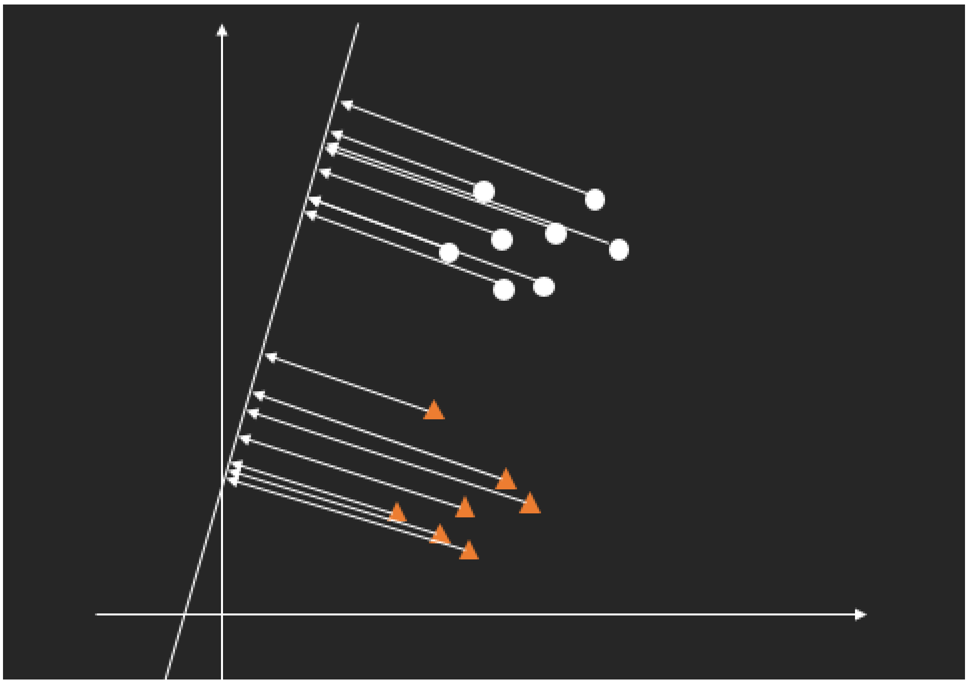
Fisher 线性判别分析

模式识别系列

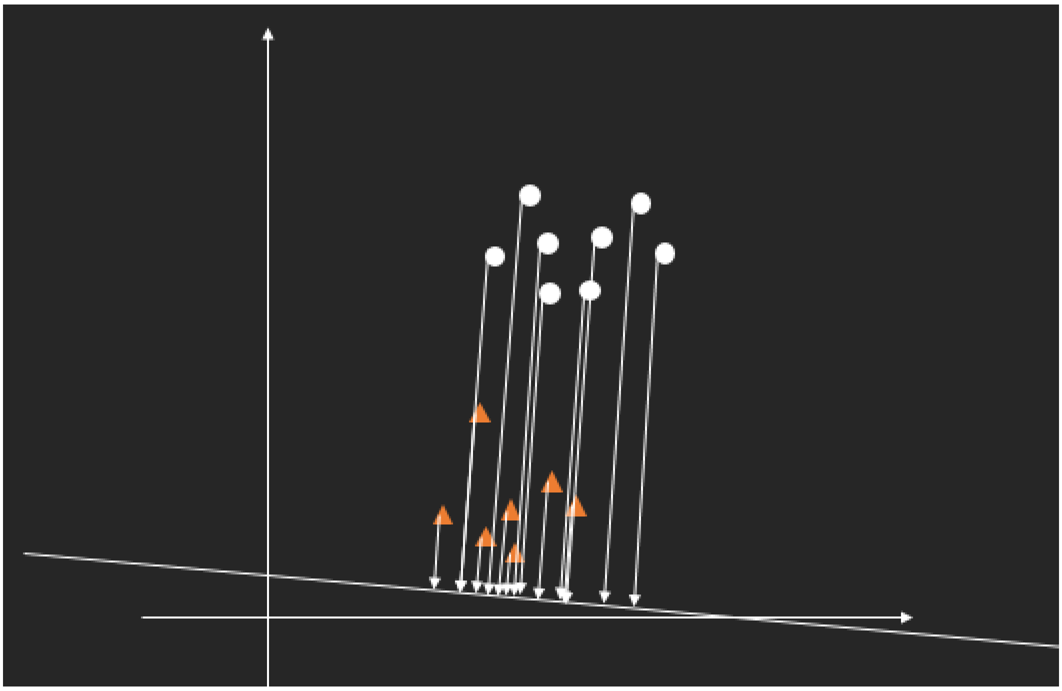
2017年 11月28日

设有属于两个类别的 n 个 d 维样本 $\{x_i \mid i \in \{1, 2, , n\}\}$，如果它们线性可分，那么一般可以将它们映射到一维空间，并且同样可识别，类似于下图所示的意思



由圆形和三角形标识的两类图形被投影到了直线上，它们的位置是分开的，可以成为判别的依据。所以这就对我们产生了启发，能不能找到这样的直线，使得样本集投影到上面之后能够很轻易地对它们进行分类？

直观的想一下，只要两类样本是可分的，就一定能找得到这样的直线，但是如果像上图这样的投影直线，要识别点在直线上的投影位置，需要一个直线上的参考点，以便计算距离。另一种更方便的方法是投影到另一个方向的直线上



虽然这种方式的投影点没有明显地分开，但是仔细观察会发现样本点到直线的距离是明显分隔成两个级别的。我们假设投影面的方程为

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x}+b=0$$

对于空间中的任意点 $\mathbf{x}$，设其在上述面上的投影点为 $\mathbf{x}_p$，并且离面的垂直距离为 r。那么就有关系

$$\mathbf{x}=\mathbf{x}_p+r\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||}$$

定义函数

$$\boxed{y(\mathbf{x})=\mathbf{w}^T\mathbf{x}+b}$$

对任意点 $\mathbf{x}$，代入函数 y 后可得

$$\begin{aligned}y(\mathbf{x})&=\mathbf{w}^T(\mathbf{x}_p+r\frac{\mathbf{w}}{||\mathbf{w}||})+b\\&=\boxed{\mathbf{w}^T\mathbf{x}_p+b}+r||\mathbf{w}||\\&=r||\mathbf{w}||\end{aligned}$$

对于超平面来说，$\mathbf{w}$ 的绝对值不起作用，因为可以缩放 $\mathbf{w}$ 却使平面不发生任何变化，这样的话，如果我们若总是设 $||\mathbf{w}||=1$，那将更加方便，即

$$y(\mathbf{x})=r$$

也就是说，函数 y 将空间上的点映射成了它到超平面的垂直距离，通过距离来识别两类数据，这正好符合前面的图所表达的意思。

现在的问题就是如何找到最优的超平面来做投影，我们的需求是使得两类样本的投影距离分开得越大越好，并且同一类样本的投影距离离散的的越少越好。距离的离散度可以用类似于标准

差的量来度量

$$S_i^2 = \sum_{\mathbf{x}\in A_i} (y(\mathbf{x}) - \bar{r}_i)^2, \quad i = 1, 2$$

其中 $\bar{r}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\mathbf{x}\in A_i} y(\mathbf{x})$

而总的离散度则为

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2$$

度量两类投影距离的分散量可以考虑为均值差的平方

$$(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)^2$$

这样一来，我们的优化目标就是选择直线使得 S 越小越好，$(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)^2$ 越大越好。于是可以定义一个总体的目标函数

$$J(\mathbf{w}) = \frac{(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)^2}{S_1^2 + S_2^2}$$

这样的函数被称为 Fisher 准则函数，优化目标是找到合适的 $\mathbf{w}$ 使 $J(\mathbf{w})$ 取到极大值。

现在分别考虑分子和分母

$$\begin{aligned}
\bar{r}_1 - \bar{r}_2 &= \frac{1}{n_1} \sum_{\mathbf{x}\in A_1} y(\mathbf{x}) - \frac{1}{n_2} \sum_{\mathbf{x}\in A_2} y(\mathbf{x}) \\
&= \frac{1}{n_1} \sum_{\mathbf{x}\in A_1} (\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b) - \frac{1}{n_2} \sum_{\mathbf{x}\in A_2} (\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b) \\
&= \mathbf{w}^T \left(\frac{1}{n_1} \sum_{\mathbf{x}\in A_1} \mathbf{x} - \frac{1}{n_2} \sum_{\mathbf{x}\in A_2} \mathbf{x} \right)
\end{aligned}$$

分别定义

$$\begin{aligned}
m_1 &= \frac{1}{n_1} \sum_{\mathbf{x}\in A_1} \mathbf{x} \\
m_2 &= \frac{1}{n_2} \sum_{\mathbf{x}\in A_2} \mathbf{x}
\end{aligned}$$

则有化简后的

$$\begin{aligned}
(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)^2 &= \mathbf{w}^T (m_1 - m_2)(m_1^T - m_2^T)\mathbf{w} \\
&= \mathbf{w}^T S_b \mathbf{w}
\end{aligned}$$

这里使用 $S_b = (m_1 - m_2)(m_1^T - m_2^T)$，可以通过样本集轻易算出。另外有

$$
\begin{aligned}
S_1^2 &= \sum_{\mathbf{x}\in A_1}(y(\mathbf{x})-\bar{r}_1)^2 \\
&= \sum_{\mathbf{x}\in A_1}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+b-\frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{x}\in A_1}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+b))^2 \\
&= \sum_{\mathbf{x}\in A_1}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}-\frac{1}{n_1}\mathbf{w}^T\sum_{\mathbf{x}\in A_1}\mathbf{x})^2 \\
&= \mathbf{w}^T\sum_{\mathbf{x}\in A_1}(\mathbf{x}-\frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{x}\in A_1}\mathbf{x})(\mathbf{x}^T-\frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{x}\in A_1}\mathbf{x}^T)\mathbf{w} \\
&= \mathbf{w}^T\sum_{\mathbf{x}\in A_1}(\mathbf{x}-m_1)(\mathbf{x}^T-m_1^T)\mathbf{w}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
S_1^2+S_2^2 &= \mathbf{w}^T\left(\sum_{\mathbf{x}\in A_1}(\mathbf{x}-m_1)(\mathbf{x}^T-m_1^T)+\sum_{\mathbf{x}\in A_2}(\mathbf{x}-m_2)(\mathbf{x}^T-m_2^T))\right)\mathbf{w} \\
&= \mathbf{w}^T S_w\mathbf{w}
\end{aligned}
$$

使用 S_w 代替括号内那一长串公式，同样也能够通过样本集轻松计算。于是 Fisher 准则函数可以写成

$$J(\mathbf{w})=\frac{\mathbf{w}^T S_b\mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_w\mathbf{w}}$$

这是一个广义瑞利商，可以使用拉格朗日乘子法求极值，以及对应的解 $\mathbf{w}^*$。假定约束 $\mathbf{w}^T S_w\mathbf{w}=1$， 定义拉格朗日函数

$$L(\mathbf{w},\lambda)=\mathbf{w}^T S_b\mathbf{w}-\lambda(\mathbf{w}^T S_w\mathbf{w}-1)$$

求梯度取零

$$\nabla_{\mathbf{w}}L=S_b\mathbf{w}-\lambda S_w\mathbf{w}=0$$

即有

$$S_w^{-1}S_b\mathbf{w}^*=\lambda\mathbf{w}^*$$

显然这是一个求解矩阵 $S_w^{-1}S_b$ 的特征值问题。但是考虑到

$$S_b=(m_1-m_2)(m_1-m_2)^T$$

于是有

$$\mathbf{w}^*=S_w^{-1}(m_1-m_2)\frac{(m_1-m_2)^T\mathbf{w}^*}{\lambda}$$

这里的 $\frac{(m_1-m_2)^T\mathbf{w}^*}{\lambda}$ 是一个标量，对 $\mathbf{w}^*$ 的方向不起作用，而我们想要确定的实际上是 $\mathbf{w}^*$ 的方向，所以这一项可以忽略而不会造成错误，即

$$\mathbf{w}^* = S_w^{-1}(m_1 - m_2)$$

大型矩阵求逆是一项相当复杂的任务，但我们可以通过下面的线性方程组来避免求逆矩阵的困难

$$S_w \mathbf{w}^* = m_1 - m_2$$

在前面，为了令 $y(\mathbf{w}) = r$，我们强制 $\|\mathbf{w}\| = 1$，于是可以令

$$\mathbf{w}^* = \frac{\mathbf{w}^*}{||\mathbf{w}^*||}$$

至此，我们便找到了投影超平面的方程

$$\mathbf{w}^{*T}\mathbf{x} + b = 0$$

这里的 b 并不是特别重要，因为 b 的存在只是让直线在坐标系中平移，对特征点到直线的距离有影响，但是如果两类特征到直线的距离能明显区分，那么无论怎样平移直线，这种可区分性都不会有所减损。

将特征点投影到超平面上，单纯地使用投影距离来表示特征点，我们就将高维的数据降到了一维空间，然后再通过决策函数对特征进行分类，这就是 Fisher 线性判别的基本思想。

为了方便起见，这里设 $b = 0$ ，那么特征点到投影面的距离集合就为

$$\{d_i = \mathbf{w}^{*T}\mathbf{x}_i | \mathbf{x}_i \in A\}$$

这样就将原本的训练集合

$$\{(\mathbf{x}_i,\, y) |\, i \in \{1, 2, .., n\},\ y \in \{0, 1\}\}$$

映射到了更简化的训练集

$$\{(d_i,\, y) |\, i \in \{1, 2, .., n\},\ y \in \{0, 1\}\}$$

下面使用一维高斯判别分析对分类模型进行训练

首先假设同一类别的数据服从均值和方差分别为 μ, σ 高斯分布，即

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

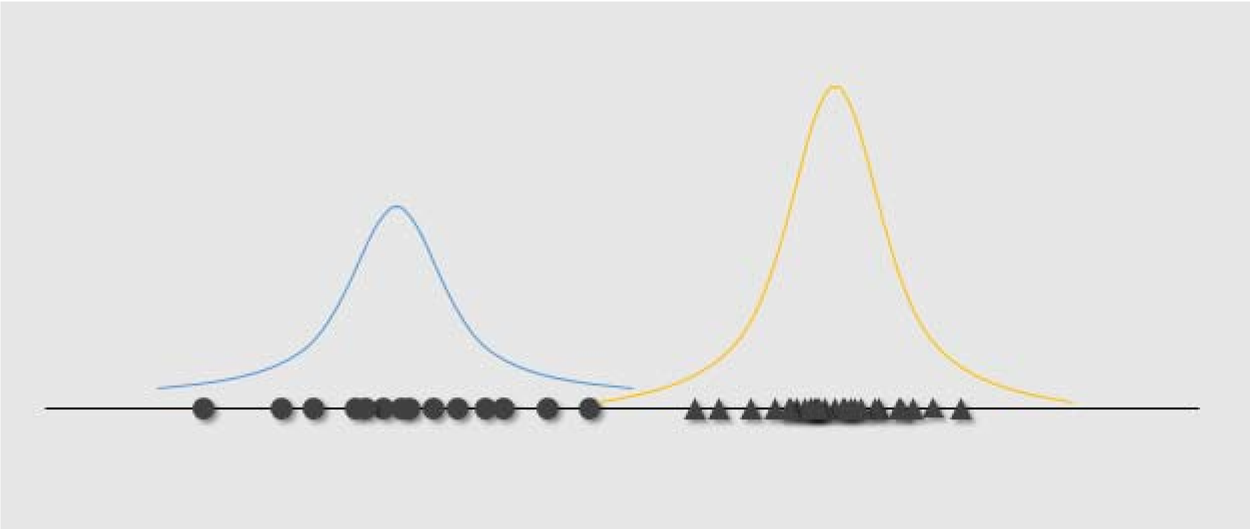
这里的 x 就是距离 d ， 使用极大似然估计来估计参数可得

$$\mu = \frac{1}{n}\sum x_i$$
$$\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum (x_i - \mu)^2$$

也就是说，对于第 i 类数据

$$
\mu_i = \frac{1}{n_i}\sum_{\mathbf{x}\in A_i} d
$$
$$
\sigma_i^2 = \frac{1}{n_i}\sum_{\mathbf{x}\in A_i} (d-\mu)^2
$$

下图可以直观地看出这一建模结果



也就是说使用正态分布函数分别对距离集合进行建模，得到概率密度函数

$$
p(x|y=0) \sim N(\mu_1,\sigma_1)
$$
$$
p(x|y=1) \sim N(\mu_2,\sigma_2)
$$

预测的时候，将测试数据 $\mathbf{x}$ 代入公式 $\mathbf{w}^{*T}\mathbf{x}$ 得到降维数据 d ，然后将 d 分别代入上述的两类模型，比较结果大小即可进行判断。

参考资料

模式识别（第二版），边肇祺

clouswang@gmail.com