

判別分析

基本的な考え方

村田 昇

講義概要

- 第 1 回 : 判別分析の考え方
- 第 2 回 : 分析の評価

判別分析の例

乳癌の良性・悪性の判別

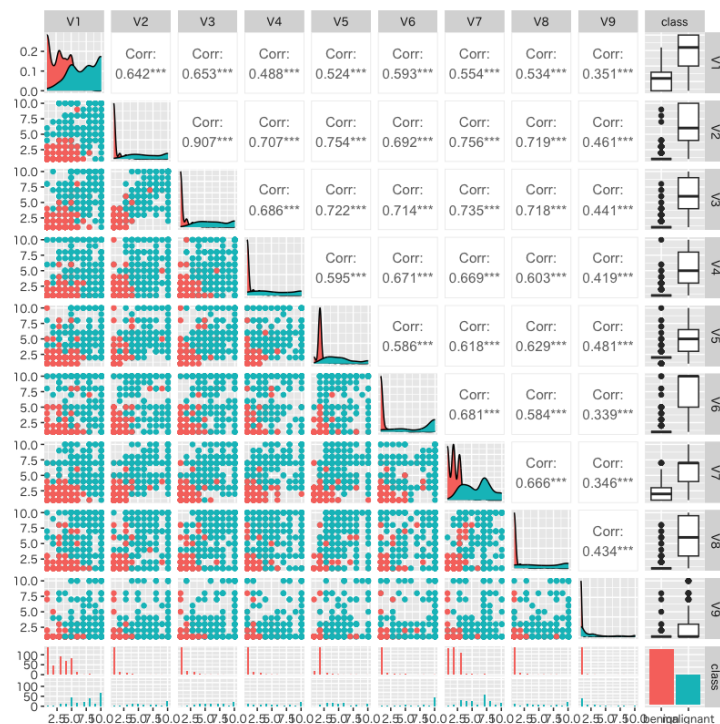


Figure 1: 9 種類の生検の散布図

判別分析の考え方

判別分析

- 判別分析 (discriminant analysis) の目的
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

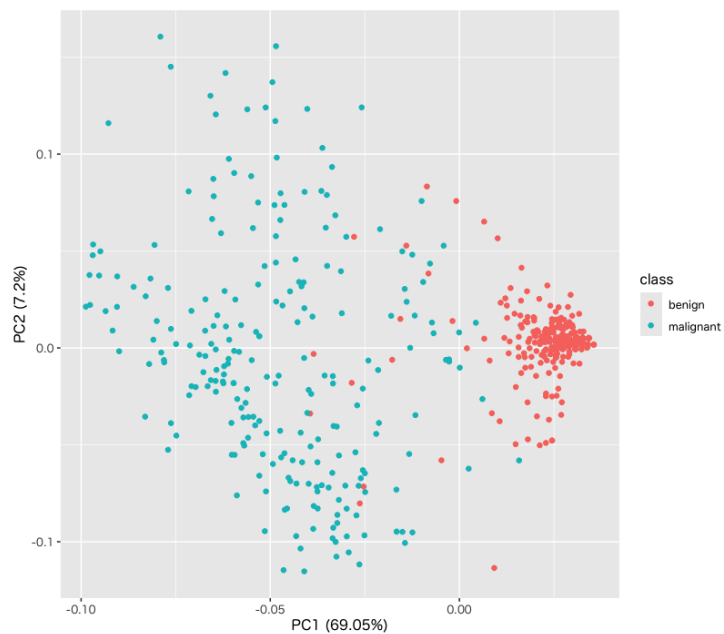


Figure 2: 主成分分析を用いて 2 次元に縮約した生検と良性・悪性の関係

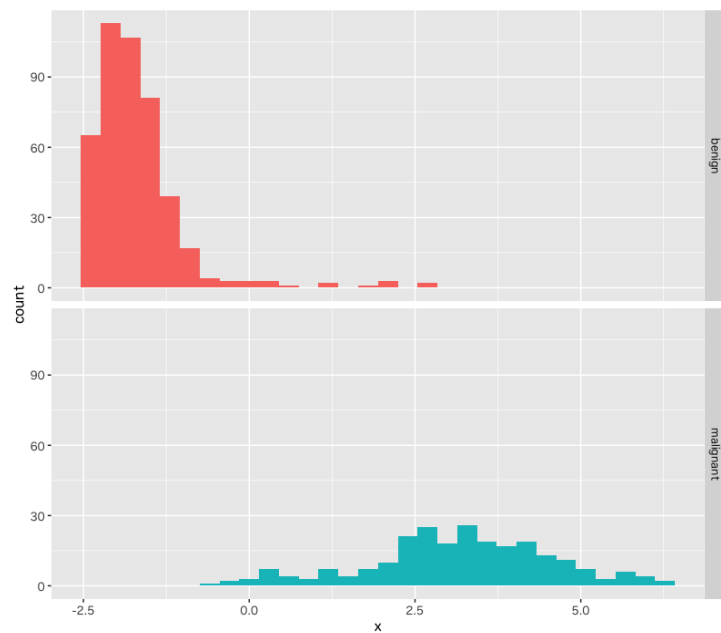


Figure 3: 線形判別関数による判別関数値の分布

- 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を予測する
 - 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 $Y = k$ が生じる原因が $X = \mathbf{x}$ である確率から計算する方法
- Bayes の公式 (Bayes' formula)

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

- $p_k(\mathbf{x})$: 原因 $X = \mathbf{x}$ から結果 $Y = k$ が生じる確率
- $f_k(\mathbf{x})$: 結果 $Y = k$ が生じる原因が $X = \mathbf{x}$ である確率

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
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 Σ : 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

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

平均・分散の推定

- 平均の推定 (クラスごとに行う)

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

– 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)

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

実習

R : 線形判別

- 関数 MASS::lda()

```
library(MASS) # パッケージの読み込み
lda(formula, data, ..., subset, na.action)
#' formula: モデル式 (ラベル ~ 判別に用いる変数)
#' data: 必要な情報を含むデータフレーム
#' 詳細は '?MASS::lda' を参照
```

- 判別結果取得のための関数

```
predict(object, newdata, prior = object$prior, dimen,
        method = c("plug-in", "predictive", "debiased"), ...)
#' object: lda の返すオブジェクト
#' newdata: 予測の対象とするデータフレーム
#' prior: ラベルの事前分布
#' 返値はリスト型で以下の項目がある
#' class: 判別関数による予測ラベル
#' posterior: ラベルの事後確率
#' x: 判別関数値
#' 詳細は '?MASS::predict.lda' を参照
```

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月と10月の気温と湿度のデータを抽出する

```
tw_data <- read_csv("data/tokyo_weather.csv")
tw_subset <- tw_data |>
  filter(month %in% c(9,10)) |>
  select(temp, humid, month) |>
  mutate(month = as_factor(month)) # 月を因子化
```

- 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

```
library(MASS)
idx <- seq(2, 60, by = 2)
tw_train <- tw_subset[idx,] # 訓練データ
tw_test <- tw_subset[-idx,] # 試験データ
tw_lda <- lda(month ~ temp + humid, data = tw_train) # 線形判別関数の構成
tw_lda_fitted <- predict(tw_lda) # 判別関数によるクラス分類結果の取得
tw_lda_predict <- predict(tw_lda, newdata = tw_test) # 新しいデータの予測
```

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 Σ_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

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

同値性の確認

- 事後確率と判別関数の関係

$$\begin{aligned}
p_k(\mathbf{x}) &< p_l(\mathbf{x}) \\
&\Leftrightarrow f_k(\mathbf{x})\pi_k < f_l(\mathbf{x})\pi_l \quad (\text{分母は共通}) \\
&\Leftrightarrow \log f_k(\mathbf{x}) + \log \pi_k < \log f_l(\mathbf{x}) + \log \pi_l \\
&\Leftrightarrow -\frac{1}{2} \det \Sigma_k - \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma_k^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) + \log \pi_k \\
&\quad < -\frac{1}{2} \det \Sigma_l - \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_l)^\top \Sigma_l^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_l) + \log \pi_l \\
&\Leftrightarrow \delta_k(\mathbf{x}) < \delta_l(\mathbf{x})
\end{aligned}$$

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 (クラスごとに行う)

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

実習

R : 2次判別

- 関数 `MASS::qda()`

```
library(MASS) # 既に読み込んでいる場合は不要
qda(formula, data, ..., subset, na.action)
#' formula: モデル式 (ラベル ~ 判別に用いる変数)
#' data: 必要な情報を含むデータフレーム
#' 詳細は '?MASS::qda' を参照
```

- 判別結果取得のための関数

```
predict(object, newdata, prior = object$prior,
        method = c("plug-in", "predictive", "debiased", "looCV"), ...)
#' object: qda の返すオブジェクト
#' newdata: 予測対象のデータフレーム. 省略すると推定に用いたデータフレーム
#' 返値はリスト型で以下の項目がある
#' class: 判別関数による予測ラベル
#' posterior: ラベルの事後確率
#' 詳細は '?MASS::predict.qda' を参照
```

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


```
tw_qda <- qda(month ~ temp + humid, data = tw_train) # 2次判別関数の構成
tw_qda_fitted <- predict(tw_qda) # 判別関数によるクラス分類結果の取得
tw_qda_predict <- predict(tw_qda, newdata = tw_test) # 新しいデータの予測
```

- 別の月や変数を用いて判別分析を行いなさい

さまざまな多値判別

多値判別の構成方法

- 判別関数の比較
 - 判別関数 δ_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
 - 異なる K 種の点の集合を $K-1$ 次元空間に配置
 - **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

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

$$A = W + B$$

Fisher の判別分析

Fisher の線形判別

- 判別のための特徴量 $Z = \alpha^T X$
 - 特徴量 Z のばらつきの計算は主成分分析と同様
 - 変動 A, W, B を Gram 行列とみなせばよい
- 良い Z の基準
 - クラス内では集まっているほど良い ($\alpha^T W \alpha$ は小)
 - クラス間では離れているほど良い ($\alpha^T B \alpha$ は大)
- Fisher の基準

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

- 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

- α は $W^{-1}B$ の固有ベクトル (主成分分析と同様)
 - $K = 2$ の場合: 最大固有値を用いる (線形判別と一致)

$$\alpha \propto W^{-1}(\mu_1 - \mu_2) = \Sigma^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$$

- 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. $d_k = \sum_{l=1}^{K-1} (\alpha_l^T x - \alpha_l^T \mu_k)^2$ を計算
 2. 最小の d_k となるクラス k に判別
 - 特徴量 Z の空間をクラスごとの平均を用いて Voronoi 分割している

実習

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.

```
tw_subset <- tw_data |>
  filter(month %in% c(9,10,11)) |>
  select(temp, humid, month) |>
  mutate(month = as_factor(month))
```

- 別の月や変数を用いて判別分析を行いなさい

```
#' 雨の有無を識別する例
tw_subset2 <- tw_data |>
  mutate(rain = factor(rain > 0),
         month = as_factor(month)) |> # 雨の有無でラベル化する
  select(rain, temp, solar, wind, month)
tw_lda2 <- lda(rain ~ ., data = tw_subset2) # 'rain' をそれ以外で判別
```

次回の予定

- 第 1 回: 判別分析の考え方
- 第 2 回: 分析の評価

ID	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7	V8	V9	class
1000025	5	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1002945	5	4	4	5	7	10	3	2	1	benign
1015425	3	1	1	1	2	2	3	1	1	benign
1016277	6	8	8	1	3	4	3	7	1	benign
1017023	4	1	1	3	2	1	3	1	1	benign
1017122	8	10	10	8	7	10	9	7	1	malignant
1018099	1	1	1	1	2	10	3	1	1	benign
1018561	2	1	2	1	2	1	3	1	1	benign
1033078	2	1	1	1	2	1	1	1	5	benign
1033078	4	2	1	1	2	1	2	1	1	benign
1035283	1	1	1	1	1	1	3	1	1	benign
1036172	2	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1041801	5	3	3	3	2	3	4	4	1	malignant
1043999	1	1	1	1	2	3	3	1	1	benign
1044572	8	7	5	10	7	9	5	5	4	malignant
1047630	7	4	6	4	6	1	4	3	1	malignant
1048672	4	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1049815	4	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1050670	10	7	7	6	4	10	4	1	2	malignant
1050718	6	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1054590	7	3	2	10	5	10	5	4	4	malignant
1054593	10	5	5	3	6	7	7	10	1	malignant
1056784	3	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1059552	1	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1065726	5	2	3	4	2	7	3	6	1	malignant
1066373	3	2	1	1	1	1	2	1	1	benign
1066979	5	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1067444	2	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1070935	1	1	3	1	2	1	1	1	1	benign
1070935	3	1	1	1	1	1	2	1	1	benign
1071760	2	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1072179	10	7	7	3	8	5	7	4	3	malignant
1074610	2	1	1	2	2	1	3	1	1	benign
1075123	3	1	2	1	2	1	2	1	1	benign
1079304	2	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1080185	10	10	10	8	6	1	8	9	1	malignant
1081791	6	2	1	1	1	1	7	1	1	benign
1084584	5	4	4	9	2	10	5	6	1	malignant
1091262	2	5	3	3	6	7	7	5	1	malignant
1099510	10	4	3	1	3	3	6	5	2	malignant
1100524	6	10	10	2	8	10	7	3	3	malignant
1102573	5	6	5	6	10	1	3	1	1	malignant
1103608	10	10	10	4	8	1	8	10	1	malignant
1103722	1	1	1	1	2	1	2	1	2	benign
1105257	3	7	7	4	4	9	4	8	1	malignant
1105524	1	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1106095	4	1	1	3	2	1	3	1	1	benign
1106829	7	8	7	2	4	8	3	8	2	malignant
1108370	9	5	8	1	2	3	2	1	5	malignant
1108449	5	3	3	4	2	4	3	4	1	malignant
1110102	10	3	6	2	3	5	4	10	2	malignant
1110503	5	5	5	8	10	8	7	3	7	malignant
1110524	10	5	5	6	8	8	7	1	1	malignant
1111249	10	6	6	3	4	5	3	6	1	malignant
1112209	8	10	10	1	3	6	3	9	1	malignant
1113038	8	2	4	1	5	1	5	4	4	malignant
1113483	5	2	3	1	6	10	5	1	1	malignant
1113906	9	5	5	2	2	2	5	1	1	malignant
1115282	5	3	5	5	3	3	4	10	1	malignant
1115293	1	1	1	1	2	2	2	1	1	benign
1116116	9	10	10	1	10	8	3	3	1	malignant
1116132	6	3	4	1	5	2	3	9	1	malignant
1116192	1	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1116998	10	4	2	1	3	2	4	3	10	malignant
1117152	4	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1118039	5	3	4	1	8	10	4	9	1	malignant
1120559	8	3	8	3	4	9	8	9	8	malignant
1121732	1	1	1	1	2	1	3	2	1	benign
1121919	5	1	3	1	2	1	2	1	1	benign
1123061	6	10	2	8	10	2	7	8	10	malignant
1124651	1	3	3	2	2	1	7	2	1	benign
1125035	9	4	5	10	6	10	4	8	1	malignant
1126417	10	6	4	1	3	4	3	2	3	malignant
1131294	1	1	2	1	2	2	4	2	1	benign
1132347	1	1	4	1	2	1	2	1	1	benign
1133041	5	3	1	2	2	1	2	1	1	benign
1133136	3	1	1	1	2	3	3	1	1	benign
1136142	2	1	1	1	3	1	2	1	1	benign
1137156	2	2	2	1	1	1	7	1	1	benign
1143978	4	1	1	2	2	1	2	1	1	benign
1143978	5	2	1	1	2	1	3	1	1	benign
1147044	3	1	1	1	2	2	7	1	1	benign
1147699	3	5	7	8	8	9	7	10	7	malignant
1147748	5	10	6	1	10	4	4	10	10	malignant
1148278	3	3	6	4	5	8	4	4	1	malignant
1148873	3	6	6	6	5	10	6	8	3	malignant
1152331	4	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1155546	2	1	1	2	1	1	2	1	1	benign
1156272	1	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1156948	3	1	1	2	2	1	1	1	1	benign
1157734	4	1	1	1	2	1	3	1	1	benign
1158247	1	1	1	1	2	1	2	1	1	benign
1160476	2	1	1	1	2	1	3	1	1	benign