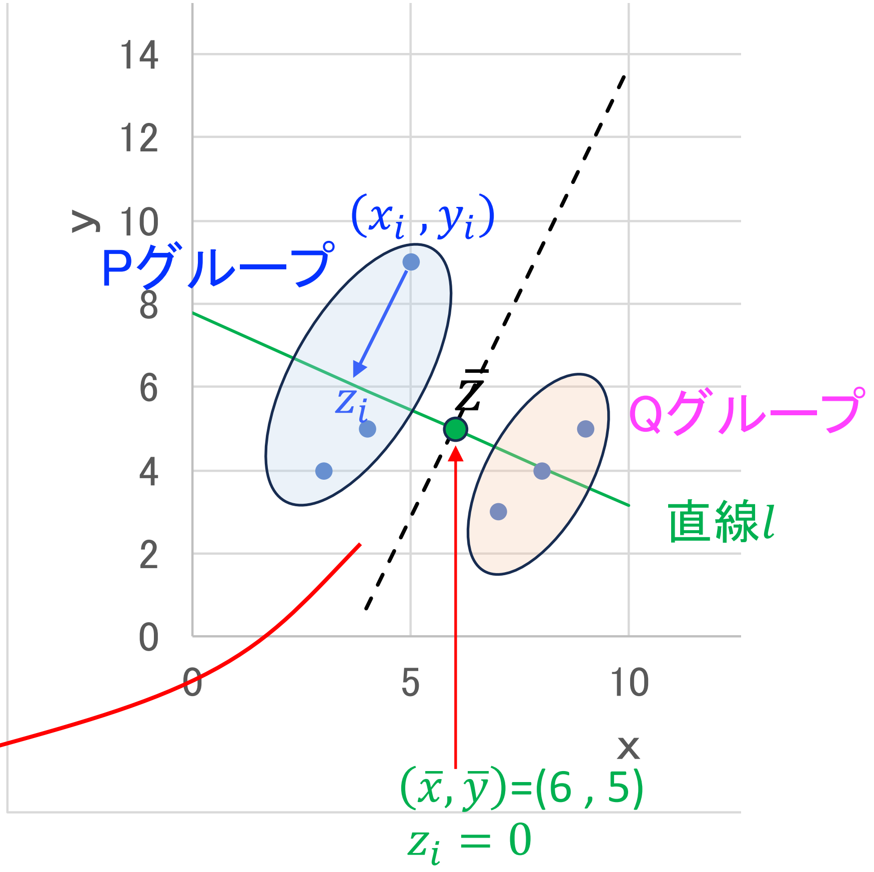
直線判別式

xy平面上でグループを判別する

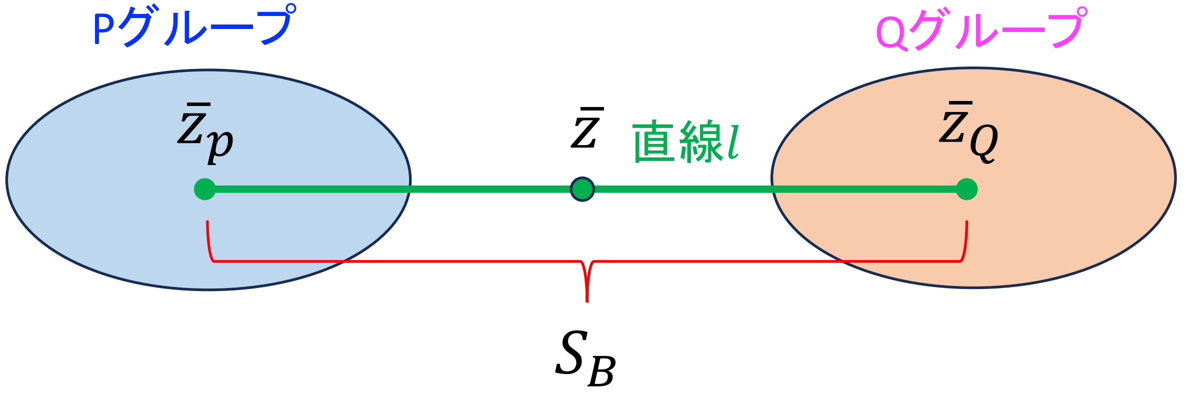
	x	y	グループ
A	5	9	P
B	3	4	P
C	4	5	P
D	7	3	Q
E	8	4	Q
F	9	5	Q
合計	36	30	
平均	6	5	

$(x_i\ , y_i)$から垂線を下ろした直線lの目盛を以下の式で表す
$(\bar{x}, \bar{y})$を通る直線のため、$(\bar{x}, \bar{y})$ の目盛りz_i＝0

$$z_i = a(x_i - \bar{x}) + b(y_i - \bar{y})$$



Pグループの直線l上の目盛の平均値$\bar{z}_P$とQグループの目盛の平均値$\bar{z}_Q$
間の距離S_Bが最大になる条件を算出して直線判別関数z_iとします



				xの偏差	yの偏差	S_{xx}	S_{yy}	S_{xy}
	x	y	グループ	$x-\bar{x}$	$y-\bar{y}$	$(x-\bar{x})^2$	$(y-\bar{y})^2$	$(x-\bar{x})(y-\bar{y})$
A	5	9	P	−1	4	1	16	−4
B	3	4	P	−3	−1	9	1	3
C	4	5	P	−2	0	4	0	0
D	7	3	Q	1	−2	1	4	−2
E	8	4	Q	2	−1	4	1	−2
F	9	5	Q	3	0	9	0	0
合計	36	30				28	22	−5
平均	6	5						

共分散×6

平均値

Pグループのサイズ	n_P	3
Pグループのxの平均	$\bar{x}_P$	4
Pグループのyの平均	$\bar{y}_P$	6
Qグループのサイズ	n_Q	3
Qグループのxの平均	$\bar{x}_Q$	8
Qグループのyの平均	$\bar{y}_Q$	4

$$S_{B_{xx}} = n_P\ (\bar{x}_P - \bar{x}\ )^2 + n_Q\ (\bar{x}_Q - \bar{x}\ )^2$$
$$= 3\ (4-6)^2 + 3(8-6)^2$$
$$=24$$

$$S_{B_{yy}} = n_P\ (\bar{y}_P - \bar{y}\ )^2 + n_Q\ (\bar{y}_Q - \bar{y}\ )^2$$
$$= 3\ (6-5)^2 + 3(4-5)^2$$
$$=6$$

$$S_{B_{xy}} = n_P(\bar{x}_P - \bar{x}\ )(\bar{y}_P - \bar{y}\ ) + n_Q(\bar{x}_Q - \bar{x}\ )(\bar{y}_Q - \bar{y}\ )$$
$$= 3(4-6)(6-5) + 3(8-6)(4-5)$$
$$= -12$$

$$S_B = \begin{pmatrix} S_{B_{xx}} & S_{B_{xy}} \\ S_{B_{xy}} & S_{B_{yy}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24 & -12 \\ -12 & 6 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{S} = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 28 & -5 \\ -5 & 22 \end{pmatrix}$$

$$S^{-1}\ S_B = \begin{pmatrix} 28 & -5 \\ -5 & 22 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 24 & -12 \\ -12 & 6 \end{pmatrix}$$

逆行列

$$= \frac{1}{22\times 28 - 5\times 5} \begin{pmatrix} 22 & 5 \\ 5 & 28 \end{pmatrix} \times 6 \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{6}{591} \begin{pmatrix} 22 & 5 \\ 5 & 28 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{2}{197} \begin{pmatrix} 78 & -39 \\ -36 & 18 \end{pmatrix} = \frac{6}{197} \begin{pmatrix} 26 & -13 \\ -12 & 6 \end{pmatrix}$$

$U = \begin{pmatrix} 26 & -13 \\ -12 & 6 \end{pmatrix}$とおく

$f(t) = |U - tE| = \begin{vmatrix} 26-t & -13 \\ -12 & 6-t \end{vmatrix}$とする　　Eは単位行列

$$= (26-t)(6-t) - (-13)(-12)$$
$$= t(t-32)$$

$f(t)$ =0より、Uの固有値は、32と0

32に属する固有ベクトルxは、

$(U - 32E)x = 0$

$$\begin{pmatrix} 26-32 & -13 \\ -12 & 6-32 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} -6 & -13 \\ -12 & -26 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$-6a - 13b = 0$
$-12a - 26b = 0$より
$a = 13\ b = -6$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} 13 \\ -6 \end{pmatrix}$$

$S^{-1}\ S_B = \frac{6}{197}U$の固有値は、

$$\frac{6\times 32}{197} = \frac{192}{197}と\frac{6\times 0}{197} = 0$$

$\frac{192}{197}$の固有値ベクトルxは、$\begin{pmatrix} 13 \\ -6 \end{pmatrix}$

直線lが$\begin{pmatrix} 13 \\ -6 \end{pmatrix}$と平行になるとき、相関比$\eta^2$は最大値$\frac{192}{197}$

直線lの方向を単位ベクトルで表すと

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{13^2+6^2}} \begin{pmatrix} 13 \\ -6 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{205}} \begin{pmatrix} 13 \\ -6 \end{pmatrix}$$

$$z_i = a(x_i - \bar{x}) + b(y_i - \bar{y}) = \frac{13}{\sqrt{205}}(x_i - 6) - \frac{6}{\sqrt{205}}(y_i - 5)$$

判別してみる

直線lは、

$$z_i = a(x_i - \bar{x}) + b(y_i - \bar{y}) = \frac{13}{\sqrt{205}}(x_i - 6) - \frac{6}{\sqrt{205}}(y_i - 5)$$

[判定基準]　$z_i < 0$のときPグループ　$z_i > 0$のときQグループ

$(x_i\,, y_i) = (9\,, 8)$の点は、どちらのグループか？

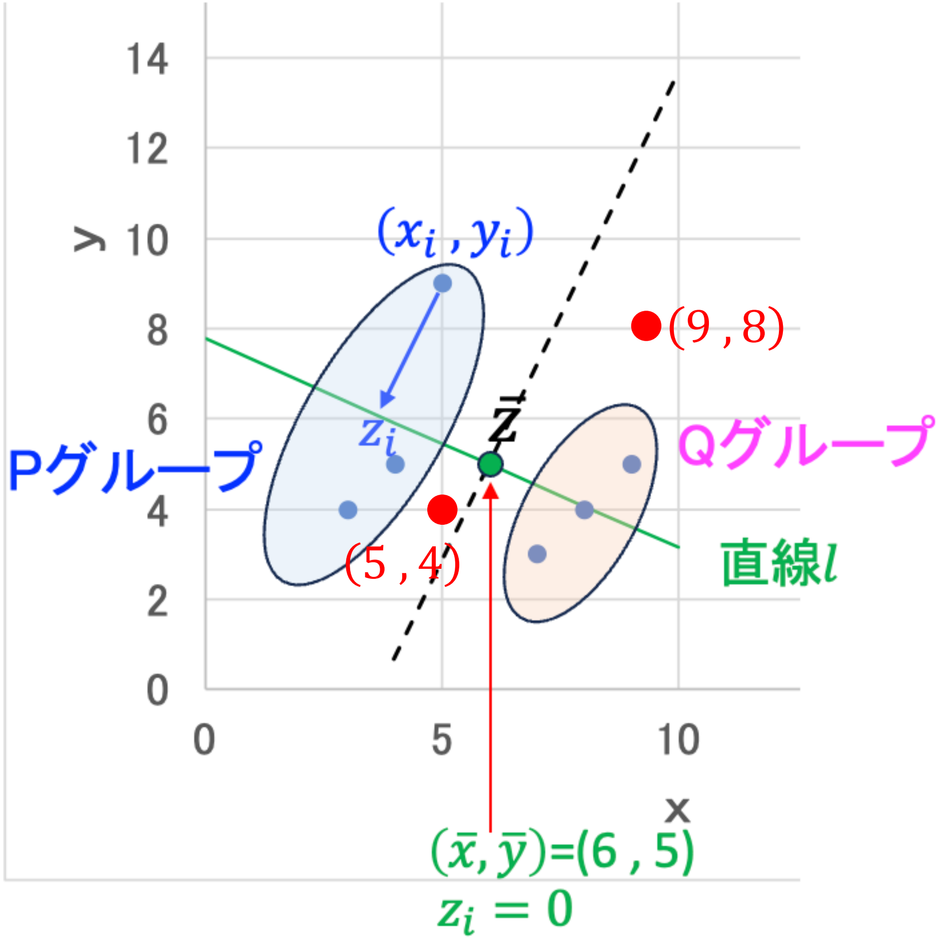
$$z_i = \frac{13}{\sqrt{205}}(x_i - 6) - \frac{6}{\sqrt{205}}(y_i - 5)$$
$$= \frac{13}{\sqrt{205}}(9 - 6) - \frac{6}{\sqrt{205}}(8 - 5) = \frac{13\times3}{\sqrt{205}} - \frac{6\times3}{\sqrt{205}} = \frac{21}{\sqrt{205}} > 0$$

→Qグループに属する

$(x_i\,, y_i) = (5\,, 4)$の点は、どちらのグループか？

$$z_i = \frac{13}{\sqrt{205}}(x_i - 6) - \frac{6}{\sqrt{205}}(y_i - 5)$$
$$= \frac{13}{\sqrt{205}}(5 - 6) - \frac{6}{\sqrt{205}}(4 - 5) = \frac{-13}{\sqrt{205}} - \frac{-6}{\sqrt{205}} = \frac{-7}{\sqrt{205}} < 0$$

→Pグループに属する



数学的な理屈

直線lは、$(\bar{x}\,,\bar{y})$を通り、この直線に垂線を下ろして直線lとの交点の目盛を読みます。$(\bar{x}\,,\bar{y})$が目盛0です。
$(x_i\,,y_i)$から直線lに下ろした垂線の目盛をz_iとして、線形判別関数と呼びます。

$$z_i = a(x_i - \bar{x}) + b(y_i - \bar{y})$$

直線lの方向を$\binom{a}{b}$として、$\binom{a}{b}$が単位ベクトルとすると、$a^2 + b^2 = 1$

$$\bar{z} = \frac{z_1+z_2+\cdots+z_n}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\{a(x_i-\bar{x})+\ b(y_i-\bar{y})\}}{n} = a\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})}{n} + b\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})}{n} = a\left(\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} - \frac{n\bar{x}}{n}\right) + b\left(\frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n} - \frac{n\bar{y}}{n}\right)$$
$$= a(\bar{x} - \bar{x}) + b(\bar{y} - \bar{y}) = 0$$

zの全変動S_T

$$S_T = \sum_{i=1}^{n}(z_i - \bar{z})^2 = \sum_{i=1}^{n}(z_i - 0)^2 = \sum_{i=1}^{n} {z_i}^2 = \sum_{i=1}^{n}\{a(x_i - \bar{x}) +\ b(y_i - \bar{y})\}^2$$
$$= \sum_{i=1}^{n}\{a^2(x_i - \bar{x})^2 +\ 2ab(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) + b^2(y_i - y)^2\}$$
$$= a^2\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 + 2ab\sum_{i=1}^{n}(\bar{x} - \bar{x})\,(\bar{y} - \bar{y}) + b^2\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2 = a^2 S_{xx} + 2abS_{xy} + b^2 S_{yy}$$

$$\bar{z}_P = \frac{\sum_{i=1}^{n_P} z_i}{n_P} = \frac{\sum_{i=1}^{n_P}\{a(x_i-\bar{x})+\ b(y_i-\bar{y})\}}{n_P} = a\left(\frac{\sum_{i=1}^{n_P} x_i}{n_P} - \frac{n_P\bar{x}}{n_P}\right) + b\left(\frac{\sum_{i=1}^{n_P} y_i}{n_P} - \frac{n_P\bar{y}}{n_P}\right) = a(\bar{x}_P - \bar{x}) + b(\bar{y}_P - \bar{y}) = 0$$

群間変動S_B

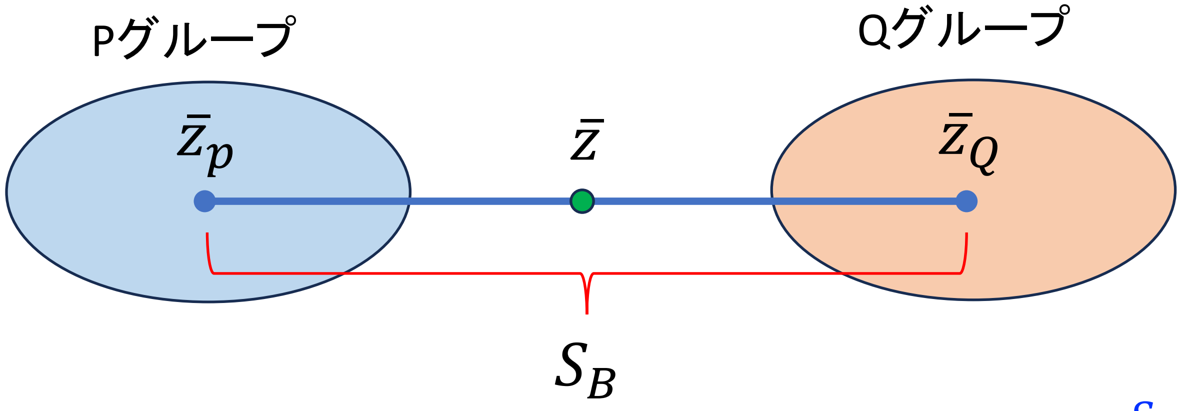
$$S_B = n_P\left(\bar{z}_p - \bar{z}\right)^2 + n_Q\left(\bar{z}_Q - \bar{z}\right)^2$$
$$= n_P\,\{a(\bar{x}_P - \bar{x}) + \ b(\bar{y}_P - \bar{y})\}^2 + n_Q\left\{a\left(\bar{x}_Q - \bar{x}\right) + \ b\left(\bar{y}_Q - \bar{y}\right)\right\}^2$$
$$= a^2\left\{n_P(\bar{x}_P - \bar{x})^2 + n_Q\left(\bar{x}_Q - \bar{x}\right)^2\right\} + 2ab\{n_P(\bar{x}_P - \bar{x})(\bar{y}_P - \bar{y}) + n_Q\left(\bar{x}_Q - \bar{x}\right)\left(\bar{y}_Q - \bar{y}\right)\} + b^2\left\{n_P(\bar{y}_P - \bar{y})^2 + n_Q\left(\bar{y}_Q - \bar{y}\right)^2\right\}$$

S_Bのxの偏差平方和:　$S_{B_{xx}} = n_P(\bar{x}_P - \bar{x})^2 + n_Q\left(\bar{x}_Q - \bar{x}\right)^2$

S_Bのyの偏差平方和:　$S_{B_{yy}} = n_P(\bar{y}_P - \bar{y})^2 + n_Q\left(\bar{y}_Q - \bar{y}\right)^2$

S_Bのxyの偏差積和:　$S_{B_{xy}} = n_P(\bar{x}_P - \bar{x})(\bar{y}_P - \bar{y}) + n_Q\left(\bar{x}_Q - \bar{x}\right)\left(\bar{y}_Q - \bar{y}\right)$

$$S_B = a^2\ S_{B_{xx}} + 2ab\ S_{B_{xy}} + b^2\ S_{B_{yy}}$$



S_Bが離れていれば、PとQグループは離れている

相関比$\eta^2 = \dfrac{\text{群間変動}}{\text{全変動}} = \dfrac{S_B}{S_T}$　　　全変動＝群間変動＋郡内変動

$0 \leq \eta^2 \leq 1$

$$\eta^2 = \frac{S_B}{S_T} = \frac{a^2\, S_{B_{xx}} + 2ab\, S_{B_{xy}} + b^2\, S_{B_{yy}}}{a^2\, S_{xx} + 2ab\, S_{xy} + b^2\, S_{yy}}$$

$S_T = a^2\, S_{xx} + 2ab\, S_{xy} + b^2\, S_{yy} = 1$のとき

$S_B = a^2\, S_{B_{xx}} + 2ab\, S_{B_{xy}} + b^2\, S_{B_{yy}}$が最大になる問題を解く

ラグランジュの未定係数法より

$$F(a, b) = a^2\, S_{B_{xx}} + 2ab\, S_{B_{xy}} + b^2\, S_{B_{yy}} - \lambda\left(a^2\, S_{xx} + 2ab\, S_{xy} + b^2\, S_{yy} - 1\right)$$

$F(a, b)$が最大値をとる条件は、

$$\frac{\partial F(a, b)}{\partial b} = 2aS_{B_{xx}} + 2bS_{B_{xy}} - \lambda\left(2aS_{xx} + 2b\, S_{xy}\right) = 0$$

$$\frac{\partial F(a, b)}{\partial b} = 2aS_{B_{xy}} + 2bS_{B_{yy}} - \lambda\left(2aS_{xy} + 2b\, S_{yy}\right) = 0$$

$$a^2\, S_{xx} + 2ab\, S_{xy} + b^2\, S_{yy} = 1$$

$$\begin{pmatrix} S_{B_{xx}} & S_{B_{xy}} \\ S_{B_{xy}} & S_{B_{yy}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \lambda\begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

$$S_B = \begin{pmatrix} S_{B_{xx}} & S_{B_{xy}} \\ S_{B_{xy}} & S_{B_{yy}} \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$S_B x - \lambda S x = 0 \;\rightarrow\; (S_B - \lambda S)x = 0$

左からS^{-1}をかけて

$S^{-1}(S_B - \lambda S)x = S^{-1} \cdot 0 \qquad (S^{-1}S_B - \lambda S^{-1}S)x = 0$

$(S^{-1}S_B - \lambda E)x = 0$

λは、$S^{-1}S_B$の固有値、xは固有ベクトル

$$S_B x - \lambda S x = 0$$
$$S_B x = \lambda S x$$
$${}^t x\, S_B x = \lambda\, {}^t x S x$$

$${}^t x\, S_B x = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{B_{xx}} & S_{B_{xy}} \\ S_{B_{xy}} & S_{B_{yy}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a^2\, S_{B_{xx}} + 2ab\, S_{B_{xy}} + b^2\, S_{B_{yy}}$$
$$\lambda\, {}^t x S x = \lambda \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda\left(a^2\, S_{xx} + 2ab\, S_{xy} + b^2\, S_{yy}\right)$$

xは固有ベクトルなので自由な値をとることができる
$a^2\, S_{xx} + 2ab\, S_{xy} + b^2\, S_{yy} = 1$　を満たすことが可能

$$a^2\, S_{B_{xx}} + 2ab\, S_{B_{xy}} + b^2\, S_{B_{yy}} = \lambda$$
$a^2\, S_{B_{xx}} + 2ab\, S_{B_{xy}} + b^2\, S_{B_{yy}}$の最大値は固有値$\lambda$