

# 判別分析

## 基本的な考え方

村田 昇

## 講義概要

- 第 1 日: 判別分析の考え方
- 第 2 日: 分析の評価

## 判別分析の考え方

### 判別分析

- **discriminant analysis**  
個体の特徴量からその個体の属する**クラス**を予測する関係式を構成する方法
- 関係式: **判別関数** (discriminant function)
  - 説明変数:  $X = (X_1, \dots, X_q)$
  - 目的変数:  $Y$  ( $K (\geq 2)$  個のクラスラベル)
- 判別関数による分類:
  - 1 次式の場合: **線形判別分析** (linear discriminant analysis)
  - 2 次式の場合: **2 次判別分析** (quadratic discriminant analysis)

### 判別分析の例

- 検査結果から患者が病気を罹患しているか判定する
  - $X$  = 検査結果
  - $Y$  = 病気・健康
- 今日の経済指標から明日株価が上昇するか予測する
  - $X$  = 今日の経済指標
  - $Y$  = 明日株価の上昇・下降
- 今日の大気の状態から, 明日の天気を予測する
  - $X$  = 今日の大気の状態
  - $Y$  = 晴・くもり・雨・雪

### 判別分析の考え方

- 確率による定式化
  1.  $X = \mathbf{x}$  の下で  $Y = k$  となる **条件付確率** を計算

$$p_k(\mathbf{x}) = P(Y = k | X = \mathbf{x})$$

2. 所属する確率が最も高いクラスに個体を分類

- 観測データ:  $n$  個の  $(Y, X_1, \dots, X_q)$  の組

$$\{(y_i, x_{i1}, \dots, x_{iq})\}_{i=1}^n$$

- 観測データから  $Y$  の条件付確率  $p_k(\mathbf{x})$  を構成

## 条件付確率

- 以下では  $X$  は離散型の  $q$  次元確率変数として説明
- 事象  $X = \mathbf{x}$  が起きたという条件の下で事象  $Y = k$  が起きる条件付確率

$$p_k(\mathbf{x}) = P(Y = k | X = \mathbf{x}) = \frac{P(Y = k, X = \mathbf{x})}{P(X = \mathbf{x})}$$

- 連続な確率変数の場合は確率密度関数を用いる

## 条件付確率の表現

- $Y$  の条件付確率  $p_k(\mathbf{x})$  のモデル化の方針:
  - $p_k(\mathbf{x})$  を直接モデル化する (例: ロジスティック回帰)
  - $Y = k$  の下での  $X$  の条件付き確率質量関数

$$f_k(\mathbf{x}) = P(X = \mathbf{x} | Y = k) = \frac{P(X = \mathbf{x}, Y = k)}{P(Y = k)}$$

のモデル化を通じて  $p_k(\mathbf{x})$  をモデル化する

- 本講義では **後者** について説明

## 事後確率による判別

### Bayes の公式

- $f_k(\mathbf{x})$  から  $p_k(\mathbf{x})$  を得る数学的原理  
原因  $X = \mathbf{x}$  から結果  $Y = k$  が生じる確率を結果  $Y = k$  が生じた原因が  $X = \mathbf{x}$  である確率から計算する方法
- Bayes の公式 (Bayes' formula)

$$p_k(\mathbf{x}) = P(Y = k | X = \mathbf{x}) = \frac{f_k(\mathbf{x})P(Y = k)}{\sum_{l=1}^k f_l(\mathbf{x})P(Y = l)}$$

### Bayes の公式の略証

- 定義より

$$f_k(\mathbf{x}) = P(X = \mathbf{x} | Y = k) = \frac{P(X = \mathbf{x}, Y = k)}{P(Y = k)}$$

- 求める条件付確率:

$$p_k(\mathbf{x}) = P(Y = k | X = \mathbf{x}) = \frac{f_k(\mathbf{x})P(Y = k)}{P(X = \mathbf{x})}$$

- 分母の展開:

$$\begin{aligned} P(X = \mathbf{x}) &= \sum_{l=1}^k P(X = \mathbf{x}, Y = l) \\ &= \sum_{l=1}^k f_l(\mathbf{x})P(Y = l) \end{aligned}$$

## 事前確率と事後確率

- **事前確率:**  $\pi_k = P(Y = k)$  (prior probability)
  - $X = \mathbf{x}$  が与えられる前に予測されるクラス確率
- **事後確率:**  $p_k(\mathbf{x})$  (posterior probability)
  - $X = \mathbf{x}$  が与えられた後に予測されるクラス確率
- Bayes の公式による書き換え:

$$p_k(\mathbf{x}) = \frac{f_k(\mathbf{x})\pi_k}{\sum_{l=1}^k f_l(\mathbf{x})\pi_l} = \frac{f_k(\mathbf{x})}{\sum_{l=1}^k f_l(\mathbf{x})\pi_l} \cdot \pi_k$$

- 事前確率が説明変数の条件付確率の重みで変更される

## 事前確率の決め方

- 事前に特別な情報がない場合:  
データから自然に決まる確率

$$\pi_k = \frac{Y = k \text{ のサンプル数}}{\text{全サンプル数}}$$

- 事前に情報がある場合 (例):  
食事・運動・飲酒・ストレスなどの生活の特徴から生活習慣病か否かを判別
  - 健常者の食事・運動・飲酒・ストレスなどの特徴量を収集
  - 罹患者の食事・運動・飲酒・ストレスなどの特徴量を収集
  - 事前確率は **別の調査の日本人の罹患率** を利用

## 線形判別分析

### 判別関数

- 判別の手続き
  1. 説明変数  $X = \mathbf{x}$  の取得
  2. 事後確率  $p_k(\mathbf{x})$  の計算
  3. 事後確率最大のクラスにデータを分類
- 判別関数:  $\delta_k(\mathbf{x})$  ( $k = 1, \dots, K$ )

$$p_k(\mathbf{x}) < p_l(\mathbf{x}) \Leftrightarrow \delta_k(\mathbf{x}) < \delta_l(\mathbf{x})$$

- 事後確率の順序を保存する計算しやすい関数
- 判別関数  $\delta_k(\mathbf{x})$  を最大化するクラス  $k$  に分類

## 線形判別

- $f_k(\mathbf{x})$  の仮定:
  - $q$  変量正規分布の密度関数
  - 平均ベクトル  $\boldsymbol{\mu}_k$ : クラスごとに異なる
  - 共分散行列  $\Sigma$ : すべてのクラスで共通

$$f_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{q/2} \sqrt{\det \Sigma}} \exp \left( -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) \right)$$

- 線形判別関数:  $\mathbf{x}$  の 1 次式

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

## 同値性の確認

- 事後確率と判別関数の関係

$$\begin{aligned} p_k(\mathbf{x}) &< p_l(\mathbf{x}) \\ \Leftrightarrow f_k(\mathbf{x})\pi_k &< f_l(\mathbf{x})\pi_l \\ \Leftrightarrow \log f_k(\mathbf{x}) + \log \pi_k &< \log f_l(\mathbf{x}) + \log \pi_l \\ \Leftrightarrow -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) + \log \pi_k \\ &< -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_l)^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_l) + \log \pi_l \\ \Leftrightarrow \delta_k(\mathbf{x}) &< \delta_l(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

## 平均・分散の推定

- 平均の推定 (クラスごとに行う)

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i: y_i=k} \mathbf{x}_i$$

- ただし  $n_k$  は  $y_i = k$  であるようなデータの総数

- 分散の推定 (まとめて行う)

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n-K} \sum_{k=1}^K \sum_{i: y_i=k} (\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k)(\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}_k)^\top$$

## 演習

### R: 線形判別関数 MASS::lda()

- データフレームに対する分析:

- 判別関数値の図示:

## 練習問題

- 東京の気候データを用いて以下の分析を行いなさい
  - 10月と11月の気温と湿度のデータを抽出する
  - 半分のデータを用いて線形判別関数を構成し、残りのデータを用いて判別を行う

## 2次判別分析

### 2次判別

- $f_k(\mathbf{x})$  の仮定:
  - $q$  変量正規分布の密度関数
  - 平均ベクトル  $\boldsymbol{\mu}_k$ : クラスごとに異なる
  - 共分散行列  $\Sigma_k$ : クラスごとに異なる

$$f_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{q/2} \sqrt{\det \Sigma_k}} \exp \left( -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) \right)$$

- 2次判別関数:  $\mathbf{x}$  の2次式

$$\delta_k(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \det \Sigma_k - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) + \log \pi_k$$

### 同値性の確認

- 事後確率と判別関数の関係

$$\begin{aligned} p_k(\mathbf{x}) &< p_l(\mathbf{x}) \\ \Leftrightarrow f_k(\mathbf{x})\pi_k &< f_l(\mathbf{x})\pi_l \\ & \text{(分母は共通)} \\ \Leftrightarrow \log f_k(\mathbf{x}) + \log \pi_k &< \log f_l(\mathbf{x}) + \log \pi_l \\ \Leftrightarrow -\frac{1}{2} \det \Sigma_k - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) + \log \pi_k \\ &< -\frac{1}{2} \det \Sigma_l - \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_l)^\top \Sigma_l^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_l) + \log \pi_l \\ \Leftrightarrow \delta_k(\mathbf{x}) &< \delta_l(\mathbf{x}) \\ & \text{(2次の項は右辺と左辺で共通)} \end{aligned}$$

## 平均・分散の推定

- 平均の推定 (クラスごとに行う)

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i:y_i=k} \mathbf{x}_i$$

- ただし  $n_k$  は  $y_i = k$  であるようなデータの総数

- 分散の推定 (クラスごとに行う)

$$\hat{\Sigma}_k = \frac{1}{n_k - 1} \sum_{i:y_i=k} (\mathbf{x}_i - \hat{\mu}_k)(\mathbf{x}_i - \hat{\mu}_k)^\top$$

## 演習

### 問題

- 以下の問に答えなさい
    - $X$  の条件付確率  $f_k(\mathbf{x})$  に関する仮定:
      - \*  $q$  変量正規分布の密度関数
      - \* 平均ベクトル  $\mu_k$ : クラスごとに異なる
      - \* 共分散行列  $\Sigma_k$ : クラスごとに異なる
- のもとで事後確率と2次判別関数の同値性

$$p_k(\mathbf{x}) < p_l(\mathbf{x}) \Leftrightarrow \delta_k(\mathbf{x}) < \delta_l(\mathbf{x})$$

を示しなさい

### 解答例

- 同値関係を順に確認すればよい

$$\begin{aligned} p_k(\mathbf{x}) &< p_l(\mathbf{x}) \\ \Leftrightarrow f_k(\mathbf{x})\pi_k &< f_l(\mathbf{x})\pi_l \\ \Leftrightarrow \log f_k(\mathbf{x}) + \log \pi_k &< \log f_l(\mathbf{x}) + \log \pi_l \\ \Leftrightarrow -\frac{1}{2} \det \Sigma_k - \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_k)^\top \Sigma_k^{-1}(\mathbf{x} - \mu_k) + \log \pi_k \\ &< -\frac{1}{2} \det \Sigma_l - \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_l)^\top \Sigma_l^{-1}(\mathbf{x} - \mu_l) + \log \pi_l \\ \Leftrightarrow \delta_k(\mathbf{x}) &< \delta_l(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

## 演習

### R: 2次判別関数 MASS::qda()

- データフレームに対する分析:

## 練習問題

- 東京の気候データを用いて以下の分析を行いなさい
  - 前問と同様な設定で2次判別を行いなさい
- 別の月や変数を用いて判別分析を行いなさい

## 多値判別

### 多値判別の構成方法

- 判別関数の比較
  - 判別関数  $\delta_k$  を比較
  - 正規分布を仮定する場合は一般には2次判別
- 2値判別の統合
  - 2クラスでの比較: 最大の組合せ数  ${}_KC_2$
  - グループでの比較: 最大の組合せ数  $2^K - 2$
- $K-1$  個の特徴量への変換
  - 説明変数の線形結合による特徴量の構成
  - **Fisher の線形判別**

## 変動の分解

- 3種類の変動
  - $A = \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)(x_i - \mu)^T$ : 全変動
  - $W = \sum_{i=1}^n (x_i - \mu_{y_i})(x_i - \mu_{y_i})^T$ : 群内変動
  - $B = \sum_{k=1}^K n_k (\mu_k - \mu)(\mu_k - \mu)^T$ : 群間変動  
( $n_k$  はクラス  $k$  のデータ数)
- 変動の関係

$$(\text{全変動}) = (\text{群内変動}) + (\text{群間変動})$$

$$A = W + B$$

## 演習

### 問題

- 以下の問に答えなさい
  - 全変動が群内・群間変動に分解されることを示しなさい
  - 説明変数の線形結合で新たな特徴量を構成する

$$Z = \alpha^T X$$

このとき  $Z$  の群内変動と群間変動を求めなさい

## 解答例

- 定義どおりに計算する

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \\ &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i} + \boldsymbol{\mu}_{y_i} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i} + \boldsymbol{\mu}_{y_i} - \boldsymbol{\mu})^\top \\ &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})^\top + \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{\mu}_{y_i} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_{y_i} - \boldsymbol{\mu})^\top \\ &\quad + \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})(\boldsymbol{\mu}_{y_i} - \boldsymbol{\mu})^\top + \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{\mu}_{y_i} - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})^\top \end{aligned}$$

- 添字の扱いに注意する

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})^\top + \sum_{k=1}^K \sum_{i:y_i=k} (\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})^\top \\ &\quad + \sum_{k=1}^K \sum_{i:y_i=k} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)(\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})^\top + \sum_{k=1}^K \sum_{i:y_i=k} (\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \\ &= \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})^\top + \sum_{k=1}^K n_k (\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_k - \boldsymbol{\mu})^\top \\ &= W + B \end{aligned}$$

- 定義どおりに計算する

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (z_i - \mu_{y_i})^2 &= \sum_{i=1}^n (z_i - \mu_{y_i})(z_i - \mu_{y_i}) \\ &= \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x}_i - \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{\mu}_{y_i})(\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x}_i - \boldsymbol{\alpha}^\top \boldsymbol{\mu}_{y_i})^\top \\ &= \boldsymbol{\alpha}^\top \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{y_i})^\top \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}^\top W \boldsymbol{\alpha} \\ \sum_{k=1}^K n_k (\mu_k - \mu)^2 &= \boldsymbol{\alpha}^\top B \boldsymbol{\alpha} \end{aligned}$$

## Fisher の判別分析

### Fisher の線形判別

- 判別のための特徴量  $Z = \boldsymbol{\alpha}^\top X$
- 良い  $Z$  の基準:
  - クラス内では集まっているほど良い ( $\boldsymbol{\alpha}^\top W \boldsymbol{\alpha}$  は小)
  - クラス間では離れているほど良い ( $\boldsymbol{\alpha}^\top B \boldsymbol{\alpha}$  は大)
- Fisher の基準:



$$\text{maximize } \boldsymbol{\alpha}^\top B \boldsymbol{\alpha} \quad \text{s.t.} \quad \boldsymbol{\alpha}^\top W \boldsymbol{\alpha} = \text{const.}$$

クラス内変動を一定にしてクラス間変動を最大化する

## Fisher の線形判別の解

- $\boldsymbol{\alpha}$  は  $W^{-1}B$  の固有値 (主成分分析の導出と同様)
  - $K = 2$  の場合: 最大固有値を用いる (線形判別と一致)

$$\boldsymbol{\alpha} \propto W^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$$

- 一般の  $K$  の場合: 第 1 から第  $K-1$  固有値を用いる
- 判別の手続き:  
 特徴量とクラスを中心までの距離を用いる
  1.  $d_k = \sum_{l=1}^{K-1} (\boldsymbol{\alpha}_l^\top \mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}_l^\top \boldsymbol{\mu}_k)^2$  を計算
  2. 最小の  $d_k$  となるクラス  $k$  に判別

## 演習

### 練習問題

- 東京の気候データを用いて以下の分析を行いなさい
  - 9 月, 10 月, 11 月の気温と湿度のデータを用いて判別関数を作成しなさい.
- 別の月や変数を用いて判別分析を行いなさい

## 次週の予定

- 第 1 日: 判別分析の考え方
- 第 2 日: 分析の評価