

Machine Learning

5장 Discriminant analysis와 Naive Bayes model

고려대학교 통계학과
박유성



Contents

- 01** Bayes rule을 이용한 classification
- 02** Discriminant analysis
- 03** Naïve bayes model

01 Bayes rule을 이용한 classification

- $d \times 1$ 인 입력변수 \mathbf{x} 가 주어져 있을 때 목표변수 y 가 class k ($k = 1, \dots, K$)에 속할 확률은 Bayes rule에 의해,

$$P(y = k|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}|k)P(k)}{P(\mathbf{x})} = \frac{P(\mathbf{x}|k)P(k)}{\sum_{k=1}^K P(\mathbf{x}|k)P(k)} \quad (5.1)$$

이 됨.

- $P(\mathbf{x}|k)$ 분포 가정에 따라 방법이 달라짐.

02 Discriminant analysis

- $P(\mathbf{x}|y=k) \sim N_d(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$ 라고 가정

- 1) $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \dots = \boldsymbol{\Sigma}_k = \boldsymbol{\Sigma}$

→ LDA (Linear discriminant analysis)

- 2) $i \neq j$ 에 대하여 $\boldsymbol{\Sigma}_i \neq \boldsymbol{\Sigma}_j$ 가 존재

→ QDA (Quadratic discriminant analysis)

LDA (Linear Discriminant Analysis)

- $P(\mathbf{x}|y=k) \sim N_d(\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k)$ 이므로 (5.1)식에서

$$P(\mathbf{x}|k) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} |\Sigma_k|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^T \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)\right) \quad (5.2)$$

- $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \dots = \Sigma_k = \Sigma$ 이므로 class k와 l에 대하여

$$\begin{aligned} \log \frac{P(y=k|\mathbf{x})}{P(y=l|\mathbf{x})} &= \log \frac{P(\mathbf{x}|k)P(y=k)}{P(\mathbf{x}|l)P(y=l)} \\ &= \log \frac{P(y=k)}{P(y=l)} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_k + \boldsymbol{\mu}_l)^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu}_l) + \mathbf{x}^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu}_l) \end{aligned} \quad (5.3)$$

LDA (Linear Discriminant Analysis)

- $P(y = k) = \pi_k$ 로 표기하고

$$\delta_k(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \Sigma^{-1} \boldsymbol{\mu}_k - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_k^T \Sigma^{-1} \boldsymbol{\mu}_k + \log \pi_k \quad (5.4)$$

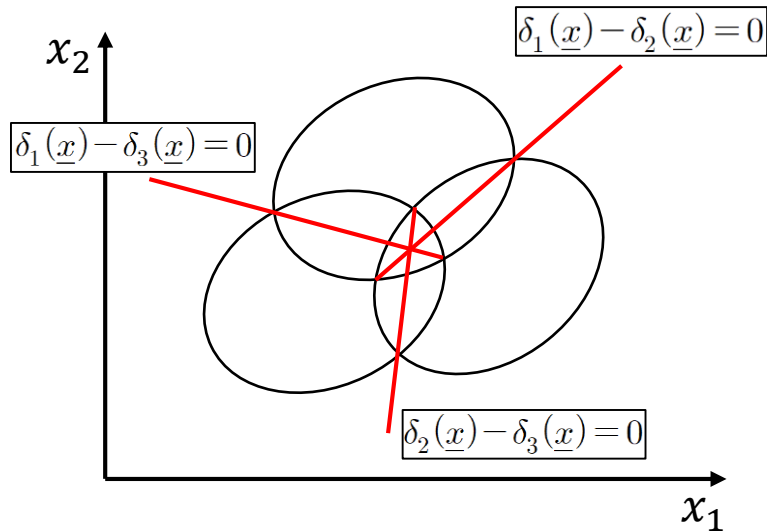
로 정의하면

- (5.3) 식은 $\log \frac{P(y = k|\mathbf{x})}{P(y = l|\mathbf{x})} = \delta_k(\mathbf{x}) - \delta_l(\mathbf{x})$ 로 표현할 수 있음.
- $\delta_k(\mathbf{x})$ 는 \mathbf{x} 에 linear이므로 선형판별함수

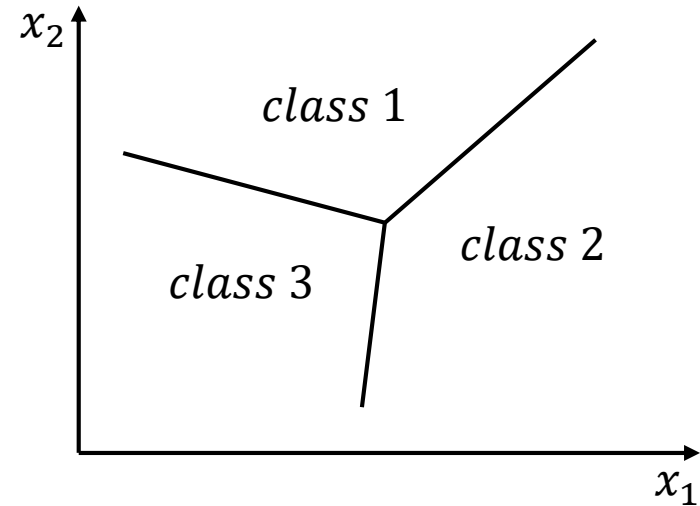
$\delta_k(\mathbf{x}) - \delta_l(\mathbf{x}) > 0$ 은 $P(y = k|\mathbf{x}) > P(y = l|\mathbf{x})$ 을 의미

→ $\delta_k(\mathbf{x})$ 를 선형판별함수(Linear discriminant function)이라 부름.

LDA (Linear Discriminant Analysis)



<판별 함수의 경계>



<판별 영역>

- 위 그림은 2개의 feature x_1 , x_2 가 존재할 때 3개의 class를 구분하는 경계선을 보여주고 있음.

LDA (Linear Discriminant Analysis)

- $\delta_k(\mathbf{x})$ 의 추정

n : training data의 총 관측치 수

n_k : class k 에 속하는 관측치 수, K : 총 class 수

$\mathbf{x}_i^{(k)}$: class k 에 속한 i 번째 $d \times 1$ feature 라고 할 때,

$$\hat{\pi}_k = n_k/n, \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_k = \sum_{i=1}^{n_k} \mathbf{x}_i^{(k)} / n_k, \quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^{n_k} (\mathbf{x}_i^{(k)} - (\hat{\boldsymbol{\mu}}_k))(\mathbf{x}_i^{(k)} - (\hat{\boldsymbol{\mu}}_k))^T / (n - K)$$

를 사용하여 $\delta_k(\mathbf{x})$ 를 추정하게 됨.

- 이와 같이 선형판별함수를 이용하여 y 의 class를 판별하는 것이 LDA (Linear Discriminant Analysis)임.

QDA (Quadratic Discriminant Analysis)

- $P(\mathbf{x}|y = k) \sim N_d(\boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k)$ 이면서 $i \neq j$ 에 대하여 $\Sigma_i \neq \Sigma_j$ 가 존재한다고 가정
- 그러므로 $\delta_k(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^T \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) + \log \pi_k$ 가 되며
이를 이차판별함수(Quadratic discriminant function)이라 함.
- $\delta_k(\mathbf{x})$ 에 대해 추정 시 $\hat{\Sigma}_k = k \text{ class}$ 내 feature들의 표본공분산 행렬임.
- 이와 같이 이차판별함수를 이용하여 y 의 $class$ 를 판별하는 것이 QDA (Quadratic Discriminant Analysis)임.

03 Naïve bayes model

- $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^T$ 가 서로 간에 독립이라고 가정

(즉, $P(\mathbf{x}|k) = \prod_{j=1}^d P(x_j|k)$ 라고 가정)

1) $x_j \sim N(\mu_k, \sigma_k^2)$ ($j = 1, \dots, d$) 라고 가정 (즉, LDA에서 $\Sigma_k = \sigma_k^2 I$)

→ Normal naïve bayes model

2) \mathbf{x} 를 d 차원 multinomial distribution으로 가정

→ Multinomial naïve bayes model

Q & A