5. Analiza dyskryminacyjna: FLD, LDA, QDA

dr inż. Urszula Libal

Politechnika Wrocławska

2015

1. Liniowe funkcje dyskryminacyjne

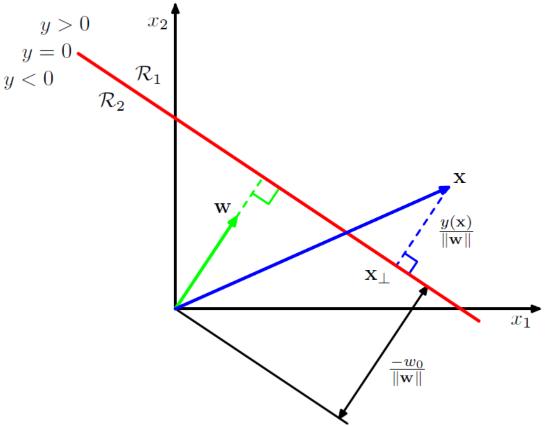
Liniowe funkcje dyskryminacyjne mają ogólną postać

$$\delta(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 = \sum_{i=1}^{D} w_i x_i + w_0. \tag{1}$$

Do liniowych dyskryminatorów, czyli klasyfikatorów opartych o liniowe funkcje dyskryminacyjne, zaliczamy

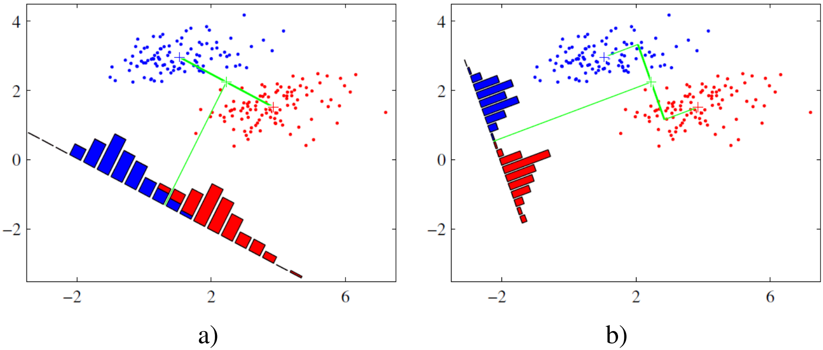
— FLD - liniowy dyskryminator Fishera,

— LDA - liniową analizę dyskryminacyjną.



Rysunek 1. Prosta rozdzielająca (na czerwono) jest prostopadła do wektora **w** (na zielono) wyznaczającego kierunek rzutu wektora **x**.

Źródło: [2]



Rysunek 2. (a) Rzut na prostą łączącą średnie w klasach. (b) Rzut na prostą o kierunku wyznaczonym przez kryterium Fishera poprawia separację klas.

Źródło: [2]

2. Liniowy dyskryminator Fishera (FLD)

Liniowy dyskryminator Fishera [1] (ang. *Fisher's Linear Discriminant*, FLD) zakłada, że μ_k to średnie, a Σ_k to macierze kowariancji w klasach $k = 1, 2$.

Dokonujemy liniowej transformacji, dzięki której uzyskamy najlepsze rozdzielenie klas. W celu separacji klas rzutujemy wektory cech $\mathbf{x}$ na hiperpłaszczyznę wyznaczoną przez kierunek $\mathbf{w}$. Aby to osiągnąć maksymalizujemy klasyczne kryterium Fishera [5]

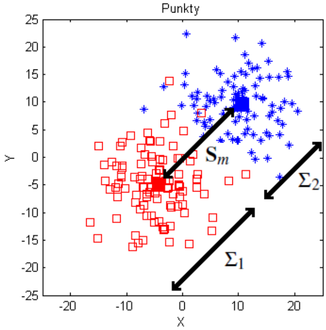
$$F(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{S}_m \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T \mathbf{S}_w \mathbf{w}}, \tag{2}$$

gdzie $\mathbf{S}_m$ to macierz rozproszeń międzyklasowych

$$\mathbf{S}_m = (\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)^T, \tag{3}$$

a $\mathbf{S}_w$ to macierz rozproszeń wewnątrzklasowych

$$\mathbf{S}_w = p_1\Sigma_1 + p_2\Sigma_2. \tag{4}$$



Rysunek 3. Rozrzut międzyklasowy oraz wewnątrzklasowy.

Źródło: opracowanie własne

Wyliczamy pochodną kryterium F i przyrównujemy do zera

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} F(\mathbf{w}) = 0. \tag{5}$$

Optymalny kierunek dyskryminacyjny to

$$\mathbf{w} = \mathbf{S}_w^{-1} \left(\mu_1 - \mu_2\right). \tag{6}$$

Liniowy dyskryminator Fishera ma postać

$$\Psi_{FLD}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } \mathbf{w}^T \mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases} \tag{7}$$

co po podstawieniu (6) i uwzględnieniu, że $\mathbf{S}_w$ jest macierzą symetryczną, daje

$$\Psi_{FLD}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } (\mu_1 - \mu_2)^T \mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases} \tag{8}$$

Próg w_{gr} wyznaczamy minimalizując średnie prawdopodobieństwo błędnej klasyfikacji - jest to punkt graniczny (por. rys. 1 z wykładu nr 1).

Niech $f_1^{\perp}$ i $f_2^{\perp}$ oznaczają jednowymiarowe funkcje gęstości, które są rzutami D-wymiarowych gęstości f_1 i f_2 w klasach na kierunek $\mathbf{w}$ (por. histogramy na rys. (b)).

Zrzutowane rozkłady w klasach $k = 1, 2$ charakteryzują się średnimi

$$m_k = \mathbf{w}^T \mu_k \tag{9}$$

oraz wariancjami

$$\sigma_k^2 = \mathbf{w}^T \Sigma_k \mathbf{w}. \tag{10}$$

Szukamy w_{gr}, które spełnia

$$p_1 f_1^{\perp}(w_{gr}) = p_2 f_2^{\perp}(w_{gr}). \tag{11}$$

Ogólnie można zapisać, że FLD klasyfikuje obraz do klasy $j \in \mathscr{M}$,

$$\Psi_{FLD}(\mathbf{x}) = j, \text{ gdy } |\mathbf{w}^T \mathbf{x} - \mathbf{w}^T \mu_j| < |\mathbf{w}^T \mathbf{x} - \mathbf{w}^T \mu_k|, \tag{12}$$

dla każdej klasy $k \in \mathscr{M}$ różnej od j.

3. Liniowa analiza dyskryminacyjna (LDA)

Liniowa analiza dyskryminacyjna [2] (ang. *Linear Discriminant Analysis*, LDA) zakłada, że funkcje gęstości prawdopodobieństwa w klasach $k = 1, 2$ mają D-wymiarowe rozkłady normalne $\mathcal{N}(\mu_k, \Sigma)$ o równych macierzach kowariancji w klasach.
Można więc powiedzieć, że LDA jest równoważne FLD przy dodatkowych założeniach, że rozkłady w klasach są gaussowskie i macierze kowariancji w klasach są równe

$$\Sigma = \Sigma_1 = \Sigma_2.$$

Liniowa funkcja dyskryminacyjna ma ponownie postać

$$\delta(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 = \sum_{i=1}^{D} w_i x_i + w_0, \tag{13}$$

a klasyfikator

$$\Psi_{LDA}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } \mathbf{w}^T\mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases} \tag{14}$$

gdzie optymalny kierunek dyskryminacyjny to

$$\mathbf{w} = \Sigma^{-1}(\mu_1 - \mu_2). \tag{15}$$

Z warunku

$$p_1 f_1^{\perp}(w_{gr}) = p_2 f_2^{\perp}(w_{gr}) \tag{16}$$

wyznaczymy w_{gr}.

W przypadku dwóch klas rozpatrujemy rozkłady $\mathscr{N}(\mu_1, \Sigma_1)$ oraz $\mathscr{N}(\mu_2, \Sigma_2)$, co po uwzględnieniu (9) i (10) prowadzi do warunku

$$p_1 \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} \exp\left\{(w_{gr} - m_1)^2 / \left(2\sigma_1^2\right)\right\} = p_2 \frac{1}{\sigma_1\sqrt{2\pi}} \exp\left\{(w_{gr} - m_2)^2 / \left(2\sigma_2^2\right)\right\}. \tag{17}$$

Po przekształceniu otrzymujemy równanie kwadratowe

$$(\sigma_1^2 - \sigma_2^2)w_{gr}^2 + (\sigma_1^2 m_2 - \sigma_2^2 m_1)w_{gr} + m_1^2\sigma_2^2 - m_2^2\sigma_1^2 - 2\sigma_1^2\sigma_2^2 \ln\frac{p_1\sigma_1}{p_2\sigma_2} = 0. \tag{18}$$

Przypadki szczególne:

(a) Jeżeli $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2$, to

$$w_{gr} = \frac{m_1 + m_2}{2} + \frac{\sigma^2}{m_2 - m_1} \ln\frac{p_1}{p_2}. \tag{19}$$

(b) Jeżeli $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2$ i $p_1 = p_2$, to

$$w_{gr} = \frac{m_1 + m_2}{2}. \tag{20}$$

(c) Jeżeli $\sigma_1 \neq \sigma_2$, to istnieją dwa pierwiastki równania

$$w_{gr\,1,2} = \frac{\sigma_2^2 m_1 - \sigma_1^2 m_2 \pm \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{(m_2 - m_1)^2 + 2\left(\sigma_2^2 - \sigma_1^2\right) \ln \frac{p_1 \sigma_1}{p_2 \sigma_2}}}{\sigma_2^2 - \sigma_1^2}. \tag{21}$$

(d) Jeżeli $\sigma_1 \neq \sigma_2$, i $m = m_1 = m_2$, to

$$w_{gr\,1,2} = m \pm \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{\frac{2}{\sigma_2^2 - \sigma_1^2} \ln \frac{p_1 \sigma_1}{p_2 \sigma_2}}. \tag{22}$$

Uwaga 1. Czasami w literaturze reguła FLD i LDA są ze sobą utożsamiane.

Uwaga 2. Z równości $\Sigma = \Sigma_1 = \Sigma_2$wynika $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2 = \mathbf{w}^T \Sigma \mathbf{w}$,

dlatego przypadki (a) i (b) odnoszą się do metody LDA.

Uwaga 3. Natomiast przypadki (c) i (d) zachodzą dla $\sigma_1 \neq \sigma_2$,

co może zajść jedynie, gdy $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$. Dopuszczenie różnych macierzy kowariancji

przy założeniu normalności rozkładów w klasach nazywane jest metodą QDA.

4. Kwadratowa analiza dyskryminacyjna (QDA)

W przypadku, gdy pominiemy założenie o równości macierzy kowariancji w gaussowskich rozkładach $\mathcal{N}(\mu_1, \Sigma_1)$ oraz $\mathcal{N}(\mu_2, \Sigma_2)$, otrzymamy klasyfikator zwany kwadratową analizą dyskryminacyjną [3] (ang. *Quadratic Discriminant Analysis*, QDA). Warunek

$$p_1 f_1^{\perp}(w_{gr}) = p_2 f_2^{\perp}(w_{gr}) \tag{23}$$

pozwala wyznaczyć w_{gr} - patrz wzory (21) i (22). Forma reguły klasyfikacyjnej pozostaje bez zmian, tzn.

$$\Psi_{QDA}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{gdy } \mathbf{w}^T\mathbf{x} < w_{gr}, \\ 2, & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases} \tag{24}$$

W przypadku punktów na płaszczyźnie krzywa rozdzielająca klasy przyjmuje postać okręgu, elipsy, paraboli lub hiperboli.

5. Uogólnione liniowe funkcje dyskryminacyjne

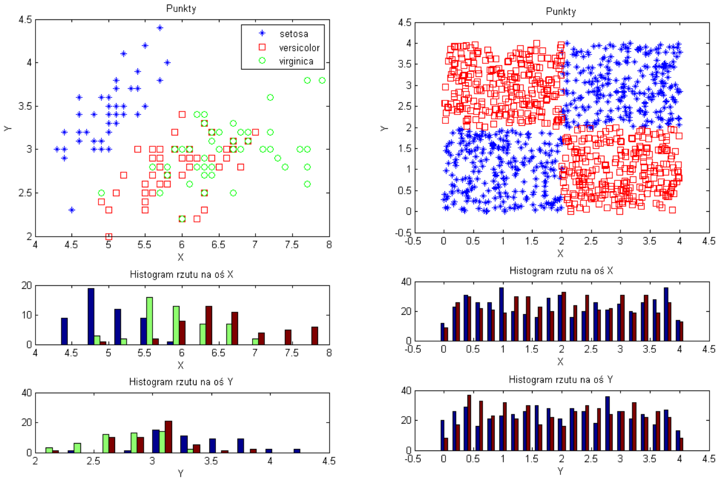
Uogólnione liniowe funkcje dyskryminacyjne [4] (ang. *Generalised Linear Discriminant Functions*, GLDFs), określane także jako *maszyny* ϕ, są to funkcje dyskryminacyjne postaci

$$\delta(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi + w_0 \tag{25}$$

gdzie $\phi = (\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \ldots, \phi_d(\mathbf{x}))^T$ jest funkcja wektorową $\mathbf{x}$.

Funkcja dyskryminująca	Matematyczna forma $\phi_i(\mathbf{x})$
liniowa	$\phi_i(\mathbf{x}) = x_i$
kwadratowa	$\phi_i(\mathbf{x}) = x_{k_1}^{l_1} x_{k_2}^{l_2}$, gdzie $l_1, l_2 = 0$ lub 1
wielomianowa *n*-tego rzędu	$\phi_i(\mathbf{x}) = x_{k_1}^{l_1} \ldots x_{k_n}^{l_n}$, gdzie $l_1, \ldots, l_n = 0$ lub 1
radialna funkcja bazowa	$\phi_i(\mathbf{x}) = \phi(\lvert\mathbf{x} - \mathbf{v}_i\rvert)$
perceptron wielowarstwowy	$\phi_i(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^T \mathbf{v}_i + v_{i0})$, gdzie f to funkcja logistyczna $f(z) = 1/(1 + \exp(-z))$

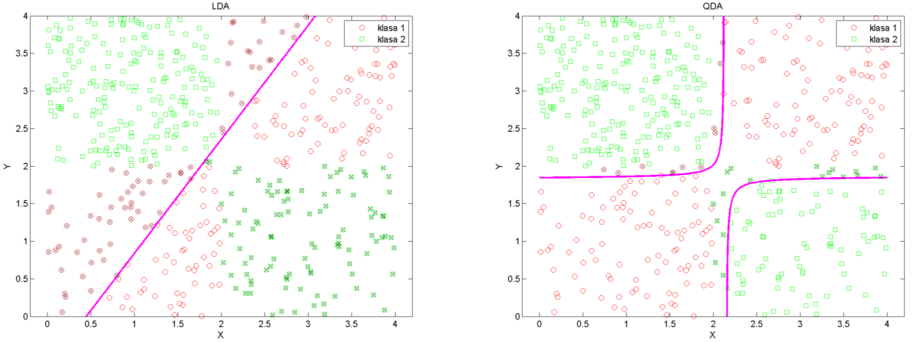
7. Przykłady i dyskusja założeń



a) b)

Rysunek 4. Rozkłady brzegowe: (a) dla danych Fisheriris, (b) rozkłady jednostajne.

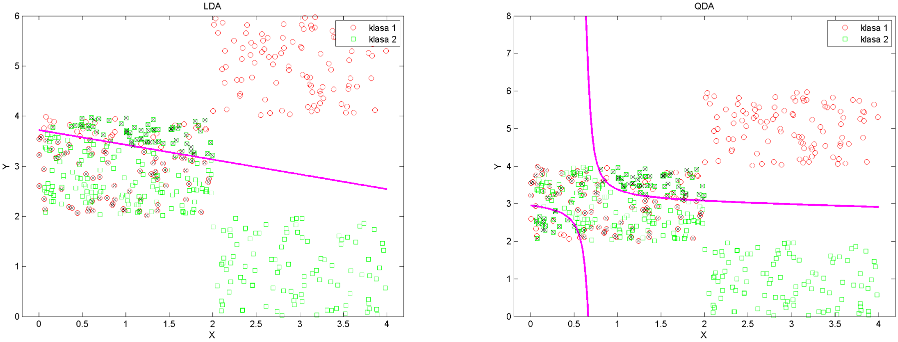
Źródło: opracowanie własne



a) b)

Rysunek 5. (a) Prosta rozdzielająca klasy za pomocą LDA.
(b) Krzywe rozdzielające klasy za pomocą QDA.

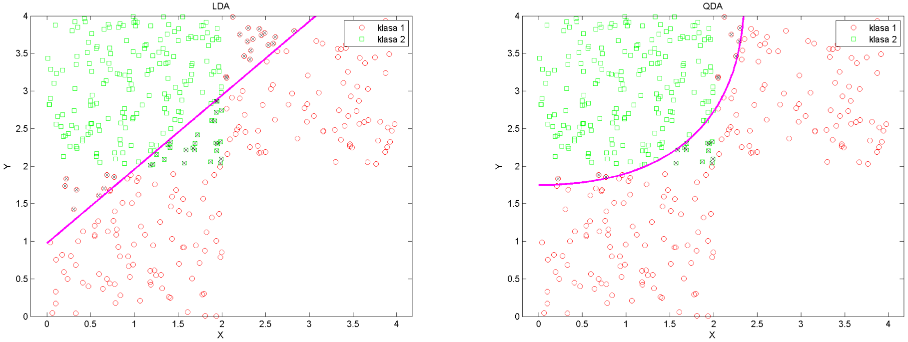
Źródło: opracowanie własne



a) b)

Rysunek 6. (a) Prosta rozdzielająca klasy za pomocą LDA.
(b) Krzywe rozdzielające klasy za pomocą QDA.

Źródło: opracowanie własne



a) b)

Rysunek 7. (a) Prosta rozdzielająca klasy za pomocą LDA.
(b) Krzywe rozdzielające klasy za pomocą QDA.

Źródło: opracowanie własne

Literatura

[1] R.A. Fisher, *The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems*, Annals of Eugenics 7 (2): 179–188, (1936)

[2] C.M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer Series: Information Science and Statistics (2006)

[3] J. Koronacki, J. Ćwik, *Statystyczne systemy uczące się*, WNT, Warszawa (2005)

[4] A.R. Webb, K.D. Copsey, *Statistical Pattern Recognition*, 3rd ed., Wiley, (2011)

[5] W. Malina, M. Smiatacz, *Rozpoznawanie obrazów*, Exit, Warszawa, (2011)