深入浅出线性判别分析（LDA），从理论到代码实现

原创 善财童子 PaperWeekly 1月19日

收录于话题

#机器学习 17个

©作者 | 善财童子

学校 | 西北工业大学

研究方向 | 机器学习/射频微波

在知乎看到一篇讲解线性判别分析（LDA，Linear Discriminant Analysis）的文章，感觉数学概念讲得不是很清楚，而且没有代码实现。所以童子在参考相关文章的基础上在这里做一个学习总结，与大家共勉，欢迎各位批评指正~~

注意：在不加说明的情况下，所有公式的向量均是列向量，这个也会反映到代码中。

本文的基本思路来自以下文章：

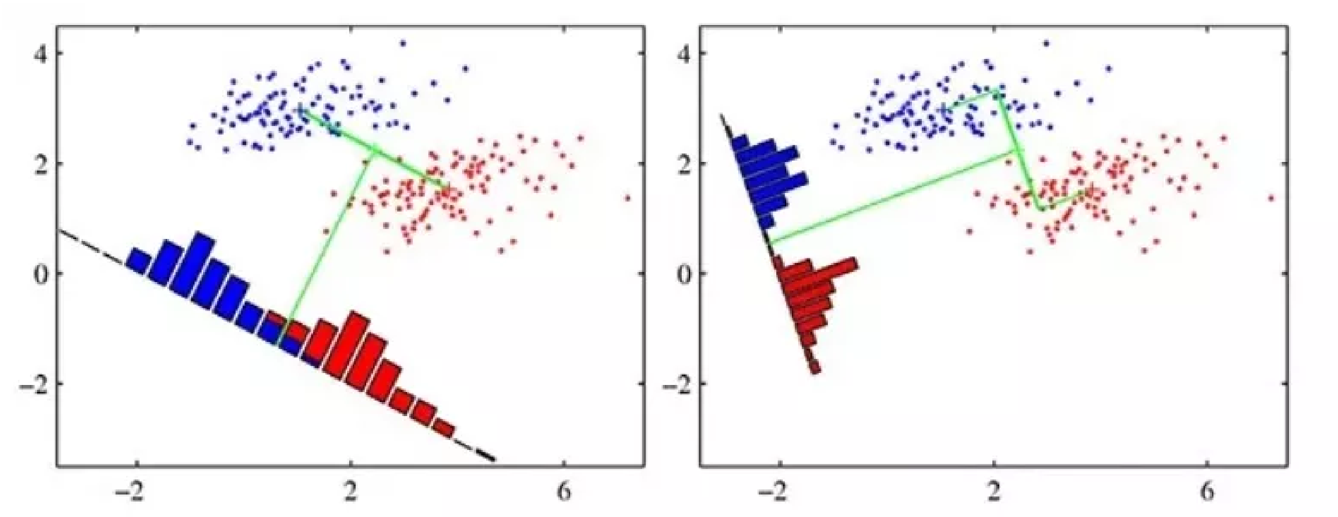
https://www.adeveloperdiary.com/data-science/machine-learning/linear-discriminant-analysis-from-theory-to-code/

01

基本概念和目标

线性判别分析是一种很重要的分类算法，同时也是一种降维方法（这个我还没想懂）。和 PCA 一样，LDA 也是通过投影的方式达到去除数据之间冗余的一种算法。

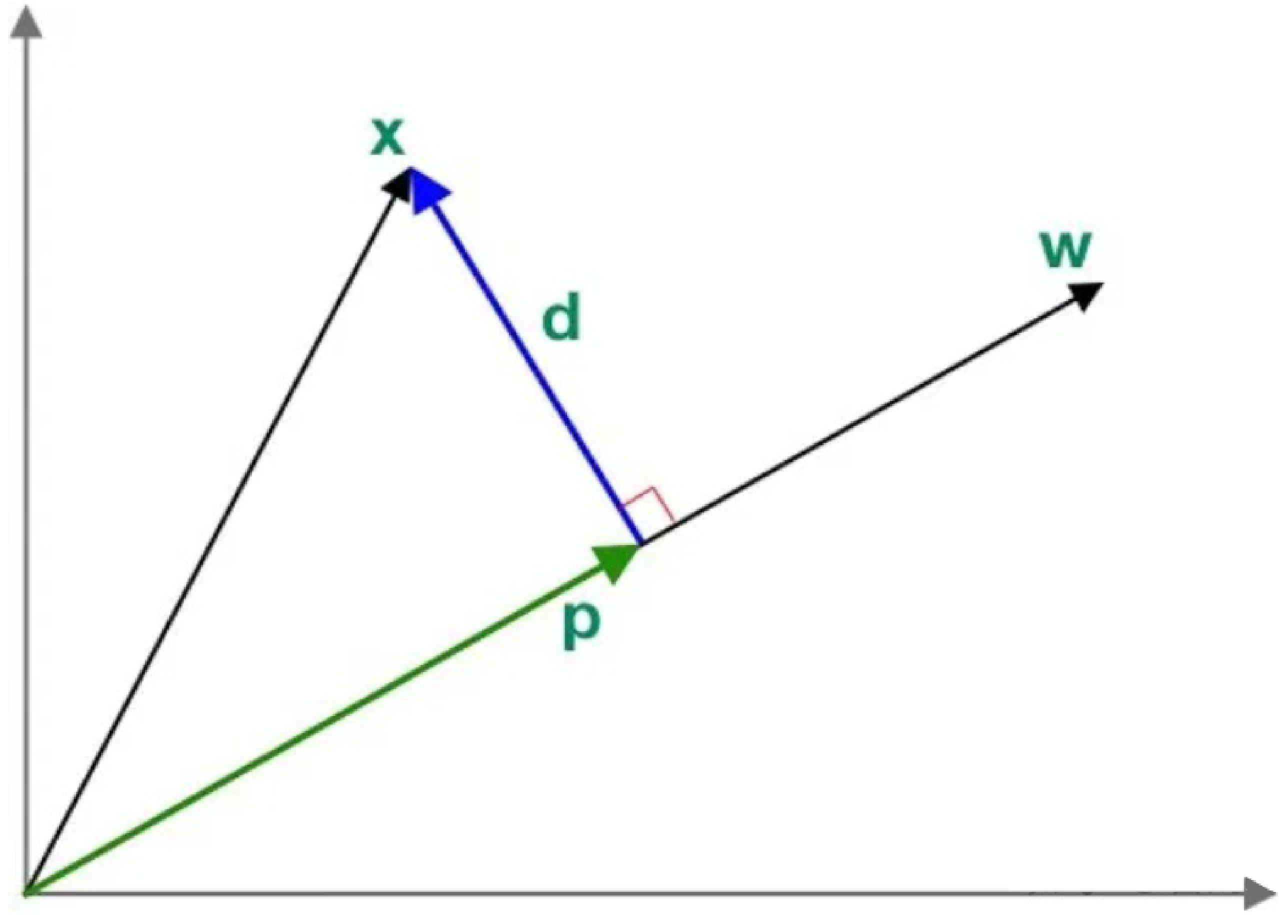
如下图所示的 2 类数据，为了正确的分类，我们希望这 2 类数据投影之后，同类的数据尽可能的集中（距离近，有重叠），不同类的数据尽可能的分开（距离远，无重叠），左图的投影不好，因为 2 类数据投影后有重叠，而右图投影之后可以很好地进行分类，因为投影之后的 2 类数据之间几乎没有重叠，只是类内重叠得很厉害，而这正是我们想要的结果。



02

正交投影

因为 LDA 用到了投影，所以这里有必要科普一下投影的知识。以二维平面为例，如图所示



我们要计算向量 x 在 w 上的投影 p，很显然 p 与 w 成比例关系：$p=cw$，其中 c 是一个常数。我们使用向量正交的概念来求出这个常数 c。在上图中，向量 $d=x-p$，d 与 p 垂直，它们的内积为 0，即 $d\cdot p=0$，即

$$d^Tp=0 \;\Rightarrow\; (x-p)^Tp=0 \Rightarrow\; (x-cw)^T(cw)=x^Tcw-c^2w^Tw=0$$

$$\Rightarrow\; x^Tw=cw^Tw \;\Rightarrow c=\frac{w^Tx}{w^Tw}$$

注意：对于两个向量 x 和 y， $x^Ty=y^Tx$，所以有 $p=\left(\frac{w^Tx}{w^Tw}\right)w$。

假设 w 是一个单位向量，则 $w^Tw=1$，这样，对于任意向量 x，其在 w 上的投影 $\hat{x}$ 可表示为：

$$\hat{x}=(w^Tx)w=aw \qquad (1)$$

其中， a 是一个常数。

对于一个数据集 $X=\{x_1,x_2,...,x_m\}$，其中 x_i，i=1,2,3,...m 是 d 维列向量。同样假设 w 是一个单位向量，那么每一个 x_i 在 w 的投影是：

$$\hat{x_i}=(w^Tx_i)w=a_iw \tag{2}$$

上述公式的 a_i 是叫做 x_i 在 w 上的偏移或者坐标。这一系列的值 $\{a_1,a_2,...,a_m\}$ 表示我们做了一个映射 $R^d\rightarrow R$，即通过投影，我们将 d 维向量降维到了 1 维。

03

投影数据的均值

为简化起见，我们先假设有 2 类数据，定义样本 x_i：$x_i\in R^d$，其中 $d=2$。

我们再定义 D_i：

$$D_i=\{x_j|y_j=c_i\}$$

其中 c_i 是类别，D_i 是所有类别为 c_i 的样本的集合。所有数据 x_i 投影到 w 后，求其均值：

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{1}{n_1} \sum_{x_i \in D_1} a_i \\ &= \frac{1}{n_1} \sum_{x_i \in D_1} w^T x_i \\ &= w^T \left(\frac{1}{n_1} \sum_{x_i \in D_i} x_i \right) \\ &= w^T \mu_1 \end{aligned} \tag{3}$$

其中，μ_1 是 D_1 数据集的均值，同理 D_2 的均值是 μ_2，投影后的均值 $m_2 = w^T \mu_2$。为了使投影之后数据可正确地分类，我们希望这 2 类数据的中心离得越远越好，也就是要使 $|m_1 - m_2|$ 最大，但是单独这个条件并不能保证能够正确地对每一个数据进行分类，我们还需要考虑每一类数据的方差，大的方差表示 2 类数据之间有重叠，小的方差表示 2 类数据之间没有重叠。

LDA 并没有直接使用方差的计算公式，而是采用如下的定义：

$$s_i^2 = \sum_{x_j \in D_i} (a_j - m_i)^2 \tag{4}$$

这个有个名称叫 scatter matrix，本文暂时将其翻译成散步矩阵吧。

总结一下，LDA 主要就两点：

（1）最大化各类数据中心的距离，也就是各类数据的均值之间的距离要最大；

（2）各类数据的散步矩阵之和要小，也就是每个类别中的数据尽可能地集中。

将上述两点整合在一起，得到一个优化公式：

$$\max_w J(w) = \frac{(m_1 - m_2)^2}{s_1 + s_2} \tag{5}$$

这个公式也叫做 Fisher LDA，这样，LDA 的问题就是关于 w 最优化上述的公式。我们重写上述公式如下：

$$\begin{aligned}(m_1-m_2)^2&=(w^T\mu_1-w^T\mu_2)^2\\&=[w^T(\mu_1-\mu_2)]^2\\&=w^T(\mu_1-\mu_2)(\mu_1-\mu_2)^Tw\\&=w^TBw\end{aligned}\tag{6}$$

同理有 ：

$$\begin{aligned}s_i^2&=\sum_{x_j\in D_i}(a_j-m_i)^2\\&=\sum_{x_j\in D_i}(w^Tx_j-w^T\mu_i)^2\\&=w^T\left(\sum_{x_j\in D_i}(x_j-\mu_i)(x_j-\mu_i)^T\right)w\\&=w^TS_iw\end{aligned}\tag{7}$$

这样：

$$\begin{aligned}s_1^2+s_2^2&=w^TS_1w+w^TS_2w\\&=w^T(S_1+S_2)w\\&=w^TSw\end{aligned}\tag{8}$$

这样，LDA 目标优化函数就可以重写为：

$$\max_w J(w)=\frac{w^TBw}{w^TSw}\tag{9}$$

对公式（9）关于 $\boldsymbol{w}$ 求导，并令其导数为 0，可得：

$$\frac{dJ(w)}{dw}=\frac{(2Bw)(w^TSw)-(2Sw)(w^TBw)}{(w^TSw)^2}=0 \quad (10)$$

整理得：

$$\begin{aligned} Bw(w^TSw) &= Sw(w^TBw) \\ \Rightarrow Bw &= Sw(\frac{w^TBw}{w^TSw}) \\ \Rightarrow Bw &= J(w)Sw \\ \Rightarrow Bw &= \lambda Sw \end{aligned} \quad (11)$$

公式（11）中 做了替代：$\lambda=J(w)$，λ 是一个常量。如果 S 是非奇异矩阵，那么公式（11）左乘 S^{-1} 得到：

$$(S^{-1}B)w=\lambda w \quad (12)$$

最终，LDA 问题其实就是求 $S^{-1}B$ 对应最大特征值，而我们前面要求的投影方向就是最大特征值对应的特征向量，我们将 LDA 问题化成了矩阵的特征值和特征向量的问题了。

上述推导针对二分类问题进行的，对于多分类问题， S 矩阵的计算方式不变，而 B 矩阵需要采用如下的公式计算：

$$B=\sum_{i=1}^{C}n_i(\mu_i-\mu)(\mu_i-\mu)^T \quad (13)$$

其中：

C 表示类别的个数；n_i 表示第 i 类中样本的个数；μ_i 表示第 i 类样本的均值；μ 表示整个样本的均值。

关于矩阵微分可参考如下文章：

https://zhuanlan.zhihu.com/p/24709748

https://zhuanlan.zhihu.com/p/24863977

这里提醒一下，对 $x^T A x$ 关于 x 求导的结果是 $\left(A+A^T\right)x$，如果 A 是对称矩阵，即 $A=A^T$，则 $\frac{\partial x^T A x}{\partial x}=2Ax$。公式（10）中因为 B 和 S 都是对称矩阵（由它们的定义可以看出是对称矩阵），所以对 $w^T B w$ 关于 w 求导的结果是 2Bw，即 $\frac{\partial w^T B w}{\partial w}=2Bw$，同理 $\frac{\partial w^T S w}{\partial w}=2Sw$。

04

代码实现

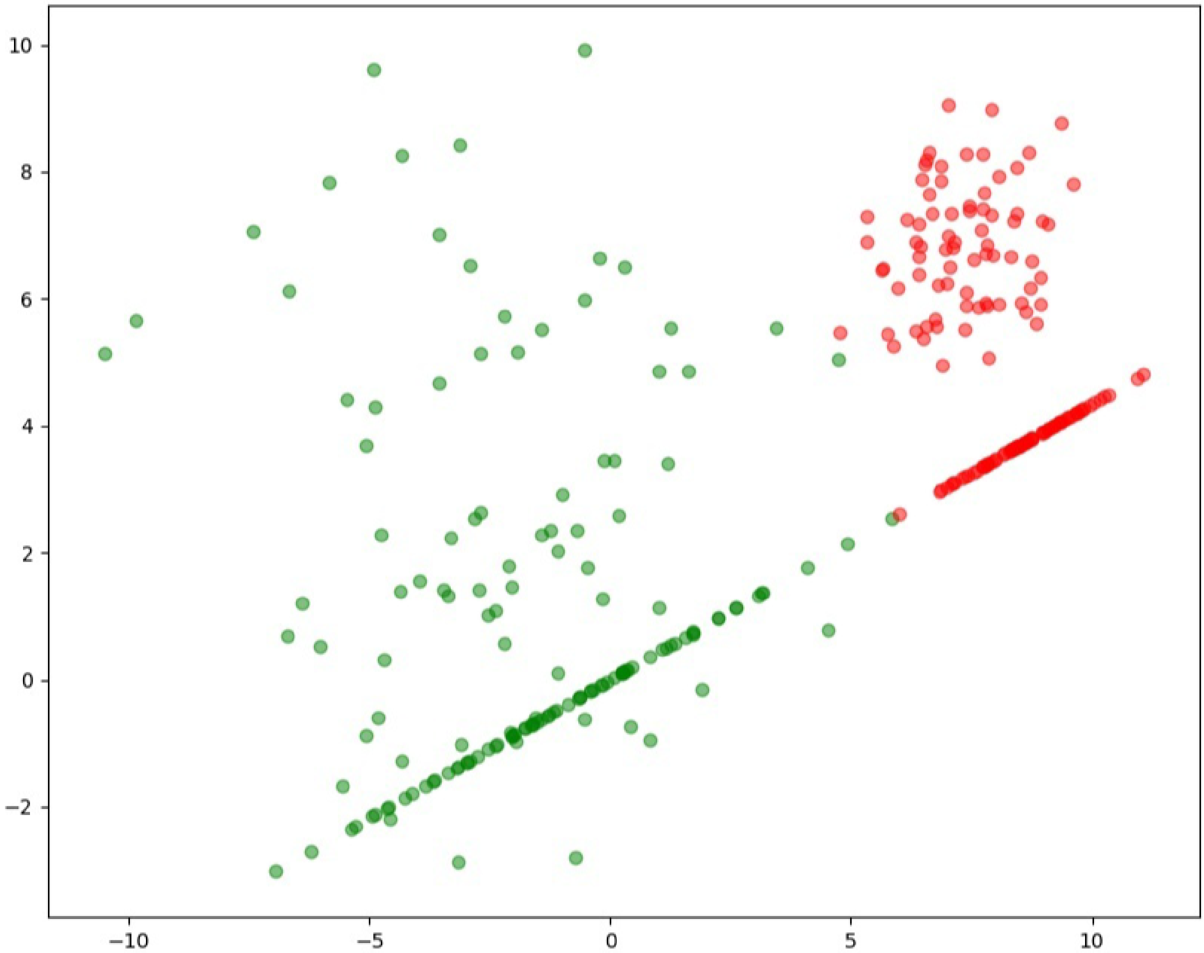
```
import numpy as np
from sklearn import datasets

from sklearn.datasets import make_blobs
import matplotlib.pyplot as plt

class MyLDA:
    def __init__(self):
        pass


    def fit(self, X, y):
        # 获取所有的类别
        labels = np.unique(y)
        #print(labels)
        means = []
        for label in labels:
            # 计算每一个类别的样本均值
            means.append(np.mean(X[y == label], axis=0))
        # 如果是二分类的话
        if len(labels) == 2:
            mu = (means[0] - means[1])
            mu = mu[:,None] # 转成列向量
            B = mu @ mu.T
        else:
            total_mu = np.mean(X, axis=0)
            B = np.zeros((X.shape[1], X.shape[1]))
            for i, m in enumerate(means):
                n = X[y==i].shape[0]
                mu_i = m - total_mu
```

```
            mu_i = mu_i[:,None] # 转成列向量
            B += n * np.dot(mu_i, mu_i.T)

        # 计算S矩阵
        S_t = []
        for label, m in enumerate(means):
            S_i = np.zeros((X.shape[1], X.shape[1]))
            for row in X[y == label]:
                t = (row - m)
                t = t[:,None] # 转成列向量
                S_i += t @ t.T
            S_t.append(S_i)
        S = np.zeros((X.shape[1], X.shape[1]))
        for s in S_t:
            S += s

        # S^-1B进行特征分解
        S_inv = np.linalg.inv(S)
        S_inv_B = S_inv @ B
        eig_vals, eig_vecs = np.linalg.eig(S_inv_B)

        #从大到小排序
        ind = eig_vals.argsort()[::-1]
        eig_vals = eig_vals[ind]
        eig_vecs = eig_vecs[:, ind]
        return eig_vecs


#构造数据集
def make_data(centers=3, cluster_std=[1.0, 3.0, 2.5], n_samples=150, n_features=2):
    X, y = make_blobs(n_samples, n_features, centers, cluster_std)
    return X, y

if __name__ == "__main__":
    X, y = make_data(2, [1.0, 3.0])
    print(X.shape)

    lda = MyLDA()
    eig_vecs = lda.fit(X, y)
    W = eig_vecs[:, :1]

    colors = ['red', 'green', 'blue']
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 8))
    for point, pred in zip(X, y):
        # 画出原始数据的散点图
        ax.scatter(point[0], point[1], color=colors[pred], alpha=0.5)
        # 每个数据点在W上的投影
        proj = (np.dot(point, W) * W) / np.dot(W.T, W)

        #画出所有数据的投影
        ax.scatter(proj[0], proj[1], color=colors[pred], alpha=0.5)

    plt.show()
```

4.1 2类2个特征

```
if __name__ == "__main__":
    X, y = make_data(2, [1.0, 3.0]) #rint(X.shape)

    lda = MyLDA()
    eig_vecs = lda.fit(X, y)
    W = eig_vecs[:, :1]

    colors = ['red', 'green', 'blue']
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 8))
    for point, pred in zip(X, y):
        # 画出原始数据的散点图
        ax.scatter(point[0], point[1], color=colors[pred], alpha=0.5)
        # 每个数据点在W上的投影
        proj = (np.dot(point, W) * W) / np.dot(W.T, W)

        #画出所有数据的投影
        ax.scatter(proj[0], proj[1], color=colors[pred], alpha=0.5)

    plt.show()
```

运行结果是：

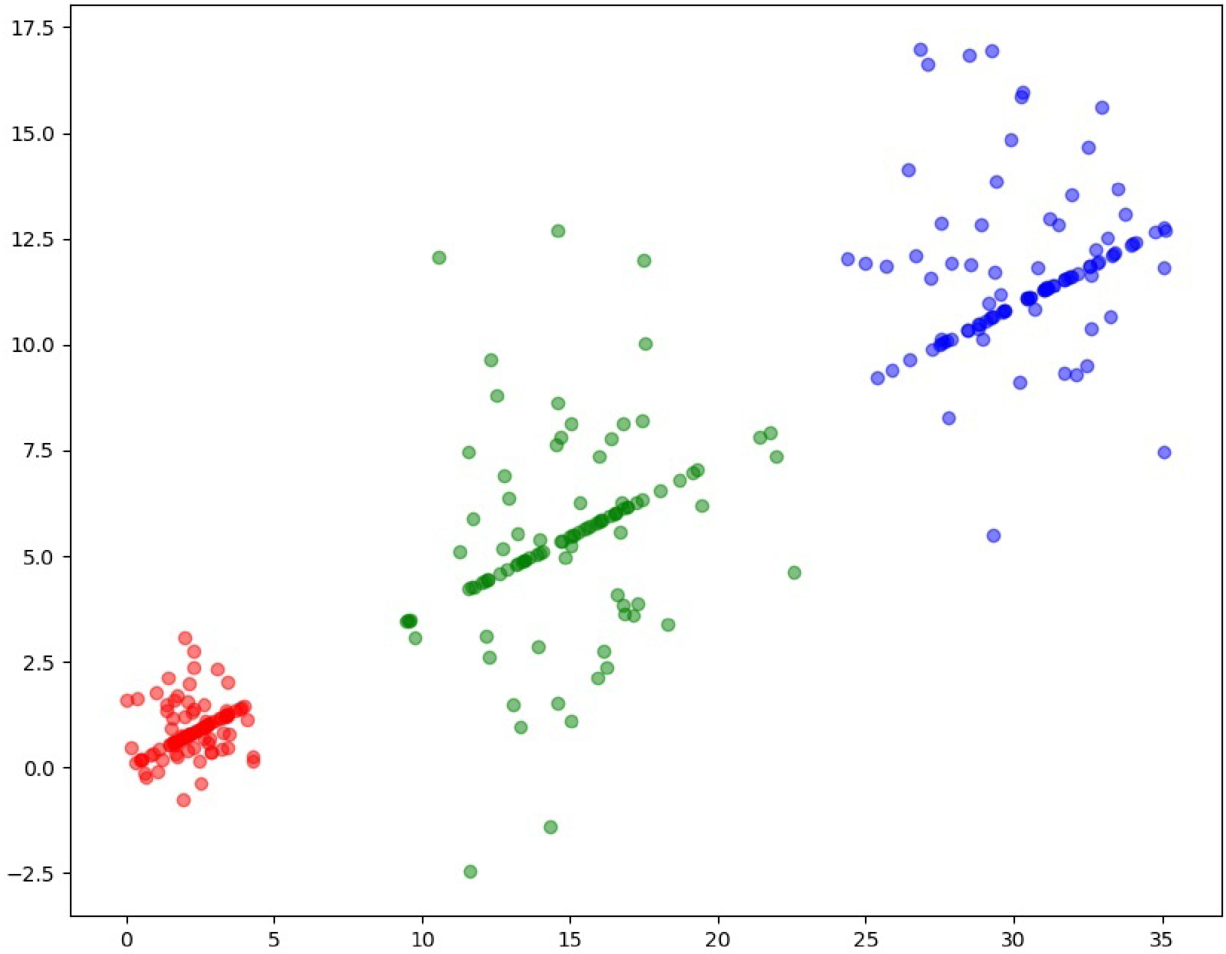


可见，数据投影后在 1 维上可以很好的分类。

4.2 3类2个特征

```
if __name__ == "__main__":
        # 3类
    X, y = make_data([[2.0, 1.0], [15.0, 5.0], [31.0, 12.0]], [1.0, 3.0, 2.5])
    print(X.shape)

    lda = MyLDA()
    eig_vecs = lda.fit(X, y)
    W = eig_vecs[:, :1]

    colors = ['red', 'green', 'blue']
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 8))
    for point, pred in zip(X, y):
        # 画出原始数据的散点图
        ax.scatter(point[0], point[1], color=colors[pred], alpha=0.5)
        # 每个数据点在W上的投影
        proj = (np.dot(point, W) * W) / np.dot(W.T, W)

        #画出所有数据的投影
        ax.scatter(proj[0], proj[1], color=colors[pred], alpha=0.5)

    plt.show()
```

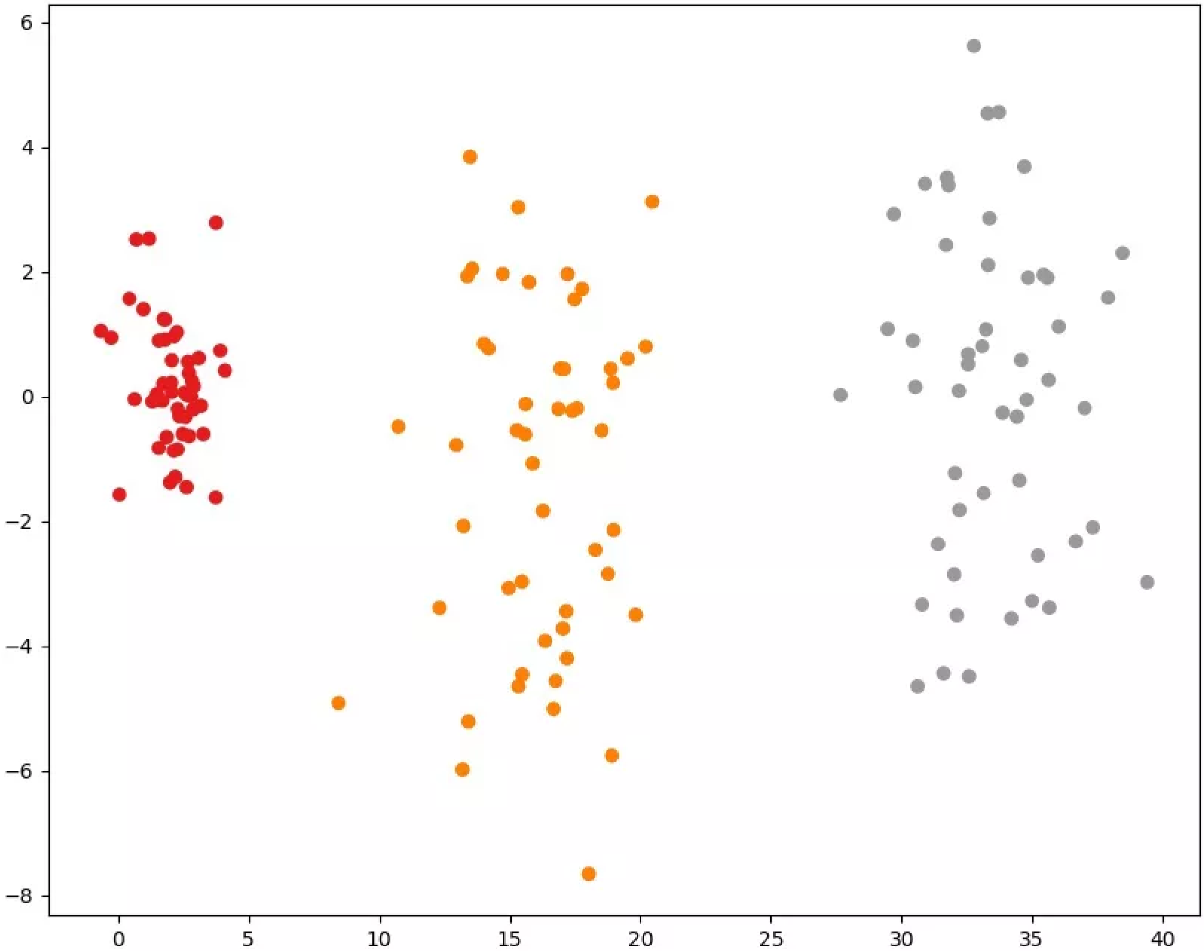
运行结果是：



4.3 3类4个特征

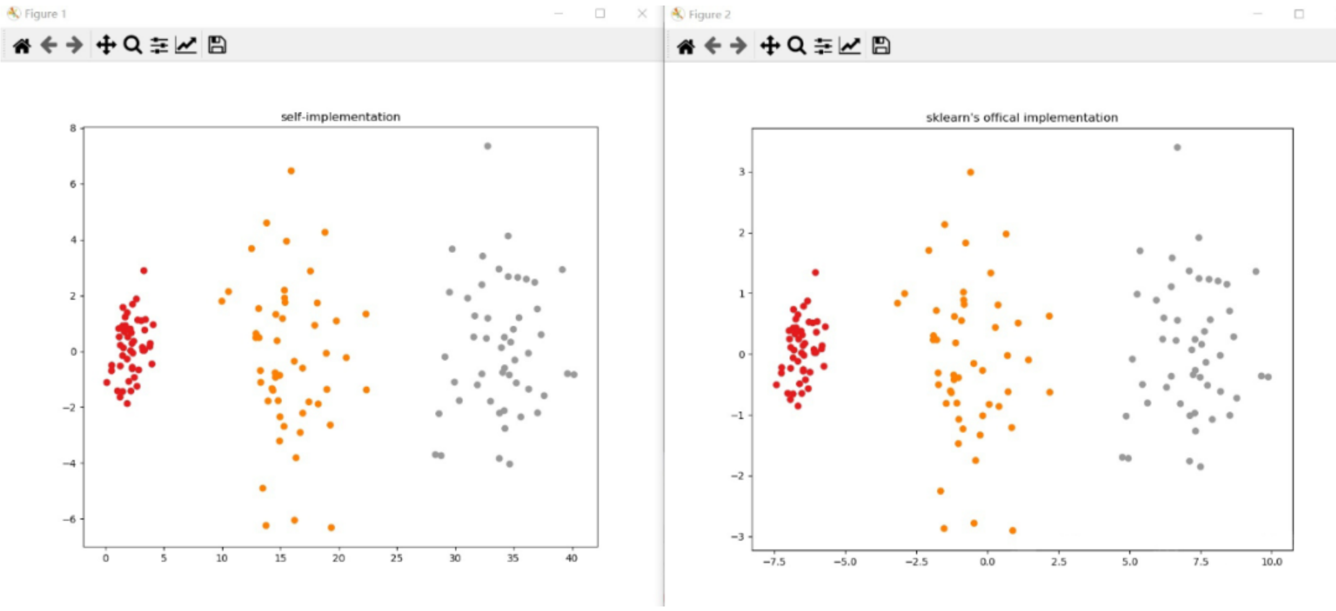
```
if __name__ == "__main__":
    #X, y = load_data(cols, load_all=True, head=True)
    X, y = make_data([[2.0, 1.0], [15.0, 5.0], [31.0, 12.0]], [1.0, 3.0, 2.5], n_featu
    print(X.shape)

    lda = MyLDA()
    eig_vecs = lda.fit(X, y)

    # 取前2个最大特征值对应的特征向量
    W = eig_vecs[:, :2]

    # 将数据投影到这两个特征向量上，从而达到降维的目的
    transformed = X @ W
    plt.subplots(figsize=(10, 8))
    plt.scatter(transformed[:, 0], transformed[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.Set1)
    plt.show()
```

运行结果如下：



对上述结果使用 sklearn 官方实现的 LDA 进行对比验证：

```
if __name__ == "__main__":
    X, y = make_data([[2.0, 1.0], [15.0, 5.0], [31.0, 12.0]], [1.0, 3.0, 2.5], n_featu
    print(X.shape)

    lda = MyLDA()
    eig_vecs = lda.fit(X, y)

    # 取前2个最大特征值对应的特征向量
    W = eig_vecs[:, :2]

    # 将数据投影到这两个特征向量上，从而达到降维的目的
    transformed = X @ W
    plt.subplots(figsize=(10, 8))
    plt.scatter(transformed[:, 0], transformed[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.Set1)
    plt.title('self-implementation')

    from sklearn.discriminant_analysis import LinearDiscriminantAnalysis
    sk_lda = LinearDiscriminantAnalysis()
    sk_lda.fit(X, y)
    transformed = sk_lda.transform(X)
    plt.subplots(figsize=(10, 8))
    plt.scatter(transformed[:, 0], transformed[:, 1], c=y, cmap=plt.cm.Set1)
    plt.title("sklearn's offical implementation")
    plt.show()
```



左图是本文实现的 LDA 分类结果，右图是官方实现的 LDA 分类结果，可见，两者的结果是一致的。

05

总结

LDA 是一个很强大的工具，但它是一个有监督的分类算法，PCA 是一个无监督的算法，这是和 PCA 的一个很重要的区别。

更多阅读