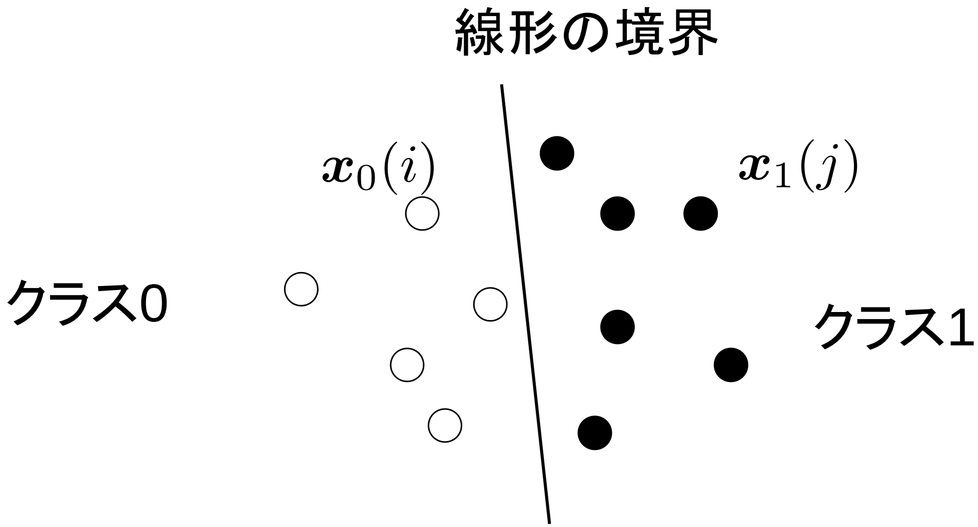
19. 判別分析

- 判別分析はデータをクラスに分類する
  - 二つのクラス, クラス0とクラス1があるとしよう
    - 例えば, クラス0は正常なクラス, クラス1は異常な（故障, 病気などの）クラスに対応する
  - 扱う問題は, 二つのクラスの間の最も適切な境界を見つけることである
  - データ
    - データベクトル $\boldsymbol{x}_0(1), \ldots, \boldsymbol{x}_0(n_0)$ はクラス0に属する
    - データベクトル $\boldsymbol{x}_1(1), \ldots, \boldsymbol{x}_1(n_1)$ はクラス1に属する

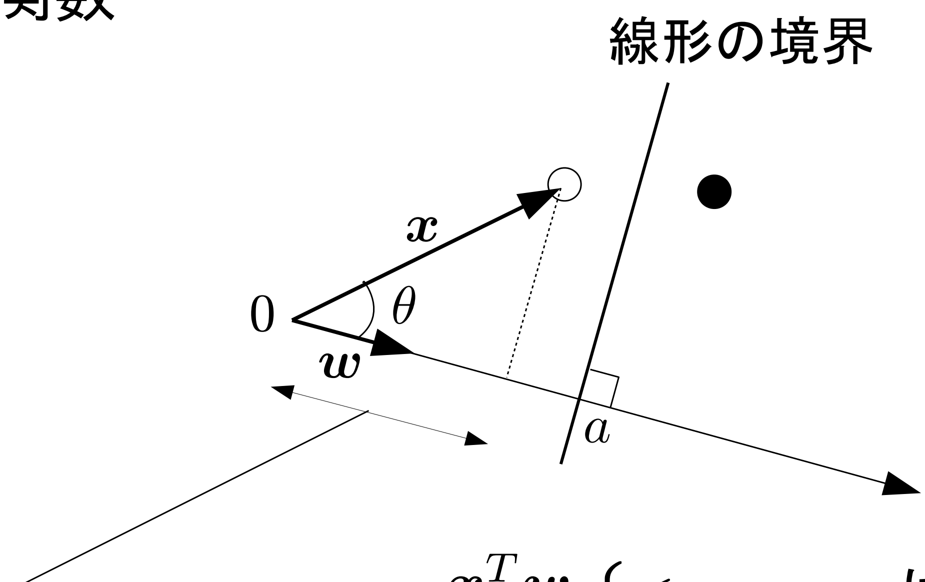
19. 判別分析

- 線形判別関数
  - クラス間の境界を定める線形関数
    境界は線形（直線, 平面, または超平面）になる



19. 判別分析

- 線形判別関数



$$長さ = \|\boldsymbol{x}\|\cos\theta = \frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{w}}{\|\boldsymbol{w}\|}\begin{cases} < a & \ldots\ \boldsymbol{x}\ \text{はクラス0に属する} \\ > a & \ldots\ \boldsymbol{x}\ \text{はクラス1に属する} \end{cases}$$

$$\Updownarrow$$

$$z = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}\begin{cases} < b & \ldots\ \boldsymbol{x}\ \text{はクラス0に属する} \\ > b & \ldots\ \boldsymbol{x}\ \text{はクラス1に属する} \end{cases}$$

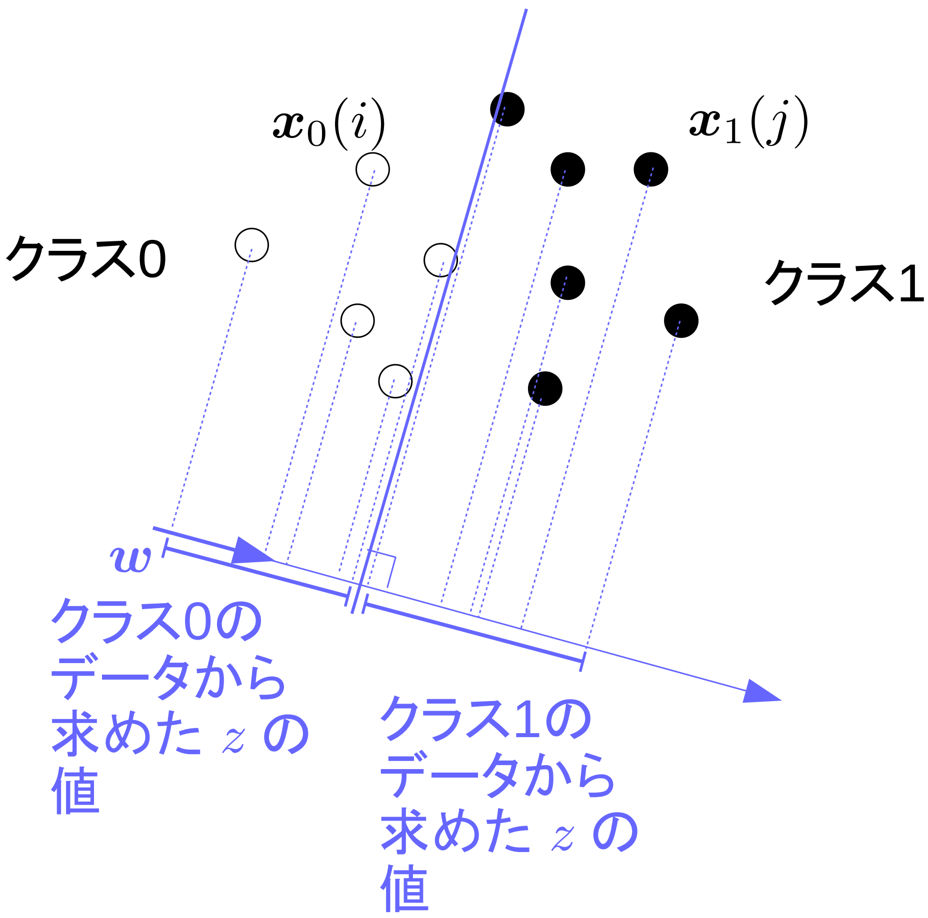
ここで $b = a\|\boldsymbol{w}\|$.

$\boldsymbol{w}$ の向きと2クラスの位置との相互関係に応じて，不等号の向きが逆になることもあり得ることに注意

最も適切な $\boldsymbol{w}$ を求めたい

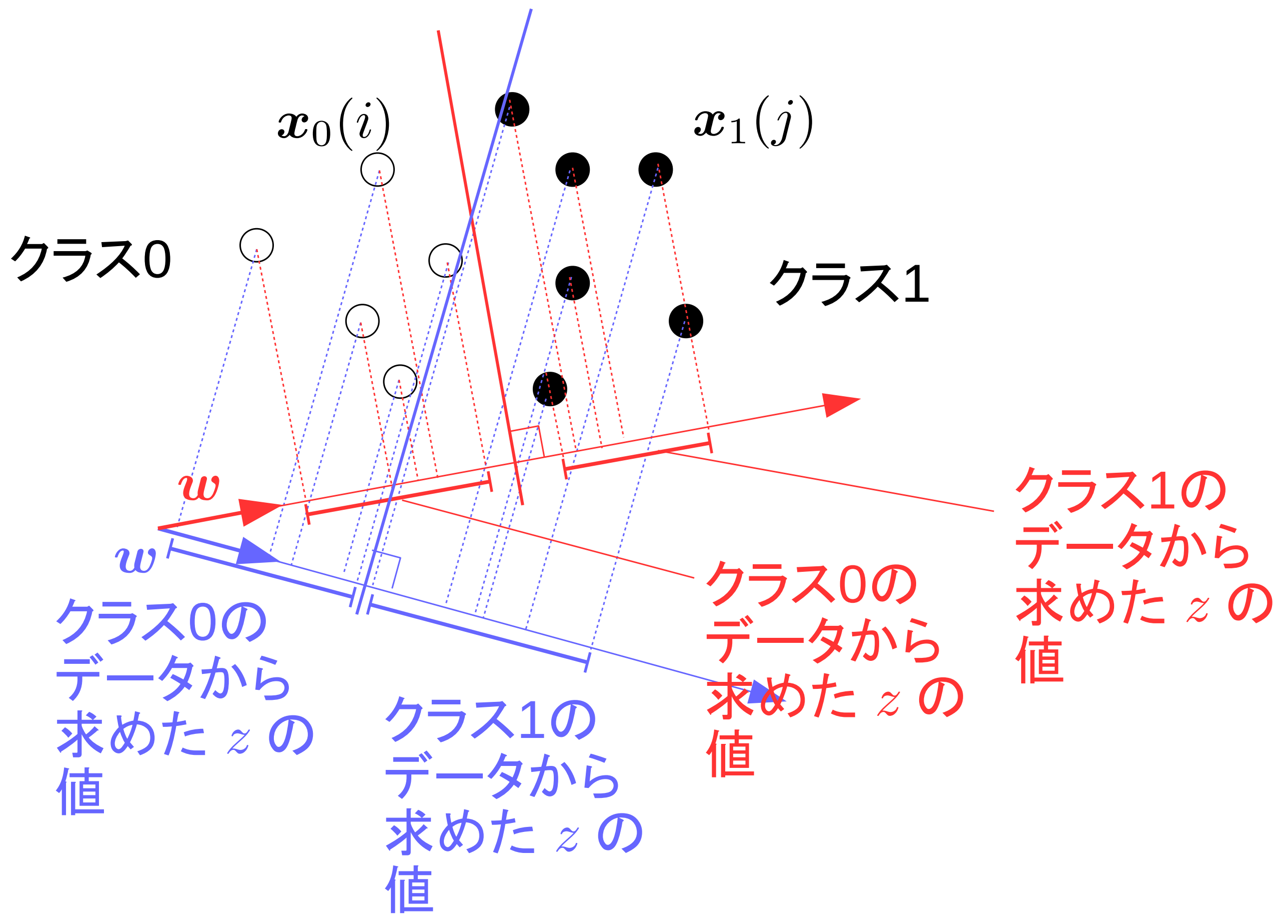
19. 判別分析

- 最も適切な $\boldsymbol{w}$



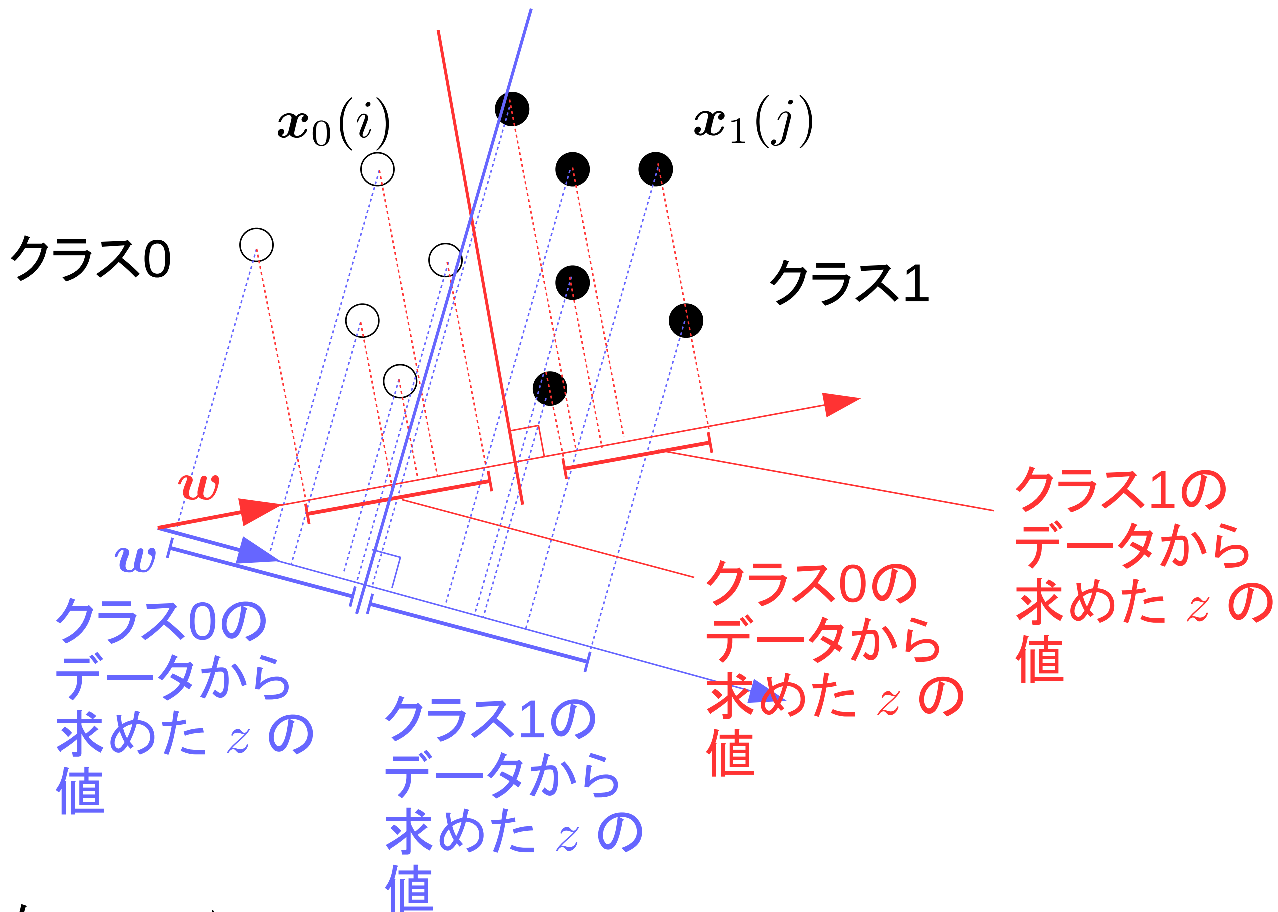
19. 判別分析

- 最も適切な $\boldsymbol{w}$



19. 判別分析

- 最も適切な $\boldsymbol{w}$



適切な $\boldsymbol{w}$ ⇨

異なるクラスの z の値は離れており，同じクラスの z の値は互いに近い

19. 判別分析

- z の値の近さ（あるいは散らばりの程度）の評価
  - $\boldsymbol{x}$ の平均
    - $\bar{\boldsymbol{x}}_0 = \dfrac{1}{n_0} \displaystyle\sum_{i=1}^{n_0} \boldsymbol{x}_0(i)$ ：クラス0の $\boldsymbol{x}$ の平均
    - $\bar{\boldsymbol{x}}_1 = \dfrac{1}{n_1} \displaystyle\sum_{j=1}^{n_1} \boldsymbol{x}_1(j)$ ：クラス1の $\boldsymbol{x}$ の平均

19. 判別分析

- z の平均
  - $z_0(i) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_0(i)$ と $z_1(j) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_1(j)$ を定義する
  - クラス0の z の平均
$$\bar{z}_0 = \frac{1}{n_0}\sum_{i=1}^{n_0} z_0(i) = \frac{1}{n_0}\sum_{i=1}^{n_0} \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_0(i) = \boldsymbol{w}^T \frac{1}{n_0}\sum_{i=1}^{n_0} \boldsymbol{x}_0(i) = \boldsymbol{w}^T \bar{\boldsymbol{x}}_0.$$
  - クラス1の z の平均
$$\bar{z}_1 = \frac{1}{n_1}\sum_{j=1}^{n_1} z_1(j) = \boldsymbol{w}^T \bar{\boldsymbol{x}}_1.$$
  - 両クラスのすべての z の平均
$$\bar{z} = \frac{1}{n_0 + n_1}\left(\sum_{i=1}^{n_0} z_0(i) + \sum_{j=1}^{n_1} z_1(j)\right) = \frac{n_o \bar{z}_0 + n_1 \bar{z}_1}{n_0 + n_1}.$$

19. 判別分析

- 偏差平方和（平均との差の2乗の和）

$$V = \underbrace{\sum_{i=1}^{n_0} (z_0(i) - \bar{z})^2}_{\substack{\| \\ \sum_{i=1}^{n_0} (z_0(i) - \bar{z}_0 + \bar{z}_0 - \bar{z})^2}} + \sum_{j=1}^{n_1} (z_1(j) - \bar{z})^2$$

$$\sum_{i=1}^{n_0} (z_0(i) - \bar{z}_0 + \bar{z}_0 - \bar{z})^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n_0} \left[(z_0(i) - \bar{z}_0)^2 + 2(z_0(i) - \bar{z}_0)(\bar{z}_0 - \bar{z}) + (\bar{z}_0 - \bar{z})^2 \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n_0} (z_0(i) - \bar{z}_0)^2 + 2(\bar{z}_0 - \bar{z}) \underbrace{\sum_{i=1}^{n_0} (z_0(i) - \bar{z}_0)}_{\substack{\| \\ 0}} + n_0(\bar{z}_0 - \bar{z})^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n_0} (z_0(i) - \bar{z}_0)^2 + n_0(\bar{z}_0 - \bar{z})^2$$

19. 判別分析

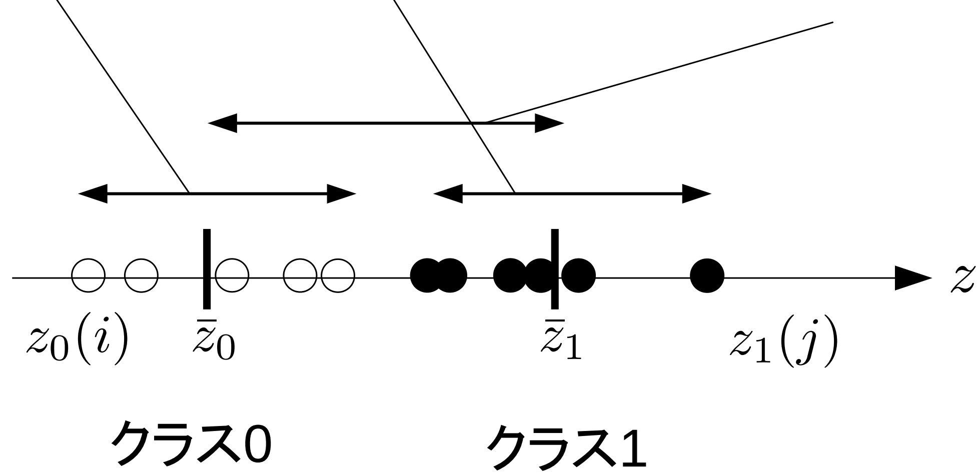
$$V=\sum_{i=1}^{n_0}\left(z_0(i)-\bar{z}_0\right)^2+n_0(\bar{z}_0-\bar{z})^2+\sum_{j=1}^{n_1}\left(z_1(j)-\bar{z}_1\right)^2+n_1(\bar{z}_1-\bar{z})^2$$

$$=\underbrace{\sum_{i=1}^{n_0}\left(z_0(i)-\bar{z}_0\right)^2}_{\text{クラス0内でのばらつき，変動}}+\underbrace{\sum_{j=1}^{n_1}\left(z_1(j)-\bar{z}_1\right)^2}_{\text{クラス1内でのばらつき，変動}}+\underbrace{n_0(\bar{z}_0-\bar{z})^2+n_1(\bar{z}_1-\bar{z})^2}_{\text{全データの平均の回りの，クラス0の平均とクラス1の平均の広がり}}$$

クラス0内での
ばらつき，変動

クラス1内での
ばらつき，変動

全データの平均の
回りの，クラス0の平均と
クラス1の平均の広がり



19. 判別分析

– クラス内の分散度

$$
\begin{aligned}
V_W &= \sum_{i=1}^{n_0} \left(z_0(i) - \bar{z}_0\right)^2 + \sum_{j=1}^{n_1} \left(z_1(j) - \bar{z}_1\right)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n_0} (\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_0(i) - \boldsymbol{w}^T \bar{\boldsymbol{x}}_0)^2 + \sum_{j=1}^{n_1} (\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_1(j) - \boldsymbol{w}^T \bar{\boldsymbol{x}}_1)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n_0} \boldsymbol{w}^T (\boldsymbol{x}_0(i) - \bar{\boldsymbol{x}}_0)(\boldsymbol{x}_0(i) - \bar{\boldsymbol{x}}_0)^T \boldsymbol{w} \\
&\qquad\qquad + \sum_{j=1}^{n_1} \boldsymbol{w}^T (\boldsymbol{x}_1(j) - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\boldsymbol{x}_1(j) - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T \boldsymbol{w} \\
&= \boldsymbol{w}^T W \boldsymbol{w},
\end{aligned}
$$

ただし

$$
W = \sum_{i=1}^{n_0} (\boldsymbol{x}_0(i) - \bar{\boldsymbol{x}}_0)(\boldsymbol{x}_0(i) - \bar{\boldsymbol{x}}_0)^T + \sum_{j=1}^{n_1} (\boldsymbol{x}_1(j) - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\boldsymbol{x}_1(j) - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T
$$

19. 判別分析

– クラス間の分散度

$$
\begin{aligned}
V_B &= n_0(\bar{z}_0 - \bar{z})^2 + n_1(\bar{z}_1 - \bar{z})^2 \\
&= n_0\left(\bar{z}_0 - \frac{n_0\bar{z}_0 + n_1\bar{z}_1}{n_0 + n_1}\right)^2 + n_1\left(\bar{z}_1 - \frac{n_0\bar{z}_0 + n_1\bar{z}_1}{n_0 + n_1}\right)^2 \\
&= n_0\left(\frac{n_1\bar{z}_0 - n_1\bar{z}_1}{n_0 + n_1}\right)^2 + n_1\left(\frac{n_0\bar{z}_1 - n_0\bar{z}_0}{n_0 + n_1}\right)^2 \\
&= \frac{n_0{n_1}^2 + n_1{n_0}^2}{(n_0 + n_1)^2}(\bar{z}_0 - \bar{z}_1)^2 = \frac{n_0 n_1}{n_0 + n_1}(\bar{z}_0 - \bar{z}_1)^2 \\
&= \frac{n_0 n_1}{n_0 + n_1}(\boldsymbol{w}^T\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \boldsymbol{w}^T\bar{\boldsymbol{x}}_1)^2 \\
&= \frac{n_0 n_1}{n_0 + n_1}\boldsymbol{w}^T(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T\boldsymbol{w} \\
&= \boldsymbol{w}^T B\boldsymbol{w},
\end{aligned}
$$

ただし

$$
B = \frac{n_0 n_1}{n_0 + n_1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T
$$

19. 判別分析

- 適切な $\boldsymbol{w}$
  - V_W が小さい, すなわち, 各クラスの z の値が固まっており,
    一方で, V_B が大きい, すなわち二つのクラスの z の値が十分に離れている
  - 最も適切な $\boldsymbol{w}$ は V_W の大きさを一定値, たとえば1, に保ちながら, V_B を最大化することによって得られる
    これは次のように定式化できる

$$\text{minimize } \boldsymbol{w}^T B \boldsymbol{w} \text{ subject to } \boldsymbol{w}^T W \boldsymbol{w} - 1 = 0.$$

  - ラグランジュ乗数（186ページ）を用いると, 最も適切な $\boldsymbol{w}$ の条件が次のように得られる

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}^T B \boldsymbol{w}) - v \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}^T W \boldsymbol{w} - 1) = \boldsymbol{0}.$$

（186ページに記載されていた条件は $\nabla f(\boldsymbol{x}_0) + \sum_{i=1}^{m} v_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}_0) = 0$ であった）

19. 判別分析

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}^T B \boldsymbol{w}) - v \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}^T W \boldsymbol{w} - 1) = \boldsymbol{0}$$

$$B\boldsymbol{w} + B^T\boldsymbol{w} - v \cdot (W\boldsymbol{w} + W^T\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{0}$$

ここで

$$B^T = \left\{ \frac{n_0 n_1}{n_0 + n_1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T \right\}^T = \frac{n_0 n_1}{n_0 + n_1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T = B,$$

$$W^T = \left\{ \sum_{i=1}^{n_0}(\boldsymbol{x}_0(i) - \bar{\boldsymbol{x}}_0)(\boldsymbol{x}_0(i) - \bar{\boldsymbol{x}}_0)^T + \sum_{j=1}^{n_1}(\boldsymbol{x}_1(j) - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\boldsymbol{x}_1(j) - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T \right\}^T = W,$$

であるから

$$2B\boldsymbol{w} - 2vW\boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}$$

$$B\boldsymbol{w} = vW\boldsymbol{w}$$

n_0 と n_1 が十分に大きいとき，行列 W は逆行列 W^{-1} をもつことに留意

19. 判別分析

$B = \dfrac{n_0 n_1}{n_0+n_1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T$ を $B\boldsymbol{w} = vW\boldsymbol{w}$ に代入すると次式を得る

$$\underbrace{\frac{n_0 n_1}{n_0+n_1}}_{\text{スカラー}}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)\underbrace{(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T\boldsymbol{w}}_{\text{スカラー}} = \underbrace{v}_{\text{スカラー}}W\boldsymbol{w}.$$

したがって，ベクトル $\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1$ とベクトル $W\boldsymbol{w}$ は同じ方向を持っている

あるいは，ベクトル $\boldsymbol{w}$ とベクトル $W^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)$ が同じ方向を持っているとも言える

$\boldsymbol{w}$ の方向のみが問題である（その大きさは問題ではない）ので，次のようにおくことにする

$$\boldsymbol{w} = W^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1).$$

これによって，次を定義する

$$z = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} = (\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T W^{-1}\boldsymbol{x}.$$

19. 判別分析

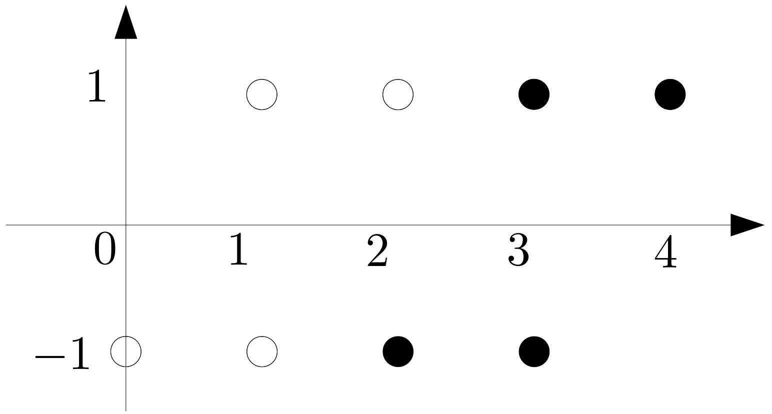
- b の値
  - クラスは $z = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} > b$ であるか否かによって判定される

    b の値は，$\bar{\boldsymbol{x}}_0$ と $\bar{\boldsymbol{x}}_1$ の中間点に対応するように定める

$$
\begin{aligned}
b &= \boldsymbol{w}^T \frac{\bar{\boldsymbol{x}}_0 + \bar{\boldsymbol{x}}_1}{2} = \{W^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)\}^T \frac{\bar{\boldsymbol{x}}_0 + \bar{\boldsymbol{x}}_1}{2} \\
&= \frac{1}{2}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T W^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 + \bar{\boldsymbol{x}}_1)
\end{aligned}
$$

19. 判別分析

- 例
  - データ



$$\boldsymbol{x}_0(1) = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x}_0(2) = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{x}_0(3) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x}_0(4) = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}_1(1) = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x}_1(2) = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x}_1(3) = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x}_1(4) = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

  - 解

$$\bar{\boldsymbol{x}}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \bar{\boldsymbol{x}}_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

19. 判別分析

$$\boldsymbol{x}_0(1)=\begin{bmatrix}0\\-1\end{bmatrix},\boldsymbol{x}_0(2)=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix},\ \boldsymbol{x}_0(3)=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix},\boldsymbol{x}_0(4)=\begin{bmatrix}2\\1\end{bmatrix}\qquad \bar{\boldsymbol{x}}_0=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{x}_1(1)=\begin{bmatrix}2\\-1\end{bmatrix},\boldsymbol{x}_1(2)=\begin{bmatrix}3\\-1\end{bmatrix},\boldsymbol{x}_1(3)=\begin{bmatrix}3\\1\end{bmatrix},\boldsymbol{x}_1(4)=\begin{bmatrix}4\\1\end{bmatrix}\qquad \bar{\boldsymbol{x}}_1=\begin{bmatrix}3\\0\end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}W&=\sum_{i=1}^{4}(\boldsymbol{x}_0(i)-\bar{\boldsymbol{x}}_0)(\boldsymbol{x}_0(i)-\bar{\boldsymbol{x}}_0)^T+\sum_{j=1}^{4}(\boldsymbol{x}_1(j)-\bar{\boldsymbol{x}}_1)(\boldsymbol{x}_1(j)-\bar{\boldsymbol{x}}_1)^T\\
&=\begin{bmatrix}-1\\-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1&-1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&-1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1\end{bmatrix}\\
&\quad+\begin{bmatrix}-1\\-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1&-1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&-1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1\end{bmatrix}\\
&=2\left(\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}\right)=\begin{bmatrix}4&4\\4&8\end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$W^{-1}=\frac{1}{32-16}\begin{bmatrix}8&-4\\-4&4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.5&-0.25\\-0.25&0.25\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{w}=W^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0-\bar{\boldsymbol{x}}_1)=\begin{bmatrix}0.5&-0.25\\-0.25&0.25\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-2\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1\\0.5\end{bmatrix}$$

19. 判別分析

$$\boldsymbol{b} = \frac{1}{2}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 - \bar{\boldsymbol{x}}_1)^T W^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}_0 + \bar{\boldsymbol{x}}_1) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}-2 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5 & -0.25 \\ -0.25 & 0.25\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 \\ 0\end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix}-1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 \\ -1\end{bmatrix} = -2$$