# 판별분석 (분류분석)

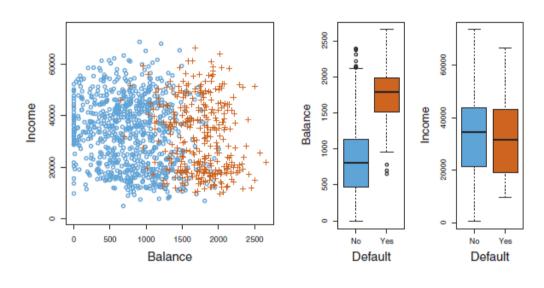
Discriminant Analysis (Classification Analysis)

#### 판별분석이란?

- 분류되어 있는 집단 간의 차이를 의미있게 설명해 줄 수 있는 독립변수들을 찾음.
- 변수의 결합으로 판별식(Discriminant function)을 만들어 관측치를 판별하는 규칙 만듬.
- 예
  - 서비스 이용 불만 고객의 성향 분석
  - SKT/KT/LGT 가입고객 판별 변수 및 판별함수 유도
- 비교: 군집분석
  - 관측치를 그룹으로 구분함
  - 판별분석과는 다르게 데이터에 집단을 나타내는 변수 없음
- 비교: 회귀분석
  - 종속변수가 이산형인 logistic regression은 두 집단 판별분석의 한 방법
  - 판별분석은 집단이 2개 이상의 범주를 갖는 범주형변수인 경우 가능
  - 판별분석은 집단을 구분하는 판별식 유도
  - 회귀분석은 집단에 속하는 확률 예측

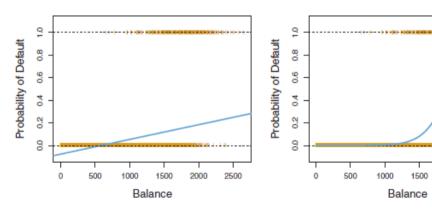
#### **Default Dataset**

• 개인의 연봉과 월 신용카드 잔고를 사용해 파산 예측



- 선형회귀모형은 적당치 않음
  - 예측치가 [0,1] 밖에 있을 수 있음

2000



# Simple Logistic Regression

• Balance를 사용해 default=Yes일 확률 예측

$$p(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X}}$$

$$\Leftrightarrow \log\left(\frac{p(X)}{1 - p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X$$
log-odds (logit) Odds: 성공확률/실패확률

- X가 한단위 증가할 때 log-odds가  $eta_1$ 만큼 증가
- ightharpoonup odds가  $e_1^{\beta_1}$ 배 변화
- p(X)와 X가 선형관계가 아니기 때문에 X의 한단위 증가가 일으키는 p(X)의 증가는 X의 값에 따라 달라짐
- $\beta_1 > 0$ : X가 증가하면 p(X)가 증가
- $\beta_1 < 0$ : X가 증가하면 p(X)가 감소

• 회귀 계수 추정: Maximum likelihood Method

$$L(\beta_0, \beta_1) = \prod_{i:y_i=1} p(x_i) \prod_{i':y_{i'}=0} (1 - p(x_{i'}))$$

```
> library(ISLR)
> glm.fit=glm(default~balance,data=Default,family=binomial)
> summary(qlm.fit)
Call:
glm(formula = default ~ balance, family = binomial, data = Default)
Deviance Residuals:
   Min
             1Q Median
-2.2697 -0.1465 -0.0589 -0.0221 3.7589
Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -1.065e+01 3.612e-01 -29.49 <2e-16 ***
balance
            5.499e-03 2.204e-04 24.95 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
    Null deviance: 2920.6 on 9999 degrees of freedom
Residual deviance: 1596.5 on 9998 degrees of freedom
AIC: 1600.5
Number of Fisher Scoring iterations: 8
```

- balance의 회귀계수 p-value < 0.0001
  - 파산확률과 카드잔고 사이에 관계가 있음
- 카드 잔고가 \$1000인 사람의 파산 확률은?

$$\begin{split} \hat{p}(X) &= \frac{e^{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X}}{1 + e^{\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X}} = \frac{e^{-10.6513 + 0.0055 \times 1,000}}{1 + e^{-10.6513 + 0.0055 \times 1,000}} = 0.00576, \\ &> \text{a=predict(glm.fit,data.frame(balance=1000))} \\ &> \exp(\text{a})/(1 + \exp(\text{a})) \\ &\qquad \qquad 1 \\ 0.005752145 \\ &> \text{predict(glm.fit,data.frame(balance=1000),type="response")} \\ &\qquad \qquad 1 \\ 0.005752145 \end{split}$$

# Multiple Logistic Regression

• 모형

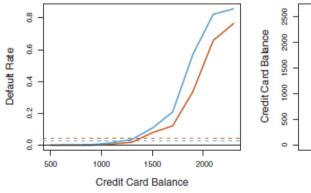
$$\log\left(\frac{p(X)}{1-p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p,$$
$$p(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p}}.$$

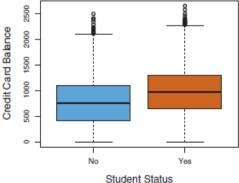
```
> glm.fit2=glm(default~balance+income+student,data=Default,family=binomial)
> summary(glm.fit2)
glm(formula = default ~ balance + income + student, family = binomial,
    data = Default)
Deviance Residuals:
             1Q Median
   Min
-2.4691 -0.1418 -0.0557 -0.0203
                                   3.7383
Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -1.087e+01 4.923e-01 -22.080 < 2e-16 ***
            5.737e-03 2.319e-04 24.738 < 2e-16 ***
balance
             3.033e-06 8.203e-06 0.370 0.71152
income
studentYes -6.468e-01 2.363e-01 -2.738 0.00619 **
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
    Null deviance: 2920.6 on 9999 degrees of freedom
Residual deviance: 1571.5 on 9996 degrees of freedom
AIC: 1579.5
Number of Fisher Scoring iterations: 8
```

- 현재잔고와 학생여부는 파산과 연관이 있음
- 학생더미 변수의 계수가 음수
  - Simple logistic regression에서는 양수

```
> glm.fit3=glm(default~student,data=Default,family=binomial)
> summary(glm.fit3)
Call:
alm(formula = default ~ student. family = binomial. data = Default)
Deviance Residuals:
              10 Median
                                       Max
-0.2970 -0.2970 -0.2434 -0.2434 2.6585
Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -3.50413
                       0.07071 -49.55 < 2e-16 ***
                       0.11502
                                  3.52 0.000431 ***
studentYes
            0.40489
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

- 학생이면 파산가능성이 더 낮음?
- Confounding effect
  - 같은 수준의 income과 balance를 가지고 있을 경우 학생의 파산가능성(odds)이 더 낮음
  - 학생일 경우 credit card balance가 더 높은 경향이 있음
  - 학생인 경우 아닌 경우보다 파산가능성 (odds) 이 1.5배
  - 같은 수준의 income과 balance를 가지고 있을 경우 학생의 파산가능성 (odds) 은 0.5배





#### 모형비교: Deviance Goodness-of-fit Test

```
> anova(glm.fit2, glm.fit3, test="Chisq")
Analysis of Deviance Table

Model 1: default ~ balance + income + student
Model 2: default ~ student
   Resid. Df Resid. Dev Df Deviance Pr(>Chi)
1     9996     1571.5
2     9998     2908.7 -2 -1337.1 < 2.2e-16 ***
---
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1</pre>
```

- Reduced Model과 Full Model의 차이가 유의한지 검정
- 여러 설명변수가 주는 영향이 유의한지 한번에 검정
  - 다중회귀분석의 F-test와 유사
- Balance와 income의 영향이 default 확률을 예측하는 데 유의하다.

# 반복 측정된 자료

- 한 개의 X값에서 여러 개의 Y가 측정된 경우
- $X_i$ 에서의 관측치가 0, 1이 아니라  $n_i$ 개 중  $Y_{\cdot i}$ 개의 성공 관측
- Binomial Distribution

$$f(Y_{\cdot i}) = \frac{n_i!}{Y_{\cdot i}! (n_i - Y_{\cdot i})!} \pi_i^{Y_{\cdot i}} (1 - \pi_i)^{n_i - Y_{\cdot i}}$$

# Example: Coupon Effectiveness

• 가격을 할인해 주는 쿠폰의 효과를 검증하기 위해 무작위로 추출된 각 200개의 가구에 5,10,15,20,30 달러의 쿠폰을 제공했다.

	Price_reduc	N	N_redeemed
1	5	200	30
2	10	200	55
3	15	200	70
4	20	200	100
5	30	200	137

```
> data=read.csv("coupon.csv")
> model2=glm(cbind(N_redeemed,N-N_redeemed)~Price_reduc.data=data.family=binomial(logit))
> summary(model2)
call:
glm(formula = cbind(N_redeemed, N - N_redeemed) ~ Price_reduc,
   family = binomial(logit), data = data)
Deviance Residuals:
-0.8988 0.6677 -0.1837 0.7612 -0.5477
Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
Price_reduc 0.096834 0.008549 11.33 <2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)
   Null deviance: 149.4627 on 4 degrees of freedom
Residual deviance: 2.1668 on 3 degrees of freedom
AIC: 33.793
Number of Fisher Scoring iterations: 3
                     \hat{\pi} = \frac{\exp(-2.04 + 0.0968X)}{1 + \exp(-2.04 + 0.0968X)}
```

$$\widehat{OR} = \exp(0.0968) = 1.102$$
 쿠폰의 할인액이 1달러 증가할 때 쿠폰을 사용할 Odds가 10% 증가한다.

### 오분류율, 민감도, 특이도

• 판별분석 결과 분할표

		예측그룹	
실제그룹	표본의 수	Positive	Negative
Positive	n <sub>1</sub>	n <sub>11</sub>	n <sub>12</sub>
Negative	n <sub>2</sub>	n <sub>21</sub>	n <sub>22</sub>

- 오분류율 (Error rate): 잘못 분류한 비율 =  $\frac{n_{12}+n_{21}}{n_1+n_2}$
- 민감도 (Sensitivity: True Positive Rate):positive를 positive로 구분한 비율 =  $\frac{n_{11}}{n_1}$
- 특이도 (Specificity: True Negative Rate): negative를 negative로 구분한 비율=  $\frac{n_{22}}{n_2}$

# Example: 오분류율, 민감도, 특이도

```
> pred=data.frame(default=Default$default, fit=glm.fit2$fitted)
                                                                 • 10000 명중 330명이 파산
> head(pred)
  default

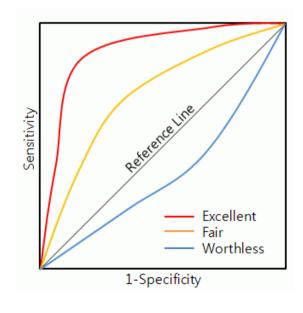
    Cutoff=0.5

       No 0.0014287239
       No 0.0011222039
      No 0.0098122716
      No 0.0004415893
      No 0.0019355062
       No 0.0019895182
> table(Default$default)
  No Yes
    333
9667
> xtabs(~Default$default+(glm.fit2$fitted>0.5))
               glm.fit2$fitted > 0.5
Default$default FALSE TRUE
            No
                 9627
                       40
                228 105
            Yes
```

- Sensitivity= 105/(228+105)=0.315
- Specificity=9627/(9627+40)=0.996
- Error rate=(40+228)/10000=0.0268

# ROC (Receiver Operating Characteristic) Curve

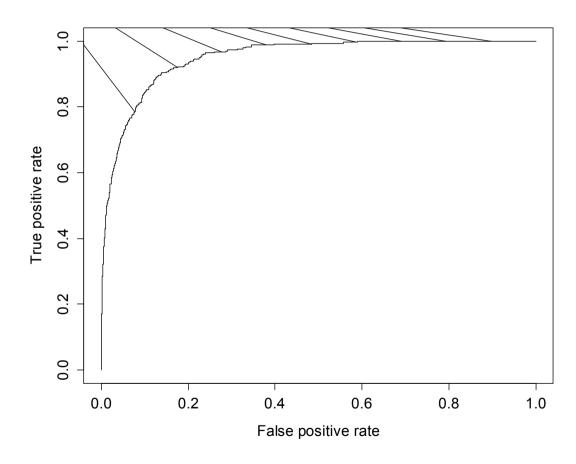
- y축: 민감도 =True positive rate
- x축: 1- 특이도=False positive rate



- ROC curve의 아래쪽 면적 (AUC)이 클수록 좋은 모형
- 왼쪽 코너에 가까운 포인트 를 Cutoff로 정하는 것도 한 방법

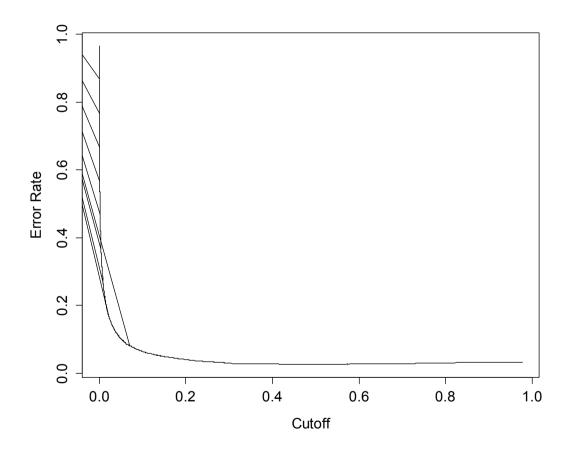
# Example: ROC curve for Default Dataset

```
library(ROCR)
predob=prediction(pred$fit,pred$default)
plot(performance(predob,"tpr","fpr"))
```



# Example: Error rate for Default Dataset

plot(performance(predob,measure="err"))



# Linear Discriminant Analysis (LDA)

- $\pi_k$ : k-집단에 들어갈 사전 확률(prior probability).  $\sum_k \pi_k = 1$
- 데이터가 주어져 있을 때 k-집단에 들어갈 사후 확률 (posterior probability)

$$\Pr(G = k | X = x) = \frac{f_k(x)\pi_k}{\sum_{l=1}^{K} f_l(x)\pi_l}$$

• 각 집단의 분포가 정규분포라고 가정

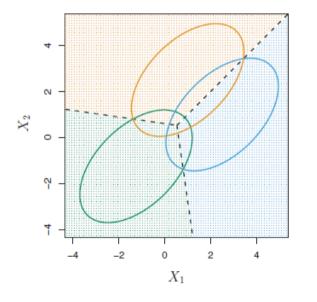
$$f_k(x) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_k|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(x - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k)}$$

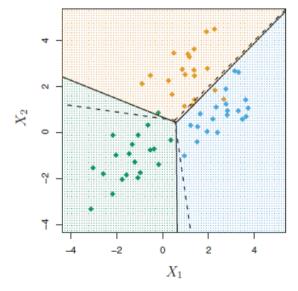
- 만약 각 집단의 공분산 행렬이 동일하다면  $(\Sigma_k = \Sigma)$ , 사후확률의 비율  $\log \frac{\Pr(G=k|X=x)}{\Pr(G=l|X=x)}$ 이 x 에 대한 선형식으로 표현됨.
- 판별함수 (discriminant function)이 큰 그룹으로 할당

$$\delta_k(x) = x^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_k + \log \pi_k$$

$$x^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_{k} - \frac{1}{2} \mu_{k}^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_{k} = x^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_{l} - \frac{1}{2} \mu_{l}^{T} \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_{l}$$

• 위의 식을 만족하는 선이 decision boundary





# 예: Turkey

- 야생칠면조(WILD)와 사육칠면조(DOMESTIC)의 구분
- 9개 부위의 길이 정보를 사용

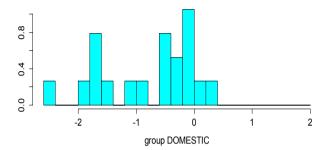
```
> head(data)
     ID HUM RAD ULN FEMUR TIN CAR D3P COR SCA TYPE
                                                                                                             Δ

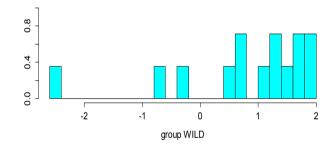
    DOMESTIC

                                                                        55
13 B710 153 140 147
                      142 151 817 305 102 128 WILD
                                                                                                         Δ
                                                                            △ WILD
                                                                                                         Δ
                     146 155 814 305 111 137 WILD
14 B790 156 137 151
17 B819 158 135 151
                     146 152 790 289 111 125 WILD
19 B085 148 129 146
                     139 147 767 287 106 123 WILD
                                                                                                             Δ
                     140 159 818 301 116 136 WILD
20 B089 157 140 154
                                                                                                       Δ
                                                                                                                       Δ
21 B090 153 138 153
                      141 151 822 312 115 133 WILD
> str(data)
                                                                                                       Δ
'data.frame': 33 obs. of 11 variables:
                                                                                             Δ
       : Factor w/ 82 levels "B081", "B085",..: 20 21
                                                                                             О
       : int 153 156 158 148 157 153 156 153 152 147 ...
                                                                                           Δ
                                                                                             О
       : int 140 137 135 129 140 138 138 135 140 130 ...
 $ ULN : int 147 151 151 146 154 153 156 150 151 144 ...
 $ FEMUR: int 142 146 146 139 140 141 145 144 144 136 ...
       : int 151 155 152 147 159 151 150 158 158 145 ...
       : int 817 814 790 767 818 822 835 772 792 765 ...
       : int 305 305 289 287 301 312 310 276 303 289 ...
                                                                             Δ
 $ COR : int 102 111 111 106 116 115 118 102 111 108 ...
                                                                               0
 $ SCA : int 128 137 125 123 136 133 133 123 122 131 ...
 $ TYPE : Factor w/ 2 levels "DOMESTIC","WILD": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
                                                                                                150
                                                                                                          155
                                                                                      145
                                                                                                                    160
                                                                            140
 - attr(*, "na.action")=Class 'omit' Named int [1:49] 1 2 3 4 5 6 7
 ....- attr(*. "names")= chr [1:49] "1" "2" "3" "4" ...
                                                                                              data$HUM
```

# 예: Turkey

```
> model1=lda(TYPE~HUM+ULN,data)
> model1
Call:
lda(TYPE ~ HUM + ULN, data = data)
Prior probabilities of groups:
DOMESTIC
               WILD
0.5757576 0.4242424
Group means:
              HUM
                       ULN
DOMESTIC 146.7368 143.7895
        153.0000 149.9286
Coefficients of linear discriminants:
          LD1
HUM 0.1469784
ULN 0.1028563
```





# 예: Turkey

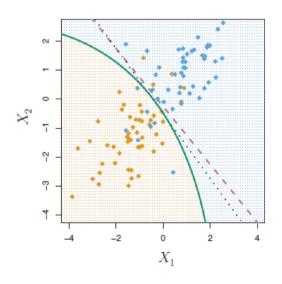
• 새로운 관측치 분류

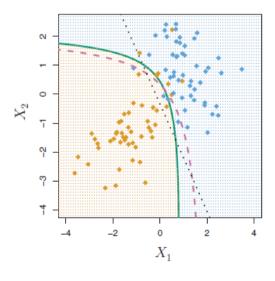
# Quadratic Discriminant Analysis (QDA)

$$f_k(x) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma_k|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(x - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x - \mu_k)}$$

• 만약 각 집단의 공분산 행렬이 동일하지않다면  $(\Sigma_k \neq \Sigma)$ , 사후확률의 비율  $\log \frac{\Pr(G=k|X=x)}{\Pr(G=l|X=x)}$ 이 x 에 대한 이차식으로 표현됨.

$$\delta_k(x) = -\frac{1}{2}(x - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x - \mu_k) - \frac{1}{2}\log|\Sigma_k| + \log \pi_k$$
$$= -\frac{1}{2}x^T \Sigma_k^{-1}x + x^T \Sigma_k^{-1}\mu_k - \frac{1}{2}\mu_k^T \Sigma_k^{-1}\mu_k - \frac{1}{2}\log|\Sigma_k| + \log \pi_k$$





• 두 집단 공분산의 차이가 적고, p가 적당히 크며(p>6), 표본의 수가 작으면  $(n_{1_n} n_2 < 25)$  QDF는 LDF 보다 비효율적

```
> fit2=qda(TYPE~HUM+ULN,data)
> fit2
Call:
qda(TYPE ~ HUM + ULN, data = data)
Prior probabilities of groups:
 DOMESTIC
               WILD
0.5757576 0.4242424
Group means:
              HUM
                       ULN
DOMESTIC 146.7368 143.7895
         153.0000 149.9286
> predict(fit2,data.frame("HUM"=c(145,150),"ULN"=c(150,145))) #prediction
$class
[1] WILD
             DOMESTIC
Levels: DOMESTIC WILD
$posterior
    DOMESTIC
                  WILD
1 0.00221008 0.9977899
2 0.68425690 0.3157431
```

#### 오분류율 계산

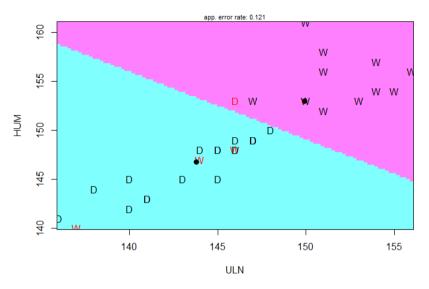
- 표본분할에 의한 오류율 계산
  - 동일한 데이터로 분류함수를 구하고 다시 오류율을 계산하면 실제보다 bias가 작게 계산
  - 자료를 training set과 validation set으로 나눔
  - training set: 판별함수 계산
  - validation set: 타당성 검사를 위한 표본으로 오류율 계산
- 교차타당성(cross-validation)에 의한 오류율 계산
  - 한 개만의 표본을 제외한 나머지 표본으로 판별함수 계산
  - 구해진 판별함수를 이용해 제외된 표본을 분류
  - 이 과정을 전체 표본 크기만큼 시행하여 오류율 계산

# 예: Turkey – 오분류율 계산

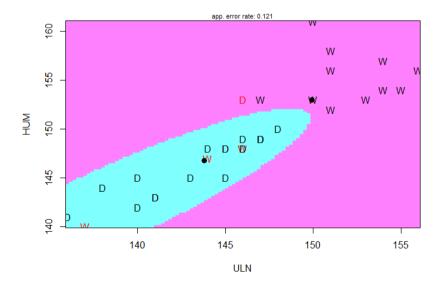
• CV=TRUE 옵션: 교차타당성에 의한 분류결과

```
> fit3=lda(TYPE~HUM+ULN,data,CV=T)
> ct3=table(data$TYPE,fit3$class)
> ct3
           DOMESTIC WILD
  DOMESTIC
                 18
                       1
                     11
                  3
  WILD
> prop.table(ct3)
             DOMESTIC
                            WILD
  DOMESTIC 0.54545455 0.03030303
           0.09090909 0.33333333
  WILD
> sum(diag(prop.table(ct3)))
[1] 0.8787879
> library(klaR)
> partimat(TYPE~HUM+ULN,data,method="lda")
> partimat(TYPE~HUM+ULN,data,method="qda")
```

#### **Partition Plot**



#### **Partition Plot**



# 예: Turkey – 사전확률 설정

• 설정 하지 않으면 default로 자료가 가지는 각 그룹의 비율을 사전확률로 여김

• 사전 정보에 의해 Domestic일 확률이 0.4, Wild일 확률이 0.6인 것을 알 경우

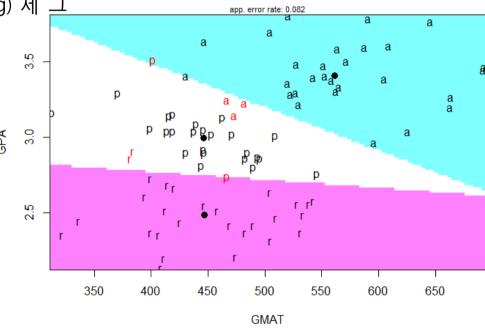
### 여러그룹의 판별분석

- 공분산 행렬이 그룹 간에 모두 같다는 가정→ LDA
- 공분산 행렬이 그룹 간에 다르다는 가정 → QDA
- 각 그룹에 속할 사후 확률이 가장 큰 집단으로 분류

• 예) 미국의 한 경영대학원에서 MBA과정에 지원하는 학생들의 학부 평균성적과 경영대학원 입학성적 자료를 활용해 합격(accepted), 불합격(rejected), 보류(pending) 세 그

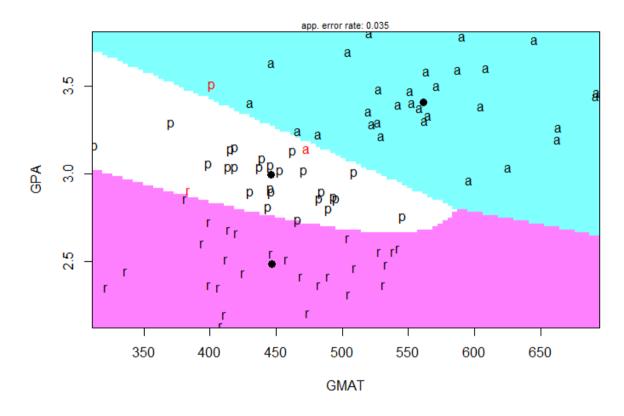
```
> head(mba)
   GPA GMAT
            result
1 2.96 596 accepted
2 3.14 473 accepted
3 3.22 482 accepted
4 3.29 527 accepted
5 3.69 505 accepted
6 3.46 693 accepted
> fit5=lda(result~GPA+GMAT,mba,CV=T)
> ct5=table(mba$result.fit5$class)
> ct5
           accepted pending rejected
  accepted
  pending
                 1
                         24
                                  1
  rejected
                                  26
> sum(diag(prop.table(ct5)))
[1] 0.9058824
> partimat(result~GPA+GMAT,mba,method="lda")
```

#### **Partition Plot**



# 여러그룹의 판별분석

#### **Partition Plot**



# 공분산 행렬의 동일성 검정

- Box's M Test
  - 가설
    - $H_0: \Sigma_1 = \cdots = \Sigma_G = \Sigma$
    - $H_a$ : Not  $H_0$
  - 검정통계량

$$M = \prod \left( \frac{\left| C_{w(g)} \right|}{\left| C_{w} \right|} \right)^{(n_{g}-1)/2}$$

- $C_{w(g)}$ : 그룹g의 표본공분산행렬
- $C_w$ : 전체 자료에 대한 표본공분산행렬
- $n_g$ : 그룹 g의 관측치 수
- 검정통계량  $B = a \ function \ of \ \log(M) \sim X^2(\frac{1}{2}p(p+1)(G-1))$
- R에서 공분산행렬의 등분산성 검정 해주는 패키지 없음
- BoxMTest function (by Ranjan Maitra, Iowa State University) 사용

#### > BoxMTest(mba[.1:2].mba[.3]) MBox Chi-sar, df P 16.0745 16.6653 6 0.0134 Covariance matrices are significantly different. \$MBox accepted 16,6653 \$ChiSa accepted 16.07448 \$df [1] 6 \$pValue accepted

0.01335976