UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

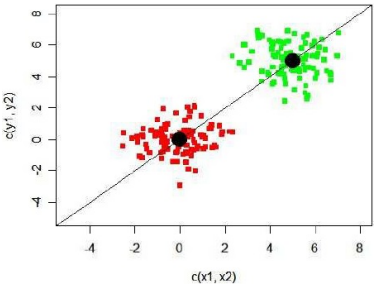
Análisis Discriminante

Alan Reyes-Figueroa

Introducción a la Ciencia de Datos (Aula 27) 15.abril.2021

Análisis discriminante

Queremos separar o clasificar un conjunto de datos en 2 clases.
Punto de partida: ¿en cuál dirección proyectar los datos para separar los puntos de diferentes clases lo mayor posible?

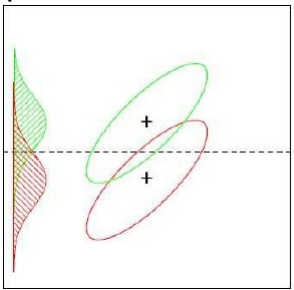


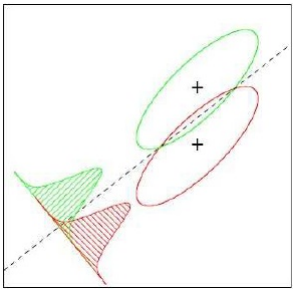
Después usar un clasificador lineal del tipo $\widehat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{1}(\mathbf{l}^T\mathbf{x} > l_o)$.

Análisis discriminante

¿ Cómo definir “separar las clases lo mayor posible”?

Primera idea:
Considerar los centroides de cada clase como representantes de cada clase. Separamos estos lo más posible.
Problema: hay que tomar en cuenta la estructura de la covarianza.





Análisis discriminante

Supongamos que tenemos un conjunto de datos $(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$ divididos en dos clases: 0 y 1.
La variabilidad o dispersión de los datos puede escribirse como

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\sum_{i=1}^{n}\bar{x}^2 = \mathbf{x}^T\mathbf{x} - n\mathbf{x}^T\mathbf{1}^T\mathbf{1}\bar{x},$$

la cual es una expresión de la forma $\mathbf{x}^T(I - \mathbf{1}^T\mathbf{1})\mathbf{x} = \mathbf{x}^T(I - J)\mathbf{x} = \mathbf{x}^T P\mathbf{x}$, donde $P = I - J = I - \mathbf{1}^T\mathbf{1}$ funciona como una matriz de covarianza.

Queremos maximizar la separación entre ambas clases. Si

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T A\mathbf{x} &= \text{dispersión entre clases}, \\ \mathbf{x}^T B\mathbf{x} &= \text{discrepancia dentro de cada clase}, \end{aligned}$$

estamos interesados en calcular los valores extremos del cociente $\frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T B\mathbf{x}}$.

Teorema (Cociente de Rayleigh)

Si $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ es simétrica, $B \in \mathbb{R}^{d\times d}$ es simétrica y positiva definida, entonces los valores extremos $\sup_{\mathbf{x}\neq \mathbf{o}} \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T B\mathbf{x}} = \lambda_1$, $\inf_{\mathbf{x}\neq \mathbf{o}} \frac{\mathbf{x}^T A\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T B\mathbf{x}} = \lambda_n$, corresponden a los autovalores máximo y mínimo, respectivamente, de $B^{-1}A$, y los valores extremos se alcanzan en $\mathbf{q}_1$ y $\mathbf{q}_n$, los autovectores correspondientes. □

Corolario

Si $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^d$, $B \in \mathbb{R}^{d\times d}$ es simétrica y positiva definida, entonces

$$\sup_{\mathbf{x}\neq \mathbf{o}} \frac{(\mathbf{a}^T\mathbf{x})}{\mathbf{x}^T B\mathbf{x}} = \sup_{\mathbf{x}\neq \mathbf{o}} \frac{\mathbf{x}^T(\mathbf{a}\mathbf{a}^T)\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T B\mathbf{x}} = \mathbf{a}^T B^{-1}\mathbf{a},$$

se alcanza en $\mathbf{x} = kB^{-1}\mathbf{a}$. □

Análisis discriminante

Eso fue lo que Fisher (1936) estudió en

THE USE OF MULTIPLE MEASUREMENTS IN TAXONOMIC PROBLEMS

By R. A. FISHER, Sc.D., F.R.S.

Table I shows measurements of the flowers of fifty plants each of the two species *Iris setosa* and *I. versicolor*, found growing together in the same colony and measured by Dr E. Anderson, to whom I am indebted for the use of the data. Four flower measurements are given. We shall first consider the question: What linear function of the four measurements

$$X = \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \lambda_3 x_3 + \lambda_4 x_4$$

will maximize the ratio of the difference between the specific means to the standard deviations within species? The observed means and their differences are shown in Table II.

Análisis discriminante

Trabajó con el conjunto de datos IRIS (colectado por Edgar Anderson): 150 datos, 4 atributos, 3 clases $\Rightarrow$ $X \in \mathbb{R}^{150\times 4}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{150}$.

Dada una observación $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4$, Fisher se preguntó si existe alguna función lineal

$$\lambda^T \bar{\mathbf{x}} = \lambda_1 \bar{x}_1 + \lambda_2 \bar{x}_2 + \lambda_3 \bar{x}_3 + \lambda_4 \bar{x}_4$$

de las medias, tal que maximice el cociente de las diferencias entre las medias y la dispersión (varianza) dentro de cada grupo.

Consideremos el caso de dos poblaciones, con medias $\mu_1, \mu_2 \in \mathbb{R}^4$. Denotamos la diferencia de ambas por

$$\mathbf{d} = \mu_1 - \mu_2 = (d_1, d_2, d_3, d_4)^T.$$

Análisis discriminante

Consideramos la expresión lineal

$$D = \lambda^T \mathbf{d} = \lambda_1 d_1 + \lambda_2 d_2 + \lambda_3 d_3 + \lambda_4 d_4 = \lambda^T(\mu_1 - \mu_2),$$

y

$$S = Var(\lambda^T \bar{\mathbf{x}}_1 - \lambda^T \bar{\mathbf{x}}_2) = \lambda^T Var(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)\lambda = \lambda^T \Sigma \lambda.$$

Queremos maximizar la cantidad

$$\frac{D^2}{S} = \frac{(\lambda^T \mathbf{d})^2}{\lambda^T \Sigma \lambda} = \frac{(\mathbf{d}^T \lambda)^2}{\lambda^T \Sigma \lambda}. \tag{1}$$

Por el corolario anterior, el óptimo está dado por el múltiplo $\lambda^* = k\Sigma^{-1}\mathbf{d} = k\Sigma^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$.

Análisis discriminante

Fisher obtivo el mismo resultado sin usar propiedades espectrales, sino derivando la expresión (1):

$$\nabla_\lambda \frac{D^2}{S} = \nabla_\lambda \frac{(\mathbf{d}^T\lambda)^2}{\lambda^T\Sigma\lambda} = \frac{2(\mathbf{d}^T\lambda)(\lambda^T\Sigma\lambda)\mathbf{d} - (\mathbf{d}^T\lambda)^2 \cdot 2\Sigma\lambda}{(\lambda^T\Sigma\lambda)^2} = 0,$$

$$\Rightarrow\ (\mathbf{d}^T\lambda)[(\lambda^T\Sigma\lambda)\mathbf{d} - (\lambda^T\mathbf{d})\Sigma\lambda] = 0\ \Rightarrow\ (\lambda^T\Sigma\lambda)\mathbf{d} = (\lambda^T\mathbf{d})\Sigma\lambda$$

De ahí que

$$\Sigma\lambda = \frac{\lambda^T\Sigma\lambda}{\lambda^T\mathbf{d}}\mathbf{d} = t\mathbf{d},$$

y se tiene que $\lambda^* = t\Sigma^{-1}\mathbf{d} = t\Sigma^{-1}(\mu_1 - \mu_2)$.

Análisis discriminante

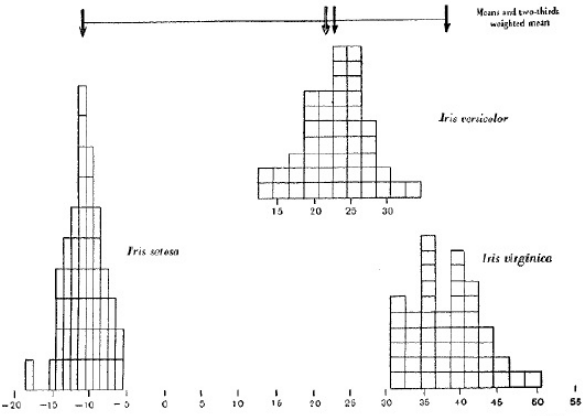


Fig. 1. Frequency histograms of the discriminating linear function, for three species of *Iris*.

Resultados obtenidos por Fisher para el conjunto de datos IRIS.

Criterios de separabilidad

La **dispersión dentro de clases** (*variance within groups*) S_W está determinada por la suma de las varianzas de cada grupo:

$$S_W = S_1 + S_2 + \ldots, S_K,$$

donde $S_i = \sum_{j=1}^{n_i} (\mathbf{x}_{ij} - \bar{\mathbf{x}}_i)^T (\mathbf{x}_{ij} - \bar{\mathbf{x}}_i)$, $\bar{\mathbf{x}}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \mathbf{x}_{ij}$. Por otro lado, la

dispesión entre clases (*variance between groups*) S_B es

$$S_B = \sum_{i=1}^{k} n_i (\bar{\mathbf{x}}_i - \bar{\mathbf{x}})^T (\bar{\mathbf{x}}_i - \bar{\mathbf{x}}),$$

con $\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} \mathbf{x}_{ij}$, $n = n_1 + n_2 + \ldots + n_k$.

La **dispersión total** es $S_T = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} (\mathbf{x}_{ij} - \bar{\mathbf{x}})^T (\mathbf{x}_{ij} - \bar{\mathbf{x}})$.

Criterios de separabilidad

Propiedad

$$S_T = S_W + S_B. \square$$

Obs!

- La varianza total (de datos $\mathbf{x}_{ij}$ agrupados en k clases) puede descomponerse en dos factores:
  - variabilidad dentro de cada grupo S_W,
  - variabilidad entre grupos S_B.
- Relación con ANOVA.
- Podemos combinar las técnicas para determinar la mayor separación entre grupos, con técnicas de reducción de dimensión: Aplicamos una transformación lineal $W : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^p$, $p < r$, a los datos $\tilde{\mathbb{X}} = W\mathbb{X}$. Definimos en ese caso $\tilde{S}_W = W^T S_W W$, $\tilde{S}_B = W^T S_B W$, y $\tilde{S}_T = W^T S_T W$.

Criterios de separabilidad

Tenemos los siguientes criterios de separabilidad:

- El criterio estándar: la variabilidad entre grupos, sobre la variabilidad dentro de cada grupo

$$J(W) = \frac{\tilde{S}_B}{\tilde{S}_W},$$

- $J(W) = \operatorname{tr}(\tilde{S}_W^{-1}\tilde{S}_B)$,
- $J(W) = \operatorname{tr}(\tilde{S}_B) - \lambda \operatorname{tr}(\tilde{S}_W)$,
- $J(W) = \dfrac{\operatorname{tr} \tilde{S}_B}{\operatorname{tr} \tilde{S}_W}$,
- $J(W) = \log\det(\tilde{S}_W^{-1}\tilde{S}_B) = \sum_{i=1}^{r} \log \lambda_i$

Enfoque probabilístico

Considera el clasificador bayesiano óptimo

$$\widehat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{1}\Big(\frac{\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 1)}{\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 0)} > c_1\Big), \quad \text{con } c_1 = \frac{\lambda_{01}\,\mathbb{P}(Y = 0)}{\lambda_{10}\,\mathbb{P}(Y = 1)}.$$

Vamos a suponer, por ahora, que las dos poblaciones siguen distribuciones normales multivariadas:

$$f_j(\mathbf{x}) = \mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = j) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma_j|^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(\mathbf{x}-\mu_j))}.$$

Y así

$$\log \frac{\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 1)}{\mathbb{P}(X = \mathbf{x} \mid Y = 0)} = -\frac{(\mathbf{x}-\mu_1)^T\Sigma_1^{-1}(\mathbf{x}-\mu_1)) - (\mathbf{x}-\mu_0)^T\Sigma_0^{-1}(\mathbf{x}-\mu_0)}{2} + \frac{1}{2}\log\frac{|\Sigma_0|}{|\Sigma_1|}.$$

Enfoque probabilístico

Entonces

$$\widehat{y}(\mathbf{x}) = 1 \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{(\mathbf{x}-\mu_1)^T\Sigma_1^{-1}(\mathbf{x}-\mu_1)) - (\mathbf{x}-\mu_0)^T\Sigma_0^{-1}(\mathbf{x}-\mu_0)}{2} > \log\frac{\lambda_{01}\pi_0|\Sigma_1|^{1/2}}{\lambda_{10}\pi_1|\Sigma_0|^{1/2}}$$

$$\Leftrightarrow \quad \mathbf{x}^T(\Sigma_1^{-1}-\Sigma_0^{-1})\mathbf{x} - 2(\mu_1\Sigma_1^{-1}-\mu_0\Sigma_0^{-1})\mathbf{x} + \mu_1\Sigma_1^{-1}\mu_1 - \mu_0\Sigma_0^{-1}\mu_0 > -2\log\frac{\lambda_{01}\pi_0|\Sigma_1|^{1/2}}{\lambda_{10}\pi_1|\Sigma_0|^{1/2}}.$$

Esta es una ecuación de la forma $\mathbf{b}_0 + \mathbf{b}_1^T\mathbf{x} + \mathbf{x}^T\mathbf{b}_2\mathbf{x} > 0$.

Definición

*El término anterior se llama el **discriminante cuadrático** (QDA).*

Enfoque probabilístico

En el caso en que las covarianzas Σ_0 y Σ_1 coinciden, entonces la ecuación anterior se reduce a

$$\widehat{y}(\mathbf{x}) = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{x}^T(\Sigma_1^{-1} - \Sigma_0^{-1})\mathbf{x} - 2(\mu_1\Sigma_1^{-1} - \mu_0\Sigma_0^{-1})\mathbf{x} + \mu_1\Sigma_1^{-1}\mu_1 - \mu_0\Sigma_0^{-1}\mu_0 > -2\log\frac{\lambda_{01}\pi_0|\Sigma_1|^{1/2}}{\lambda_{10}\pi_1|\Sigma_0|^{1/2}}$$

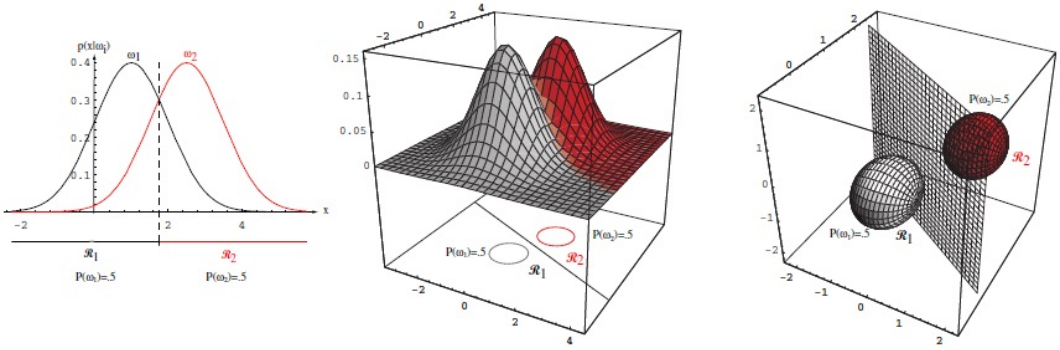
$$\Leftrightarrow \quad -2(\mu_1\Sigma_1^{-1} - \mu_0\Sigma_0^{-1})\mathbf{x} + \mu_1\Sigma_1^{-1}\mu_1 - \mu_0\Sigma_0^{-1}\mu_0 > -2\log\frac{\lambda_{01}\pi_0|\Sigma_1|^{1/2}}{\lambda_{10}\pi_1|\Sigma_0|^{1/2}}.$$

Esta es una ecuación de la forma $\mathbf{b}_0 + \mathbf{b}_1^T\mathbf{x} > 0$.

Definición

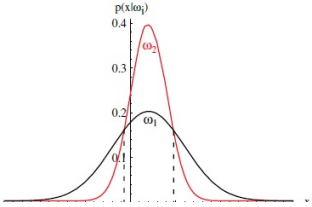
*El término anterior se llama el **discriminante lineal** (LDA).*

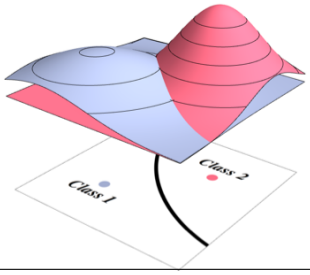
Enfoque probabilístico

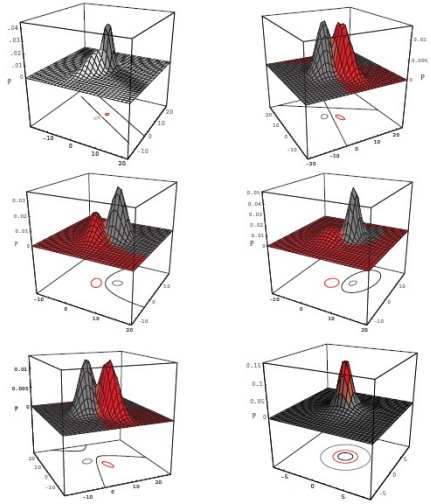


Análisis discriminante lineal, para el caso de dos normales $f_i(\mathbf{x})$.

Enfoque probabilístico







UVG UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Enfoque probabilístico