Analiza dyskryminacyjna: FLD, LDA, QDA

Dr inż. Urszula Libal

Analiza dyskryminacyjna

SPIS TREŚCI:

1. Liniowe funkcje dyskryminacyjne

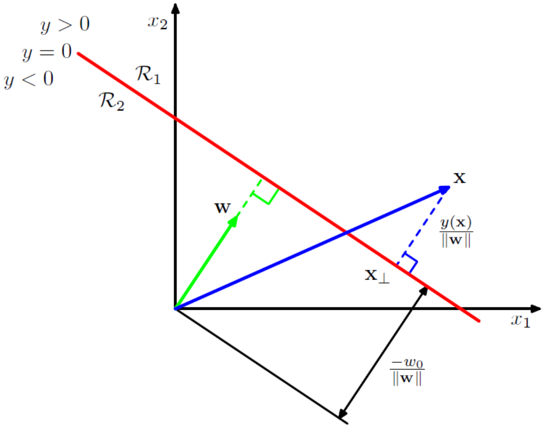
Liniowe funkcje dyskryminacyjne mają ogólną postać

$$\delta(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 = \sum_{i=1}^{D} w_i x_i + w_0. \tag{1}$$

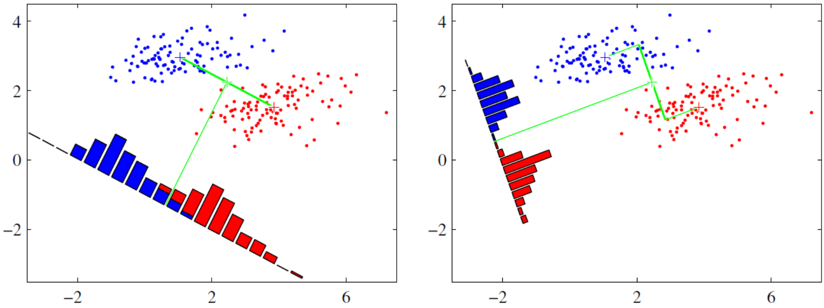
Do liniowych dyskryminatorów, czyli klasyfikatorów opartych o liniowe funkcje dyskryminacyjne, zaliczamy

— FLD - liniowy dyskryminator Fishera,

— LDA - liniową analizę dyskryminacyjną.



Rysunek 1. Prosta rozdzielająca (na czerwono) jest prostopadła do wektora $\mathbf{w}$ (na zielono) wyznaczającego kierunek rzutu wektora $\mathbf{x}$.



a) b)

Rysunek 2. (a) Rzut na prostą łączącą średnie w klasach. (b) Rzut na prostą o kierunku wyznaczonym przez kryterium Fishera poprawia separację klas.

2. Liniowy dyskryminator Fishera (FLD)

Liniowy dyskryminator Fishera (ang. *Fisher's Linear Discriminant*, FLD) zakłada, że μ_k to średnie, a Σ_k to macierze kowariancji w klasach $k = 1, 2$.

Dokonujemy liniowej transformacji, dzięki której uzyskamy najlepsze rozdzielenie klas. W celu separacji klas rzutujemy wektory cech $\mathbf{x}$ na hiperpłaszczyznę wyznaczoną przez kierunek $\mathbf{w}$. Aby to osiągnąć maksymalizujemy klasyczne kryterium Fishera [5]

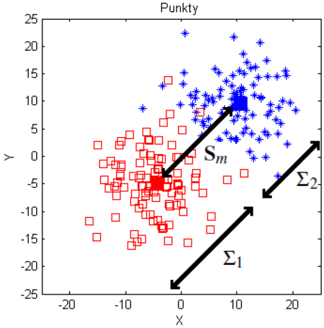
$$F(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{S}_m \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T \mathbf{S}_w \mathbf{w}}, \tag{2}$$

gdzie $\mathbf{S}_m$ to macierz rozproszeń międzyklasowych

$$\mathbf{S}_m = (\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)^T, \tag{3}$$

a $\mathbf{S}_w$ to macierz rozproszeń wewnątrzklasowych

$$\mathbf{S}_w = p_1 \Sigma_1 + p_2 \Sigma_2. \tag{4}$$



Rysunek 3. Rozrzut międzyklasowy oraz wewnątrzklasowy.

Wyliczamy pochodną kryterium F i przyrównujemy do zera

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} F(\mathbf{w}) = 0. \tag{5}$$

Optymalny kierunek dyskryminacyjny to

$$\mathbf{w} = \mathbf{S}_w^{-1} \left(\mu_1 - \mu_2\right). \tag{6}$$

Liniowy dyskryminator Fishera ma postać

$$\Psi_{FLD}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } \mathbf{w}^T \mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases} \tag{7}$$

co po podstawieniu (6) i uwzględnieniu, że $\mathbf{S}_w$ jest macierzą symetryczną, daje

$$\Psi_{FLD}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } (\mu_1 - \mu_2)^T \mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases} \tag{8}$$

Próg w_{gr} wyznaczamy minimalizując średnie prawdopodobieństwo błędnej klasyfikacji - jest to punkt graniczny (por. rys. 1 z wykładu nr 1).

Niech $f_1^{\perp}$ i $f_2^{\perp}$ oznaczają jednowymiarowe funkcje gęstości, które są rzutami D-wymiarowych gęstości f_1 i f_2 w klasach na kierunek $\mathbf{w}$ (por. histogramy na rys. (b)).

Zrzutowane rozkłady w klasach $k = 1, 2$ charakteryzują się średnimi

$$m_k = \mathbf{w}^T \mu_k \tag{9}$$

oraz wariancjami

$$\sigma_k^2 = \mathbf{w}^T \Sigma_k \mathbf{w}. \tag{10}$$

Szukamy w_{gr}, które spełnia

$$p_1 f_1^{\perp}(w_{gr}) = p_2 f_2^{\perp}(w_{gr}). \tag{11}$$

Ogólnie można zapisać, że FLD klasyfikuje obraz do klasy $j \in \mathscr{M}$,

$$\Psi_{FLD}(\mathbf{x}) = j, \text{ gdy } |\mathbf{w}^T \mathbf{x} - \mathbf{w}^T \mu_j| < |\mathbf{w}^T \mathbf{x} - \mathbf{w}^T \mu_k|, \tag{12}$$

dla każdej klasy $k \in \mathscr{M}$ różnej od j.

3. Liniowa analiza dyskryminacyjna (LDA)

Liniowa analiza dyskryminacyjna (ang. *Linear Discriminant Analysis*, LDA) zakłada, że funkcje gęstości prawdopodobieństwa w klasach $k = 1, 2$ mają D-wymiarowe rozkłady normalne $\mathscr{N}(\mu_k, \Sigma)$ o równych macierzach kowariancji w klasach.

Można więc powiedzieć, że LDA jest równoważne FLD przy dodatkowych założeniach, że rozkłady w klasach są gaussowskie i macierze kowariancji w klasach są równe

$$\Sigma = \Sigma_1 = \Sigma_2.$$

Liniowa funkcja dyskryminacyjna ma ponownie postać

$$\delta(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 = \sum_{i=1}^{D} w_i x_i + w_0, \tag{13}$$

a klasyfikator

$$\Psi_{LDA}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } \mathbf{w}^T\mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases} \tag{14}$$

gdzie optymalny kierunek dyskryminacyjny to

$$\mathbf{w} = \Sigma^{-1}(\mu_1 - \mu_2). \tag{15}$$

Z warunku

$$p_1 f_1^{\perp}(w_{gr}) = p_2 f_2^{\perp}(w_{gr}) \tag{16}$$

wyznaczymy w_{gr}.

W przypadku dwóch klas rozpatrujemy rozkłady $\mathcal{N}(\mu_1, \Sigma_1)$ oraz $\mathcal{N}(\mu_2, \Sigma_2)$, co po uwzględnieniu (9) i (10) prowadzi do warunku

$$p_1 \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} \exp\left\{(w_{gr} - m_1)^2 / \left(2\sigma_1^2\right)\right\} = p_2 \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} \exp\left\{(w_{gr} - m_2)^2 / \left(2\sigma_2^2\right)\right\}. \tag{17}$$

Po przekształceniu otrzymujemy równanie kwadratowe

$$(\sigma_1^2 - \sigma_2^2)w_{gr}^2 + (\sigma_1^2 m_2 - \sigma_2^2 m_1)w_{gr} + m_1^2\sigma_2^2 - m_2^2\sigma_1^2 - 2\sigma_1^2\sigma_2^2 \ln\frac{p_1\sigma_1}{p_2\sigma_2} = 0. \qquad (18)$$

Przypadki szczególne:

(a) Jeżeli $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2$, to

$$w_{gr} = \frac{m_1 + m_2}{2} + \frac{\sigma^2}{m_2 - m_1}\ln\frac{p_1}{p_2}. \qquad (19)$$

(b) Jeżeli $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2$ i $p_1 = p_2$, to

$$w_{gr} = \frac{m_1 + m_2}{2}. \qquad (20)$$

(c) Jeżeli $\sigma_1 \neq \sigma_2$, to istnieją dwa pierwiastki równania

$$w_{gr\,1,2} = \frac{\sigma_2^2 m_1 - \sigma_1^2 m_2 \pm \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{(m_2 - m_1)^2 + 2\left(\sigma_2^2 - \sigma_1^2\right) \ln \frac{p_1 \sigma_1}{p_2 \sigma_2}}}{\sigma_2^2 - \sigma_1^2}. \tag{21}$$

(d) Jeżeli $\sigma_1 \neq \sigma_2$, i $m = m_1 = m_2$, to

$$w_{gr\,1,2} = m \pm \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{\frac{2}{\sigma_2^2 - \sigma_1^2} \ln \frac{p_1 \sigma_1}{p_2 \sigma_2}}. \tag{22}$$

Uwaga 1. Czasami w literaturze reguła FLD i LDA są ze sobą utożsamiane.

Uwaga 2. Z równości $\Sigma = \Sigma_1 = \Sigma_2$wynika $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2 = \mathbf{w}^T \Sigma \mathbf{w}$,

dlatego przypadki (a) i (b) odnoszą się do metody LDA.

Uwaga 3. Natomiast przypadki (c) i (d) zachodzą dla $\sigma_1 \neq \sigma_2$,

co może zajść jedynie, gdy $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$. Dopuszczenie różnych macierzy kowariancji

przy założeniu normalności rozkładów w klasach nazywane jest metodą QDA.

4. Kwadratowa analiza dyskryminacyjna (QDA)

W przypadku, gdy pominiemy założenie o równości macierzy kowariancji w gaussowskich rozkładach $\mathcal{N}(\mu_1, \Sigma_1)$ oraz $\mathcal{N}(\mu_2, \Sigma_2)$, otrzymamy klasyfikator zwany kwadratową analizą dyskryminacyjną (ang. *Quadratic Discriminant Analysis*, QDA). Warunek

$$p_1 f_1^{\perp}(w_{gr}) = p_2 f_2^{\perp}(w_{gr}) \tag{23}$$

pozwala wyznaczyć w_{gr} - patrz wzory (21) i (22). Forma reguły klasyfikacyjnej pozostaje bez zmian, tzn.

$$\Psi_{QDA}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } \mathbf{w}^T \mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases} \tag{24}$$

W przypadku punktów na płaszczyźnie krzywa rozdzielająca klasy przyjmuje postać okręgu, elipsy, paraboli lub hiperboli.

5. Uogólnione liniowe funkcje dyskryminacyjne

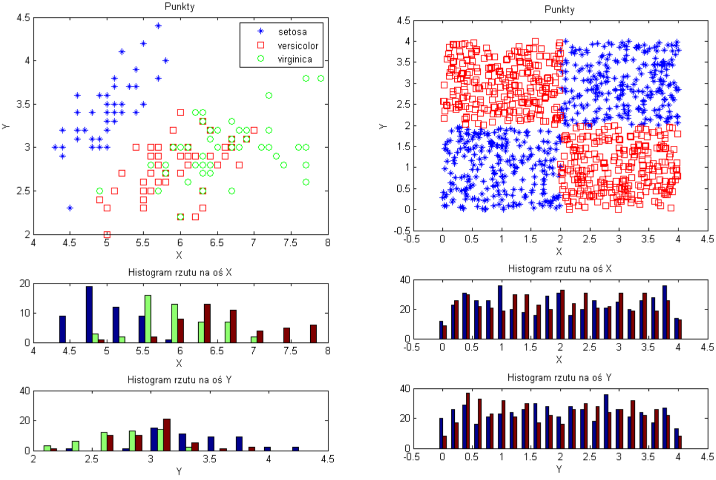
Uogólnione liniowe funkcje dyskryminacyjne (ang. *Generalised Linear Discriminant Functions*, GLDFs), określane także jako *maszyny* ϕ, są to funkcje dyskryminacyjne postaci

$$\delta(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi + w_0 \tag{25}$$

gdzie $\phi = (\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \ldots, \phi_d(\mathbf{x}))^T$ jest funkcja wektorową $\mathbf{x}$.

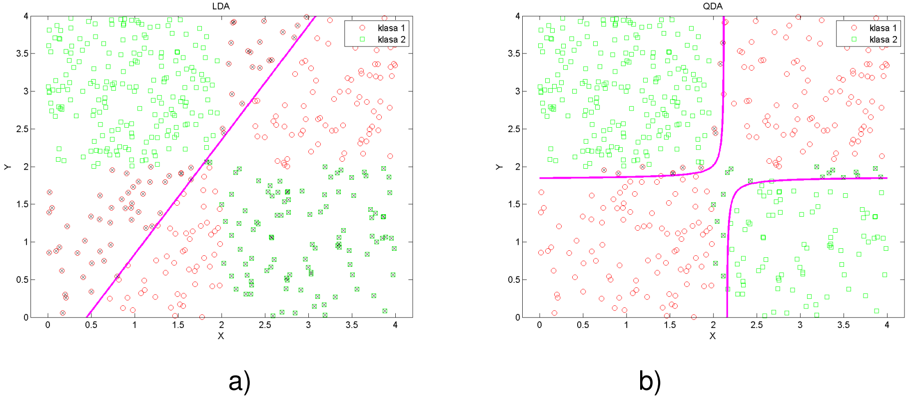
Funkcja dyskryminująca	Matematyczna forma $\phi_i(\mathbf{x})$
liniowa	$\phi_i(\mathbf{x}) = x_i$
kwadratowa	$\phi_i(\mathbf{x}) = x_{k_1}^{l_1} x_{k_2}^{l_2}$, gdzie $l_1, l_2 = 0$ lub 1
wielomianowa n-tego rzędu	$\phi_i(\mathbf{x}) = x_{k_1}^{l_1} \ldots x_{k_n}^{l_n}$, gdzie $l_1, \ldots, l_n = 0$ lub 1
radialna funkcja bazowa	$\phi_i(\mathbf{x}) = \phi(\lvert \mathbf{x} - \mathbf{v}_i \rvert)$
perceptron wielowarstwowy	$\phi_i(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^T \mathbf{v}_i + v_{i0})$, gdzie f to funkcja logistyczna $f(z) = 1/(1 + \exp(-z))$

7. Przykłady i dyskusja założeń

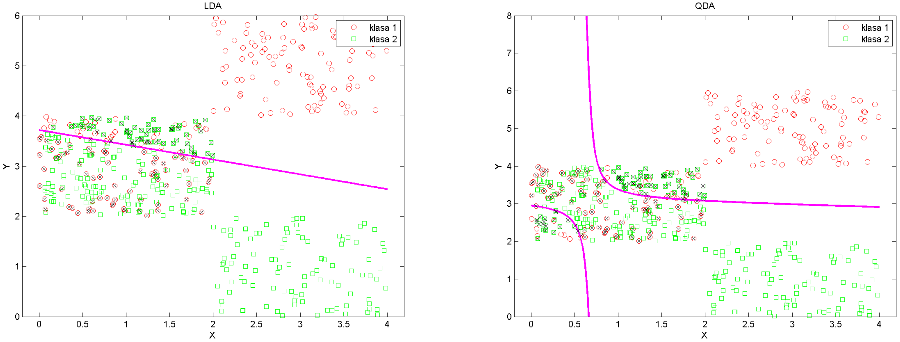


a) b)

Rysunek 4. Rozkłady brzegowe: (a) dla danych Iris, (b) rozkłady jednostajne.

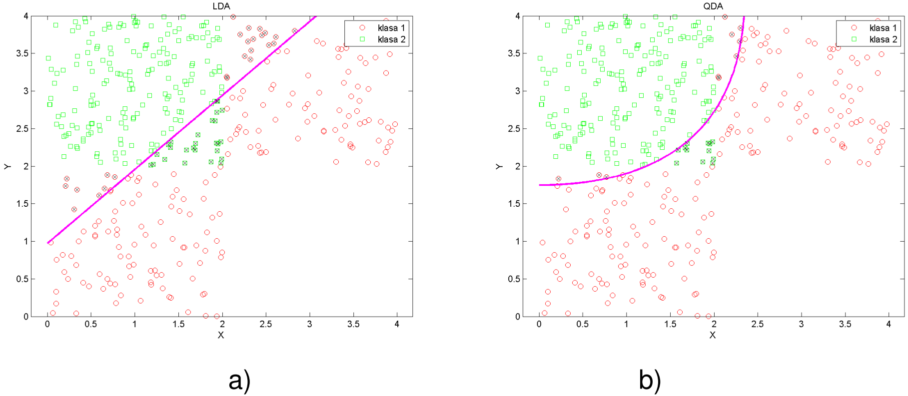


Rysunek 5. (a) Prosta rozdzielająca klasy za pomocą LDA.
(b) Krzywe rozdzielające klasy za pomocą QDA.



a) b)

Rysunek 6. (a) Prosta rozdzielająca klasy za pomocą LDA.
(b) Krzywe rozdzielające klasy za pomocą QDA.



Rysunek 7. (a) Prosta rozdzielająca klasy za pomocą LDA.
(b) Krzywe rozdzielające klasy za pomocą QDA.