Análisis Discriminante

Mathias Bourel

IMERL - Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay

June 19, 2019

Introducción

Problema: Se dispone de un conjunto amplio de individuos que pueden venir de dos o más poblaciones. Para cada individuo se observa una variable aleatoria *p* dimensional. Se desea clasificar un nuevo individuo, con valores de las variables conocidas, en una de las poblaciones.

Se puede considerar como un análisis de regresión donde la variable dependiente es categórica (etiqueta de cada grupo) y las variables independientes son continuas. Queremos encontrar una relación lineal entre estas variables que mejor discrimine a los individuos.

Aplicaciones

credit scoring (ingresos, antiguedad trabajo, patrimonio para predecir comportamiento futuro), reconocimiento de patrones, aplicaciones medicales (paciente con cierta enfermedad).

Introducción

 $\mathcal{L} = \{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)\}$ muestra de datos.

- **Discriminar:** usar \mathcal{L} para construir un clasificador (función de las caracteristicas X_i) para separar lo mejor posibles los grupos dados.
- ullet Clasificar: usar el clasificador para predecir la etiqueta Y_{new} de una nueva observación X_{new} .

Suponemos que hay dos grupos G_1 y G_2 y que cada individuo pertenece a un único grupo (por ejemplo sano/enfermo, spam/no spam).

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

Clasificador de Bayes

Sean $P_1 \sim f_1$ y $P_2 \sim f_2$ dos poblaciones. Queremos clasificar un nuevo elemento x_0 que proviene de una variable aleatoria X en una de estas dos poblaciones. Se sabe que $\pi_1 = \mathbb{P}(X \in P_1)$ y $\pi_2 = \mathbb{P}(X \in P_2)$ y que $\pi_1 + \pi_2 = 1$. Si $\mathbb{P}(X = x | X \in P_i) = f_i(x)\Delta x$, entonces la distribución de X es

$$f_X(x) = \pi_1 f_1(x) + \pi_2 f_2(x)$$

Entonces

$$\mathbb{P}(1|x_0) = \mathbb{P}(X \in P_1|X = x_0) = \frac{\mathbb{P}(x_0|1)\pi_1}{\pi_1\mathbb{P}(x_0|1) + \pi_2\mathbb{P}(x_0|2)} = \frac{f_1(x_0)\pi_1}{\pi_1f_1(x_0) + \pi_2f_2(x_0)}$$

$$\mathbb{P}(2|x_0) = \mathbb{P}(X \in P_2|X = x_0) = \frac{P(x_0|2)\pi_2}{\pi_1\mathbb{P}(x_0|1) + \pi_2\mathbb{P}(x_0|2)} = \frac{f_2(x_0)\pi_2}{\pi_1f_1(x_0) + \pi_2f_2(x_0)}$$

Clasificamos x_0 en la población más probable a posteriori (clasificador de Bayes), es decir en P_2 si

$$\pi_2 f_2(x_0) > \pi_1 f_1(x_0)$$

y si $\pi_1=\pi_2$, clasificamos en P_2 si

$$f_2(x_0) > f_1(x_0)$$

◆ロ → ◆回 → ◆ 注 → ◆ 注 ・ り へ ②

Con costes

Suponemos que haya un coste por clasificar mal. Notamos por c(i|j) el coste de clasificar en P_i cuando pertenece en realidad a P_i .

El coste esperado de la clasificación de x_0 en P_2 es:

$$c(2|1)\mathbb{P}(1|x_0) + 0\mathbb{P}(2|x_0) = c(2|1)\mathbb{P}(1|x_0)$$

El coste esperado de la clasificación de x_0 en P_1 es:

$$0\mathbb{P}(1|x_0) + c(1|2)\mathbb{P}(2|x_0) = c(1|2)\mathbb{P}(2|x_0)$$

Entonces asignamos x_0 a la población 2 si

$$\frac{f_2(x_0)\pi_2}{c(2|1)} > \frac{f_1(x_0)\pi_1}{c(1|2)}$$

A igualdad de los otros terminos, clasificamos en P_2 si:

- su probabilidad a priori es más alta.
- la verosimilitud de que x_0 provenga de P_2 es más alta.
- ullet el coste de equivocarnos al clasificarlo en P_2 es más bajo.

Análisis Discriminante Lineal Gaussiano (LDA)

Supongamos que $f_1 \sim N(\mu_1, \Sigma)$ y $f_2 \sim N(\mu_2, \Sigma)$ - misma matriz de covarianzas-. De

$$\frac{f_2(x)\pi_2}{c(2|1)} > \frac{f_1(x)\pi_1}{c(1|2)}$$

tomando logaritmo tenemos que

$$-\frac{1}{2}\underbrace{(x-\mu_2)'\Sigma^{-1}(x-\mu_2)}_{D_2^2} + \log\left(\frac{\pi_2}{c(2|1)}\right) > -\frac{1}{2}\underbrace{(x-\mu_1)'\Sigma^{-1}(x-\mu_1)}_{D_1^2} + \log\left(\frac{\pi_1}{c(1|2)}\right) \quad (*)$$

donde D_i^2 es la distancia de Mahalanobis entre el punto observado x y la media de la población i (recordar los slides sobre normal multivariada). Entonces:

$$D_1^2 - 2\log\left(\frac{\pi_1}{c(1|2)}\right) > D_2^2 - 2\log\left(\frac{\pi_2}{c(2|1)}\right)$$

y si suponemos que $\pi_1=\pi_2$ y los costes iguales, clasificamos en la población 2 si

$$D_1^2 > D_2^2$$

Obs: si $\Sigma = \sigma^2 I$ entonces la regla equivale en usar la distancia euclidea.

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

Análisis Discriminante Lineal Gaussiano

Volviendo a (*), si desarrollamos, al tener la misma matriz de varianzas-covarianzas Σ , se elimina el termino cuadrático $x'\Sigma^{-1}x$. Entonces

$$-\mu_1' \Sigma^{-1} x + \frac{1}{2} \mu_1' \Sigma^{-1} \mu_1 > -\mu_2' \Sigma^{-1} x + \frac{1}{2} \mu_2' \Sigma^{-1} \mu_2 - \log \left(\frac{c(1|2)\pi_2}{c(2|1)\pi_1} \right)$$

$$(\mu_2 - \mu_1)' \Sigma^{-1} x > (\mu_2 - \mu_1)' \Sigma^{-1} \left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2}\right) - \log\left(\frac{c(1|2)\pi_2}{c(2|1)\pi_1}\right)$$

Si $w=\Sigma^{-1}(\mu_2-\mu_1)$, entonces

$$w'x > \underbrace{w'\left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2}\right) - \log\left(\frac{c(1|2)\pi_2}{c(2|1)\pi_1}\right)}_{-w_0}$$

clasificamos en la población 2 si

$$w'x > -w_0 \Rightarrow L(x) = w'x + w_0 > 0$$

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

Análisis Discriminante Lineal Gaussiano

Suponiendo costes y probabilidades a priori iguales, volviendo a $w'x > \underbrace{w'\left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2}\right)}_{-w_0}$ (es decir

L(x) > 0) entonces:

$$w'x - w'\mu_1 > w'\mu_2 - w'x$$

Entonces el procedimiento para clasificar el individuo x_0 en P_1 o en P_2 según este método es el siguiente:

- ① Calcular el vector $w = \Sigma^{-1}(\mu_2 \mu_1)$.
- ② Construir la variables indicadora discriminante z = w'x
- **3** Clasificar en la población donde la distancia $|z_0 m_i|$ es mínima siendo $z_0 = w'x_0$ y $m_i = w'\mu_i$.

Observar que:

•
$$Var(z) = Var(w'x) = w' Var(x)w = w' \Sigma w = \underbrace{(\mu_2 - \mu_1)' \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1)}_{D_2^2}$$

Por otro lado:

$$m_2 - m_1 = w'(\mu_2 - \mu_1) = (\Sigma^{-1}(\mu_2 - \mu_1))'(\mu_2 - \mu_1) = (\mu_2 - \mu_1)'\Sigma^{-1}(\mu_2 - \mu_1) = D^2$$

Entonces

$$Var(z) = m_2 - m_1$$



Análisis Discriminante Lineal Gaussiano

Podemos interpretar a la variable z de la siguiente manera: si dividimos la relación $w'x-w'\mu_1>w'\mu_2-w'x$ por ||w|| y $u=\frac{w}{||w||}$ entonces

$$u'x - u'\mu_1 > u'\mu_2 - u'x$$

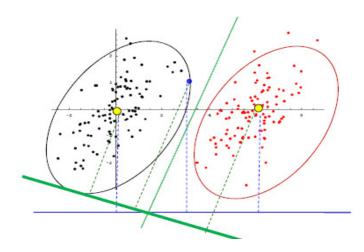
y $\widehat{P}_u(x) = u'x$ es la proyección (el escalar) de x en la dirección u, y $u'\mu_i$ es la proyección de μ_i en la dirección u para i=1,2. Entonces elegiremos la población 2 si

$$\widehat{P}_u(x) > \widehat{P}_u\left(\frac{\mu_1 + \mu_2}{2}\right)$$

(el hiperplano perpendicular a u por $u'\left(\frac{\mu_1+\mu_2}{2}\right)$ divide el espacio muestral en dos regiones)

Interpretación geométrica del Análisis Discriminante Lineal

En la figura siguiente representamos la situación establecida en la transparencia anterior: proyectando el punto medio de las medias sobre u (el punto medio de los dos puntos amarillos), y proyectando x (el punto azul) sobre u sabremos cuál de las dos poblaciones atribuirle.



Cálculo de probabilidades de error

Recordamos que la variable z=w'x tiene esperanza $\mathbb{E}(z)=m_i=w'\mu_i$ y varianza $D^2=m_2-m_1$. Entonces

$$\begin{split} \mathbb{P}(2|1) &= \mathbb{P}\left(z \geq \frac{m_1 + m_2}{2} \big| z \sim \textit{N}(m_1, D)\right) = \mathbb{P}\left(y \geq \frac{\frac{m_1 + m_2}{2} - m_1}{D} \big| y \sim \textit{N}(0, 1)\right) \\ &\mathbb{P}(2|1) = 1 - \Phi\left(\frac{D}{2}\right) \\ \mathbb{P}(1|2) &= \mathbb{P}\left(z \leq \frac{m_1 + m_2}{2} \big| z \sim \textit{N}(m_2, D)\right) = \mathbb{P}\left(y \leq \frac{\frac{m_1 + m_2}{2} - m_2}{D} \big| y \sim \textit{N}(0, 1)\right) \\ &\mathbb{P}(1|2) = \Phi\left(-\frac{D}{2}\right) \end{split}$$

Las probabilidades de error son iguales, el error de clasificación sólo depende de la distancia de Mahalanobis entre las medias.

⟨□⟩ ⟨□⟩ ⟨≡⟩ ⟨≡⟩ ≡ √0,00

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

Probabilidads a posteriori

Volviendo a la cuenta del principio:

$$\mathbb{P}(1|x) = \frac{\pi_1 f_1(x)}{\pi_1 f_1(x) + \pi_2 f_2(x)}$$

$$\mathbb{P}(1|x) = \frac{\pi_1 \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_1)' \Sigma^{-1}(x - \mu_1)\right)}{\pi_1 \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_1)' \Sigma^{-1}(x - \mu_1)\right) + \pi_2 \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu_2)' \Sigma^{-1}(x - \mu_2)\right)}$$

$$\mathbb{P}(1|x) = \frac{1}{1 + \frac{\pi_2}{\pi_1} \exp\left(-\frac{1}{2}(D_2^2 - D_1^2)\right)}$$

En el caso que las probabilidades a priori sean iguales, cuanto más alejado está el punto de la población 1, $(D_1^2 > D_2^2)$, el denominador es más grande y menor será $\mathbb{P}(1|x)$ y al contrario.

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

Ejemplo (Peña, pág 406)

Retrato entre dos posibles pintores. Se miden dos variables: X1 profundidad del trazo y X2 proporción que ocupa el retrato sobre la superficie del lienzo.

Retratos del pintor A
$$\sim N\left(\mu_A = \begin{pmatrix} 2 \\ 0.8 \end{pmatrix}, \Sigma\right)$$
, Restratos de pintor B $\sim N\left(\mu_B = \begin{pmatrix} 2.3 \\ 0.7 \end{pmatrix}, \Sigma\right)$
Covarianzas $\Sigma = \begin{pmatrix} 0.25 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{pmatrix}$, nueva obra a clasificar $x_0 = \begin{pmatrix} 2.1 \\ 0.75 \end{pmatrix}$

$$D_A^2 = \begin{pmatrix} 2.1 - 2 & 0.75 - 0.8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.25 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 2.1 - 2 \\ 0.75 - 0.8 \end{pmatrix} = 0.52$$

$$D_B^2 = \left(\begin{array}{cc} 2.1 - 2.3 & 0.75 - 0.7 \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc} 0.25 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{cc} 2.1 - 2.3 \\ 0.75 - 0.7 \end{array}\right) = 0.8133$$

$$D_B^2 = \begin{pmatrix} 2.1 - 2.3 & 0.75 - 0.7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.25 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2.1 - 2.3 \\ 0.75 - 0.7 \end{pmatrix} = 0.8133$$

Entonces

$$\mathbb{P}(A|x) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{1}{2}(D_B^2 - D_A^2)\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{1}{2}(0,8133 - 0.52)\right)} = 0,5376$$

$$\mathbb{P}(A|B) = 1 - \Phi\left(\frac{D^2}{2}\right) = 1 - \Phi\left(\frac{\left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right) \left(\begin{array}{ccc} 0.25 & 0.025 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 \\ 0.8 - 0.7 \end{array}\right)}{2}\right) = 1 - \Phi\left(\frac{\left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right) \left(\begin{array}{ccc} 0.25 & 0.025 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)}{2}\right) = 1 - \Phi\left(\frac{\left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right) \left(\begin{array}{ccc} 0.25 & 0.025 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)}{2}\right) = 1 - \Phi\left(\frac{\left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right) \left(\begin{array}{ccc} 0.25 & 0.025 & 0.025 \\ 0.025 & 0.01 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.8 - 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{ccc} 2 - 2.3 & 0.7 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{cc$$

$$1 - \Phi(0.808) = 0,189$$

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

Ahora vamos a generalizar lo anterior suponiendo que tenemos G poblaciones y que no conocemos la distribución de las que provienen (no es normal, hay que estimar media y matriz de varianzas-covarianzas).

Ahora vamos a generalizar lo anterior suponiendo que tenemos G poblaciones y que no conocemos la distribución de las que provienen (no es normal, hay que estimar media y matriz de varianzas-covarianzas). Supongamos que tenemos G poblaciones. Consideramos la matriz $X \in \mathcal{M}_{n \times p}$ y notamos por x_{ijg} donde i es el individuo, j la característica y g la población. Sea n_g

la cantidad de elementos en el grupo g entonces la cantidad global de individuos es $n = \sum_{g=1}^{G} n_g$.

Notaciones:

ullet $\mathbf{x_{ig}}' = (x_{i1g}, \dots, x_{ipg}) \in \mathbb{R}^p$ (p variables del individuo i en la pop. g)

Ahora vamos a generalizar lo anterior suponiendo que tenemos G poblaciones y que no conocemos la distribución de las que provienen (no es normal, hay que estimar media y matriz de varianzas-covarianzas). Supongamos que tenemos G poblaciones. Consideramos la matriz $X \in \mathcal{M}_{n \times p}$ y notamos por x_{ijg} donde i es el individuo, j la característica y g la población. Sea n_g

la cantidad de elementos en el grupo g entonces la cantidad global de individuos es $n = \sum_{g=1}^{G} n_g$.

Notaciones:

- $ullet \mathbf{x_{ig}}' = (x_{i1g}, \dots, x_{ipg}) \in \mathbb{R}^p \ (p \ ext{variables del individuo} \ i \ ext{en la pop.} \ g)$
- Vector de medias de los individuos de la población $g\colon \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} = \frac{1}{n_g}\sum_{i=1}^{n_g}\mathbf{x}_{\mathbf{ig}} \in \mathbb{R}^p.$

Utilizaremos $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ como estimación de $\mu_{\boldsymbol{\varphi}}$.

Ahora vamos a generalizar lo anterior suponiendo que tenemos G poblaciones y que no conocemos la distribución de las que provienen (no es normal, hay que estimar media y matriz de varianzas-covarianzas). Supongamos que tenemos G poblaciones. Consideramos la matriz $X \in \mathcal{M}_{n \times p}$ y notamos por x_{ijg} donde i es el individuo, j la característica y g la población. Sea n_g

la cantidad de elementos en el grupo g entonces la cantidad global de individuos es $n = \sum_{g=1}^G n_g$.

Notaciones:

- $ullet \mathbf{x_{ig}}' = (x_{i1g}, \dots, x_{ipg}) \in \mathbb{R}^p \ (p \ ext{variables del individuo} \ i \ ext{en la pop.} \ g)$
- Vector de medias de los individuos de la población $g \colon \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} = \frac{1}{n_g} \sum_{i=1}^{n_g} \mathbf{x}_{i\mathbf{g}} \in \mathbb{R}^p.$

4 D > 4 D > 4 E > 4 E > E 9 Q C

Ahora vamos a generalizar lo anterior suponiendo que tenemos G poblaciones y que no conocemos la distribución de las que provienen (no es normal, hay que estimar media y matriz de varianzas-covarianzas). Supongamos que tenemos G poblaciones. Consideramos la matriz $X \in \mathcal{M}_{n \times p}$ y notamos por x_{ijg} donde i es el individuo, j la característica y g la población. Sea n_g

la cantidad de elementos en el grupo g entonces la cantidad global de individuos es $n=\sum\limits_{g=1}^G n_g$.

Notaciones:

- $ullet \mathbf{x_{ig}}' = (x_{i1g}, \dots, x_{ipg}) \in \mathbb{R}^p \ (p \ ext{variables del individuo} \ i \ ext{en la pop.} \ g)$
- Vector de medias de los individuos de la población $g \colon \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} = \frac{1}{n_g} \sum_{i=1}^{n_g} \mathbf{x}_{i\mathbf{g}} \in \mathbb{R}^p$.

Utilizaremos $\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ como estimación de $\mu_{\mathbf{g}}$.

• Matriz de covarianzas para la clase g:

$$\widehat{S}_{g} = \frac{1}{n_{g} - 1} \sum_{i=1}^{n_{g}} (\mathbf{x}_{ig} - \overline{\mathbf{x}}_{g}) (\mathbf{x}_{ig} - \overline{\mathbf{x}}_{g})'$$

Supondremos que las G poblaciones tienen la misma matriz de varianzas y covarianzas Σ (en la práctica se debe realizar la prueba M de Box: ¡buscar información!).

Ahora vamos a generalizar lo anterior suponiendo que tenemos G poblaciones y que no conocemos la distribución de las que provienen (no es normal, hay que estimar media y matriz de varianzas-covarianzas). Supongamos que tenemos G poblaciones. Consideramos la matriz $X \in \mathcal{M}_{n \times p}$ y notamos por x_{ijg} donde i es el individuo, j la característica y g la población. Sea n_g

la cantidad de elementos en el grupo g entonces la cantidad global de individuos es $n=\sum\limits_{g=1}^G n_g$.

Notaciones:

- $ullet \mathbf{x_{ig}}' = (x_{i1g}, \dots, x_{ipg}) \in \mathbb{R}^p \ (p \ ext{variables del individuo} \ i \ ext{en la pop.} \ g)$
- Vector de medias de los individuos de la población $g\colon \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} = \frac{1}{n_g}\sum_{i=1}^{n_g}\mathbf{x}_{i\mathbf{g}} \in \mathbb{R}^p.$

Utilizaremos $\bar{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ como estimación de $\mu_{\mathbf{g}}$.

Matriz de covarianzas para la clase g:

$$\widehat{S}_g = \frac{1}{n_g - 1} \sum_{i=1}^{n_g} (\mathbf{x}_{ig} - \overline{\mathbf{x}}_{g}) (\mathbf{x}_{ig} - \overline{\mathbf{x}}_{g})'$$

Supondremos que las G poblaciones tienen la misma matriz de varianzas y covarianzas Σ (en la práctica se debe realizar la prueba M de Box: ¡buscar información!).

ullet La matriz de varianzas y covarianzas de la población global es (para estimar Σ):

$$\widehat{S}_w = \sum_{g=1}^G \frac{n_g - 1}{n - G} \widehat{S}_g$$

←□ → ←□ → ← = → ← = → へ < ○</p>

Para obtener las funciones discriminantes entre las clases usaremos:

- ullet $\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ como estimación de $\mu_{\mathbf{g}}$
- \widehat{S}_w como estimación de Σ .

Para obtener las funciones discriminantes entre las clases usaremos:

- ullet $\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ como estimación de $\mu_{\mathbf{g}}$
- \widehat{S}_w como estimación de Σ .

Clasificaremos entonces un nuevo individuo x_0 en aquella clase g que haga mínima la distancia de Mahalanobis entre x_0 y la media $\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ del grupo g,

Para obtener las funciones discriminantes entre las clases usaremos:

- ullet $\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ como estimación de $\mu_{\mathbf{g}}$
- \widehat{S}_w como estimación de Σ .

Clasificaremos entonces un nuevo individuo x_0 en aquella clase g que haga mínima la distancia de Mahalanobis entre x_0 y la media $\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}$ del grupo g, es decir en aquella clase g tal que:

$$\min_{g \in \{1, \dots, G\}} (x_0 - \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}})' \widehat{S}_w^{-1} (x_0 - \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}}) = \min_{g \in \{1, \dots, G\}} \widehat{w}_g' (\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} - x_0)$$

siendo

$$\widehat{w}_g = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} - x_0)$$

Si notamos por

$$\widehat{w}_{g,g+1} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}} - \overline{\mathbf{x}}_{\mathbf{g}+1}) = \widehat{w}_g - \widehat{w}_{g+1}$$

las variables discriminantes necesarias son

$$z_{g,g+1}=\widehat{w}_{g,g+1}'x_0,\ g=1,\ldots,G$$

Si notamos por

$$\widehat{w}_{g,g+1} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{\mathsf{x}}_{\mathsf{g}} - \overline{\mathsf{x}}_{\mathsf{g}+1}) = \widehat{w}_g - \widehat{w}_{g+1}$$

las variables discriminantes necesarias son

$$z_{g,g+1} = \widehat{w}'_{g,g+1} x_0, \quad g = 1, \dots, G$$

En efecto, observar que $w_{j,j+2}=w_{j,j+1}+w_{j+1,j+2}$ $\forall j=1,\ldots,G-1$, así que necesito G-1 ejes discriminantes si p>G-1, ya que todos los demás se deducen de ellos. Por ejemplo si G=4 y conozco $w_{1,2},w_{2,3}$ y $w_{3,4}$ entonces puedo deducir de la igualdad anterior $w_{1,3},w_{2,4}$ y $w_{1,4}$.

Si notamos por

$$\widehat{w}_{g,g+1} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{\mathsf{x}}_{\mathsf{g}} - \overline{\mathsf{x}}_{\mathsf{g}+1}) = \widehat{w}_g - \widehat{w}_{g+1}$$

las variables discriminantes necesarias son

$$z_{g,g+1} = \widehat{w}'_{g,g+1} x_0, \ g = 1, \dots, G$$

En efecto, observar que $w_{j,j+2}=w_{j,j+1}+w_{j+1,j+2}$ $\forall j=1,\ldots,G-1$, así que necesito G-1 ejes discriminantes si p>G-1, ya que todos los demás se deducen de ellos. Por ejemplo si G=4 y conozco $w_{1,2},w_{2,3}$ y $w_{3,4}$ entonces puedo deducir de la igualdad anterior $w_{1,3},w_{2,4}$ y $w_{1,4}$.

Cuando $p \ge G-1$, como estos vectores pertenecen a \mathbb{R}^p la cantidad máxima de vectores linealmente independientes es p.

Si notamos por

$$\widehat{w}_{g,g+1} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{\mathsf{x}}_{\mathsf{g}} - \overline{\mathsf{x}}_{\mathsf{g}+1}) = \widehat{w}_g - \widehat{w}_{g+1}$$

las variables discriminantes necesarias son

$$z_{g,g+1} = \widehat{w}_{g,g+1}'x_0, \quad g = 1, \dots, G$$

En efecto, observar que $w_{j,j+2} = w_{j,j+1} + w_{j+1,j+2} \ \forall j=1,\ldots,G-1$, así que necesito G-1 ejes discriminantes si p>G-1, ya que todos los demás se deducen de ellos. Por ejemplo si G=4 y conozco $w_{1,2}, w_{2,3}$ y $w_{3,4}$ entonces puedo deducir de la igualdad anterior $w_{1,3}, w_{2,4}$ y $w_{1,4}$.

Cuando $p \geq G-1$, como estos vectores pertenecen a \mathbb{R}^p la cantidad máxima de vectores linealmente independientes es p.

Por todo eso podemos suponer que la cantidad de ejes discriminantes necesarios es

$$r = \min(p, G - 1)$$

Si notamos por

$$\widehat{w}_{g,g+1} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{x}_g - \overline{x}_{g+1}) = \widehat{w}_g - \widehat{w}_{g+1}$$

las variables discriminantes necesarias son

$$z_{g,g+1} = \widehat{w}_{g,g+1}'x_0, \quad g = 1, \dots, G$$

En efecto, observar que $w_{i,j+2}=w_{i,j+1}+w_{i+1,j+2}\ \forall j=1,\ldots,G-1$, así que necesito G-1 ejes discriminantes si p > G - 1, ya que todos los demás se deducen de ellos. Por ejemplo si G = 4 y conozco $w_{1,2}, w_{2,3}$ y $w_{3,4}$ entonces puedo deducir de la igualdad anterior $w_{1,3}, w_{2,4}$ y $w_{1,4}$.

Cuando $p \geq G - 1$, como estos vectores pertenecen a \mathbb{R}^p la cantidad máxima de vectores linealmente independientes es p.

Por todo eso podemos suponer que la cantidad de ejes discriminantes necesarios es

$$r = \min(p, G - 1)$$

Como en el caso de dos clases, clasifico en la clase g en vez de la clase g+1 si

$$|z_{g,g+1} - \widehat{m}_g| < |z_{g,g+1} - \widehat{m}_{g+1}|$$

siendo $\widehat{m}_{g} = \widehat{w}'_{g,g+1} \overline{\mathbf{x}}_{g}$

Veamos ahora el criterio de Fisher que es equivalente al anterior.

Veamos ahora el criterio de Fisher que es equivalente al anterior.

El criterio propuesto por Fisher es de encontrar una variable escalar $z=\alpha'x$ que maximice la distancia entre las medias proyectadas $\widehat{m}_1 = \alpha' \overline{x}_1$ y $\widehat{m}_2 = \alpha' \overline{x}_2$, siendo \overline{x}_1 la estimación de la media μ_1 de la población 1 y \overline{x}_2 la estimación de la media μ_2 de la población 2.

- Suponemos, como siempre, que la matriz de varianzas Σ es la misma para cada población.
- La varianza de z es $\alpha' \Sigma \alpha$ y la estimamos por $s_z^2 = \alpha' \widehat{S}_w \alpha$.

Queremos hallar el vector α de manera que la separación entre m_1 y m_2 sea máxima, es decir que los grupos sean los más separados posibles pero que la varianza dentro de cada grupo sea mínima.

Una medida de esta separación es

$$\phi = \left(\frac{\widehat{m}_2 - \widehat{m}_1}{\mathsf{s}_\mathsf{z}}\right)^2$$

lo que equivale a

$$\phi = \frac{(\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1))^2}{\alpha'\widehat{S}_w\alpha}$$

Observar que la función ϕ a optimizar es invariante por constantes, es decir $\phi(p\alpha) = \phi(\alpha) \ \forall p$, lo cual nos ayudará en la cuenta que sigue.

◆□ > ◆□ > ◆□ > ◆□ > □ □

Para encontrar la dirección α que maximice ϕ , derivo (matricialmente!) el cociente e igualo a cero:

$$0 = \frac{d\phi}{d\alpha} = \frac{2\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)'\alpha'\widehat{S}_w\alpha - 2\widehat{S}_w\alpha(\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1))^2}{(\alpha'\widehat{S}_w\alpha)^2}$$

Por lo tanto:

$$(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)\alpha'\widehat{S}_w\alpha = \widehat{S}_w\alpha\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)$$

Para encontrar la dirección α que maximice ϕ , derivo (matricialmente!) el cociente e igualo a cero:

$$0 = \frac{d\phi}{d\alpha} = \frac{2\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)'\alpha'\widehat{S}_w\alpha - 2\widehat{S}_w\alpha(\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1))^2}{(\alpha'\widehat{S}_w\alpha)^2}$$

Por lo tanto:

$$(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)\alpha'\widehat{S}_w\alpha = \widehat{S}_w\alpha\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)$$

$$\Rightarrow (\overline{x}_2 - \overline{x}_1) = \widehat{S}_w \alpha \frac{\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)}{\alpha' \widehat{S}_w \alpha}$$

Para encontrar la dirección α que maximice ϕ , derivo (matricialmente!) el cociente e igualo a cero:

$$0 = \frac{d\phi}{d\alpha} = \frac{2\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)'\alpha'\widehat{S}_w\alpha - 2\widehat{S}_w\alpha(\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1))^2}{(\alpha'\widehat{S}_w\alpha)^2}$$

Por lo tanto:

$$(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)\alpha'\widehat{S}_w\alpha = \widehat{S}_w\alpha\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)$$

$$\Rightarrow (\overline{x}_2 - \overline{x}_1) = \widehat{S}_w\alpha\frac{\alpha'(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)}{\alpha'\widehat{S}_w\alpha}$$

$$\Rightarrow \alpha = \lambda\widehat{S}_w^{-1}(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)$$

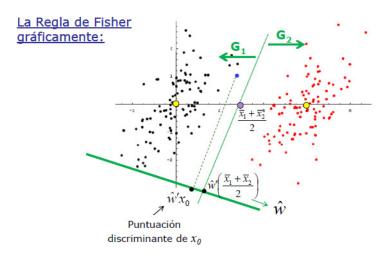
siendo $\lambda=\frac{\alpha'\widehat{S}_{\mathbf{W}}\alpha}{\alpha'(\overline{\mathbf{x}_2}-\overline{\mathbf{x}_1})}$. Normalizamos α de manera que $\lambda=1$ (es ahí que usamos que ϕ es invariante por constantes, sólo interesa la dirección) con lo que

$$\widehat{\alpha} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{x}_2 - \overline{x}_1)$$

y es entonces la dirección discriminante, sin haber hecho ninguna hipótesis sobre la distribución de x.

Interpretación geométrica LDF, 2 grupos

Nuevamente tenemos la misma situación gráfica ya que podemos usar el mismo argumento que en transparencias anteriores, y ver la regla de Fisher como un problema de proyección ortogonal. Acá en el dibujo $\widehat{w}=\widehat{\alpha}.$



Resumiendo, para dos poblaciones, si

$$\widehat{S}_w = \frac{n_1 - 1}{n_1 + n_2 - 2} \widehat{S}_1 + \frac{n_2 - 1}{n_1 + n_2 - 2} \widehat{S}_2$$

١

$$\widehat{\alpha} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{x}_2 - \overline{x}_1),$$

la regla de clasificación de Fisher es :

Resumiendo, para dos poblaciones, si

$$\widehat{S}_{w} = \frac{n_{1} - 1}{n_{1} + n_{2} - 2} \widehat{S}_{1} + \frac{n_{2} - 1}{n_{1} + n_{2} - 2} \widehat{S}_{2}$$

У

$$\widehat{\alpha} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{x}_2 - \overline{x}_1),$$

la regla de clasificación de Fisher es : se clasifica la observación x_0 en la población 2 si

$$\widehat{\alpha}' x_0 > \widehat{\alpha}' \left(\frac{\overline{x}_1 + \overline{x}_2}{2} \right)$$

Resumiendo, para dos poblaciones, si

$$\widehat{S}_w = \frac{n_1 - 1}{n_1 + n_2 - 2} \widehat{S}_1 + \frac{n_2 - 1}{n_1 + n_2 - 2} \widehat{S}_2$$

У

$$\widehat{\alpha} = \widehat{S}_w^{-1}(\overline{x}_2 - \overline{x}_1),$$

la regla de clasificación de Fisher es :

se clasifica la observación x_0 en la población 2 si

$$\widehat{\alpha}' x_0 > \widehat{\alpha}' \left(\frac{\overline{x}_1 + \overline{x}_2}{2} \right)$$

Como antes, si tenemos información a priori, clasificaremos en la población 2 si:

$$\widehat{\alpha}' x_0 > \widehat{\alpha}' \left(\frac{\overline{x}_1 + \overline{x}_2}{2} \right) - \log \left(\frac{\pi_2}{\pi_1} \right)$$

Este procedimiento es óptimo para clasificar si la distribucin conjunta de las variables explicativas es normal multivariante con misma matriz de varianza-covarianza. Observar que en el desarrollo anterior no hicimos ninguna restricción sobre la distribución de x.

El método de Fisher es robusto: aunque los datos no verifiquen las hipotesis previas, el resultado que se obtiene es cercano al mejor resultado.

Lo anterior se puede generalizar a varios grupos. Vamos a querer buscar una dirección de proyección u sobre las cuales proyectaremos las medias. Es decir con las notaciones anteriores si definimos la proyección de la media por la población g:

$$\overline{z}_g = u' \overline{x}_g$$

y la proyección de la media total Si definimos:

$$\overline{z}_T = u' \overline{x}_T$$

siendo $\overline{x}_T \in \mathbb{R}^p$ el vector de medias de las p variables para las n observaciones.

21 / 28

Lo anterior se puede generalizar a varios grupos. Vamos a querer buscar una dirección de proyección u sobre las cuales proyectaremos las medias. Es decir con las notaciones anteriores si definimos la proyección de la media por la población g:

$$\overline{z}_g = u' \overline{x}_g$$

y la proyección de la media total Si definimos:

$$\overline{z}_T = u' \overline{x}_T$$

siendo $\bar{x}_T \in \mathbb{R}^p$ el vector de medias de las p variables para las n observaciones.

Variabilidad dentro de los grupos (no explicada) para los puntos proyectados:

$$VNE = \sum_{j=1}^{n_g} \sum_{g=1}^{G} (z_{jg} - \overline{z}_g)^2 = \sum_{j=1}^{n_g} \sum_{g=1}^{G} u'(x_{jg} - \overline{x}_g)(x_{jg} - \overline{x}_g)'u = u'Wu$$

siendo $W=\sum\limits_{j=1}^{n_g}\sum\limits_{g=1}^G(x_{jg}-\overline{x}_g)(x_{jg}-\overline{x}_g)'\in\mathcal{M}_{p\times p}.$ W estima la variabilidad de los datos

respecto a sus medias de grupo, que es la misma, por hipótesis, en todos ellos. Mide las diferencias dentro de los grupos.

21 / 28

M.Bourel (IMERL, UdelaR) Análisis Discriminante June 19, 2019

Lo anterior se puede generalizar a varios grupos. Vamos a querer buscar una dirección de proyección u sobre las cuales proyectaremos las medias. Es decir con las notaciones anteriores si definimos la proyección de la media por la población g:

$$\overline{z}_g = u' \overline{x}_g$$

y la proyección de la media total Si definimos:

$$\overline{z}_T = u' \overline{x}_T$$

siendo $\bar{x}_T \in \mathbb{R}^p$ el vector de medias de las p variables para las n observaciones.

Variabilidad dentro de los grupos (no explicada) para los puntos proyectados:

$$VNE = \sum_{j=1}^{n_g} \sum_{g=1}^{G} (z_{jg} - \overline{z}_g)^2 = \sum_{j=1}^{n_g} \sum_{g=1}^{G} u'(x_{jg} - \overline{x}_g)(x_{jg} - \overline{x}_g)'u = u'Wu$$

siendo $W=\sum_{j=1}^{n_g}\sum_{g=1}^G(x_{jg}-\overline{x}_g)(x_{jg}-\overline{x}_g)'\in\mathcal{M}_{p\times p}.$ W estima la variabilidad de los datos

respecto a sus medias de grupo, que es la misma, por hipótesis, en todos ellos. Mide las diferencias dentro de los grupos.

Variabilidad entre grupos (explicada) para los puntos proyectados:

$$VE = n_g \sum_{g=1}^G (\overline{z}_g - \overline{z}_T)^2 = n_g \sum_{g=1}^G u'(\overline{x}_g - \overline{x}_T)(\overline{x}_g - \overline{x}_T)'u = u'Bu$$

siendo $B = n_g \sum_{g=1}^G (\overline{x}_g - \overline{x}_T)(\overline{x}_g - \overline{x}_T)' \in \mathcal{M}_{p \times p}$. Mide las diferencias entre grupos.

Se puede probar que la suma de cuadrados totales T (total) se puede descomponer como la suma de cuadrados dentro de los grupos W (within) y la suma de cuadrados entre grupos B (between), esto es, por ejemplo en univariado que si tenemos G grupos, \overline{x} es la media y tenemos n observaciones:

$$\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2 = \sum_{g=1}^{G} \sum_{i=1}^{n_g} (x_{ig} - \overline{x}_g)^2 + \sum_{g=1}^{G} n_g (\overline{x}_g - \overline{x})^2$$

En el caso de las correlaciones, si tenemos G grupos, denotamos la covarianza entre dos variables aleatorias x_j y $x_{j'}$ como $t(x_j,x_{j'})=\frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^n(x_{ij}-\overline{x}_j)(x_{ij'}-\overline{x}_{j'})$, y $\overline{x}_{gj}=\frac{1}{n_g}\sum\limits_{i=1}^{n_g}x_{ij}$ es la media de la variable j en el grupo g, entonces (ejercicio)

$$t(x_j, x_{j'}) = \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{g=1}^{G} \sum_{i=1}^{n_g} (x_{ij} - \overline{x}_{gj})(x_{ij'} - \overline{x}_{gj'})}_{\text{dentro de los grupos} = w(x_j, x_{j'})} + \underbrace{\sum_{g=1}^{G} \frac{n_g}{n} (\overline{x}_{gj} - \overline{x}_j)(\overline{x}_{gj'} - \overline{x}_{j'})}_{\text{entre grupos} = b(x_j, x_{j'})}$$

lo cual indica que la covarianza total es igual a la covarianza *dentro* de los grupos más la covarianza *entre* grupos, lo cual matricialmente se escribe

$$T = W + B$$
 (ejercicio)

←□→ ←□→ ← □→ ← □ → ○○○

M.Bourel (IMERL, UdelaR)

La cantidad a maximizar es

$$\phi = \frac{u'Bu}{u'Wu}$$

Derivando e igualando a cero, se tiene que:

$$0 = \frac{\partial \phi}{\partial u} = \frac{2Buu'Wu - 2u'BuWu}{(u'Wu)^2}$$

Es decir

$$Bu = Wu\left(\frac{u'Bu}{u'Wu}\right)$$

La cantidad a maximizar es

$$\phi = \frac{u'Bu}{u'Wu}$$

Derivando e igualando a cero, se tiene que:

$$0 = \frac{\partial \phi}{\partial u} = \frac{2Buu'Wu - 2u'BuWu}{(u'Wu)^2}$$

Es decir

$$Bu = Wu\left(\frac{u'Bu}{u'Wu}\right) \to Bu = \phi Wu$$

Suponiendo que la matriz W es invertible, entonces $\phi u = W^{-1}Bu$. Por lo que u es vector propio de $W^{-1}B$ asociado al valor propio ϕ . Al querer maximizar ϕ , entonces ϕ es el mayor valor propio de la matriz $W^{-1}B$ y u el vector propio asociado. Entonces la función discriminante es:

$$z_1 = u_1^{'} x$$

siendo u_1 el vector propio asociado al mayor valor propio de $W^{-1}B$.

23 / 28

La cantidad a maximizar es

$$\phi = \frac{u'Bu}{u'Wu}$$

Derivando e igualando a cero, se tiene que:

$$0 = \frac{\partial \phi}{\partial u} = \frac{2Buu'Wu - 2u'BuWu}{(u'Wu)^2}$$

Es decir

$$Bu = Wu\left(\frac{u'Bu}{u'Wu}\right) \to Bu = \phi Wu$$

Suponiendo que la matriz W es invertible, entonces $\phi u = W^{-1}Bu$. Por lo que u es vector propio de $W^{-1}B$ asociado al valor propio ϕ . Al querer maximizar ϕ , entonces ϕ es el mayor valor propio de la matriz $W^{-1}B$ y u el vector propio asociado. Entonces la función discriminante es:

$$z_1 = u_1^{\prime} x$$

siendo u_1 el vector propio asociado al mayor valor propio de $W^{-1}B$.

El paso siguiente consiste en hallar u_2 tal que $z_2 = u_2'x$ sea incorrelada con z_1 . Como sabemos, el vector u_2 es asociado al segundo valor propio de $W^{-1}B$, etc.

La cantidad a maximizar es

$$\phi = \frac{u'Bu}{u'Wu}$$

Derivando e igualando a cero, se tiene que:

$$0 = \frac{\partial \phi}{\partial u} = \frac{2Buu'Wu - 2u'BuWu}{(u'Wu)^2}$$

Es decir

$$Bu = Wu\left(\frac{u'Bu}{u'Wu}\right) \rightarrow Bu = \phi Wu$$

Suponiendo que la matriz W es invertible, entonces $\phi u = W^{-1}Bu$. Por lo que u es vector propio de $W^{-1}B$ asociado al valor propio ϕ . Al querer maximizar ϕ , entonces ϕ es el mayor valor propio de la matriz $W^{-1}B$ y u el vector propio asociado. Entonces la función discriminante es:

$$z_1 = u_1^{'} x$$

siendo u_1 el vector propio asociado al mayor valor propio de $W^{-1}B$.

El paso siguiente consiste en hallar u_2 tal que $z_2=u_2^{'}x$ sea incorrelada con z_1 . Como sabemos, el vector u_2 es asociado al segundo valor propio de $W^{-1}B$, etc. Siendo $r=\min(G-1,p)$, para

cada valor propio $\alpha_1 > \cdots > \alpha_r > 0$ obtengo u_1, \ldots, u_r y z_1, \ldots, z_r incorreladas .

Cuidado: los vectores propios de $W^{-1}B$ no son necesariamente ortogonales!! Ver práctico.

Este procedimiento proporciona r=min(p,G-1) variables canónicas discriminantes que vienen dadas por

$$z = U'_r x$$

donde U_r es una matriz $p \times r$ que contiene en columnas los vectores propios de $W^{-1}B$ y x es un vector $p \times 1$.

Este procedimiento proporciona r=min(p,G-1) variables canónicas discriminantes que vienen dadas por

$$z = U'_r x$$

donde U_r es una matriz $p \times r$ que contiene en columnas los vectores propios de $W^{-1}B$ y x es un vector $p \times 1$.

El vector z de tamaño $r \times 1$ recoge los valores de las variables canónicas para el elemento x, que son las coordenadas del punto en el espacio definido por las variables canónicas.

Este procedimiento proporciona r=min(p,G-1) variables canónicas discriminantes que vienen dadas por

$$z = U'_r x$$

donde U_r es una matriz $p \times r$ que contiene en columnas los vectores propios de $W^{-1}B$ y x es un vector $p \times 1$.

El vector z de tamaño $r \times 1$ recoge los valores de las variables canónicas para el elemento x, que son las coordenadas del punto en el espacio definido por las variables canónicas.

Para clasificar un nuevo individuo x_0 basta calcular sus coordenadas z_0 con la fórmula anterior y lo asignamos al grupo de cuya media transformada esté más próxima con la distancia euclídea.

Discriminación lineal de Fisher (LDF)

Ejemplo:

Supongo G=4 y una observación x_0 nueva para clasificar. Vamos a notar por $L_i(x)=u_i'x$ (o sea L_i es la función discriminante asociado al vector u_i).

- Consideramos las funciones discriminantes L_1, L_2, L_3
- ② Calculo $L(x_0) = (L_1(x_0), L_2(x_0), L_3(x_0)).$
- **②** Calculamos los centroides de cada grupos: $L(\overline{x}_1) = (L_1(\overline{x}_1), L_2(\overline{x}_1), L_3(\overline{x}_1))$

$$L(\overline{x}_2) = (L_1(\overline{x}_2), L_2(\overline{x}_2), L_3(\overline{x}_2))$$

$$L(\overline{x}_3) = (L_1(\overline{x}_3), L_2(\overline{x}_3), L_3(\overline{x}_3))$$

$$L(\overline{x}_4) = (L_1(\overline{x}_4), L_2(\overline{x}_4), L_3(\overline{x}_4))$$

lacktriangle Clasificamos el dato en el grupo con el centroide más prximo a $L(x_0)$ (usando distancia eucldea).

25 / 28

Análisis Discriminate Cuadrático (QDA)

Si suponemos que las matrices de covarianzas no son iguales, el clasificador de Bayes asigna la observación x a la clase para la cual:

$$-\frac{1}{2}(x-\mu_k)'\Sigma_k^{-1}(x-\mu_k) + \log(\pi_k) = -\frac{1}{2}x'\Sigma_k^{-1}x + x'\Sigma_k^{-1}\mu_k - \frac{1}{2}\mu_k'\Sigma_k^{-1}\mu_k + \log(\pi_k)$$

es mayor (observe que esto es una función cuadrática).

Discriminación logística

Recordamos la función logit:

$$\mathbb{P}(X) = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta'X)}}$$

Entonces

$$rac{\mathbb{P}(X)}{1-\mathbb{P}(X)}=e^{eta_0+eta'X}\in[0,+\infty)$$

)

$$\log\left(\frac{\mathbb{P}(X)}{1-\mathbb{P}(X)}\right) = \beta_0 + \beta' x$$

- La discriminación logística es más robusta que LDA a la no normalidad. Si hay normalidad, LDA en general es mejor.
- La estimación de los paramétros en la discriminación logística se hace por logverosimilitud.

Referencias

- 1 D. Peña. Análisis de datos multivariantes, Mac Graw Hill, 2002
- James, Witten, Hastie and Tibshirani. An introduction to Statistical Learning with application in R, Springer, 2013.