

Abstract

本期我们学习线性分类-软输出-概率生成模型的一种算法：高斯判别分析(GDA)。

Idea

在前一期我们学习的逻辑回归算法属于概率判别模型，判别模型与生成模型的区别是：

- 判别模型是直接对概率 $p(y|x)$ 进行建模，求出其真实的概率值
- 生成模型是则是对 $p(y|x)$ 使用贝叶斯定理，转化为 $\frac{p(x|y)p(y)}{p(x)}$ ，因为 $p(x)$ 与 y 无关，因此可以忽略，最终得到：

$$p(y|x) \propto p(x|y)p(y) = p(x; y) \tag{15}$$

因此我们关注的是 (x, y) 这个联合分布，最后预测时只需比较 $p(y = 0|x), p(y = 1|x)$ 哪个大即可。

Algorithm

首先，我们对模型做出一些假设：

$$\begin{aligned} y \in \{0, 1\} \quad y &\sim \text{Bernuolli}(\phi) \quad p(y) = \phi^y(1 - \phi)^{1-y} \\ \begin{cases} x|y = 1 & \sim N(\mu_1, \Sigma) \\ x|y = 0 & \sim N(\mu_2, \Sigma) \end{cases} \implies p(x|y) &= N(\mu_1, \Sigma)^y N(\mu_2, \Sigma)^{1-y} \end{aligned}$$

因此模型的所有参数 θ 为：

$$\theta = (\phi, \mu_1, \mu_2, \Sigma) \tag{16}$$

现在给出模型的损失函数：

$$\begin{aligned} J(\theta) &= \log(p(Y|X)) = \log(\prod_{i=1}^n p(y_i|x_i)) \\ &= \sum_{i=1}^n \log(p(y_i|x_i)) \end{aligned} \tag{17}$$

因此：

$$\begin{aligned} \hat{\theta} &= \operatorname{argmax}(J(\theta)) = \operatorname{argmax}(\sum_{i=1}^n \log(\frac{p(x_i|y_i)p(y_i)}{p(x_i)})) \\ &= \operatorname{argmax}(\sum_{i=1}^n \log(p(x_i|y_i)p(y_i))) \\ &= \operatorname{argmax}(\sum_{i=1}^n y_i \log(N(\mu_1, \Sigma)) + (1 - y_i) \log(N(\mu_2, \Sigma)) + \log(\phi^{y_i}(1 - \phi)^{1-y_i})) \end{aligned} \tag{18}$$

ϕ 的求解

对 ϕ 求偏导：

$$\sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\phi} + \frac{y_i - 1}{1 - \phi} = 0 \implies \phi = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{N} = \frac{N_1}{N} \tag{19}$$

其中， N, N_1, N_2 分别为总样本的个数，正例与反例的个数

μ 的求解

然后对 μ_1 进行求解：

$$\begin{aligned}
\hat{\mu}_1 &= \underset{\mu_1}{argmax} \sum_{i=1}^N y_i \log N(\mu_1, \Sigma) \\
&= \underset{\mu_1}{argmax} \sum_{i=1}^N y_i \log \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}} |\Sigma|^{\frac{1}{2}}} \exp(-\frac{1}{2}(x_i - \mu_1)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_1)) \right) \\
&= \underset{\mu_1}{argmin} \sum_{i=1}^N y_i (x_i - \mu_1)^T \Sigma^{-1} (x_i - \mu_1)
\end{aligned} \tag{20}$$

上述推导中用到了多元高斯分布的概率密度函数：

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}} |\Sigma|^{\frac{1}{2}}} \exp(-\frac{1}{2}(x_i - \mu_1)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_1)) \tag{21}$$

其中， p 为随机变量的个数，读者可以根据一元高斯分布的概率密度函数进行连乘，并辅以线代的知识，就可以推出多元的公式。

下面对式子进行微分：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Delta}{\partial \mu_1} &= \sum_{i=1}^N -2y_i (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_1) = 0 \\
\implies \mu_1 &= \frac{\sum_{i=1}^N y_i x_i}{\sum_{i=1}^N y_i} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i x_i}{N_1}
\end{aligned} \tag{22}$$

而由于正例与反例是对称的，因此：

$$\mu_2 = \frac{\sum_{i=1}^N (1 - y_i) x_i}{N_2} \tag{23}$$

Σ 的求解

我们观察式子的前两项：

$$\hat{\theta} = \underset{\Sigma}{argmax} \left(\sum_{i=1}^n y_i \log(N(\mu_1, \Sigma)) + (1 - y_i) \log(N(\mu_2, \Sigma)) + \log(\phi^{y_i} (1 - \phi)^{1-y_i}) \right) \tag{24}$$

发现，当 $y = 0$ 时，第一项都为0；当 $y = 1$ 时，第二项都为0。

因此式子可以更为：

$$\begin{aligned}
\hat{\theta} &= \underset{\Sigma}{argmax} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in C_1} \log(N(\mu_1, \Sigma)) + \sum_{(x_i, y_i) \in C_2} \log(N(\mu_2, \Sigma)) \right) \\
&= \underset{\Sigma}{argmax} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in C_1} -\frac{1}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} (x_i - \mu_1)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_1) + \sum_{(x_i, y_i) \in C_2} -\frac{1}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} (x_i - \mu_2)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_2) \right)
\end{aligned} \tag{25}$$

我们观察 $(x_i - \mu)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu)$ 的形状： $(1, p) * (p, p) * (p, 1) = (1, 1)$ ，因此可以对它加上迹(tr)的符号，将其看作一个矩阵，而在迹的内部，矩阵的顺序是可以随意交换的：

$$\begin{aligned}
\hat{\theta} &= \underset{\Sigma}{argmax} \left(-\frac{N}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} \text{tr} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in C_1} (x_i - \mu_1)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_1) \right) - \frac{1}{2} \text{tr} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in C_2} (x_i - \mu_2)^T (\Sigma)^{-1} (x_i - \mu_2) \right) \right) \\
&= \underset{\Sigma}{argmax} \left(-\frac{N}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} \text{tr} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in C_1} (x_i - \mu_1)^T (x_i - \mu_1) (\Sigma)^{-1} \right) - \frac{1}{2} \text{tr} \left(\sum_{(x_i, y_i) \in C_2} (x_i - \mu_2)^T (x_i - \mu_2) (\Sigma)^{-1} \right) \right) \\
&= \underset{\Sigma}{argmax} \left(-\frac{N}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} \text{tr} (N_1 S_1 (\Sigma)^{-1}) - \frac{1}{2} \text{tr} (N_2 S_2 (\Sigma)^{-1}) \right)
\end{aligned} \tag{26}$$

其中， S 为协方差矩阵。

下面对式子求偏导：

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \Sigma} = -\frac{1}{2} \left(N \frac{1}{|\Sigma|} |\Sigma| (\Sigma)^{-1} - N_1 S_1 (\Sigma)^{-2} - N_2 S_2 (\Sigma)^{-2} \right) = 0 \tag{27}$$

因此求解出 $\hat{\Sigma}$ ：

$$\begin{aligned}
 N\Sigma^{-1} - N_1S_1^T\Sigma^{-2} - N_2S_2^T\Sigma^{-2} &= 0 \\
 \implies \hat{\Sigma} &= \frac{N_1S_1 + N_2S_2}{N}
 \end{aligned}
 \tag{28}$$

最后，当我们要预测的时候，只需比较 $p(x|y=0)p(y=0)$ 与 $p(x|y=1)p(y=1)$ 哪一个更大即可。

Implement

```
import numpy as np
import os
os.chdir("../")
from models.linear_models import GDA

n1 = 1000
n_test = 100
x = np.linspace(0, 10, n1 + n_test)
w1, w2 = 0.3, 0.5
b1, b2 = 0.1, 0.2
x1 = x[:n1]
x_test = x[n1:]
v1 = x1 * w1 + b1
v2 = x1 * w2 + b2
cla_1 = np.c_[x1, v1]
cla_2 = np.c_[x1, v2]
l1 = np.ones(shape=(cla_1.shape[0], 1))
l2 = np.zeros(shape=(cla_2.shape[0], 1))
train_data = np.r_[cla_1, cla_2]
train_label = np.r_[l1, l2]

v_test = x_test * w2 + b2
data_test = np.c_[x_test, v_test]

model = GDA()
model.fit(train_data, train_label)
print(model.get_params())
print("accuracy:", model.evaluate(data_test, 0))
```

```
(0.5, array([[4.54504095],
             [1.46351228]]), array([[4.54504095],
             [2.47252047]]), array([[14.96809381,  8.07251381],
             [ 8.07251381, 14.96809381]]))
accuracy: 1
```