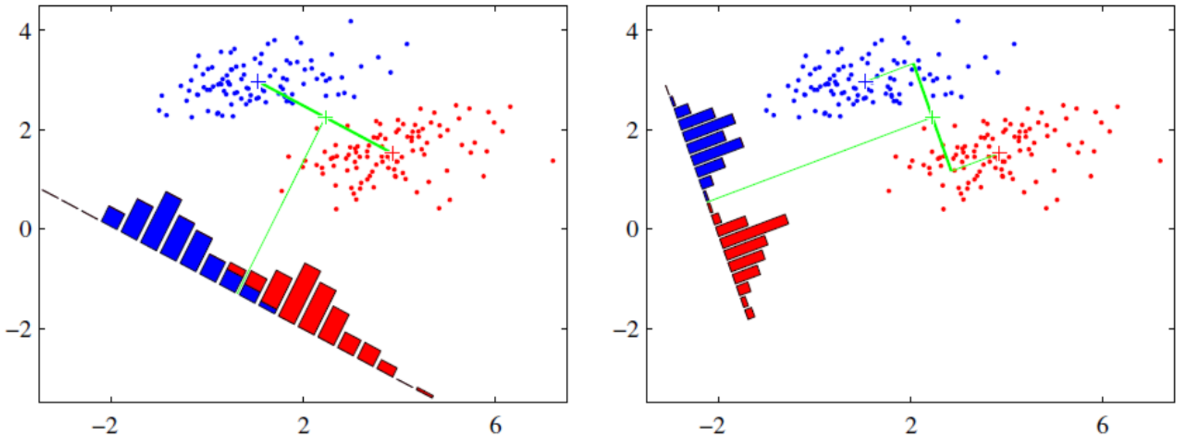
线性判别分析(LDA)

2021-10-24

1. 基本原理

降维原理：组间方差大、组内方差小。



2. 降维步骤

以二类数据为例对降维过程进行说明。首先，定义如下变量：

1. 数据集：$\mathbf{x}^{(i)}=[x_1^{(i)},x_2^{(i)},\cdots,x_d^{(i)}]^{\mathrm{T}}$，共$N$个样本
2. 类别：$c=\{c_1,c_2\}$，其中，c_1样本个数为N_1，c_2样本个数为N_2，$N=N_1+N_2$

原始数据为d维，在"组间方差大、组内方差小"的原则下，先降1维；

1. 投影

   使用向量$\mathbf{w}=[w_1,w_2,\cdots,w_d]^{\mathrm{T}}$对数据进行投影，并得到投影后的结果：

$$y=\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \tag{18}$$

2. 计算原始数据类内均值

$$\boldsymbol{\mu}_i = \frac{1}{N_i}\sum_{\mathbf{x}\in c_i}\mathbf{x} \tag{19}$$

其中，$i\in\{1,2\}$，$\boldsymbol{\mu}_i$的维度是$d\times 1$

3. 计算投影后的样本点均值

$$\tilde{\mu}_i = \frac{1}{N_i}\sum_{y\in c_i} y = \frac{1}{N_i}\sum_{y\in c_i}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}x = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_i \tag{20}$$

由此可知，投影后的均值是样本中心点的投影。

4. 定义投影后数据的方差：度量组内差异

$$\begin{aligned}\tilde{s}_i^2 &= \sum_{y\in c_i}(y-\tilde{\mu}_i)^2 \\ &= \sum_{\mathbf{x}\in c_i}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}-\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_i\right)^2 \\ &= \sum_{\mathbf{x}\in c_i}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^{\mathrm{T}}\mathbf{w}\end{aligned} \tag{21}$$

$\tilde{s}_i^2$的几何意义是反映了样本点的密集程度，值越大，投影后数据越分散，反之，越集中。

为方便后续计算，定义中间部分为：

$$S_i = \sum_{\mathbf{x}\in c_i}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^{\mathrm{T}} \\ \text{注：}S_i\text{的维度是}d\times d \tag{22}$$

这也被称为散列矩阵（scatter matrices）。

定义S_W（**Within**-class scatter matrix）为：

$$S_W = S_1 + S_2 \\ \text{注：}S_W\text{的维度是}d\times d \tag{23}$$

5. 定义投影后组间均值差异：度量组间差异

$$\begin{aligned}A &= (\tilde{\mu}_1-\tilde{\mu}_2)^2 \\ &= (\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1-\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_2)(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1-\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}} \\ &= \mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}}\mathbf{w}\end{aligned} \tag{24}$$

定义S_B称为（**Between**-class scatter matrix）：

$$S_B = (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}} \\ \text{注：}S_B\text{的维度是}d\times d \tag{25}$$

6. 定义最终度量公式

$$\begin{aligned}J(w) &= \frac{(\tilde{\mu}_1-\tilde{\mu}_2)^2}{\tilde{s}_1^2+\tilde{s}_2^2} \\ &= \frac{\mathbf{w}^{\mathbf{T}}S_B\mathbf{w}}{\mathbf{w}^{\mathbf{T}}S_W\mathbf{w}}\end{aligned} \tag{26}$$

7. 定义优化目标

$$\begin{aligned}&\max\ J(\mathbf{w}) \\ &s.t.\ \left\|\mathbf{w}^{\mathbf{T}}S_W\mathbf{w}\right\| = 1\end{aligned} \tag{27}$$

增加约束$\|\mathbf{w}^{\mathbf{T}}S_W\mathbf{w}\| = 1$的原因：因为不做归一化的话，$\mathbf{w}$扩大任何倍，公式都成立，因此无法确定$\mathbf{w}$。

8. 定义拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(\mathbf{w},\lambda) = \mathbf{w}^{\mathbf{T}}S_B\mathbf{w} - \lambda\left(\mathbf{w}^{\mathbf{T}}S_W\mathbf{w} - 1\right) \tag{28}$$

求导得：

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbf{w}} &= S_B\mathbf{w} + S_B^T\mathbf{w} - \lambda S_W\mathbf{w} - \lambda S_W^T\mathbf{w} \\ &= 2S_B\mathbf{w} - 2\lambda S_W\mathbf{w} \quad (\text{因为}S_B\text{和}S_W\text{为对称矩阵}) \\ &= 0\end{aligned} \tag{29}$$

解得：

$$S_B\mathbf{w} = \lambda S_W\mathbf{w}S_W^{-1}S_B\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w} \tag{30}$$

可见，$\mathbf{w}$是矩阵$S_W^{-1}S_B$的特征向量，当前可以取最大特征值对应的特征向量。

因为：

$$S_B\mathbf{w} = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}}\mathbf{w} \tag{31}$$

而$(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}}\mathbf{w}$为一个数值，假设$(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}}\mathbf{w} = \alpha$，那么总可以对$\mathbf{w}$进行缩放，使得$\alpha = \lambda$，即：

$$S_B\mathbf{w} = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathbf{T}}\mathbf{w} = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)\lambda \tag{32}$$

那么：

$$S_W^{-1}S_B\mathbf{w} = S_W^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)\lambda = \lambda\mathbf{w} \tag{33}$$

所以：

$$\mathbf{w} = S_W^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \tag{34}$$

至此，只需要求出原始样本的均值和方差就可以求出最佳的方向$\mathbf{w}$。

3. 参考链接

1. 线性判别分析LDA原理总结 - 刘建平Pinard - 博客园 (cnblogs.com)
2. 为什么线性判别分析的降维维数不能大于类别数减一？ - 知乎 (zhihu.com)
3. Dimensionality Reduction——LDA线性判别分析原理篇 - 知乎 (zhihu.com)
4. Linear Discriminant Analysis (sebastianraschka.com)