5강. Discriminant Analysis

◈ 담당교수 : 김 동 하

■ 학습개요

이번 강의에서는 분류문제를 해결하는 방법중 하나인 판별분석에 대해 학습한다. 판별분석의 개념에 대해 배우고, 두 가지 방법론인 선형판별분석(LDA)과 이차판별분석(QDA)에 대해 다룬다. 더 나아가, 선형판별분석모형과 로지스틱모형의 공통점과 차이점에 대해서도 배우도록 한다.

■ 학습목표

1	판별분석의 개념에 대해 학습한다.
2	선형판별분석(LDA)에 대해 학습한다.
3	이차판별분석(QDA)에 대해 학습한다.

■ 주요용어

용어	해설
판별분석	분류문제를 해결하는 방법론 중에 하나로 설명변수와 종속변수의 결합분포를 모형화하여 주어진 입력값이 어떤 집단에 속하는지를 예측할 수 있는 분석 방법론
선형판별분석	판별분석 방법론 중 한가지로, 각 모집단의 공분산이 동일하다고 가정하는 모형. 모집단의 예측이 설명변수값의 선형식으로 결정되는 특징이 있다.
이차판별분석	선형판별분석과는 다르게 각 모집단의 공분산이 동일하다는 가정을 하지 않는 모형. 모집단의 예측이 설명변수값의 이차식으로 결정된다.

■ 학습하기

01. 판별분석

판별분석이란?

- 두 개 이상의 모집단에서 추출된 데이터를 이용.
- 해당 샘플이 어느 모집단으로부터 추출된 것인지를 결정.
- 즉, 주어진 입력값에 대해서 이 데이터가 어떤 모집단에 속하는지를 판별하는 방법론
  -> 분류 문제를 해결하는 방법론 중 하나

판별분석의 용어

- 판별변수 (Discriminant Variable):
  -> 어떤 집단에 속하는지 판별하기 위해 사용되는 독립 변수
- 판별함수 (Discriminant Function):
  -> 판별변수들의 선형/비선형 조합
  -> 종속변수의 집단을 정확하게 분류할 수 있도록 학습
- 판별점수 (Discriminant Score)
  -> 개체가 어떤 집단에 속하는지 판별하기 위해 판별함수에 대입하여 얻은 값.

두 가지 판별분석 방법론

- 독립변수값의 모집단 정보를 판별하는 판별함수의 형태에 따라서 다음의 두 가지 방법론으로 나뉨.
- 선형판별분석 (Linear Discriminant Analysis): 선형 판별식을 사용
- 이차판별분석 (Quadratic Discriminant Analysis): 이차 판별식을 사용

판별분석의 모형 정리

- X: 설명 변수
- Y: 설명 변수값이 속단 모집단의 라벨(클래스)
  -> 0, 1 두 개의 값만을 갖는다고 가정하자.
  -> 판별분석은 3개 이상의 범주를 갖는 라벨도 분류가 가능.
- 판별분석모형은 다음의 분포를 가정

$$Y \sim Ber(\pi)$$
$$X \mid Y = y \sim N(\mu_y, \Sigma_y), y \in \{0,1\}$$

- 설명 변수 X의 주변 분포는 다음과 같이 계산되어짐.

$$X \sim (1-\pi) \cdot N(\mu_0, \Sigma_0) + \pi \cdot N(\mu_1, \Sigma_1)$$

  -> 혼합 정규 분포 (Mixture of Gaussian)

판별분석을 이용한 예측 모형

- 입력값 X가 주어졌을 때 종속 변수 Y의 분포는 베이즈 정리에 의해 다음과 같이 계산되어짐.

$$P(Y=1 \mid X=x)=\frac{P(Y=1)\cdot P(X=x \mid Y=y)}{P(X=x)}$$
$$=\frac{\pi_1\phi(x;\mu_1,\Sigma_1)}{\sum_{y=0}^{1}\pi_y\phi(x;\mu_y,\Sigma_y)}$$

-> 여기서, $\pi_0=1-\pi, \pi_1=\pi$

-> $\phi(x;\mu_y,\Sigma_y)$: 정규분포 $N(\mu_y,\Sigma_y)$의 확률 밀도 함수.

- 이를 이용하여 입력값 X가 주어졌을 때 종속 변수의 값을 다음과 같이 예측할 수 있다.

$$\hat{y}=1 \text{ if } P(Y=1 \mid X=x)>0.5$$
$$\hat{y}=0 \, otherwise$$

- 위의 예측 기준을 다시 쓰면 아래와 같다.

$$\hat{y}=1 \text{ if } P(Y=1 \mid X=x)>P(Y=0 \mid X=x)$$
$$\hat{y}=0 \, otherwise.$$

- 위 수식을 다시 쓰면 다음과 같은 결과를 얻을 수 있다.

$$\hat{y}=1 \text{ if}$$
$$-\frac{1}{2}x^T\left(\Sigma_1^{-1}-\Sigma_0^{-1}\right)x+x^T\left(\Sigma_1^{-1}\mu_1-\Sigma_0^{-1}\mu_0\right)$$
$$+\log\left(\frac{\pi_1\det\left(\Sigma_1\right)^{-1/2}}{\pi_0\det\left(\Sigma_0\right)^{-1/2}}\right)-\frac{1}{2}\left(\mu_1^T\Sigma_1^{-1}\mu_1-\mu_0^T\Sigma_0^{-1}\mu_0\right)>0$$
$$\hat{y}=0 \, otherwise.$$

이차판별분석

- 판별식은 다음과 같이 입력값에 대한 이차식으로 정리됨.

$$\hat{y}=1 \text{ if } x^TAx+x^Tb+c>0$$
$$\hat{y}=0 \, otherwise$$

- 입력값의 이차식을 통해 종속변수를 예측

  -> 이차판별분석 (QDA)

선형판별분석

- 공분산 행렬 Σ_0, Σ_1이 같다는 가정을 하면?

  -> 즉, $\Sigma_0=\Sigma_1=\Sigma$

- 판별식은 다음과 같이 정리됨.

$$\hat{y}=1 \text{ if}$$
$$x^T\Sigma^{-1}(\mu_1-\mu_0)+\log\left(\frac{\pi_1}{\pi_0}\right)-\frac{1}{2}\left(\mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1-\mu_0^T\Sigma^{-1}\mu_0\right)>0$$
$$\hat{y}=0 \, otherwise.$$

- 판별식은 다음과 같이 입력값에 대한 일차식으로 정리됨.

$\hat{y} = 1 \text{ if } x^T b + c > 0$
$\hat{y} = 0 otherwise$

- 입력값의 선형식을 통해 종속변수를 예측
  -> 선형판별분석 (LDA)

판별분석 모수의 추정

- 선형판별분석 (LDA): $\pi, \mu_0, \mu_1, \Sigma$
- 이차판별분석 (QDA): $\pi, \mu_0, \mu_1, \Sigma_0, \Sigma_1$
- LDA, QDA 모두 학습 데이터를 이용한 음의 로그우도함수를 최소화하는 모수를 추정한다.
- 학습 데이터: $(x_1,y_1),...,(x_n,y_n)$
- 음의 로그 우도 함수 (Negative log-likelihood function)

$$-\sum_{i=1}^{n} \log P(Y = y_i \mid X = x_i)$$

LDA vs. Logistic model

- 선형판별분석에서 설명변수가 주어졌을 때 종속변수의 분포는 다음과 같이 나타내어진다.

$$P(Y = 1 \mid X = x) = \frac{\exp(b^T x + c)}{1 + \exp(b^T x + c)}$$

  -> 로지스틱 모형과 같은 형태임!
- 어떤 차이점이 있을까?
- 로지스틱 모형
  -> 로지스틱모형은 종속변수의 조건부분포만을 모형화
  -> Discriminative model
  -> $P(Y = y \mid X = x)$를 모형화
- LDA
  -> LDA는 독립변수, 종속변수의 결합분포를 모형화
  -> Generative model
  -> $P(Y = y, X = x)$를 모형화
- 선형판별분석은 로지스틱모형보다 더 많은 수의 모수를 가짐.
- 데이터의 실제 분포(특히 설명변수)가 판별분석에서 가정한 분포와 일치한다면 로지스틱 모형보다 더 우수한 성능.

02. Python을 이용한 판별분석 실습

데이터 설명

- 남극 펭귄 344마리에 대한 데이터
- species: 펭귄 종류 (총 3가지)
- island: 서식하는 남극섬 종류

- bill_length_mm: culmen length (mm)
- bill_depth_mm: bill_depth (mm)
- flipper_length_mm: 물갈퀴 길이 (mm)
- body_mass_g: 몸무게 (g)
- sex: 성별
- 분석 목표: 수치형 설명변수 4개로 펭귄의 종을 판별하는 판별분석 모형을 학습하자.

환경설정

- 필요한 패키지 불러오기

```
import os
import numpy as np
import pandas as pd
import collections
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis
from sklearn.discriminant_analysis import QuadraticDiscriminantAnalysis
from sklearn.metrics import confusion_matrix
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
```

데이터 불러오기

- sns 패키지에 내장되어있는 penguins 데이터를 불러오기.

```
penguins = sns.load_dataset('penguins')
print(penguins.shape)
penguins.head()
```

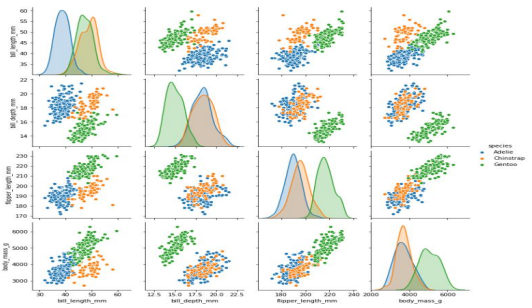
```
(344, 7)
```

	species	island	bill_length_mm	bill_depth_mm
0	Adelie	Torgersen	39.1	18.7
1	Adelie	Torgersen	39.5	17.4
2	Adelie	Torgersen	40.3	18.0

탐색적 자료분석

- 설명변수 자료들의 특성을 살펴본다.
- 히스토그램과 산점도를 통해 시각화를 한다.

```
sns.pairplot(penguins, diag_kind='kde', hue='species')
plt.show()
```



선형판별분석

- LDA를 활용하여 데이터 분석하기.

```
lda = LinearDiscriminantAnalysis()
lda.fit(X_train, y_train)
```

```
LinearDiscriminantAnalysis()
```

- 적합한 LDA 모형에 평가 데이터를 대입하여 분류 정확도와 오차행렬을 계산하자.

```
y_test_pred_lda = lda.predict(X_test)
confusion_matrix(y_test, y_test_pred_lda)
```

```
array([[47,  0,  0],
       [ 0, 21,  0],
       [ 0,  0, 36]])
```

```
lda.score(X_test, y_test)
```

```
1.0
```

이차판별분석

- QDA를 활용하여 데이터 분석하기.

```
qda = QuadraticDiscriminantAnalysis()
qda.fit(X_train, y_train)
```

```
QuadraticDiscriminantAnalysis()
```

- 적합한 QDA 모형에 평가 데이터를 대입하여 분류 정확도와 오차행렬을 계산하자.

```
y_test_pred_qda = qda.predict(X_test)
confusion_matrix(y_test, y_test_pred_qda)
```

```
array([[47,  0,  0],
       [ 0, 21,  0],
       [ 0,  0, 36]])
```

```
qda.score(X_test, y_test)
```

```
1.0
```

■ 연습문제

(객관식)1. 다음 보기 중 판별분석에 대한 설명으로 잘못된 것을 고르시오.

① 종속변수값을 통해서 종속변수의 범주를 예측하는 분류 방법 중 하나이다.

② 판별분석은 3개 이상의 범주를 갖는 종속변수도 분류가 가능하다.

③ 판별분석모형의 모수는 음의 로그우도함수를 최소화하는 값으로 추정한다.

④ 이차판별분석은 모집단 간의 공분산이 동일하다는 가정을 한다.

정답 : ④

해설 : 이차판별분석은 모집단 간의 공분산이 동일하다는 가정을 하지 않는다.

(단답형)2. 판별분석모형에서 설명변수의 주변 분포가 따르는 분포는 무엇인가?.

정답) 혼합 정규 분포
해설) 판별분석모형에서 설명변수는 혼합 정규 분포를 따른다.

(O/X)3. 이진분류문제에서 선형판별분석모형은 로지스틱모형보다 많은 모수를 갖는다.

정답 : O
해설 : 선형판별분석모형의 모수의 개수는 로지스틱모형보다 많다.

■ 정리하기

1. 판별분석은 분류 문제를 해결하는 방법 중 하나로, 설명변수와 종속변수의 결합분포를 모형화한다. 판별분석에는 선형판별분석과 이차판별분석이 존재한다.

2. 선형판별분석은 모집단 간의 공분산행렬이 동일하다는 가정을 하므로 설명변수값의 선형식으로 분류 예측값이 결정된다.

3. 이차판별분석은 모집단 간의 공분산행렬이 동일하다는 가정을 하지 않으므로 설명변수값의 이차식으로 분류 예측값이 결정된다.

■ 참고자료 (참고도서, 참고논문, 참고사이트 등)

없음.