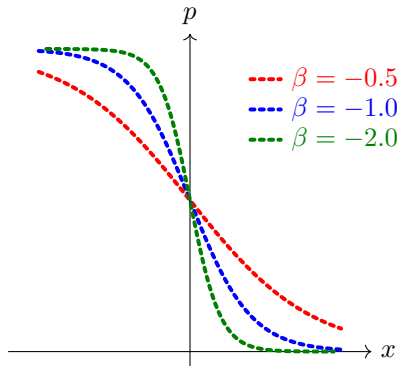
- (1) $\beta = 0.5$
- (2) $\beta = 1.0$
- (3) $\beta = 2.0$

図2 $\alpha = 0, \beta > 0$ 

$\alpha = 0, \beta < 0$ の場合

ロジスティックモデル (1) において $\alpha = 0$ として、以下のパラメータのときのグラフを描画した。

- (1) $\beta = -0.5$
- (2) $\beta = -1.0$
- (3) $\beta = -2.0$

図3 $\alpha = 0, \beta < 0$ 

$\beta > 0$ の場合

ロジスティックモデル (1) において $\beta > 0$ として、以下のパラメータのときのグラフを描画した。

(1) $\alpha = -3.0$

(2) $\alpha = -2.0$

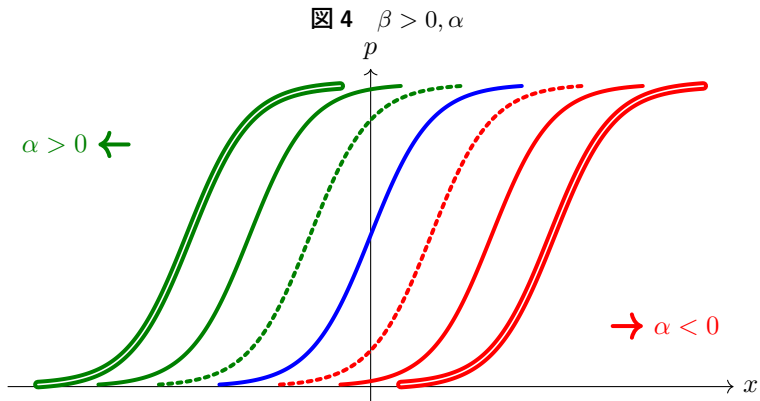
(3) $\alpha = -1.0$

(4) $\alpha = 0.0$

(5) $\alpha = 1.0$

(6) $\alpha = 2.0$

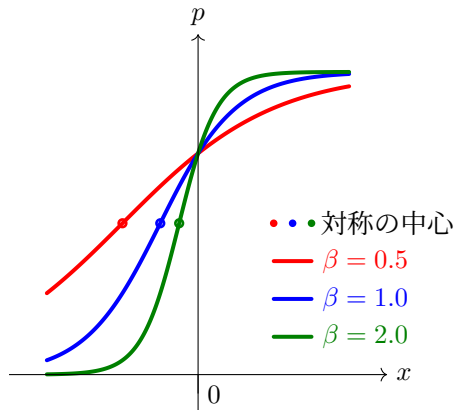
(7) $\alpha = 3.0$



$\alpha = 1, \beta > 0$ の場合

ロジスティックモデル (1) において $\alpha = 1$ として、以下のパラメータのときのグラフを描画した。

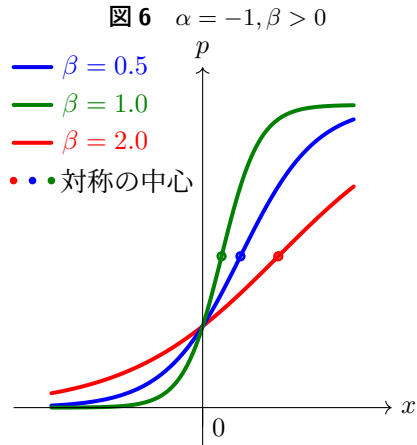
- (1) $\beta = 0.5$
- (2) $\beta = 1.0$
- (3) $\beta = 2.0$

図 5 $\alpha = 1, \beta > 0$ 

$\alpha = -1, \beta > 0$ の場合

ロジスティックモデル(1)において $\alpha = -1$ として、以下のパラメータのときのグラフを描画した。

- (1) $\beta = 0.5$
- (2) $\beta = 1.0$
- (3) $\beta = 2.0$



1.3.5 ロジスティックモデルの幾何学的なパラメータの意味

ロジスティックモデル (1) を変形すると

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))} \quad (1)$$

$$= \frac{1}{1 + \exp\left(-\beta\left(x - \left(-\frac{\alpha}{\beta}\right)\right)\right)} \quad (20)$$

である。

α は関数を x 軸上を平行移動させる。

β は関数を x 軸上で拡大縮小させると同時に、 α へ影響し、 x 軸軸上で対称の中心を $-\frac{\alpha}{\beta}$ だけ (+) 方向に平行移動させる。

1.4 線型モデルの限界

- 独立変数と従属変数の関係をあらわすために線型モデルを仮定している。
- 線型モデルを仮定する理由は、特別な仮定を設定する理由がないからである。
- 特別な仮定を想定しないので、もっとも単純なモデルとして線型モデルを選択している。
- ここでは、線型モデルを当てはめることが不適切である状況を考察する。

数値例

ある製品を作成する為には加熱処理が必要であるが、加熱処理の時間 (x) によって不良品 ($y = 1$) が発生しやすくなることが想定されている。

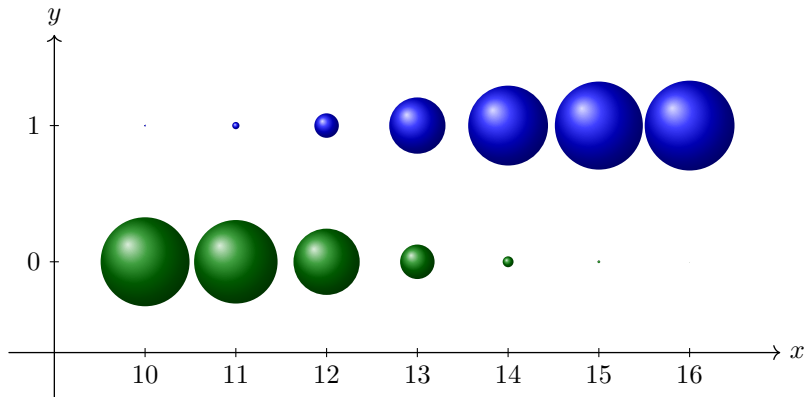
そこで加熱時間 (x) を変えながら 100 個ずつ作成し、不良品 ($y = 1$) か否か ($y = 0$) を確認した。

観測結果が表 1 である。

表 1 加熱時間と不良品と正常品

加熱時間	不良品の数	正常品の数
x	$y = 1$	$y = 0$
10	2	98
11	8	92
12	27	73
13	62	38
14	88	12
15	97	3
16	99	1

図7 不良品と正常品の観測値



1.4.1 ダミー変数を従属変数

ダミー変数を従属変数, 加熱時間を独立変数として線型モデル

$$y = \alpha + \beta x \quad (21)$$

を当てはめれば最小二乗推定値

$$\hat{\alpha} = -1.913\,571\,429 \quad (22)$$

$$\hat{\beta} = 0.189\,285\,714 \quad (23)$$

を得ることができる。

表 2 不良品の予測値

x	$\hat{y}$
10	-0.020 714
11	0.168 571
12	0.357 857
13	0.547 143
14	0.736 429
15	0.925 714
16	1.115 000

ダミー変数を従属変数とする線型モデルの限界

- 従属変数がダミー変数であっても計算することは可能である。
- 線型モデルの値域は $(-\infty, +\infty)$ なので予測値は 0 または 1 以外の値もとる。
- 0 または 1 以外の予測値の解釈が不可能である。
- β の解釈が不可能である。
- そもそも、0 または 1 しかとらない従属変数に対して、従属変数に連続量を仮定する直線を当てはめることは不適切である。

1.4.2 確率を従属変数

- 条件 x ごとの生産数に対する不良品の数の比率は不良品率である。
- 頻度主義の立場に立てば、不良品率は不良品の起こる確率である。
- 不良品率は 0 以上 1 以下の連続量であり確率の公理を満たす。

数値例

それぞれの条件 (x) ごとに不良品率を求め、不良品率を不良品がおこる確率 $\Pr(y = 1) = p$ とみなし、不良品率 (p) を従属変数とする線型モデルの適用を試みる。

表 3 加熱時間と不良品率

x	p
10	0.02
11	0.08
12	0.27
13	0.62
14	0.88
15	0.97
16	0.99

線型モデルの当てはめ

従属変数を不良品率 (p)、加熱時間を独立変数 (x) として線型モデル

$$p = \alpha + \beta x \quad (24)$$

を当てはめ、最小二乗推定値

$$\hat{\alpha} = -1.913\,571\,429 \quad (25)$$

$$\hat{\beta} = 0.189\,285\,714 \quad (26)$$

を得る。

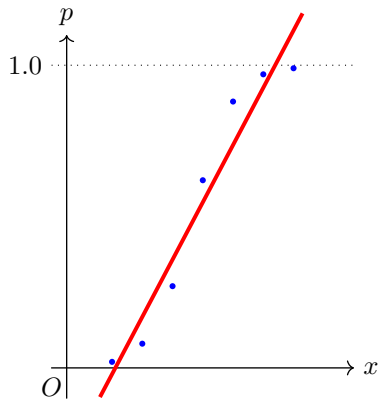
表 4 不良品率の予測値

x	p	$\hat{p}$
10	0.02	-0.020 714
11	0.08	0.168 571
12	0.27	0.357 857
13	0.62	0.547 143
14	0.88	0.736 429
15	0.97	0.925 714
16	0.99	1.115 000

確率を従属変数とする線型モデルの限界

- 線型モデルの値域は $(-\infty, +\infty)$ である。
したがって、予測値 $\hat{p}$ は負の値も、1 を超える値もとる。
- つまり、線型モデルの従属変数は確率の公理を満たさない。
- 確率である観測値に対し、確率の公理を満たさないモデルを当てはめることは不適切である。

図8 不良品率と加熱時間



1.5 ロジスティックモデルの適用

不良品率 (p) を従属変数、加熱時間 (x) を独立変数とし、ロジスティックモデル

$$p_i = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x_i))} \quad (1)$$

を当てはめる。

- ロジスティックモデルの定義域は $(-\infty, +\infty)$ であり、値域は $(0, 1)$ である。
- ロジスティックモデルは確率の公理を満たすモデルである。

問題 V-1-3

以下の式を t に関して解きなさい。

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-t)}$$

解例 V-1-3

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-t)}$$

両辺の逆数を取る

$$\frac{1}{p} = 1 + \exp(-t)$$

右辺第一項を左辺に移項し

$$\frac{1}{p} - 1 = \exp(-t)$$

左辺は通分し分母を共通にし、右辺は指数法則により

$$\frac{1-p}{p} = \frac{1}{\exp(t)}$$

両辺の逆数を取り

$$\frac{p}{1-p} = \exp(t)$$

対数関数であらわす

$$\ln\left(\frac{p}{1-p}\right) = t$$

1.5.1 ロジスティック変換

ロジスティックモデル

$$p_i = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x_i))} \quad (1)$$

を $\alpha + \beta x_i$ に関して解くと

$$\ln\left(\frac{p_i}{1 - p_i}\right) = \alpha + \beta x_i \quad (27)$$

を得る。(1) を (27) に変換する事を『ロジスティック変換』と呼ぶ。

ロジスティックモデルでは

$$\frac{p_i}{1 - p_i} \quad (28)$$

を『オッズ』とよび

$$\ln \left(\frac{p_i}{1 - p_i} \right) \quad (29)$$

を『対数オッズ』とよぶ。ロジスティックモデルは対数オッズを従属変数とする線型モデルである。

ロジスティック変換によりロジスティックモデルは線型モデルに帰着する。

問題 V-1-4

それぞれの値 (p_i) に対応する対数オッズ $\ln\left(\frac{p_i}{1-p_i}\right)$ を求めなさい。

- (1) $p_i = 0.02$
- (2) $p_i = 0.08$
- (3) $p_i = 0.27$
- (4) $p_i = 0.62$
- (5) $p_i = 0.88$
- (6) $p_i = 0.97$
- (7) $p_i = 0.99$

表 5 p_i と オッズと対数オッズ

p_i	$1 - p_i$	$\frac{p_i}{1 - p_i}$	$\ln \left(\frac{p_i}{1 - p_i} \right)$
0.02	0.98	0.020 408	-3.891 820
0.08	0.92	0.086 957	-2.442 347
0.27	0.73	0.369 863	-0.994 623
0.62	0.38	1.631 579	0.489 548
0.88	0.12	7.333 333	1.992 430
0.97	0.03	32.333 333	3.476 099
0.99	0.01	99.000 000	4.595 120

問題 V-1-5

表 6 を用いてロジスティックモデルを当てはめなさい。

表 6 加熱時間と不良品率

x	p
10	0.02
11	0.08
12	0.27
13	0.62
14	0.88
15	0.97
16	0.99

表7 ロジスティックモデル用計算

i	x	$\ln \left(\frac{p_i}{1-p_i} \right)$	x^2	$x \ln \left(\frac{p_i}{1-p_i} \right)$
1	10	-3.891 820	100	-38.918 203
2	11	-2.442 347	121	-26.865 817
3	12	-0.994 622	144	-11.935 470
4	13	0.489 548	169	6.364 126
5	14	1.992 430	196	27.894 022
6	15	3.476 098	225	52.141 480
7	16	4.595 119	256	73.521 917
Total	91	3.224 407	1,211	82.202 056

解例 V-1-5

$$\hat{\alpha} = -18.243\,011$$

$$\hat{\beta} = 1.438\,742$$

$$\ln \left(\frac{p_i}{1 - p_i} \right) = -18.243\,011 + 1.438\,742\, x_i$$

$$\hat{p}_i = \frac{1}{1 + \exp \left(- \left(-18.243\,011 + 1.438\,742\, x_i \right) \right)}$$

図9 対数オッズと線型モデル

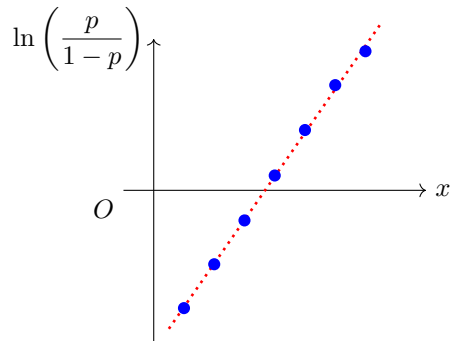
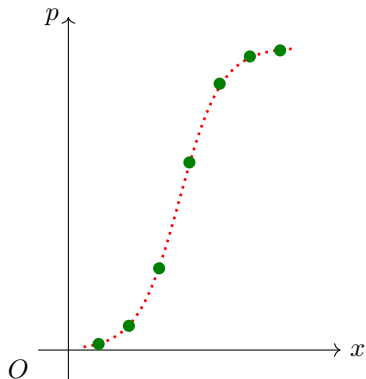


図10 ロジスティックモデル



1.5.2 変換できない値

$p = 0$ の場合

$$\frac{p}{1-p} = \frac{0}{1-0} = 0 \quad (30)$$

となり、真数が 0 である対数をとることができない。

$p = 1$ の場合

$$1-p = 1-1 = 0 \quad (31)$$

となり、分母が 0 となるためオッズを求めることができない。

やってはいけない対応

- 0.0001
- 0.000 000 1
- 0.000 000 000 1

など微小な値を 0 の代わりに代替すると、推定値がそれぞれ変化する。

どのような値を代入するかは恣意的であり、結果として分析者が推定値を決定していることになる。

1.5.3 代わりの値の意味

$p = 0$ の場合、0 の代わりに微小な値を代用することを考える。当然、0 の代わりであるのだから 0 に近ければ近いほど真摯な態度となるであろう。ここで、0 の代わりの値として、 10^{-10} , 10^{-20} , 10^{-30} を考える。この値を用いて対数オッズを求めると、

$$\ln \left(\frac{10^{-10}}{1 - 10^{-10}} \right) = -23.025\,850\,929$$

$$\ln \left(\frac{10^{-20}}{1 - 10^{-20}} \right) = -46.051\,701\,859$$

$$\ln \left(\frac{10^{-30}}{1 - 10^{-30}} \right) = -69.077\,552\,789$$

である。

- 0.1% に対応する対数オッズは $-6.906\,754\,779$ であり、99.9% に対応する対数オッズは $6.906\,754\,779$ である。
- この範囲のデータの中に異常値ともいえる値を付加することで推定値は大きく変動する。
- そして、微小な値を決めているのは分析者である。
- 最小二乗法は異常値から強く影響を受ける推定方法である。
- 異常値から強く影響を受ける推定方法に対してあえて異常値を分析対象データに付加することは避けるべきであろう。

$p = 1$ に限りなく近い値を用いる場合も同様である¹⁾。

1) 1 の代わりとして、 $1 - 10^{-10}$, $1 - 10^{-20}$, $1 - 10^{-30}$ で対数オッズを求めてみることを勧める。

1.6 影響力の指標

ロジスティックモデルにおいて x_i が 1 単位増えることを考える。

$$p_{x_i} = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x_i))} \quad (32)$$

$$p_{x_i+1} = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta (x_i + 1)))} \quad (33)$$

(32) と (33) の差は当てはめているロジスティック曲線の対称の中心に近い程大きく、対称の中心から離れると小さくなっていく。 β の影響力は x_i の値により異なり、影響力を一定の値として表現することができない。

1.6.1 オッズによる比較

(32) と (33) をオッズに関して解くと、

$$\frac{p_{x_i}}{1 - p_{x_i}} = \exp(\alpha + \beta x_i) \quad (34)$$

$$\frac{p_{x_i+1}}{1 - p_{x_i+1}} = \exp(\alpha + \beta(x_i + 1)) \quad (35)$$

である。

(34) と (35) の比をとると、

$$\frac{\left(\frac{p_{x_i+1}}{1-p_{x_i+1}}\right)}{\left(\frac{p_{x_i}}{1-p_{x_i}}\right)} = \frac{\exp(\alpha + \beta(x_i + 1))}{\exp(\alpha + \beta x_i)} \quad (36)$$

$$= \exp(\alpha + \beta(x_i + 1) - (\alpha + \beta x_i)) \quad (37)$$

$$= \exp(\alpha + \beta x_i + \beta - \alpha - \beta x_i) \quad (38)$$

$$= \exp(\beta) \quad (39)$$

を得る。

(39) の値を『オッズ比』とよぶ。オッズ比は x_i に関わらず一定であり、 x の p への影響力の指標として利用される。

1.7 まとめ

- ロジスティックモデル

$$p = \frac{1}{1 + \exp(-(\alpha + \beta x))}$$

は確率の公理を満たすので確率を従属変数とする場合、ロジスティックモデルが妥当。

- ロジスティックモデルは、ロジスティック変換により線型モデルに帰着する。

$$\ln \left(\frac{p_i}{1 - p_i} \right) = \alpha + \beta x_i$$

- オッズ比 $\exp(\beta)$ で影響力を把握する。