线性判别分析（Linear Discriminant Analysis）

JerryLead
csxulijie@gmail.com

1. 问题

之前我们讨论的 PCA、ICA 也好，对样本数据来言，可以是没有类别标签 y 的。回想我们做回归时，如果特征太多，那么会产生不相关特征引入、过度拟合等问题。我们可以使用 PCA 来降维，但 PCA 没有将类别标签考虑进去，属于无监督的。

比如回到上次提出的文档中含有“learn”和“study”的问题，使用 PCA 后，也许可以将这两个特征合并为一个，降了维度。但假设我们的类别标签 y 是判断这篇文章的 topic 是不是有关学习方面的。那么这两个特征对 y 几乎没什么影响，完全可以去除。

再举一个例子，假设我们对一张 100*100 像素的图片做人脸识别，每个像素是一个特征，那么会有 10000 个特征，而对应的类别标签 y 仅仅是 0/1 值，1 代表是人脸。这么多特征不仅训练复杂，而且不必要特征对结果会带来不可预知的影响，但我们想得到降维后的一些最佳特征（与 y 关系最密切的），怎么办呢？

2. 线性判别分析（二类情况）

回顾我们之前的 logistic 回归方法，给定 m 个 n 维特征的训练样例$x^{(i)}\{x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}\}$（i 从 1 到 m），每个$x^{(i)}$对应一个类标签$y^{(i)}$。我们就是要学习出参数θ，使得$y^{(i)} = g(\theta)^T x^{(i)}$（g 是 sigmoid 函数）。

现在只考虑二值分类情况，也就是 y=1 或者 y=0。

为了方便表示，我们先换符号重新定义问题，给定特征为 d 维的 N 个样例，$x^{(i)}\{x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}\}$，其中有$N_1$个样例属于类别$\omega_1$，另外$N_2$个样例属于类别$\omega_2$。

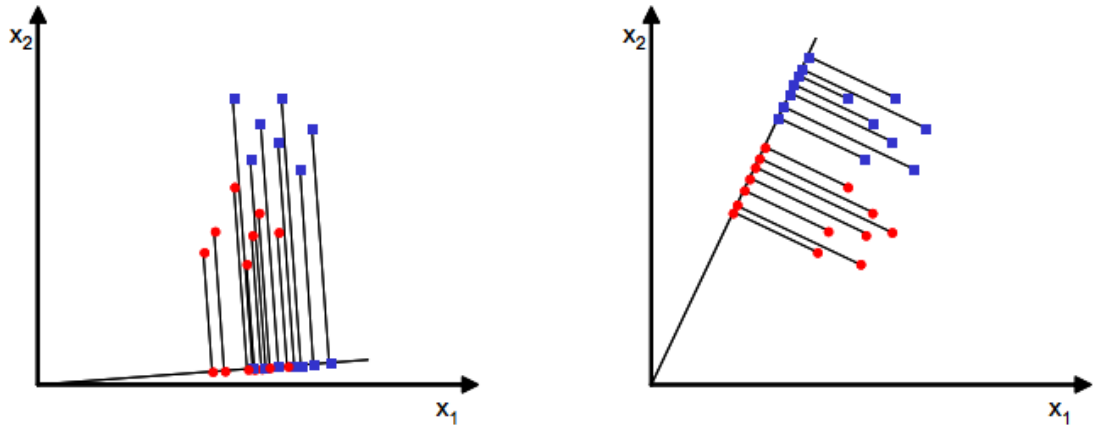
现在我们觉得原始特征数太多，想将 d 维特征降到**只有一维**，而又要保证类别能够“清晰”地反映在低维数据上，也就是这一维就能决定每个样例的类别。

我们将这个最佳的向量称为 w（d 维），那么样例 x（d 维）到 w 上的投影可以用下式来计算

$$y = w^T x$$

这里得到的 y 值不是 0/1 值，而是 x 投影到直线上的点到原点的距离。

当 x 是二维的，我们就是要找一条直线（方向为 w）来做投影，然后寻找最能使样本点分离的直线。如下图：



从直观上来看，右图比较好，可以很好地将不同类别的样本点分离。

接下来我们从定量的角度来找到这个最佳的 w。
首先我们寻找每类样例的均值（中心点），这里 i 只有两个

$$\mu_i = \frac{1}{N_i}\sum_{x\in\omega_i} x$$

由于 x 到 w 投影后的样本点均值为

$$\widetilde{\mu_i} = \frac{1}{N_i}\sum_{y\in\omega_i} y = \frac{1}{N_i}\sum_{x\in\omega_i} w^T x = w^T\mu_i$$

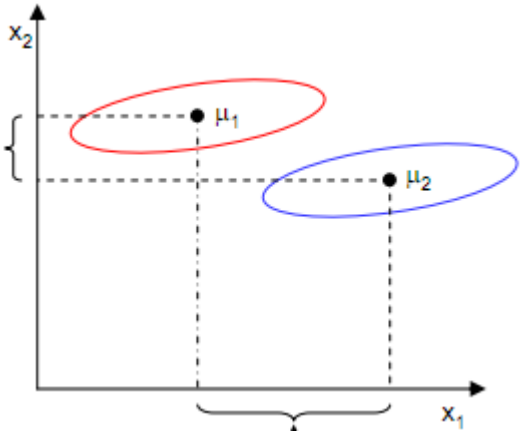
由此可知，投影后的的均值也就是样本中心点的投影。

什么是最佳的直线（w）呢？我们首先发现，能够使投影后的两类样本中心点尽量分离的直线是好的直线，定量表示就是：

$$J(w) = |\widetilde{\mu_1} - \widetilde{\mu_2}| = |w^T(\mu_1 - \mu_2)|$$

J(w)越大越好。

但是只考虑 J(w)行不行呢？不行，看下图



样本点均匀分布在椭圆里，投影到横轴 x1 上时能够获得更大的中心点间距 J(w)，但是由于有重叠，x1 不能分离样本点。投影到纵轴 x2 上，虽然 J(w)较小，但是能够分离样本点。因此我们还需要考虑样本点之间的方差，方差越大，样本点越难以分离。

我们使用另外一个度量值，称作散列值（scatter），对投影后的类求散列值，如下

$$\tilde{s}_i^2 = \sum_{y \in \omega_i} (y - \tilde{\mu}_i)^2$$

从公式中可以看出，只是少除以样本数量的方差值，散列值的几何意义是样本点的密集程度，值越大，越分散，反之，越集中。

而我们想要的投影后的样本点的样子是：不同类别的样本点越分开越好，同类的越聚集越好，也就是均值差越大越好，散列值越小越好。正好，我们可以使用 J(w)和 S 来度量，最终的度量公式是

$$\mathrm{J(w)} = \frac{|\widetilde{\mu_1} - \widetilde{\mu_2}|^2}{\widetilde{s_1}^2 + \widetilde{s_2}^2}$$

接下来的事就比较明显了，我们只需寻找使 J(w)最大的 w 即可。

先把散列值公式展开

$$\tilde{s}_i^2 = \sum_{y \in \omega_i} (y - \tilde{\mu}_i)^2 = \sum_{x \in \omega_i} (w^T x - w^T \mu_i)^2 = \sum_{x \in \omega_i} w^T (x - \mu_i)(x - \mu_i)^T w$$

我们定义上式中中间那部分

$$\mathrm{S}_i = \sum_{x \in \omega_i} (x - \mu_i)(x - \mu_i)^T$$

这个公式的样子不就是少除以样例数的协方差矩阵么，称为散列矩阵（scatter matrices）

我们继续定义

$$\mathrm{S}_w = \mathrm{S}_1 + \mathrm{S}_2$$

S_w称为 **Within**-class scatter matrix。

那么回到上面$\tilde{s}_i^2$的公式，使用S_i替换中间部分，得

$$\tilde{s}_i^2 = w^{\mathrm{T}} \mathrm{S}_i w$$

$$\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2 = w^{\mathrm{T}} \mathrm{S}_w w$$

然后，我们展开分子

$$(\tilde{\mu}_1 - \tilde{\mu}_2)^2 = (\mathrm{w}^{\mathrm{T}}\mu_1 - \mathrm{w}^{\mathrm{T}}\mu_2)^2 = \mathrm{w}^{\mathrm{T}} \underbrace{(\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)^{\mathrm{T}}}_{\mathrm{S_B}} \mathrm{w} = \mathrm{w}^{\mathrm{T}} \mathrm{S_B} \mathrm{w}$$

S_B称为 **Between**-class scatter，是两个向量的外积，虽然是个矩阵，但秩为 1。

那么 J(w)最终可以表示为

$$\mathrm{J(w)} = \frac{w^{\mathrm{T}}\mathrm{S}_B w}{w^{\mathrm{T}}\mathrm{S}_w w}$$

在我们求导之前，需要对分母进行归一化，因为不做归一的话，w 扩大任何倍，都成立，我们就无法确定 w。因此我们打算令$||w^{\mathrm{T}}\mathrm{S}_w w|| = 1$，那么加入拉格朗日乘子后，求导

$$c(w) = w^t S_B w - \lambda(w^t S_W w - 1)$$

$$\Rightarrow \frac{dc}{dw} = 2S_B w - 2\lambda S_W w = 0$$

$$\Rightarrow S_B w = \lambda S_W w$$

其中用到了矩阵微积分，求导时可以简单地把$w^{\mathrm{T}}\mathrm{S}_w w$当做$\mathrm{S}_w w^2$看待。
如果S_w可逆，那么将求导后的结果两边都乘以S_w^{-1}，得

$$S_W{}^{-1} S_B w = \lambda w$$

这个可喜的结果就是 w 就是矩阵$S_w^{-1}\mathrm{S}_B$的特征向量了。
这个公式称为 Fisher linear discrimination。

等等，让我们再观察一下，发现前面S_B的公式

$$\mathrm{S}_B = (\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)^T$$

那么

$$\mathrm{S}_B \mathrm{w} = (\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)^T w = (\mu_1 - \mu_2) * \lambda_{\mathrm{w}}$$

代入最后的特征值公式得

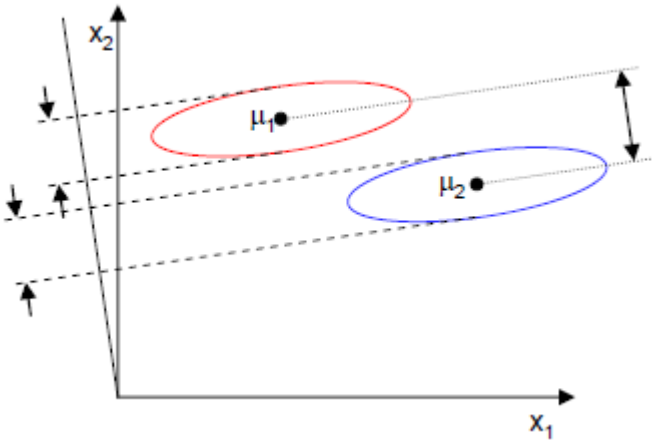
$$\mathrm{S}_w^{-1}\mathrm{S}_B \mathrm{w} = \mathrm{S}_w^{-1}(\mu_1 - \mu_2) * \lambda_{\mathrm{w}} = \lambda w$$

由于对 w 扩大缩小任何倍不影响结果，因此可以约去两边的未知常数λ和λ_{w}，得到

$$w = \mathrm{S}_w^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$$

至此，我们只需要求出原始样本的均值和方差就可以求出最佳的方向 w，这就是 Fisher 于 1936 年提出的线性判别分析。

看上面二维样本的投影结果图：



3. 线性判别分析（多类情况）

前面是针对只有两个类的情况，假设类别变成多个了，那么要怎么改变，才能保证投影后类别能够分离呢？

我们之前讨论的是如何将 d 维降到一维，现在类别多了，一维可能已经不能满足要求。假设我们有 C 个类别，需要 K 维向量（或者叫做基向量）来做投影。

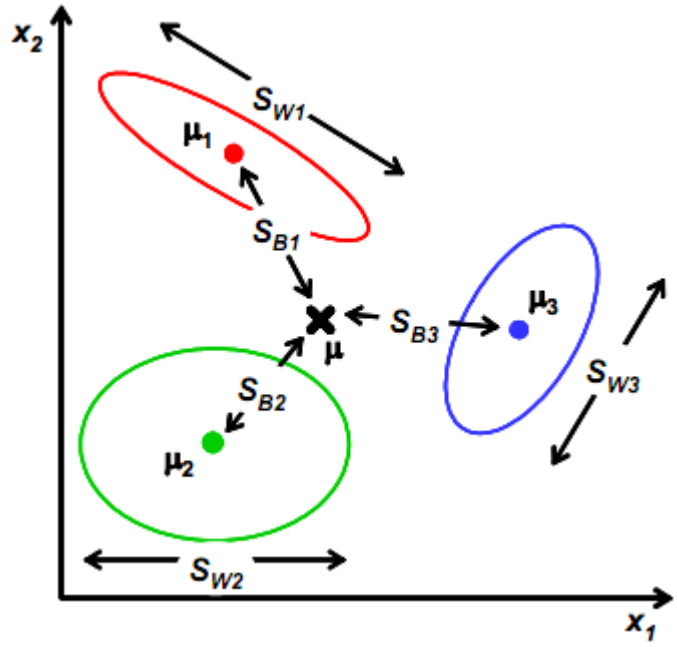
将这 K 维向量表示为$W = [w_1|w_2|\dots|w_K]$。

我们将样本点在这 K 维向量投影后结果表示为$[y_1, y_2, \dots, y_K]$，有以下公式成立

$$y_i = w_i^T x$$
$$y = W^T x$$

为了像上节一样度量 J(w)，我们打算仍然从类间散列度和类内散列度来考虑。

当样本是二维时，我们从几何意义上考虑：



其中μ_i和S_w与上节的意义一样，S_{w1}是类别 1 里的样本点相对于该类中心点μ_1的散列程度。S_{B1}变成类别 1 中心点相对于样本中心点μ的协方差矩阵，即类 1 相对于μ的散列程度。

S_w为

$$S_w = \sum_{i=1}^{C} S_{wi}$$

S_{wi}的计算公式不变，仍然类似于类内部样本点的协方差矩阵

$$S_{wi} = \sum_{x \in \omega_i} (x - \mu_i)(x - \mu_i)^T$$

S_B需要变，原来度量的是两个均值点的散列情况，现在度量的是每类均值点相对于样本中心的散列情况。类似于将μ_i看作样本点，μ是均值的协方差矩阵，如果某类里面的样本点较多，那么其权重稍大，权重用 Ni/N 表示，但由于 J(w)对倍数不敏感，因此使用 Ni。

$$S_B = \sum_{i=1}^{C} N_i \, (\mu_i - \mu)(\mu_i - \mu)^T$$

其中

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{\forall x} x = \frac{1}{N} \sum_{x \in \omega_i} N_i \mu_i$$

μ是所有样本的均值。

上面讨论的都是在投影前的公式变化，但真正的 J(w)的分子分母都是在投影后计算的。下面我们看样本点投影后的公式改变：

这两个是第 i 类样本点在某基向量上投影后的均值计算公式。

$$\widetilde{\mu_i} = \frac{1}{N_i}\sum_{y\in\omega_i} y$$

$$\tilde{\mu} = \frac{1}{N}\sum_{\forall y} y$$

下面两个是在某基向量上投影后的S_w和S_B

$$\widetilde{S_w} = \sum_{i=1}^{C}\sum_{y\in\omega_i}(y-\widetilde{\mu_i})(y-\widetilde{\mu_i})^T$$

$$\widetilde{S_B} = \sum_{i=1}^{C} N_i(\widetilde{\mu_i}-\tilde{\mu})(\widetilde{\mu_i}-\tilde{\mu})^T$$

其实就是将μ换成了$\tilde{\mu}$。

综合各个投影向量（w）上的$\widetilde{S_w}$和$\widetilde{S_B}$，更新这两个参数，得到

$$\widetilde{S_w} = W^T S_w W$$
$$\widetilde{S_B} = W^T S_B W$$

W 是基向量矩阵，$\widetilde{S_w}$是投影后的各个类内部的散列矩阵之和，$\widetilde{S_B}$是投影后各个类中心相对于全样本中心投影的散列矩阵之和。

回想我们上节的公式 J(w)，分子是两类中心距，分母是每个类自己的散列度。现在投影方向是多维了（好几条直线），分子需要做一些改变，我们不是求两两样本中心距之和（这个对描述类别间的分散程度没有用），而是求每类中心相对于全样本中心的散列度之和。

然而，最后的 J(w)的形式是

$$J(w) = \frac{|\widetilde{S_B}|}{|\widetilde{S_w}|} = \frac{|W^T S_B W|}{|W^T S_w W|}$$

由于我们得到的分子分母都是散列矩阵，要将矩阵变成实数，需要取行列式。又因为行列式的值实际上是矩阵特征值的积，一个特征值可以表示在该特征向量上的发散程度。因此我们使用行列式来计算（此处我感觉有点牵强，道理不是那么有说服力）。

整个问题又回归为求 J(w)的最大值了，我们固定分母为 1，然后求导，得出最后结果（我翻查了很多讲义和文章，没有找到求导的过程）

$$S_B w_i = \lambda S_w w_i$$

与上节得出的结论一样

$$S_w^{-1} S_B w_i = \lambda w_i$$

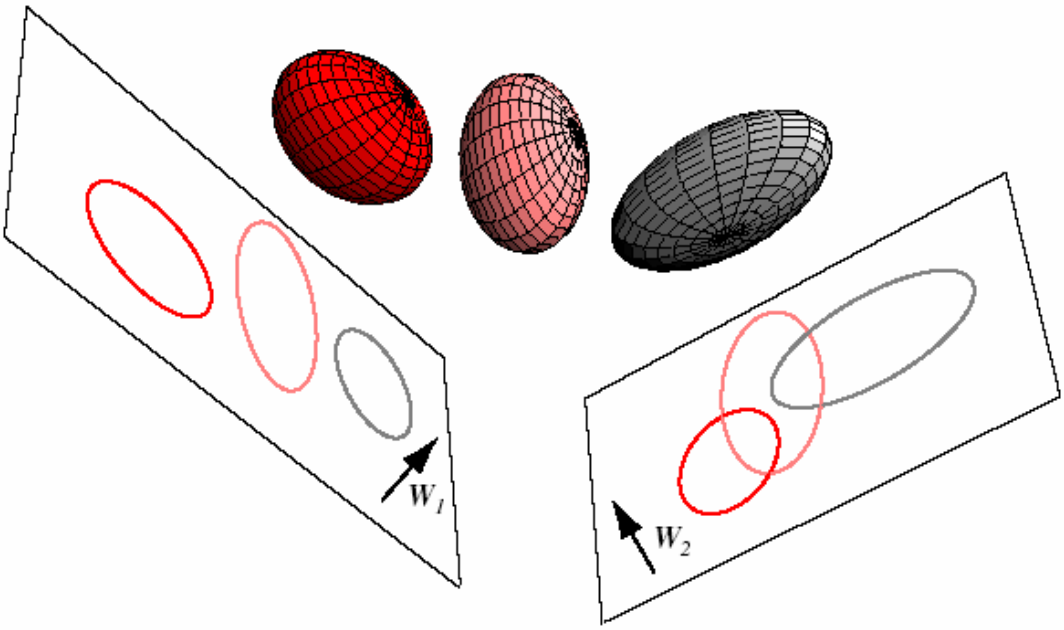
最后还归结到了求矩阵的特征值上来了。首先求出$S_w^{-1}S_B$的特征值，然后取前 K 个特征向量组成 W 矩阵即可。

注意：由于S_B中的$(\mu_i - \mu)$ 秩为 1，因此S_B的秩至多为 C（矩阵的秩小于等于各个相加矩阵的秩的和）。由于知道了前 C-1 个μ_i后，最后一个μ_C可以有前面的μ_i来线性表示，因此S_B的秩至多为 C-1。那么 K 最大为 C-1，即特征向量最多有 C-1 个。特征值大的对应的特征向量分割性能最好。

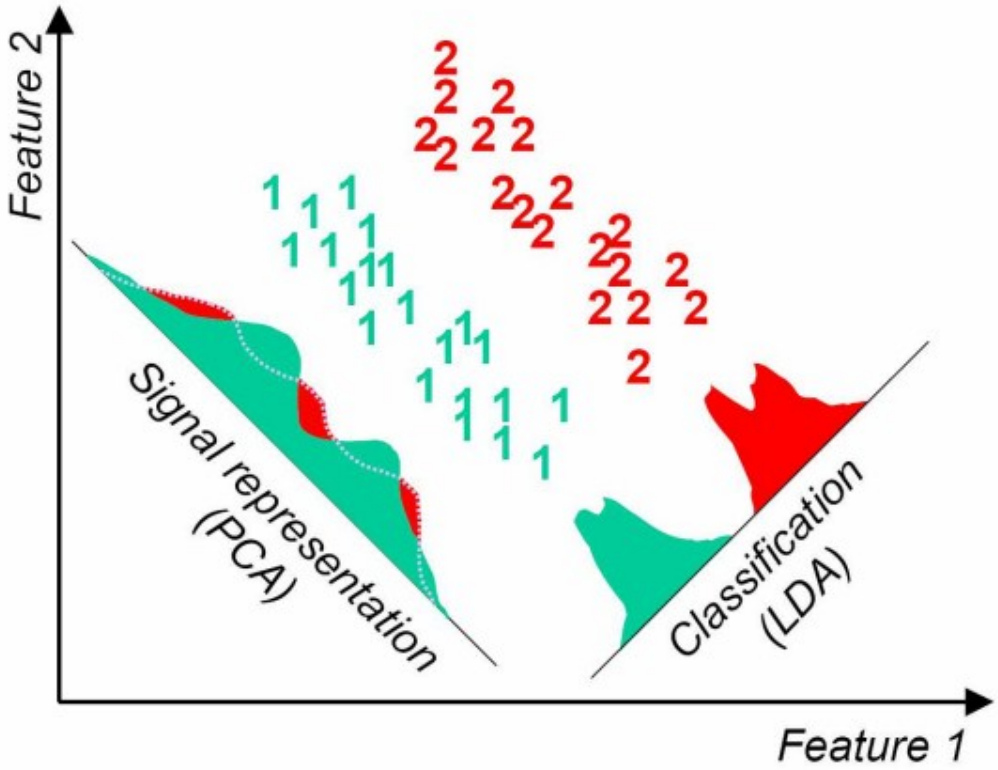
由于$S_w^{-1}S_B$不一定是对称阵，因此得到的 K 个特征向量不一定正交，这也是与 PCA 不同的地方。

4. 实例

将 3 维空间上的球体样本点投影到二维上，W1 相比 W2 能够获得更好的分离效果。



PCA 与 LDA 的降维对比：



PCA 选择样本点投影具有最大方差的方向，LDA 选择分类性能最好的方向。

LDA 既然叫做线性判别分析，应该具有一定的预测功能，比如新来一个样例 x，如何确定其类别？

拿二值分来来说，我们可以将其投影到直线上，得到 y，然后看看 y 是否在超过某个阈值 y0，超过是某一类，否则是另一类。而怎么寻找这个 y0 呢？

看

$$y = w^T x$$

根据中心极限定理，独立同分布的随机变量和符合高斯分布，然后利用极大似然估计求

$$P(y|C_i)$$

然后用决策理论里的公式来寻找最佳的 y0，详情请参阅 PRML。

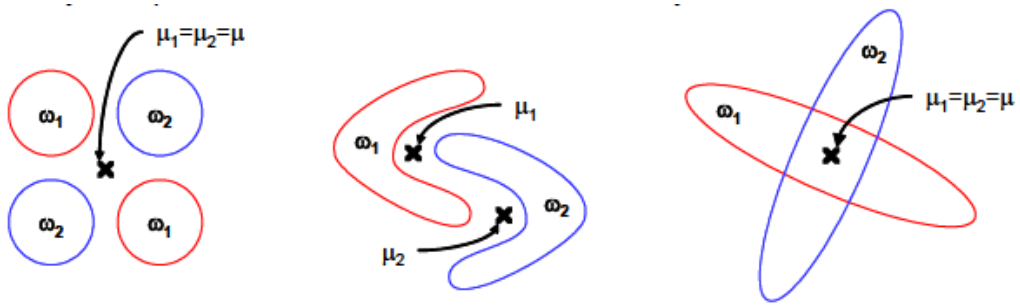
这是一种可行但比较繁琐的选取方法，可以看第 7 节（一些问题）来得到简单的答案。

5. 使用 LDA 的一些限制

1、 LDA 至多可生成 C-1 维子空间

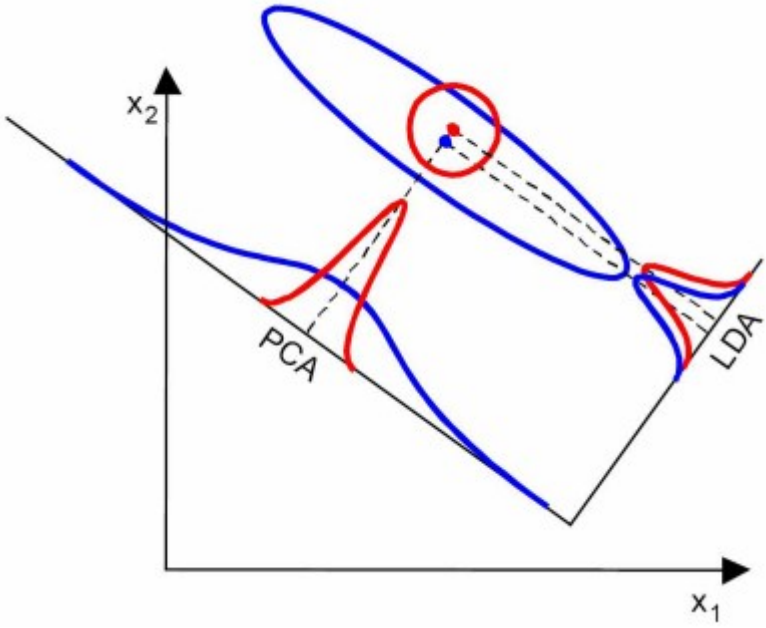
LDA 降维后的维度区间在[1,C-1]，与原始特征数 n 无关，对于二值分类，最多投影到 1 维。

2、 LDA 不适合对非高斯分布样本进行降维。



上图中红色区域表示一类样本，蓝色区域表示另一类，由于是 2 类，所以最多投影到 1 维上。不管在直线上怎么投影，都难使红色点和蓝色点内部凝聚，类间分离。

3、 LDA 在样本分类信息依赖方差而不是均值时，效果不好。



上图中，样本点依靠方差信息进行分类，而不是均值信息。LDA 不能够进行有效分类，因为 LDA 过度依靠均值信息。

4、 LDA 可能过度拟合数据。

6. LDA 的一些变种

1、 非参数 LDA

非参数 LDA 使用本地信息和 K 临近样本点来计算S_B,使得S_B是全秩的，这样我们可以抽取多余 C-1 个特征向量。而且投影后分离效果更好。

2、 正交 LDA

先找到最佳的特征向量，然后找与这个特征向量正交且最大化 fisher 条件的向量。这种方法也能摆脱 C-1 的限制。

3、 一般化 LDA

引入了贝叶斯风险等理论

4、 核函数 LDA

将特征x → Φ(x)，使用核函数来计算。

7. 一些问题

上面在多值分类中使用的

$$S_B = \sum_{i=1}^{C} N_i (\mu_i - \mu)(\mu_i - \mu)^T$$

是带权重的各类样本中心到全样本中心的散列矩阵。如果 C=2（也就是二值分类时）套用这个公式，不能够得出在二值分类中使用的S_B。

$$S_B = \sum_{i=1}^{C} (\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)^T$$

因此二值分类和多值分类时求得的S_B会不同，而S_W意义是一致的。

对于二值分类问题，令人惊奇的是最小二乘法和 Fisher 线性判别分析是一致的。

下面我们证明这个结论，并且给出第 4 节提出的 y0 值得选取问题。

回顾之前的线性回归，给定 N 个 d 维特征的训练样例$x^{(i)}\{x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}\}$（i 从 1 到 N），每个$x^{(i)}$对应一个类标签$y^{(i)}$。我们之前令 y=0 表示一类，y=1 表示另一类，现在我们为了证明最小二乘法和 LDA 的关系，我们需要做一些改变

$$\begin{cases} y = \frac{N}{N_1}，样例属于有N_1个元素的类C_1 \\ y = -\frac{N}{N_2}，样例属于有N_2个元素的类C_2 \end{cases}$$

就是将 0/1 做了值替换。

我们列出最小二乘法公式

$$E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} (w^T x^{(i)} + w_0 - y^{(i)})^2$$

w 和w_0是拟合权重参数。

分别对w_0和 w 求导得

$$\sum_{i=1}^{N} (w^T x^{(i)} + w_0 - y^{(i)}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} (w^T x^{(i)} + w_0 - y^{(i)}) x^{(i)} = 0$$

从第一个式子展开可以得到

$$w^T N\mu + Nw_0 - \sum_{i=1}^{N} y^{(i)} = w^T N\mu + Nw_0 - \left(N_1 \frac{N}{N_1} - N_2 \frac{N}{N_2}\right) = 0$$

消元后，得

$$w_0 = -w^T \mu$$

$$\mu = \frac{1}{\mathrm{N}} \sum_{i=1}^{N} x^{(i)} = \frac{1}{\mathrm{N}} (N_1 \mu_1 + N_2 \mu_2)$$

可以证明第二个式子展开后和下面的公式等价

$$\left(S_w + \frac{N_1 N_2}{N} S_B\right) w = N(\mu_1 - \mu_2)$$

其中S_w和S_B与二值分类中的公式一样。

由于$S_B \mathrm{w} = (\mu_1 - \mu_2) * \lambda_{\mathrm{w}}$

因此，最后结果仍然是

$$w = \mathrm{S}_w^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$$

这个过程从几何意义上去理解也就是变形后的线性回归（将类标签重新定义），线性回归后的直线方向就是二值分类中 LDA 求得的直线方向 w。

好了，我们从改变后的 y 的定义可以看出 y>0 属于类C_1，y<0 属于类C_2。因此我们可以选取 y0=0，即如果$\mathrm{y(x)} = w^T x + w_0 > 0$，就是类$C_1$，否则是类$C_2$。

写了好多，挺杂的，还有个 topic 模型也叫做 LDA，不过名字叫做 Latent Dirichlet Allocation，第二作者就是 Andrew Ng 大牛，最后一个他导师 Jordan 泰斗了，什么时候拜读后再写篇总结发上来吧。