Abstract

本期我们将学习二分类-硬输出的另一种算法：线性判别分析，这实际上也是一种降维的算法。

选定一个方向，将高维样本投影到这个方向上，从而对样本进行二分类。

Idea

线性判别分析的核心思想是使投影后的数据满足两个条件：

- 相同类内部的样本距离接近
- 不同类别之间的距离较大

Algorithm

要降维，我们首先要知道如何计算投影。

我们假定样本为x，沿w方向做投影

我们知道：$w \cdot x = ||w|| * ||x|| * \cos\theta$

这里我们假设 $||w|| = 1$，确定唯一的 w，防止放缩导致无数解

所以 $w \cdot x = ||x|| * \cos\theta$

而 $||x|| * \cos\theta$ 正是投影的定义

所以样本点在向量 w 上的投影长度为 $w \cdot x$

故投影长度 $z = w^T \cdot x$

我们假定属于两个类的样本数量分别为 $N1, N2$

下面对于第一个条件：**相同类内部的样本距离接近**，我们使用方差矩阵来表征每个类内部的总体分布。这里我们使用协方差矩阵的定义，用S表示原数据x的协方差矩阵

$$
\begin{aligned}
C_1 : Var_z[C_1] &= \frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N_1}(z_i - \bar{z_{c1}})(z_i - \bar{z_{c1}})^T \\
&= \frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N_1}(w^T x_i - \frac{1}{N_1}\sum_{j=1}^{N_1} w^T x_j)(w^T x_i - \frac{1}{N_1}\sum_{j=1}^{N_1} w^T x_j)^T \\
&= w^T \frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N_1}(x_i - \frac{1}{N_1}\sum_{j=1}^{N_1} x_j)(x_i - \frac{1}{N_1}\sum_{j=1}^{N_1} x_j)^T w \\
&= w^T \frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N_1}(x_i - \bar{x_{c1}})(x_i - \bar{x_{c1}})^T w \\
&= w^T S_1 w \\
C_2 : Var_z[C_2] &= \frac{1}{N_2}\sum_{i=1}^{N_2}(z_i - \bar{z_{c2}})(z_i - \bar{z_{c2}})^T \\
&= w^T S_2 w
\end{aligned} \tag{1}
$$

所以类内距离可以记为：

$$Var_z[C_1] + Var_z[C_2] = w^T(S_1 + S_2)w \tag{2}$$

对于第二个条件：**不同类别之间的距离较大**

我们可以用两个类的投影均值表示类间距离：

$$\begin{aligned}(z_{c1} - z_{c2})^2 &= (\frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N_1} w^T x_i - \frac{1}{N_2}\sum_{i=1}^{N_2} w^T x_i)^2 \\ &= (w^T(\frac{1}{N_1}\sum_{i=1}^{N_1} x_i - \frac{1}{N_2}\sum_{i=1}^{N_2} x_i))^2 \\ &= (w^T(\bar{x_{c1}} - \bar{x_{c2}}))^2 \\ &= w^T(\bar{x_{c1}} - \bar{x_{c2}})(\bar{x_{c1}} - \bar{x_{c2}})^T w\end{aligned} \tag{3}$$

好，现在再回头看看我们的两个条件：

- 相同类内部的样本距离接近
- 不同类别之间的距离较大
  我们很容易给出一个直观的损失函数：

$$L(w) = \frac{Var_z[C_1] + Var_z[C_2]}{(z_{c1} - z_{c2})^2} \tag{4}$$

通过最小化损失函数，我们得到最优的w:

$$\begin{aligned}\widehat{w} = argmin(L(w)) &= argmin(\frac{Var_z[C_1] + Var_z[C_2]}{(z_{c1} - z_{c2})^2}) \\ &= argmin(\frac{w^T(S_1 + S_2)w}{w^T(\bar{x_{c1}} - \bar{x_{c2}})(\bar{x_{c1}} - \bar{x_{c2}})^T w}) \\ &= argmin(\frac{w^T S_w w}{w^T S_b w})\end{aligned} \tag{5}$$

其中：

- S_w 为with-class: 类内方差
- S_b 为between-class: 类间方差

下面对上式做偏导：

$$\begin{aligned}\frac{\partial L(w)}{\partial w} &= \frac{\partial}{\partial w}(w^T S_w w)(w^T S_b w)^{-1} \\ &= 2S_b w\left(w^T S_w w\right)^{-1} - 2w^T S_b w\left(w^T S_w w\right)^{-2} S_w w = 0\end{aligned} \tag{6}$$

对方程做变换：

$$
\begin{aligned}
\left(w^T S_b w\right) S_w w &= S_b w \left(w^T S_w w\right) \\
\left(w^T S_b w\right) w &= S_w^{-1} S_b w \left(w^T S_w w\right)
\end{aligned} \tag{7}
$$

注意到，$w^T S_b w$与$w^T S_w w$的形状为: $(1,p)*(p,p)*(p,1)=(1,1)$

因此这两项都为标量，只是对向量的大小进行放缩，不改变方向，因此上式更为：

$$
w \propto S_w^{-1} S_b w = S_w^{-1} \left(\bar{x}_{c1} - \bar{x}_{c2}\right)\left(\bar{x}_{c1} - \bar{x}_{c2}\right)^T w \tag{8}
$$

又因为$\left(\overline{x_{c1}} - \overline{x_{c2}}\right)^T w$也为标量，因此得到最终的式子：

$$
\widehat{w} \propto S_w^{-1} \left(\bar{x}_{c1} - \bar{x}_{c2}\right) \tag{9}
$$

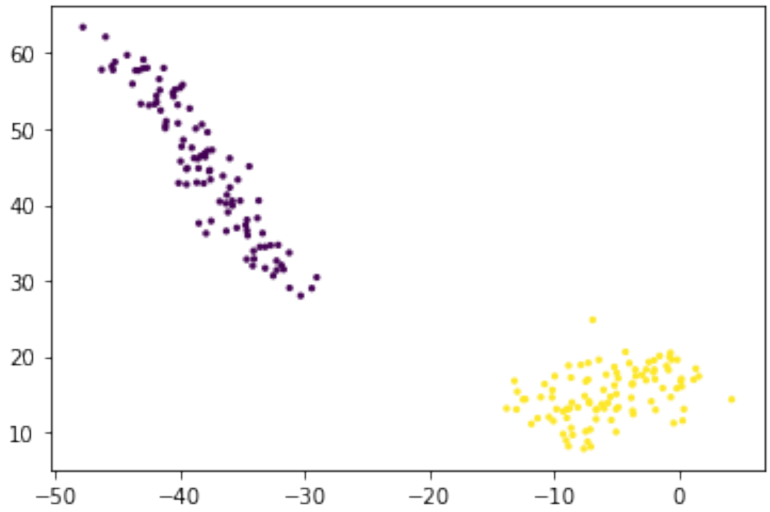
因此$S_w^{-1} \left(\bar{x}_{c1} - \bar{x}_{c2}\right)$即为我们要寻找的方向，最后可以归一化得到单位的$w$

Implement

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

x = np.linspace(0, 100, num=100)
w1, b1 = 0.1, 10
w2, b2 = 0.3, 30
epsilon = 2
k = 0.2
b = 20
w = np.asarray([-k, 1])
v1 = x * w1 + b1 + np.random.normal(scale=epsilon, size=x.shape)
v2 = x * w2 + b2 + np.random.normal(scale=epsilon, size=x.shape)
x1 = np.c_[x, v1]
x2 = np.c_[x, v2]
l1 = np.ones(x1.shape[0])
l2 = np.zeros(x2.shape[0])
data = np.r_[x1, x2]
label = np.r_[l1, l2]

model = LDA()
model.fit(x1, x2)
model.draw(data, label)
```



60
50
40
30
20
10
−50
−40
−30
−20
−10
0