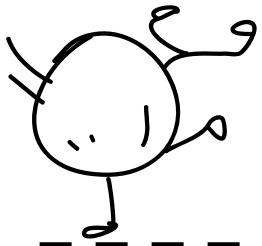


# 03 Bayes Theorem

Vorlesung 186.844

12.11.2015

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

# Überblick

I. Parameterschätzung für Bayes-Theorem
II. Abstecher: Erwartungstreue Schätzer
III. Statistische Grundlagen für zwei oder mehrere Zufallsvariablen
IV. Multivariate Normalverteilungen
V. Bayes-Theorem für multivariate Normalverteilungen
VI. Diskriminantenfunktionen


© Nicole M. Artner

# I. Parameterschätzung für Bayes-Theorem


© Nicole M. Artner

# WH: Bayes-Theorem

wird für die Klassifizierung verwendet

können aus Stichproben berechnet werden

$$P(\omega_j|x=i) = \frac{P(x=i|\omega_j)P(\omega_j)}{P(x=i)}$$

Normalisierungsfaktor:
kann aus dem Zähler berechnet werden


© Nicole M. Artner

# Parameterschätzung …

… man spricht auch vom Training oder Supervised Learning

Mit Hilfe von Trainingsdaten, bestehend aus $N$ Stichproben die $c$ Klassen zugeordnet sind, schätzt man:

- priors $P(\omega_j)$
- evidence $p(x)$
- class conditional pdfs $p(x|\omega_j)$

**Ziel**: Klassifikator soll neue Muster (Testdaten) richtig klassifizieren.


© Nicole M. Artner

# Schätzung der Priors

- meist einfach zu schätzen
- Schätzungen basieren auf
  - Klassenverteilung in den Trainingsdaten
  - zusätzliches Wissen über die Verteilung
- oft werden einfach gleiche Priors für alle Klassen angenommen

$$P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$$


© Nicole M. Artner

# Schätzung der Evidence

- Evidence (Normalisierungsfaktor) erhält man als:

$$p(x) = \sum_{j=1}^{c} p(x|\omega_j)P(\omega_j)$$

- man braucht unter anderem die Dichtefunktionen der Klassen (class conditional pdfs)

$$P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$$


© Nicole M. Artner

# Schätzung der Dichtefunktionen

… die class conditional pdfs sind am schwierigsten zu schätzen

$$P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$$

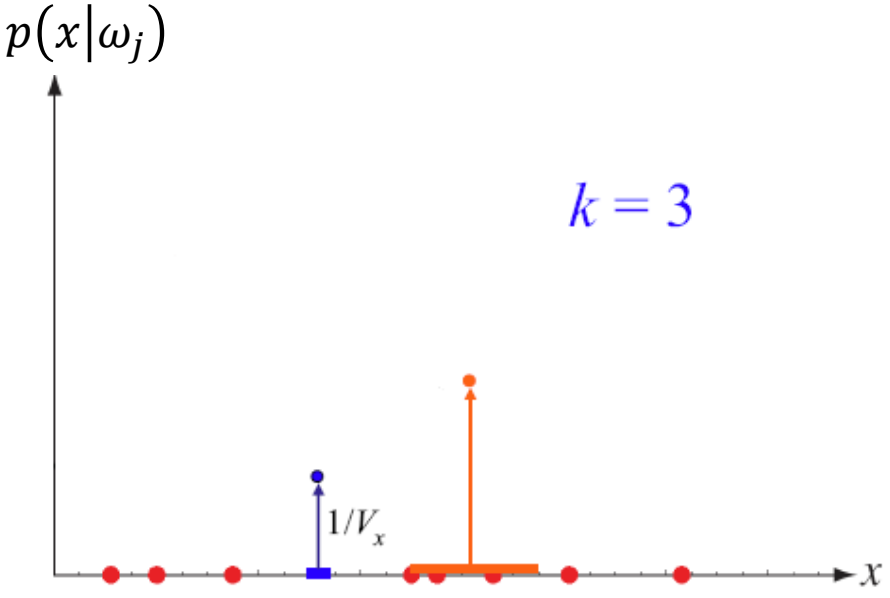
| nicht-parametrische Verfahren | parametrische Verfahren |
|---|---|
| • Anzahl der Parameter nicht fix<br>• keine Annahme über die Verteilung | • Anzahl der Parameter ist fix<br>• man macht am Beginn eine Annahme über die Verteilung (z.B. Normalverteilung) |


© Nicole M. Artner

# Nicht-Parametrisches Verfahren

- k-Nearest Neighbor Estimation (k-NN Schätzung): einfaches Verfahren zur Dichteschätzung aus $N$ Stichproben von Klasse $j$

- zentriere „Zelle“ über $x$
- lass Zelle wachsen bis $k$ Stichproben enthalten sind
- $V_x$ → Größe der Zelle (z.B. Länge der Linie)
- $\frac{1}{V_x}$ → Schätzung der Dichte

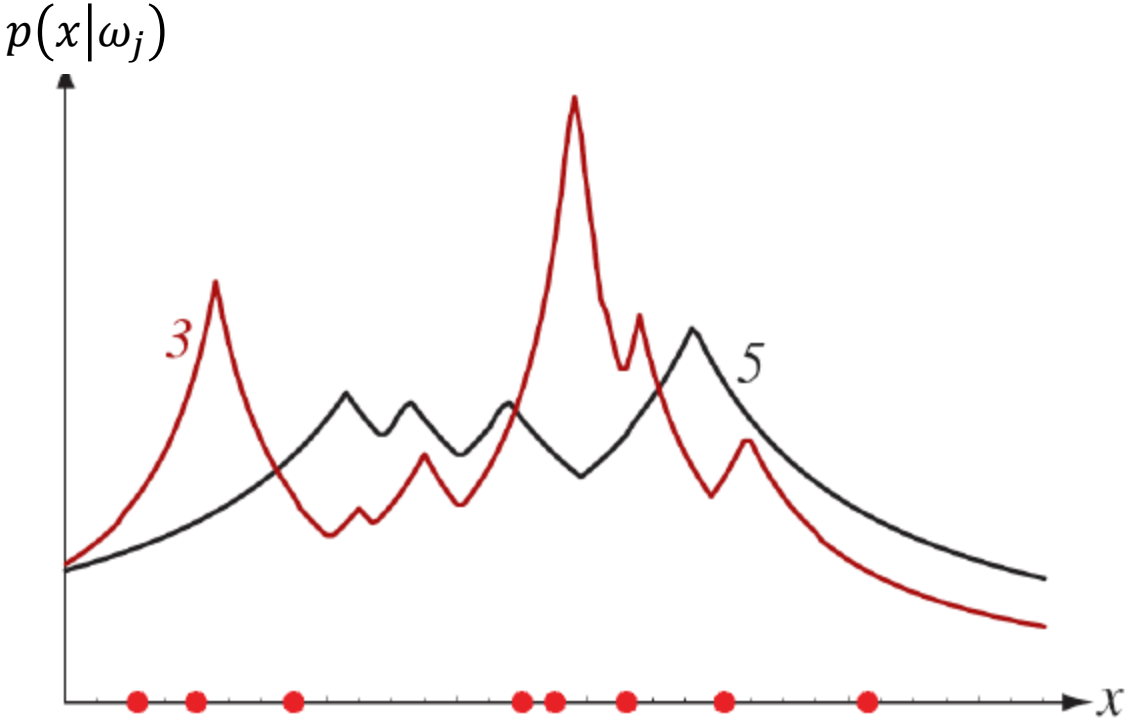




© Nicole M. Artner

# k-NN Schätzung

Ergebnis für Beispiel mit 8 Stichproben mit $k = 3$ und $k$ =5 aus Duda et al.:

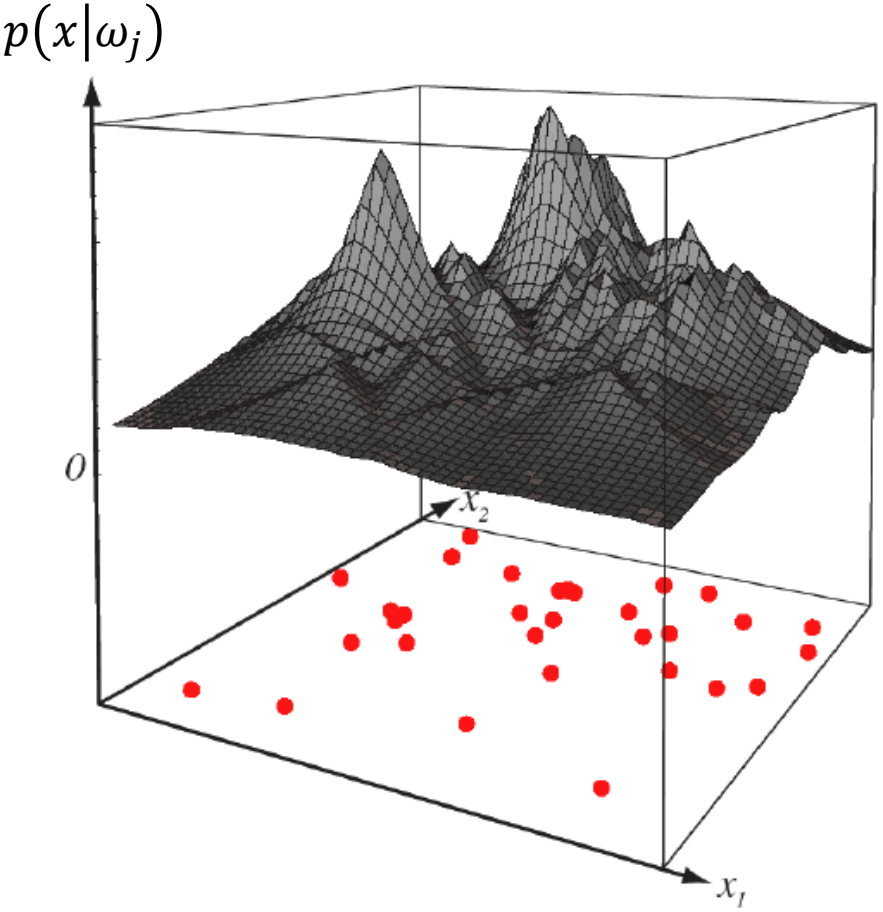



[Quelle: Duda et al., 2001]


© Nicole M. Artner

# Dichteschätzung für nD

- $k$-NN Schätzverfahren ist auch für Dichteschätzungen mit zwei oder mehr Dimensionen anwendbar
- zum Beispiel:
  - 2D-Zelle Kreis oder Rechteck
  - $V_x$ Flächeninhalt der Form




[Quelle: Duda et al., 2001]

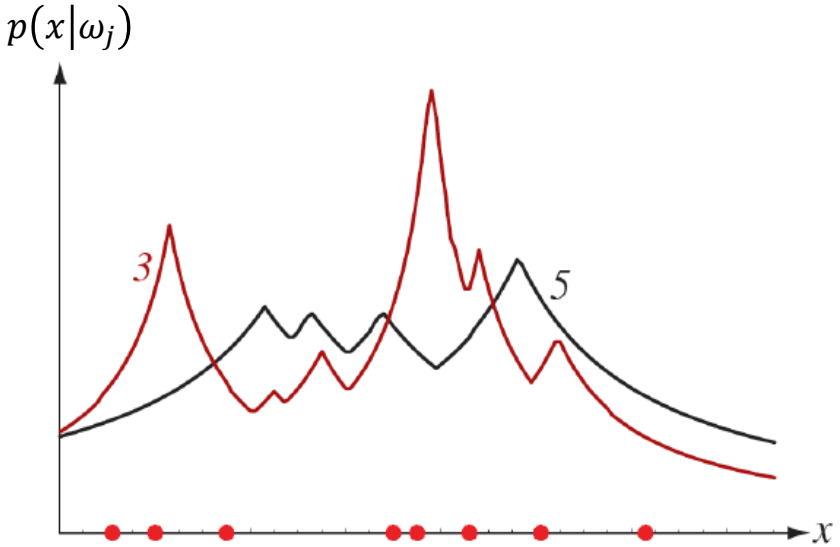

© Nicole M. Artner

# Anmerkungen Dichteschätzung

- Form der geschätzten Dichtefunktion hängt stark vom Wert für $k$ ab

- Geschätzte Dichtefunktion ist üblicherweise nicht glatt

- Schätzung nähert sich der tatsächlichen Dichtefunktion an, wenn Anzahl der Stichproben $N \rightarrow \infty$




[Quelle: Duda et al., 2001]


© Nicole M. Artner

# Link: k-NN Klassifikator

- basiert auf der Idee des k-NN Schätzers
- ABER: statt die Likelihood zu schätzen, wird direkt die posteriori Wahrscheinlichkeit geschätzt
  - aus Trainingsdaten werden $k$ „Datenpunkte“ mit der kleinsten Distanz zu $x$ gefunden
  - $k_j$ gehören zur Klasse $j$
  - posteriori Wahrscheinlichkeit für Klasse $j$ wird folgendermaßen geschätzt:

$$\mathrm{P}(\omega_j|x) = \frac{k_j}{k}$$


© Nicole M. Artner

# Parametrisches Verfahren

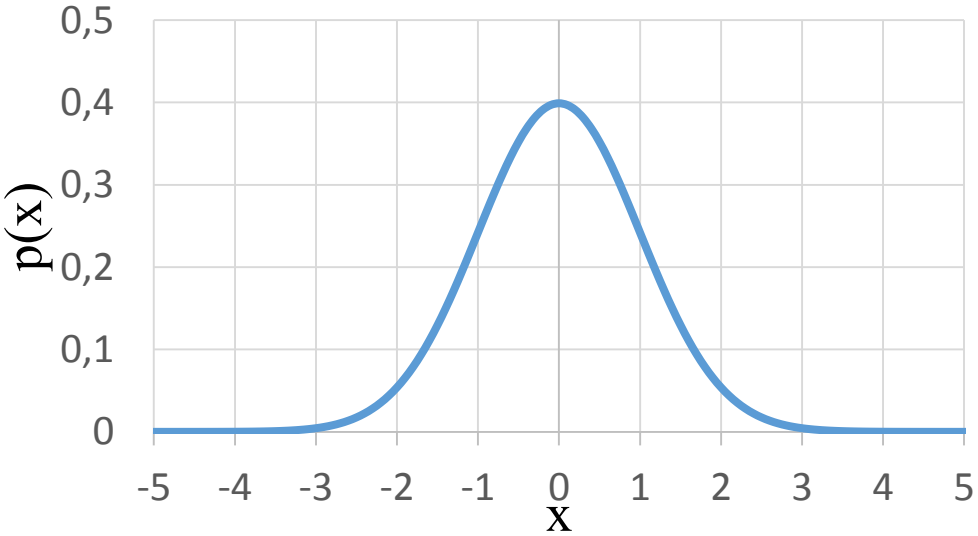
1. Annahme über Verteilung der Dichtefunktion wird getroffen
2. Schätzen der Parameter der Verteilung

| Vorteile | Nachteile |
| --- | --- |
| • weniger Parameter zu schätzen<br>• kleinerer Trainings-datensatz notwendig | • nicht so flexibel wie nicht-parametrische Verfahren |


© Nicole M. Artner

# Normalverteilung

- häufig wird eine Normalverteilung angenommen
- Gründe
  - eine der meist studierten Verteilungen
  - gute analytische Eigenschaften
  - gutes Modell für die Verteilung eines Merkmals





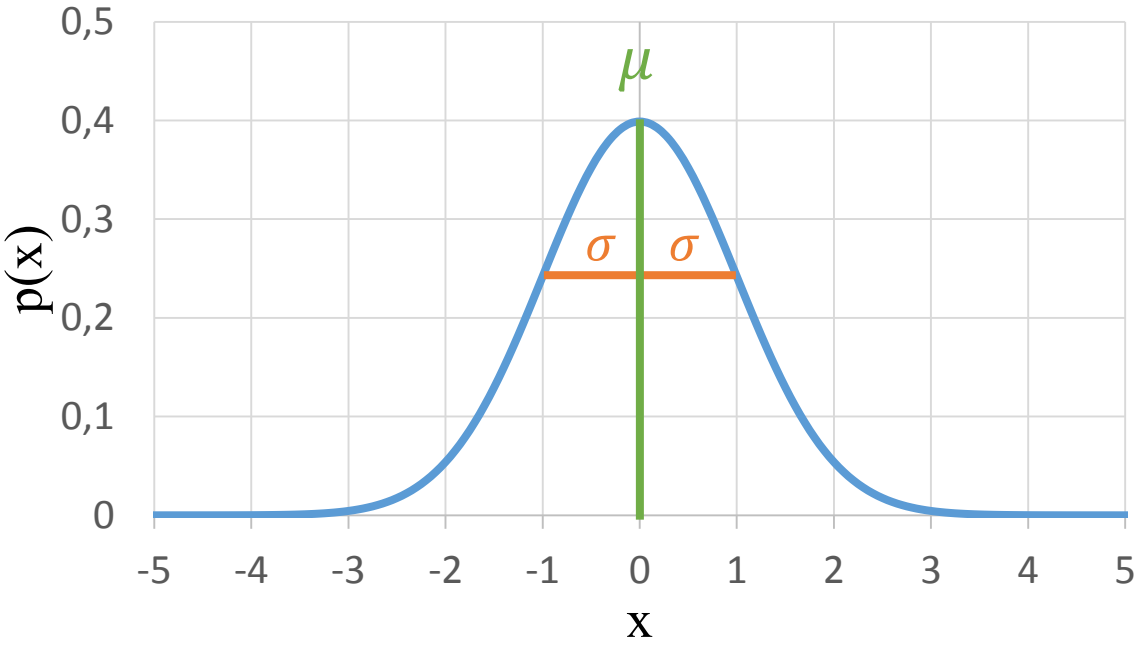
© Nicole M. Artner

# Normalverteilung

- Parameter:
  - Mittelwert $\mu$
  - Varianz $\sigma^2$

$$p(x) \sim N(\mu, \sigma^2)$$

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

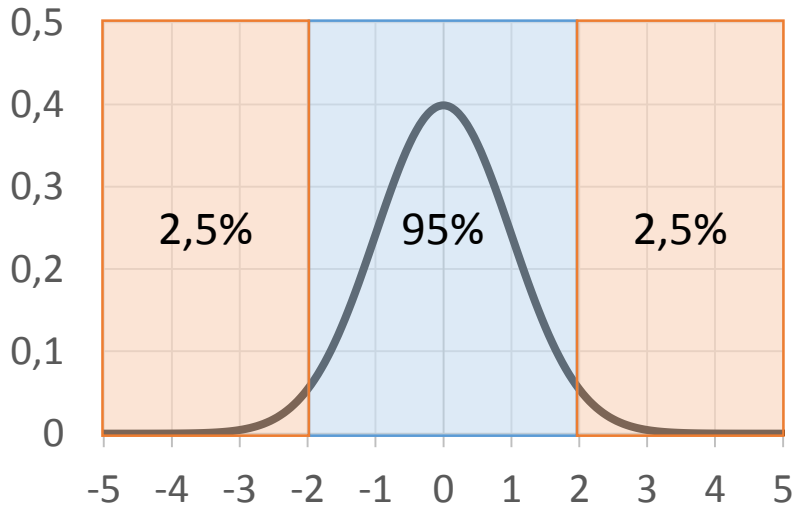




© Nicole M. Artner

# Dichte in Normalverteilung

- am höchsten in der Nähe des Mittelwerts
- Werteverteilung / Dichte:
  - $P[|x - \mu| \leq \sigma] \approx 0{,}68$ → 68% der Daten
  - $P[|x - \mu| \leq 2\sigma] \approx 0{,}95$ → 95% der Daten
  - $P[|x - \mu| \leq 3\sigma] \approx 0{,}997$ → mehr als 99% der Daten

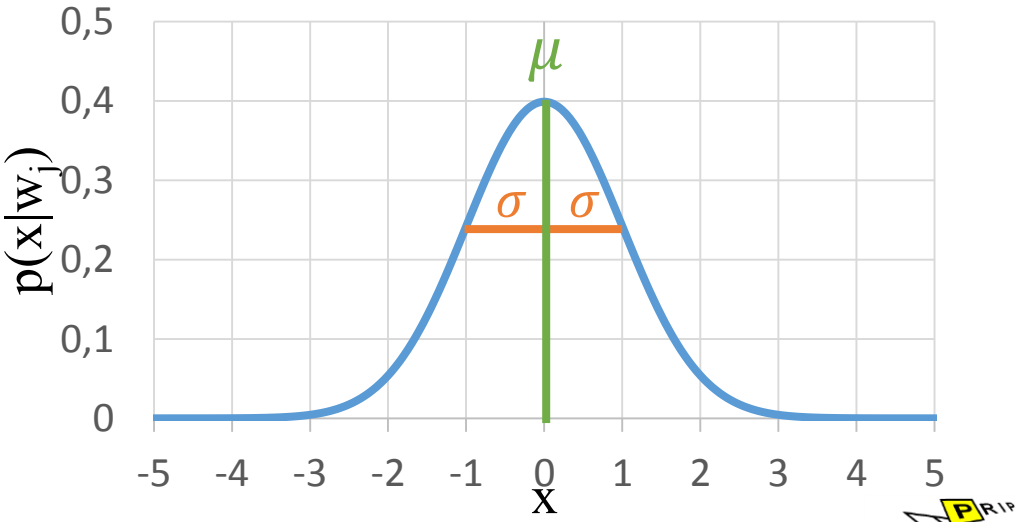




© Nicole M. Artner

# Schätzung der Parameter

1. Annahme der Verteilung: Normalverteilung
2. Trainingsdaten:
   - $N = \{x_1, \dots, x_N\}$ Stichproben mit Klassenlabel $w_j$
   - $j = 1, 2, \dots, c$
   - $N_j$ sind die Stichproben der Klasse $w_j$





© Nicole M. Artner

# Schätzung Mittelwert

Die Schätzung des Mittelwerts $\hat{\mu}_j$ für Klasse $j$ aus den Trainingsdaten $x_i$ der Klasse $j$

$$\hat{\mu}_j = \frac{1}{N_j} \sum_{x_i \in \omega_j} x_i$$

- $\hat{\mu}_j$ ist eine Schätzung des tatsächlichen Mittelwerts $\mu_j$


© Nicole M. Artner

# Schätzung Varianz

Falls tatsächlicher Mittelwert $\mu_j$ bekannt ist, wird Varianz folgendermaßen geschätzt:

$$\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{N_j} \sum_{x_i \in \omega_j} (x_i - \mu_j)^2$$

wichtiger Unterschied!

Bei geschätztem Mittelwert $\hat{\mu}_j$, wird folgender Schätzer verwendet:

$$\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{N_j - 1} \sum_{x_i \in \omega_j} (x_i - \hat{\mu}_j)^2$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel aus der Botanik

- Fisher's Iris Datensatz
- 50 Stichproben (Beobachtungen) von drei Arten von Schwertlilien
- vier Merkmale der Blüten
  - Länge und die Breite des Sepalum (Kelchblatt) und des Petalum (Kornblatt)

Iris setosa

Iris virginica

Iris versicolor


© Nicole M. Artner

# Auszug aus den Daten

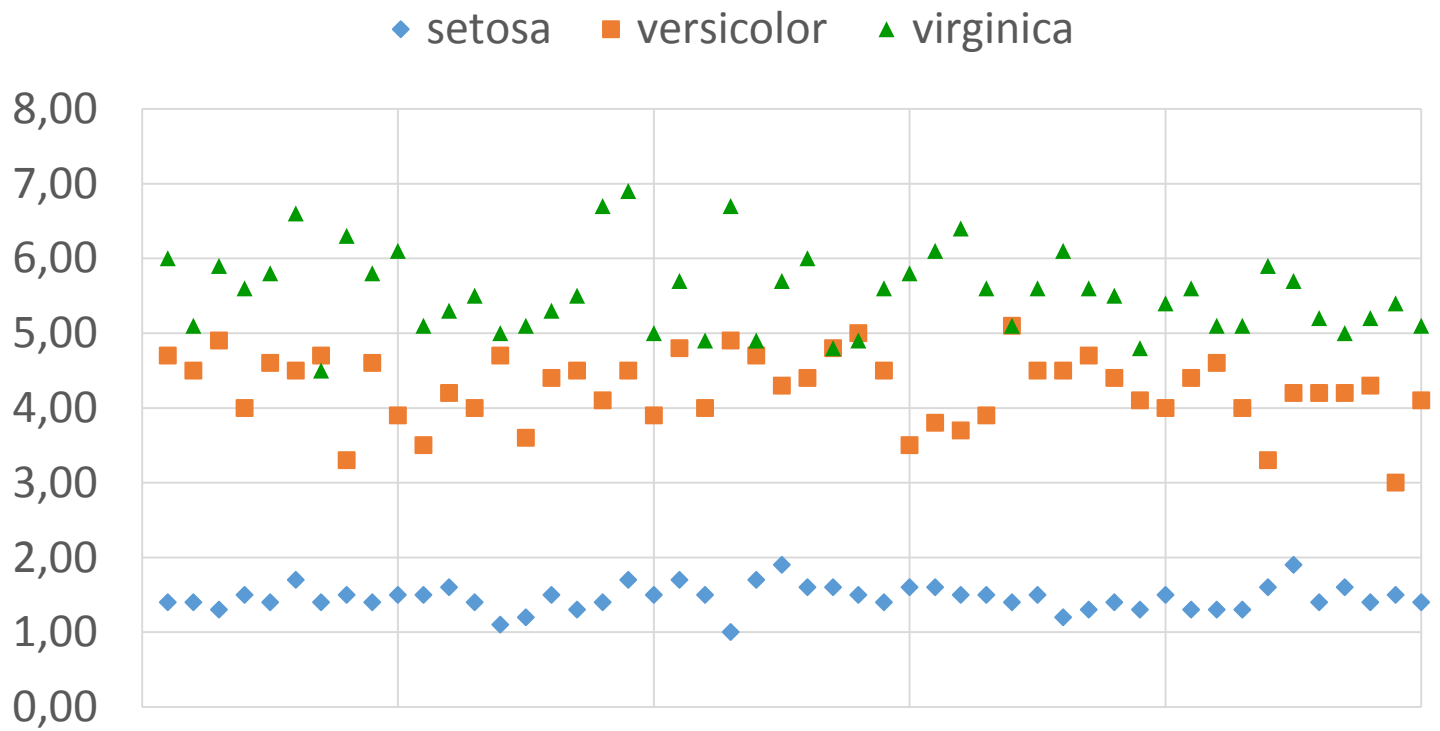
| Sepal length | Sepal width | Petal length | Petal width | Species |
|---|---|---|---|---|
| 5.1 | 3.5 | 1.4 | 0.2 | I. setosa |
| 4.9 | 3.0 | 1.4 | 0.2 | I. setosa |
| 4.7 | 3.2 | 1.3 | 0.2 | I. setosa |
| 4.6 | 3.1 | 1.5 | 0.2 | I. setosa |
| 5.0 | 3.6 | 1.4 | 0.2 | I. setosa |
| 5.4 | 3.9 | 1.7 | 0.4 | I. setosa |
| 4.6 | 3.4 | 1.4 | 0.3 | I. setosa |
| 5.0 | 3.4 | 1.5 | 0.2 | I. setosa |
| … | … | … | … | … |

Quelle: http://en.wikipedia.org/wiki/Iris_flower_data_set#Data_set


© Nicole M. Artner

# Trainingsdaten für Beispiel

- Merkmal: Petalumlänge





© Nicole M. Artner

# Schätzung der Priors

- wir nehmen an, dass die a priori Wahrscheinlichkeiten für alle 3 Klassen gleich sind:

$$P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$$

$$P(\omega_1) = P(\omega_2) = P(\omega_3) = \frac{1}{3}$$


© Nicole M. Artner

# Schätzung der Parameter

- für class conditional pdfs (Dichtefunktionen der Klassen)
- geschätzte Mittelwerte und Standardabweichungen (Varianz) von den Trainingsdaten:

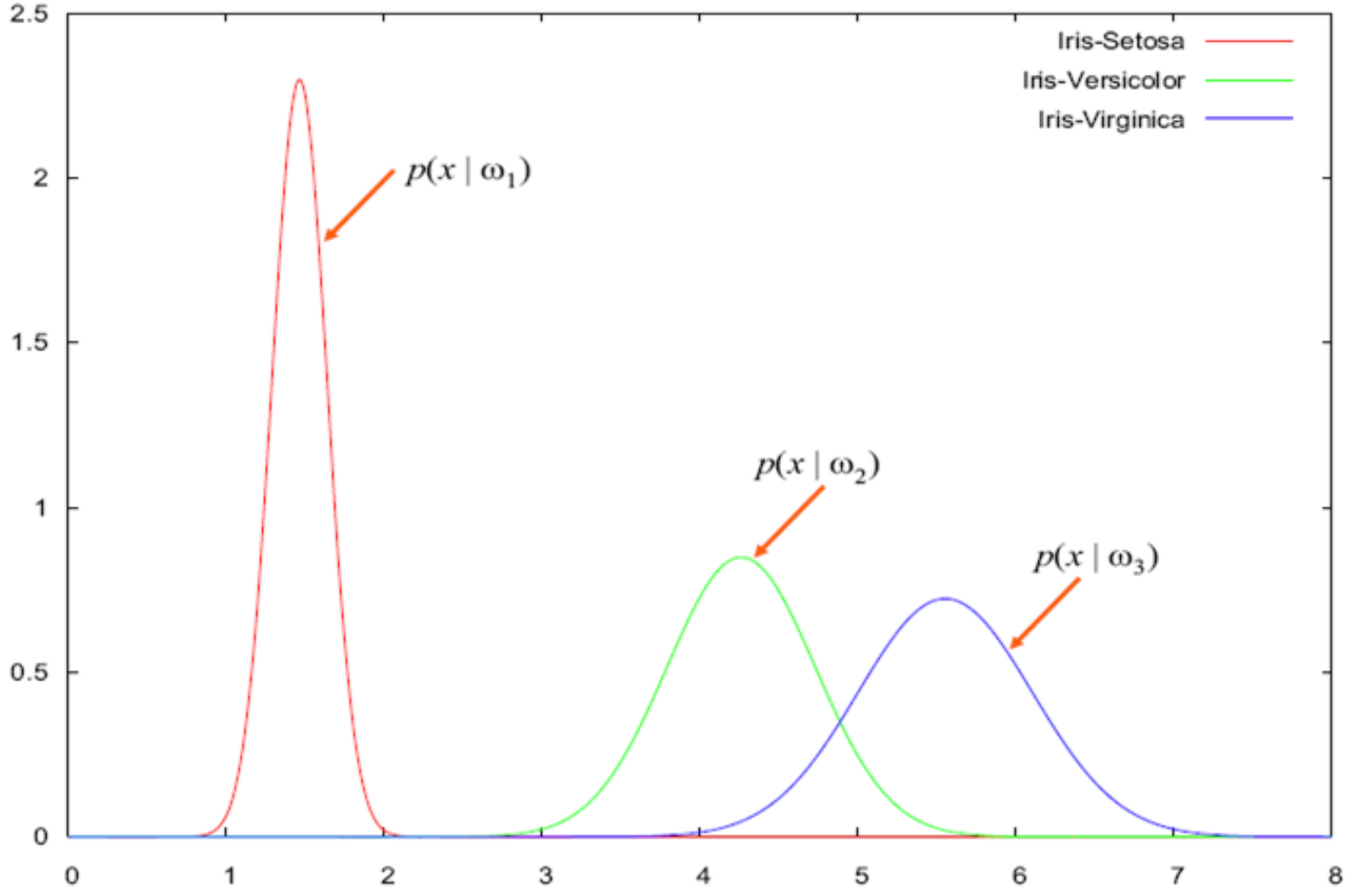
| Petalumlänge | setosa | versicolor | virginica |
|---|---|---|---|
| Mittelwert | 1,46 | 4,26 | 5,55 |
| Standardabweichung | 0,17 | 0,47 | 0,55 |

$$p(x|\omega_1) = \frac{1}{0{,}17\sqrt{2\pi}} e^{-\left[\frac{(x-1{,}46)^2}{0{,}058}\right]}$$

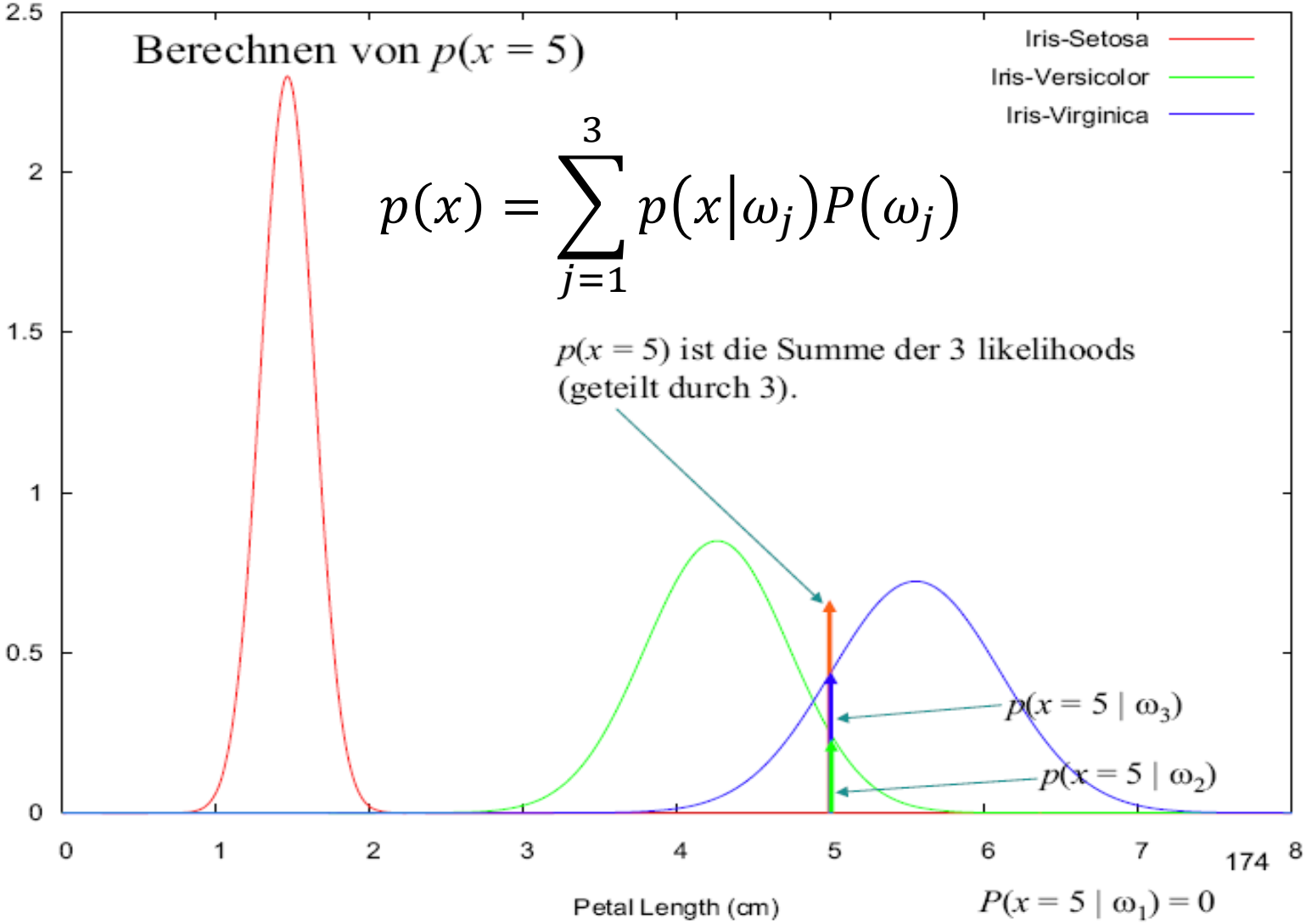

© Nicole M. Artner

# Geschätzte Dichtefunktionen

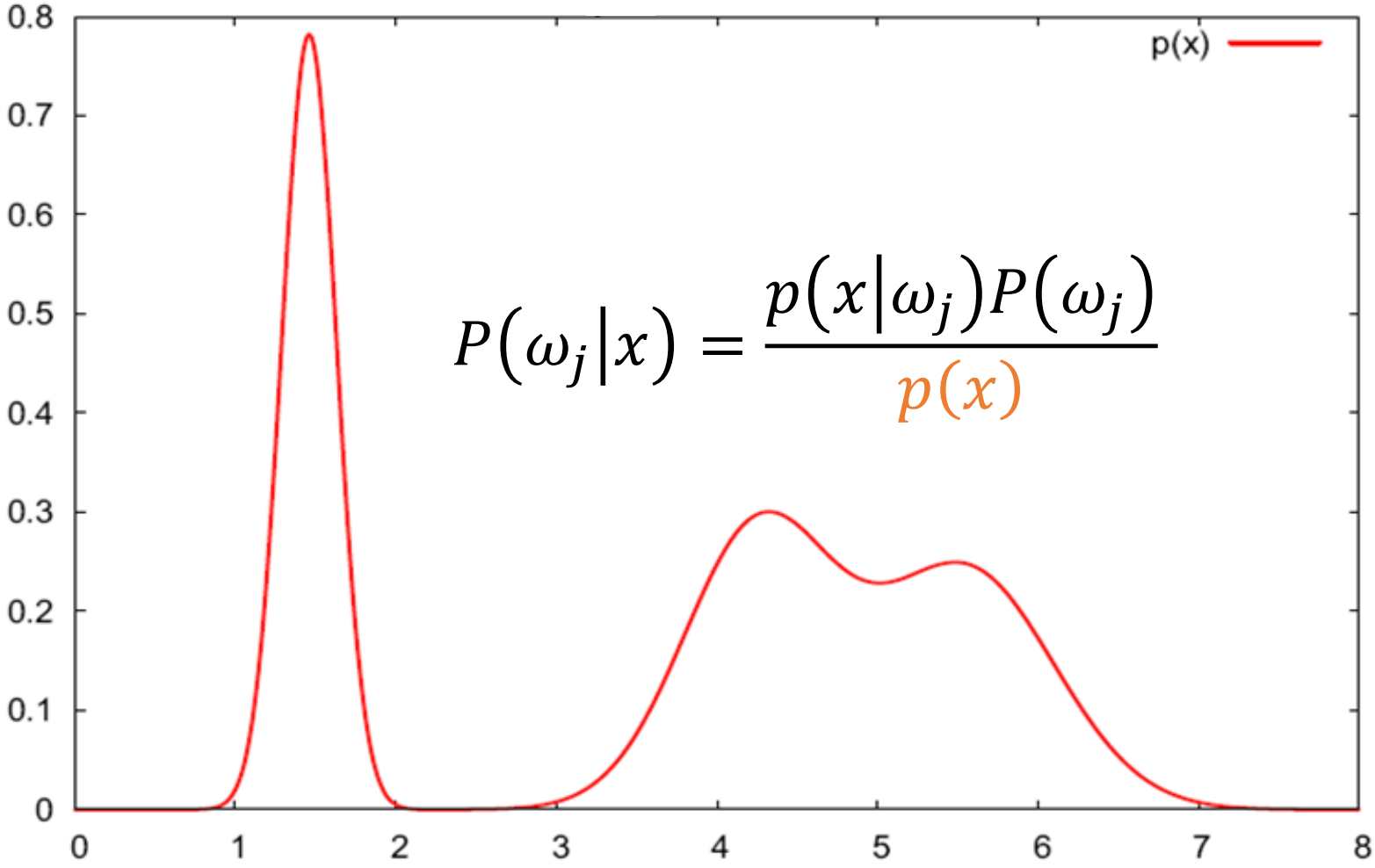
… für jede Klasse/Lilienart $P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$



# Schätzung Evidence



# Schätzung Evidence

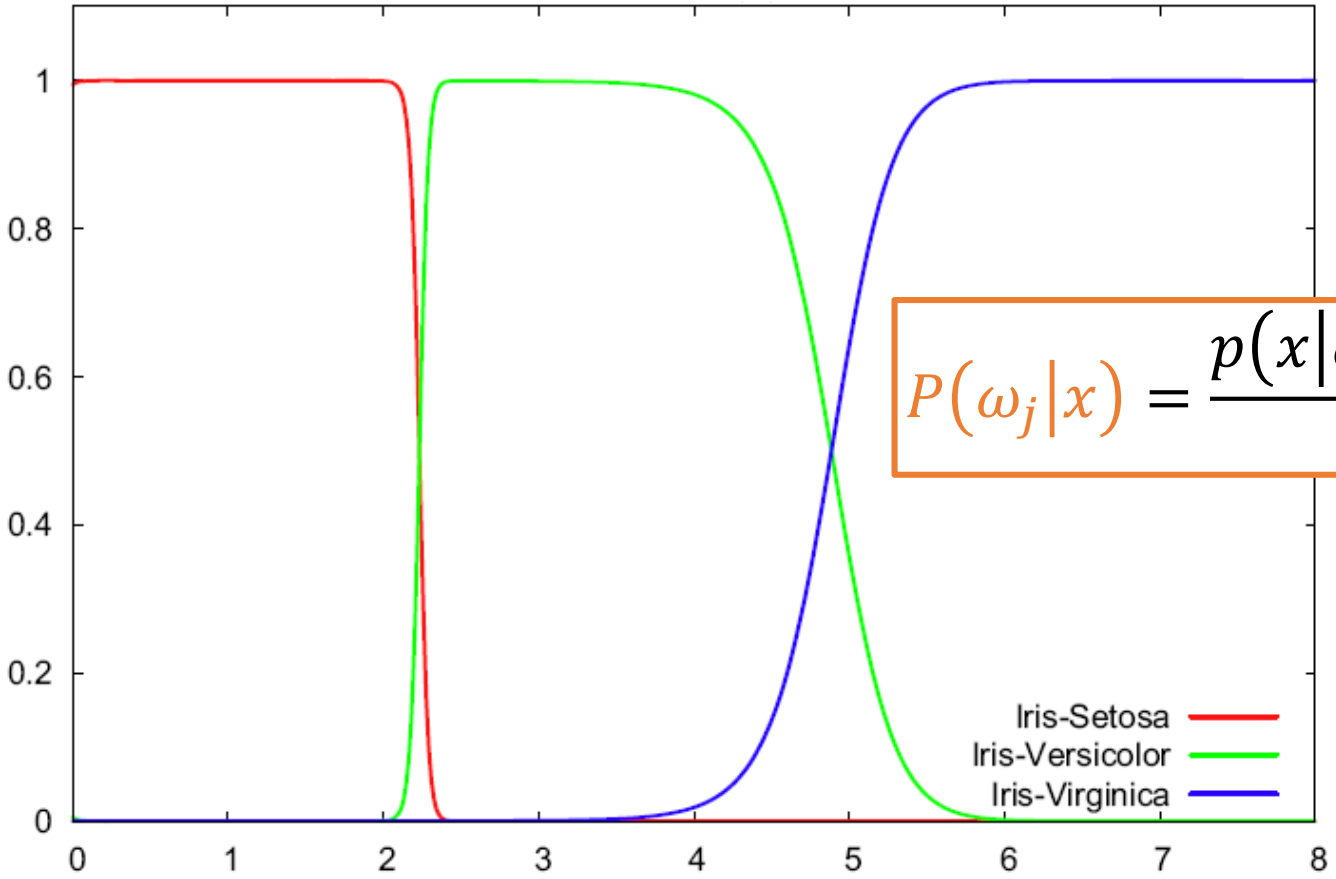



$$P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$$


© Nicole M. Artner

# Klassifikation

… mit Bayes-Entscheidungsregel




$$P(\omega_j|x) = \frac{p(x|\omega_j)P(\omega_j)}{p(x)}$$


© Nicole M. Artner

# Resümee

- ✓diskrete und stetige Zufallsvariablen
- ✓Bayes-Theorem für diskrete und stetige Zufallsvariablen
- ✓Parameterschätzung

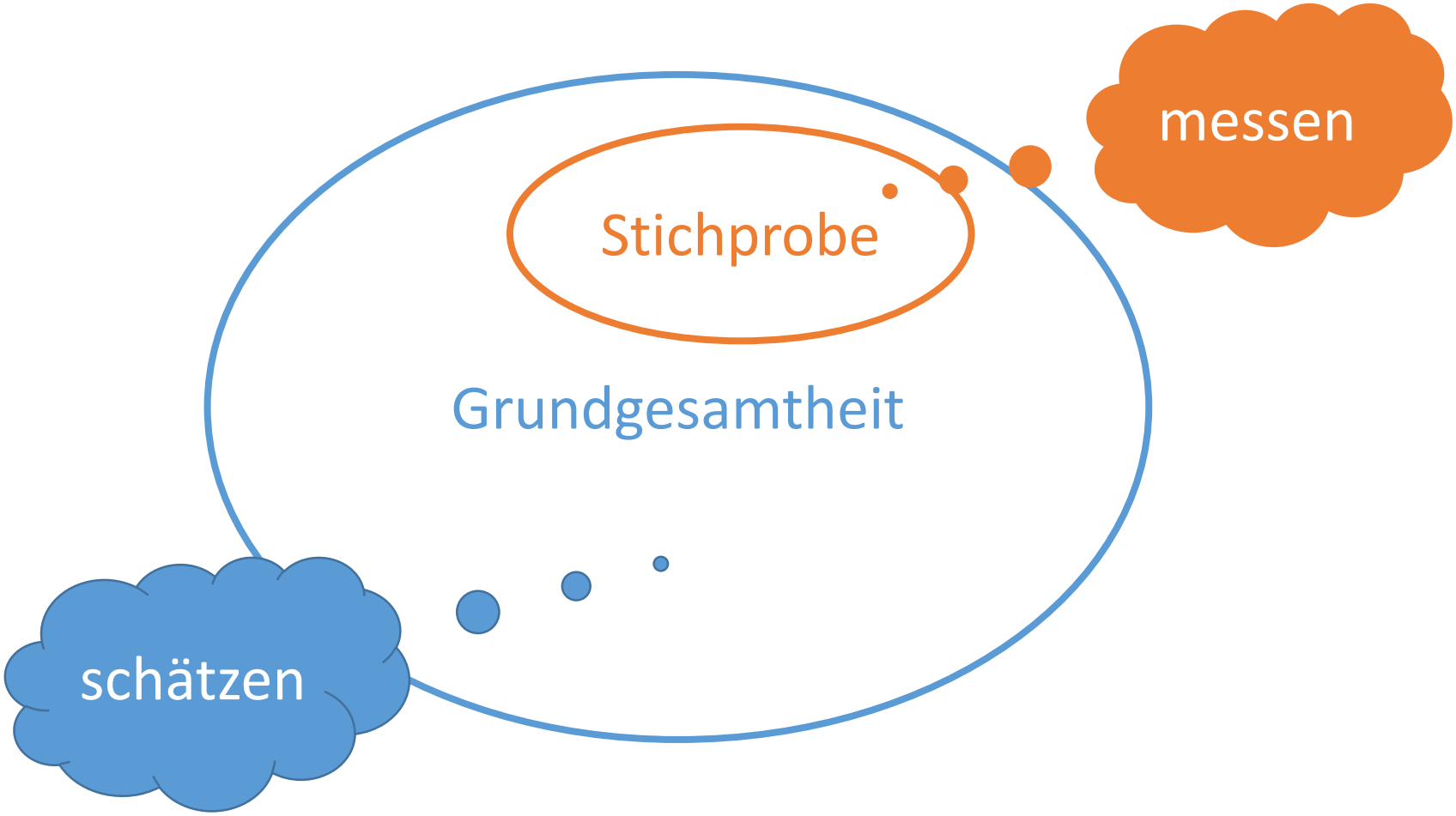
**Was fehlt noch?**

**Mehr Merkmale!**

# II. Abstecher: Erwartungstreue Schätzer


© Nicole M. Artner

# Grundgesamtheit





© Nicole M. Artner

# Eigenschaften von Schätzern

- $\hat{\theta}$ sei der Schätzer des Parameters $\theta$
- wünschenswerte Eigenschaften von $\hat{\theta}$:

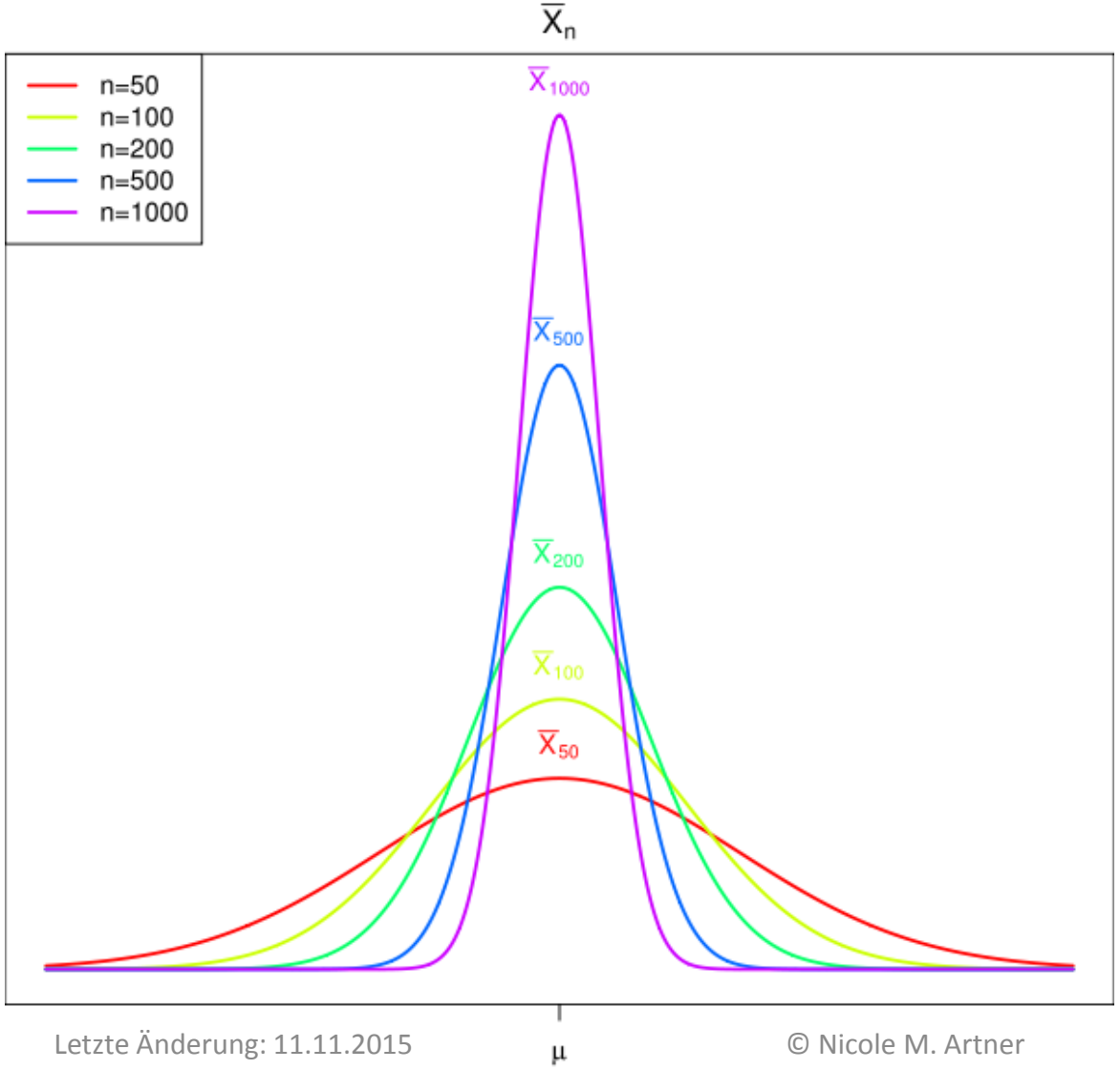
**Erwartungstreue**: $\varepsilon\left[\hat{\theta}\right] = \theta$

**Effizienz**: je geringer die Varianz des Schätzers $\sigma^2_{\hat{\theta}}$, desto effizienter ist er

**Konsistenz**: $\hat{\theta} \rightarrow \theta$ für $N \rightarrow \infty$
„Gesetz der großen Zahlen“


© Nicole M. Artner

# Effizienz des Mittelwertschätzers




Je geringer die Varianz des Schätzers $\sigma^2_{\hat{\mu}}(\bar{X})$:

- desto effizienter ist er
- desto wahrscheinlicher liegt die Schätzung nahe am wahren Wert


© Nicole M. Artner

# Schätzung Mittelwert

… ist erwartungstreu, weil

$$\varepsilon[\hat{\mu}] = \varepsilon\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i\right] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \varepsilon[x_i] = \frac{1}{N} \cdot N \cdot \mu = \mu$$

**Erklärung:**

Wenn man die Stichproben $x_i$ zufällig aus der Grundgesamtheit wählt, dann gilt $\varepsilon[x_i] = \mu$ (siehe Vorlesung 02_Grundlagen, Folie 37). Daraus folgt $\mathcal{E}[\hat{\mu}] = \mu$ und das bedeutet, dass der **Mittelwertschätzer erwartungstreu** ist.


© Nicole M. Artner

# Schätzung Varianz

… erwartungstreuer Schätzer, wenn wahres Mittel $\mu$ bekannt ist:

$$\varepsilon[\hat{\sigma}^2] = \varepsilon\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \mu)^2\right) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\varepsilon[(x_i - \mu)^2] = \frac{1}{N} \cdot N \cdot \sigma^2 = \sigma^2$$

N-1 bei wahrem Mittelwert verwenden

($\varepsilon[(x - \mu)^2] = \sigma^2$ → siehe Vorlesung 02_Grundlagen, Folie 40)

**ABER:**

Der wahre Mittelwert $\mu$ ist meist nicht bekannt …


© Nicole M. Artner

# Unkorrigierte Stichprobenvarianz

- wird auch als „verzerrte Varianz“ bezeichnet
- verwendet geschätzten Mittelwert $\hat{\mu}$ (aus Stichprobe)

Unkorrigierte Stichprobenvarianz (verzerrte Varianz):

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \hat{\mu})^2 = \frac{(x_1 - \hat{\mu})^2 + \cdots + (x_N - \hat{\mu})^2}{N}$$

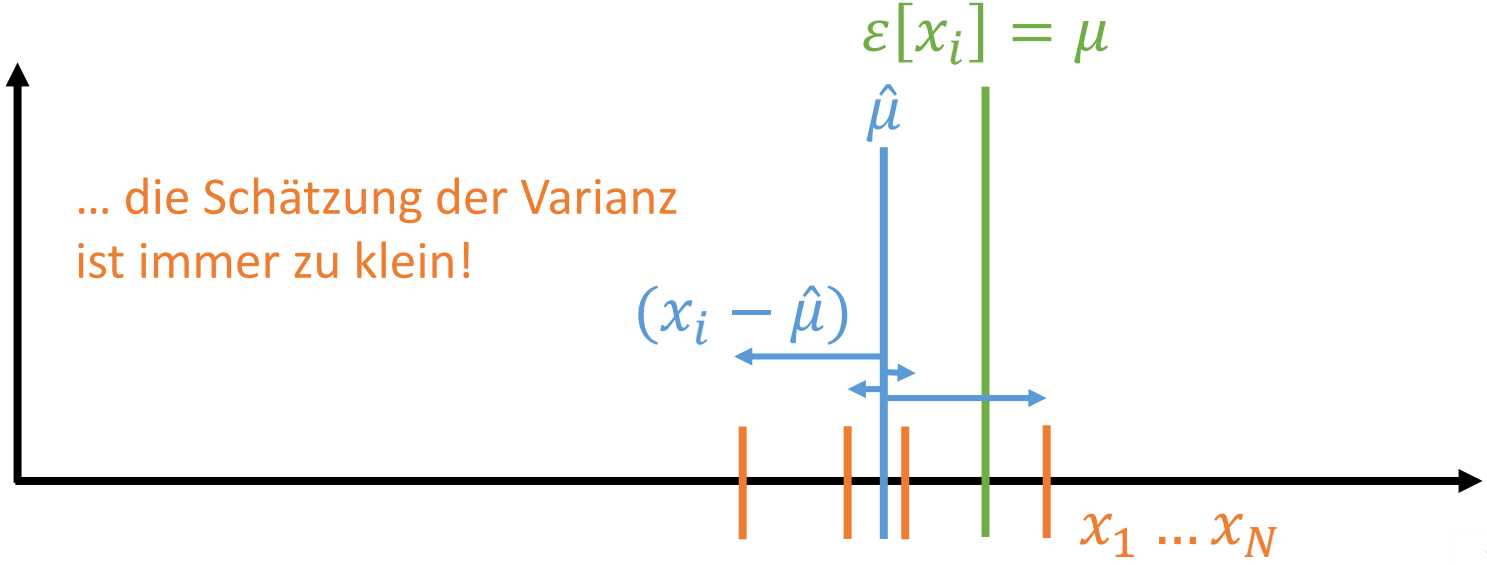

© Nicole M. Artner

# Eigenschaften

… der unkorrigierten Stichprobenvarianz

**Konsistenz:** je mehr Stichproben umso genauer wird der wahre Mittelwert geschätzt und umso besser wird auch die Schätzung der Varianz.

**Erwartungstreue:** nicht erfüllt → $\varepsilon[\hat{\sigma}^2] \neq \sigma^2$





© Nicole M. Artner

# Beispiel

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \hat{\mu})^2$$

… wir wollen zeigen, dass $\varepsilon[\hat{\sigma}^2] \neq \sigma^2$

$N = 2$ Messungen

$X = \{x_1, x_2\}$ Beobachtungen (Stichprobe)

$$\varepsilon\left[\frac{\left(x_1 - \frac{x_1 + x_2}{2}\right)^2 + \left(x_2 - \frac{x_1 + x_2}{2}\right)^2}{2}\right] =$$

$$\frac{1}{2}\varepsilon\left[\left(\frac{x_1}{2} - \frac{x_2}{2}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{2} - \frac{x_1}{2}\right)^2\right] =$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel

$$\frac{1}{2}\varepsilon\left[\left(\frac{x_1}{2}-\frac{x_2}{2}\right)^2+\left(\frac{x_2}{2}-\frac{x_1}{2}\right)^2\right] \rightarrow 2\left(\frac{x_1}{2}-\frac{x_2}{2}\right)^2=\frac{1}{2}(x_1-x_2)^2$$

$$=\frac{1}{2}\varepsilon\left[\frac{1}{2}(x_1-x_2)^2\right]=\frac{1}{4}\varepsilon[(x_1-x_2)^2]=\frac{1}{4}\varepsilon[x_1^2-2x_1x_2+x_2^2]$$

$$=\frac{1}{4}(\varepsilon[x_1^2]-2\varepsilon[x_1x_2]+\varepsilon[x_2^2])=\frac{1}{4}(2\varepsilon[x^2]-2(\varepsilon[x])^2)$$

$$=\frac{1}{2}(\varepsilon[x^2]-\varepsilon[x]^2)$$

$$\sigma^2=\varepsilon[x^2]-\varepsilon[x]^2$$

→ siehe Vorlesung 02_Grundlagen, Folie 40


© Nicole M. Artner

# Schlussfolgerung

$$= \frac{1}{2}(\varepsilon[x^2] - \varepsilon[x]^2) = \boxed{\frac{\sigma^2}{2} \neq \sigma^2}$$

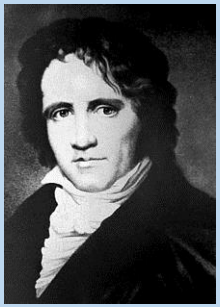
Die unkorrigierte Stichprobenvarianz ist NICHT erwartungstreu!

Was müsste man tun, damit der Schätzer erwartungstreu wird?

- in unserem Beispiel: mit 2 multiplizieren
- Allgemeiner: mit Korrekturfaktor $\frac{N}{N-1}$ multiplizieren

Besselsche Korrektur

$$\frac{N}{N-1}$$



[Bildquelle: http://de.wikipedia.org/wiki/Friedrich_Wilhelm_Bessel]


© Nicole M. Artner

# Korrigierte Stichprobenvarianz

… ist erwartungstreu

Korrigierte Stichprobenvarianz (unverzerrte Varianz):

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \hat{\mu})^2 = \frac{N}{N-1} \cdot \frac{(x_1 - \hat{\mu})^2 + \cdots + (x_N - \hat{\mu})^2}{N}$$

Umso größer die Stichprobe desto kleiner wird der Korrekturfaktor. Die Verwendung der korrigierten Stichprobenvarianz ist also nur bei kleinen Stichproben (Trainingsdatensätzen) relevant!


© Nicole M. Artner

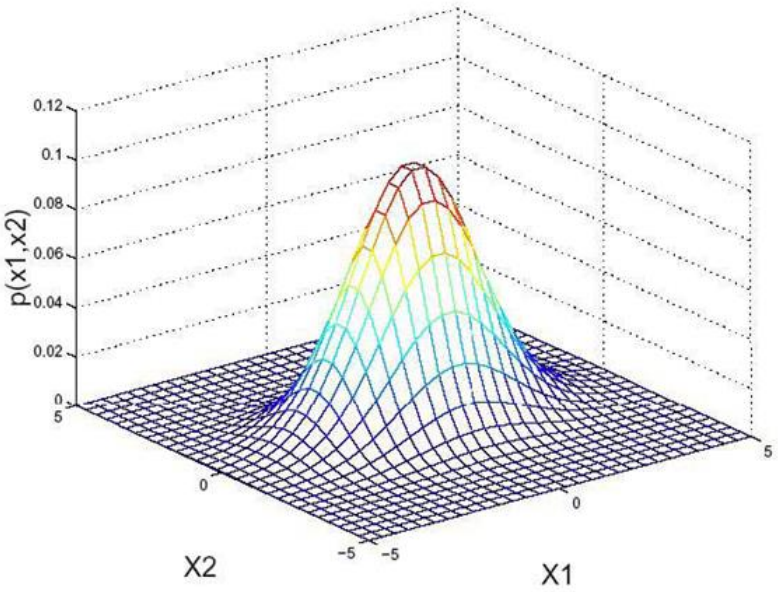
# III. Statistische Grundlagen für zwei oder mehrere Zufallsvariablen


© Nicole M. Artner

# Erwartung

Die Erwartung $\varepsilon[]$ einer bivariaten Funktion $h(x, y)$ von zwei diskreten Zufallsvariablen ist:

$$\mathcal{E}[h(x,y)] = \sum_{x \epsilon X} \sum_{y \in Y} h(x,y) P(x,y)$$



# Mittelwerte und Varianzen

- Mittelwerte beider Zufallsvariablen

$$\mu_x = \mathcal{E}[x] = \sum_{x \epsilon X} \sum_{y \in Y} x P(x, y)$$

$$\mu_y = \mathcal{E}[y] = \sum_{x \epsilon X} \sum_{y \in Y} y P(x, y)$$

- Varianzen beider Zufallsvariablen

$$\sigma_x^2 = \mathcal{E}[(x - \mu_x)^2] = \sum_{x \epsilon X} \sum_{y \in Y} (x - \mu_x)^2 P(x, y)$$

$$\sigma_y^2 = \mathcal{E}\left[(y - \mu_y)^2\right] = \sum_{x \epsilon X} \sum_{y \in Y} (y - \mu_y)^2 P(x, y)$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel: Würfel

$P(x) = \frac{1}{6}, x = \{1,2,3,4,5,6\}$ und $P(y) = \frac{1}{6}, y = \{1,2,3,4,5,6\}$

$P(x,y) = \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{36}$ ($x$ und $y$ unabhängig)

- Berechnung des Mittelwerts $\mu_x$:

$$\mu_x = 1\sum_{y=1}^{6} P(x,y) + 2\sum_{y=1}^{6} P(x,y) + 3\sum_{y=1}^{6} P(x,y) + \cdots +$$

$$+6\sum_{y=1}^{6} P(x,y) = \frac{1+2+3+4+5+6}{6} = 3{,}5$$


© Nicole M. Artner

# Kovarianz

Die Kovarianz ist ein Maß für die statistische Abhängigkeit zwischen Zufallsvariablen:

$$\sigma_{xy} = \mathcal{E}\left[(x - \mu_x)(y - \mu_y)\right] = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} (x - \mu_x)(y - \mu_y) P(x, y)$$

Schätzung der Kovarianz:

$$\hat{\sigma}_{xy} = \frac{1}{N - 1} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \hat{\mu}_x)(y_i - \hat{\mu}_y)$$

… falls die wahren Mittelwerte bekannt sind, wird mit $\frac{1}{N}$ normalisiert.


© Nicole M. Artner

# Eigenschaften der Kovarianz

$x$ und $y$ unabhängig:

$$P(x|y) = P(x) \Rightarrow \sigma_{xy} = 0$$

**Achtung**: Kovarianz $\sigma_{xy} = 0$ kann zwei Bedeutungen haben.
(1) $x$ und $y$ unabhängig oder (2) $x$ und $y$ unkorreliert

Positive Kovarianz $\sigma_{xy}$:
$x$ und $y$ vergrößern und verkleinern sich gemeinsam

Negative Kovarianz $\sigma_{xy}$:
$x$ wird größer wenn $y$ kleiner wird


© Nicole M. Artner

# Bivariat → Multivariat

… von zwei Zufallsvariablen (Merkmalen) zu „beliebig“ vielen

In der Praxis erfolgt die Klassifikation meist anhand von multivariaten Merkmalsvariablen:

$p$-dimensionaler Merkmalsvektor

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^p$$


© Nicole M. Artner

# Mittelwertvektor

$$\boldsymbol{\mu} = \mathcal{E}[\mathbf{x}] = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{E}[x_1] \\ \mathcal{E}[x_2] \\ \vdots \\ \mathcal{E}[x_p] \end{bmatrix}$$

$\mu_i = \mathcal{E}[x_i]$ ist der Mittelwert der $i$ten Komponente ($i$tes Merkmal) des Merkmalsvektors $\mathbf{x}$.

Der Schätzer des Mittelwertvektors ergibt sich, analog zum univariaten Fall, als

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{x}_i$$

$N$ $p$-dimensionale Merkmalsvektoren


© Nicole M. Artner

# Kovarianzmatrix

Eine Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$ setzt sich aus zentralen Momenten 2. Ordnung zusammen. Die Elemente $\sigma_{ij}$ bezeichnet man als Varianz wenn $(i = j)$ und als Kovarianz wenn $(i \neq j)$.

$$\sigma_{ij} = \mathcal{E}\left[(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)\right]$$

$$Cov(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix} = \mathcal{E}[(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T]$$

linearer Zusammenhang zwischen Komponente $p$ und 1 → Kovarianz

Dispersion (Energie) → Varianz $\sigma_{pp} = \sigma_p^2$


© Nicole M. Artner

# Eigenschaften

… einer Kovarianzmatrix

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \sigma_{p2} & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \sigma_{p2} & \cdots & \sigma_p^2 \end{bmatrix}$$

**Varianzen**

**Kovarianzen**

- **symmetrisch**: $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ für $1 \leq i, j \leq p$ und somit $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^T$
- **positiv semi-definit**: $\boldsymbol{\Sigma}$ hat nicht-negative Eigenwerte
- diese Eigenschaften gelten auch für $\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}$


© Nicole M. Artner

# Schätzung der Kovarianzmatrix

- Ein Schätzer der Kovarianz-Matrix ist

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{x}_i - \widehat{\boldsymbol{\mu}})^T$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel

- Gegeben folgende Trainingsdaten:
  - 2 Merkmale und 2 Klassen

Klasse 1

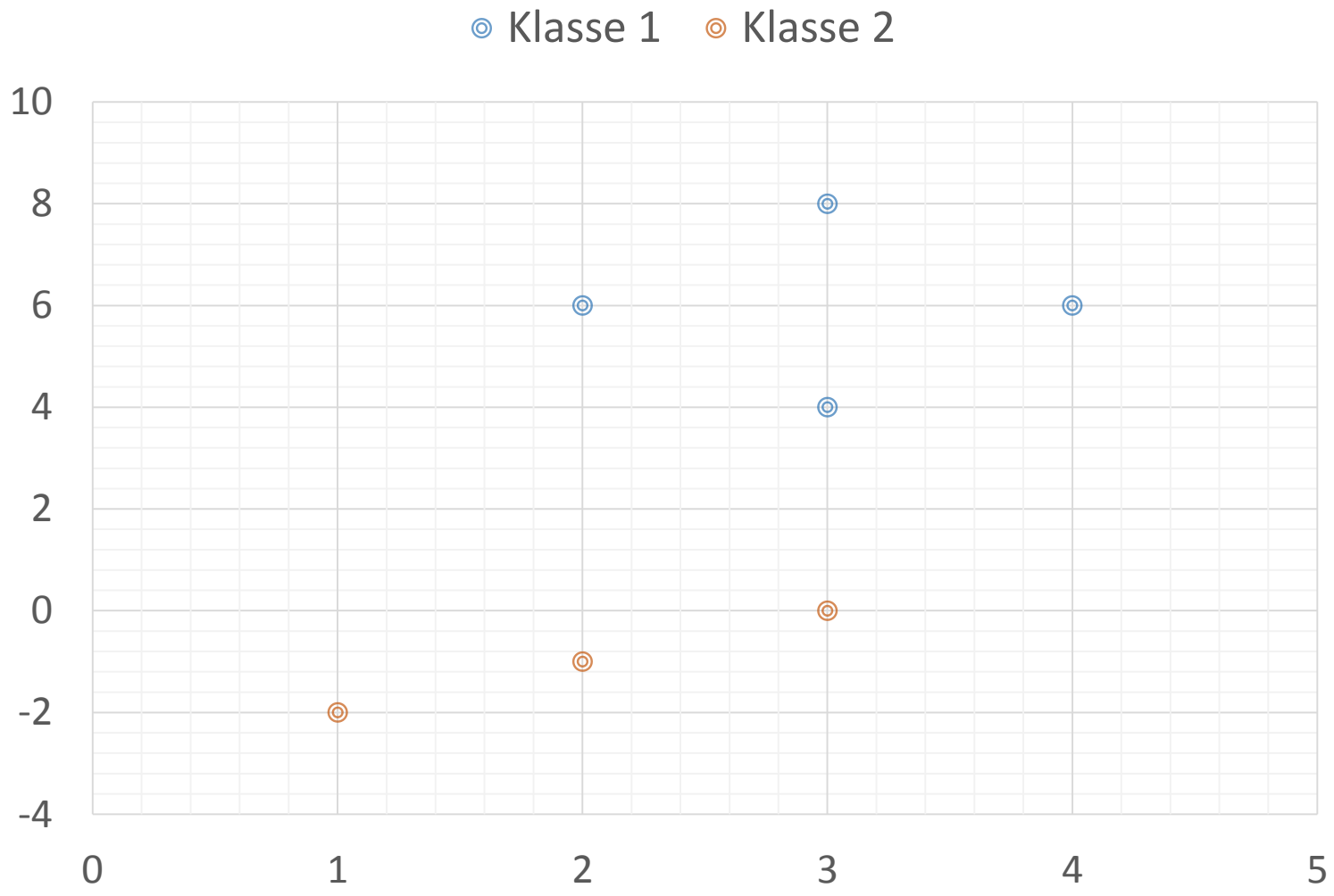
$$\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix}$$

Klasse 2

$$\begin{bmatrix}3\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}1\\-2\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}2\\-1\end{bmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# Trainingsdaten



# Schätzung Mittelwertvektor

- für Klasse 1

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 = \frac{1}{4}\left\{\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix}\right\}$$

$$= \frac{1}{4}\left\{\begin{bmatrix}12\\24\end{bmatrix}\right\}$$

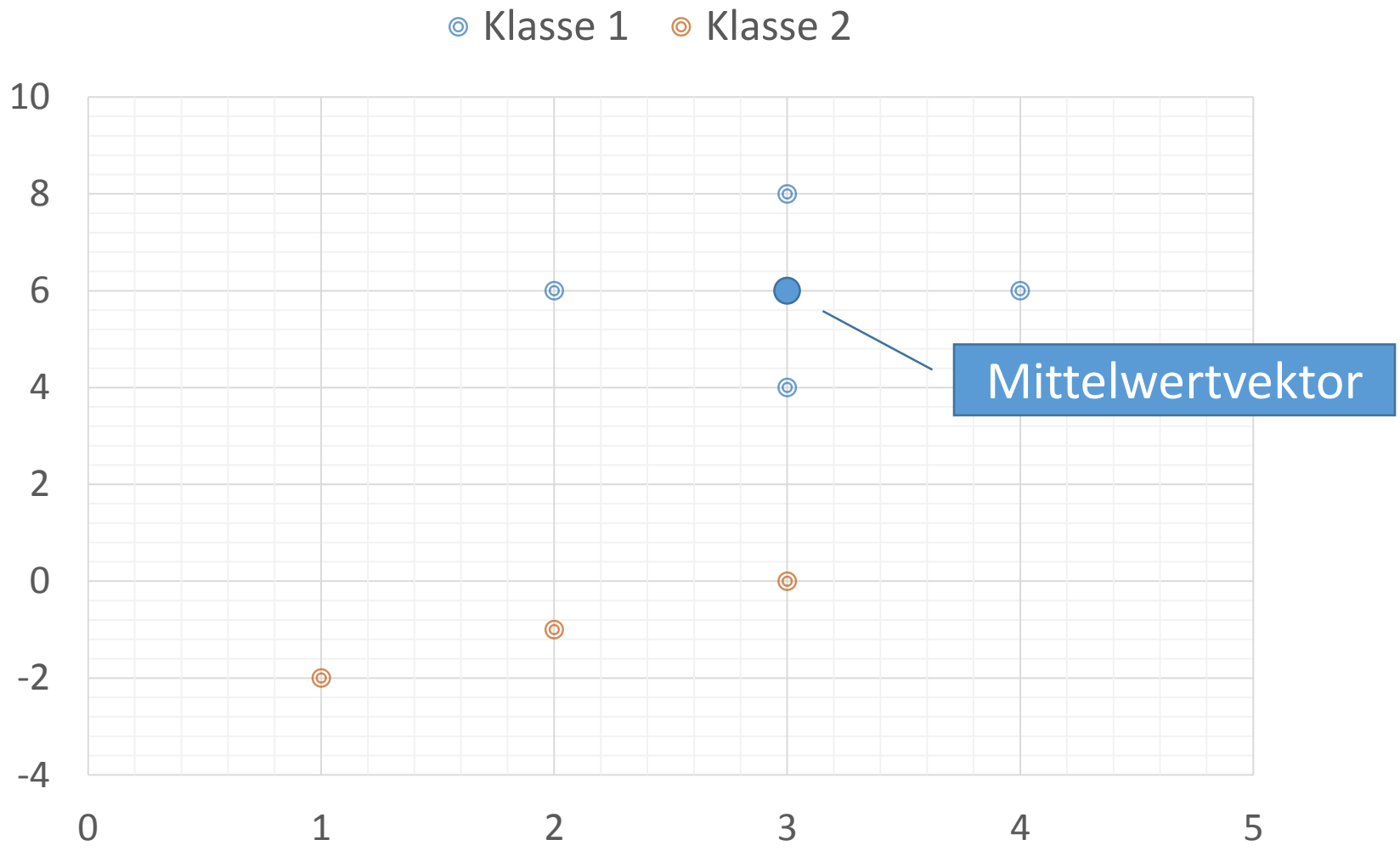
$$= \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}$$

Klasse 1

$$\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# Schätzung Mittelwertvektor





© Nicole M. Artner

# Schätzung Kovarianzmatrix

Klasse 1

$\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix}$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}})^T$$

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{3}\left\{\left(\left[\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]\left[\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]^T\right) + \left(\left[\begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]\left[\begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]^T\right) + \left(\left[\begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]\left[\begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]^T\right) + \left(\left[\begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]\left[\begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}3\\6\end{bmatrix}\right]^T\right)\right\} =$$

$$\frac{1}{3}\left\{\left(\begin{bmatrix}0\\-2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -2\end{bmatrix}\right) + \left(\begin{bmatrix}0\\2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 2\end{bmatrix}\right) + \left(\begin{bmatrix}-1\\0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1 & 0\end{bmatrix}\right) + \left(\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\right)\right\} =$$

$$\frac{1}{3}\left\{\begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\right\} = \begin{pmatrix}2/3 & 0\\0 & 8/3\end{pmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# Übung

… berechne selbst die Schätzung von Mittelwertvektor und Kovarianzmatrix für Klasse 2.

Klasse 2

$$\begin{bmatrix}3\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}1\\-2\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}2\\-1\end{bmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# VI. Multivariate Normalverteilungen

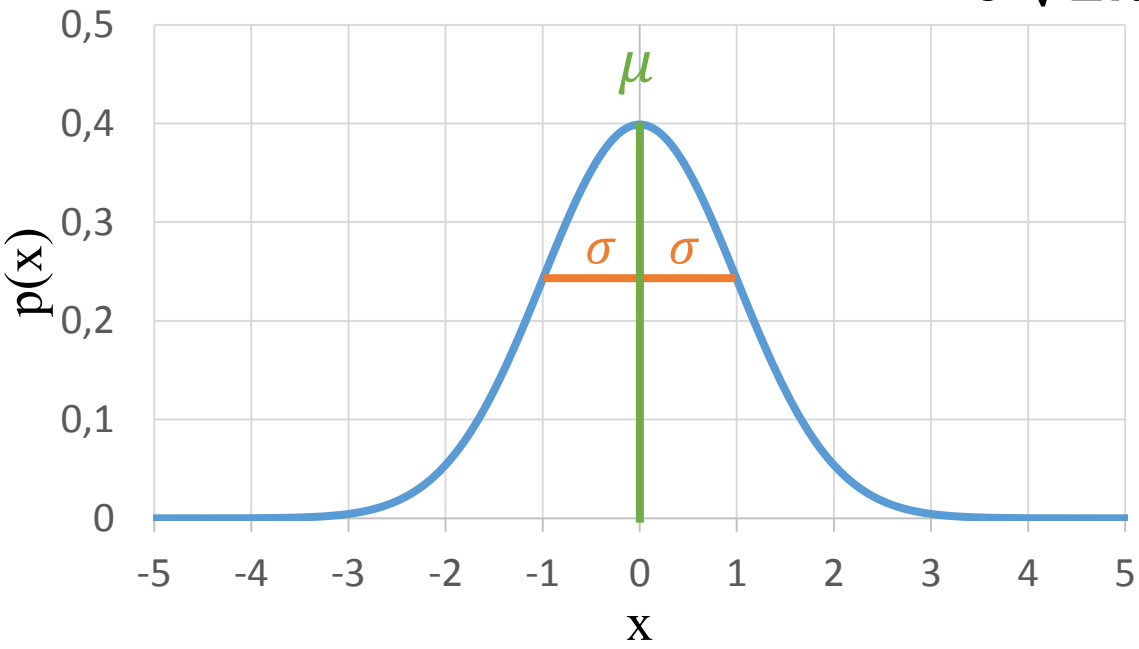

© Nicole M. Artner

# WH: Univariate Normalverteilung

- Parameter:
  - Mittelwert $\mu$
  - Varianz $\sigma^2$

$$p(x) \sim N(\mu, \sigma^2)$$

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

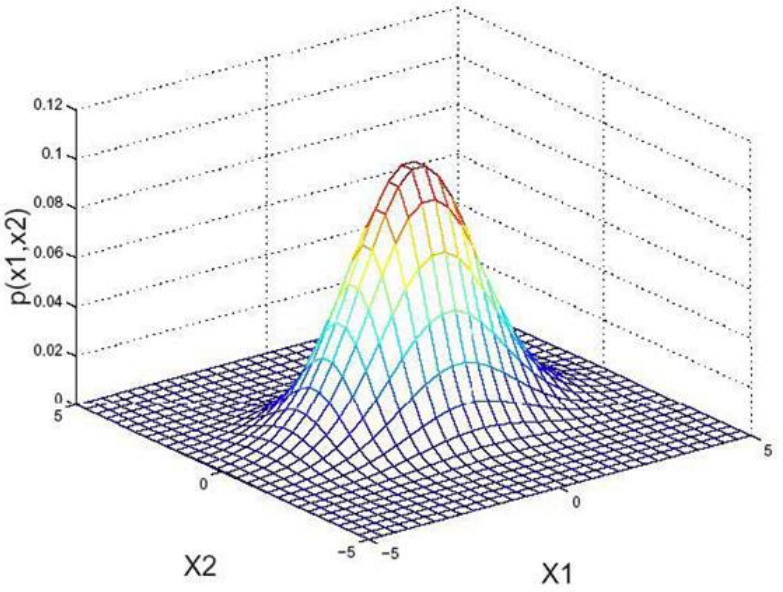




© Nicole M. Artner

# Multivariate Normalverteilung

- Parameter:
  - Mittelwertvektor $\boldsymbol{\mu}$
  - Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$




$$p(\boldsymbol{x}) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}} |\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right]}$$


© Nicole M. Artner

# Im Detail …

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right]}$$

$\boldsymbol{x}$ … $p$-dimensionaler Merkmalsvektor (Spaltenvektor)

$\boldsymbol{\mu}$ … $p$-dimensionaler Mittelwertvektor (Spaltenvektor)

$\boldsymbol{\Sigma}$ … $p \times p$-dimensionale Kovarianzmatrix

$|\boldsymbol{\Sigma}|$ … Determinante von $\boldsymbol{\Sigma}$

$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ … Inverse von $\boldsymbol{\Sigma}$

$(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})$… Mahalanobisdistanz


© Nicole M. Artner

# Determinante und Inverse

Determinante von $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ ist $\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc.$

$|\boldsymbol{\Sigma}| = 0$ … wenn $\boldsymbol{\Sigma}$ singulär ist → hat $\boldsymbol{\Sigma}$ keine Inverse

Inverse $\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \frac{1}{ad-bc}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$

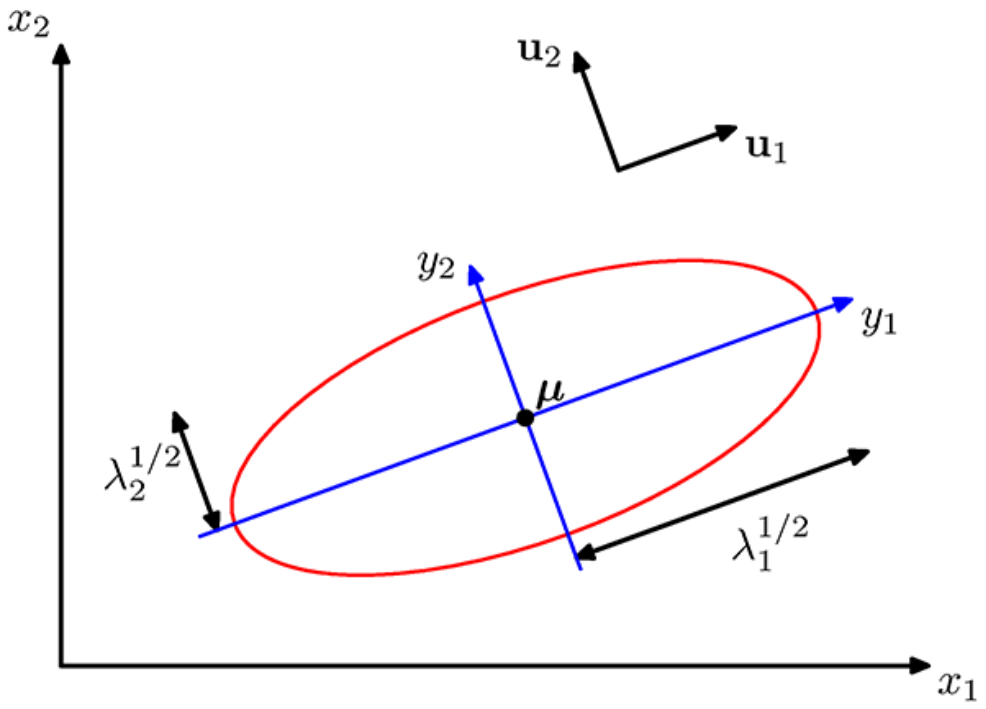
**Division durch Null nicht möglich!**

Für diese VO reicht es aus, wenn ihr die Determinante und Inverse einer $2 \times 2$ Matrix bestimmen könnt.


© Nicole M. Artner

# Mahalanobisdistanz

$$d^2(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})$$




- alle Punkte $\{\boldsymbol{x} : d^2(\boldsymbol{x}) = c\}$ liegen auf einem Hyperellipsoid im $\mathbb{R}^p$ mit Mittelpunkt $\boldsymbol{\mu}$
- für alle diese $\boldsymbol{x}$ liefert die Dichtefunktion $p(\boldsymbol{x})$ denselben Wert
- Hauptachsen der Ellipse sind definiert durch **Eigenvektoren** $\boldsymbol{u}_1$ und $\boldsymbol{u}_2$ von $\boldsymbol{\Sigma}$
- **Eigenwerte** $\lambda_1$ und $\lambda_2$ bestimmen die Länge der Achsen


© Nicole M. Artner

# V. Bayes-Theorem für multivariate Normalverteilungen


© Nicole M. Artner

# Vorgehensweise

… anhand eines Beispiels mit 2 Klassen

Iris virginica

Iris versicolor

- jeweils 4 Merkmale
  - Sepalumlänge, -breite, Petalumlänge, -breite


© Nicole M. Artner

# Hypothese

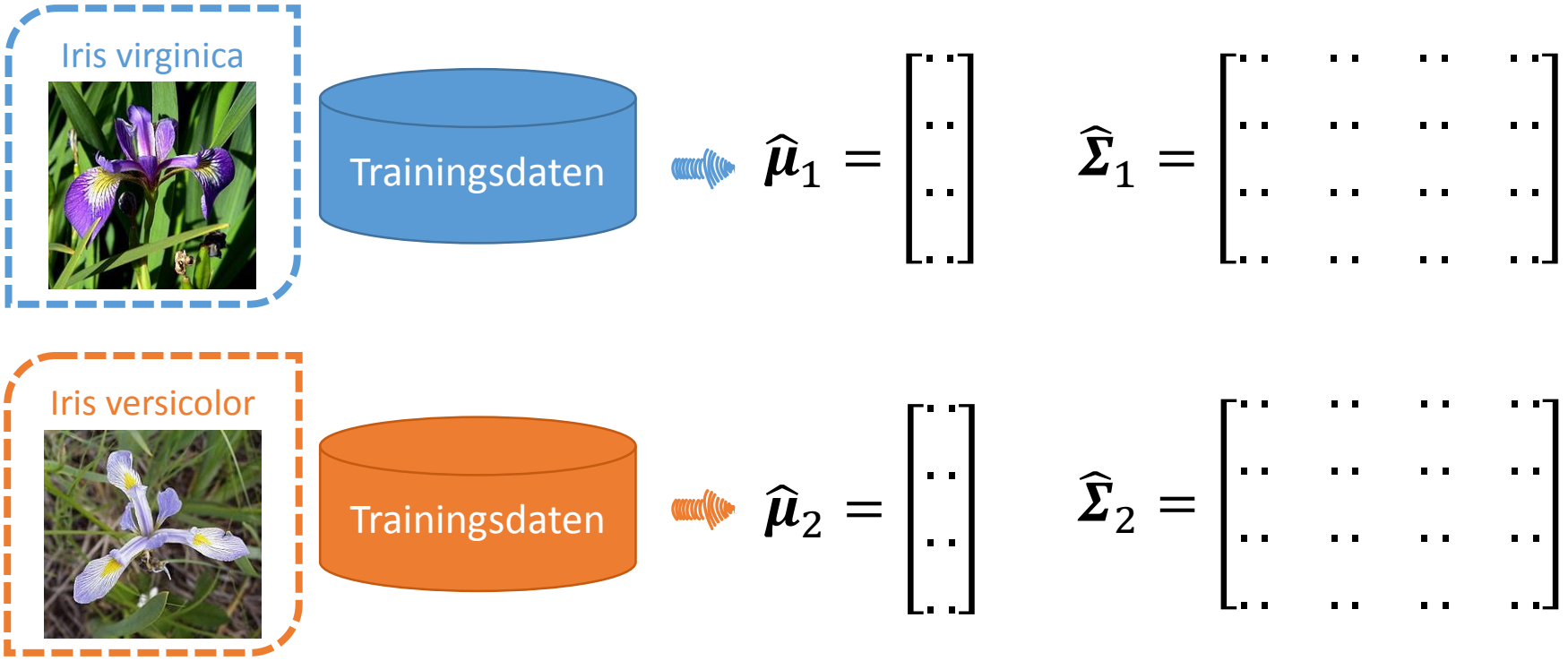
- die Dichtefunktion $p(\boldsymbol{x}|\omega_j)$ jeder Klasse $j$ kann durch eine multivariate Normalverteilung $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ beschrieben werden

$$P(\omega_j|\boldsymbol{x}) = \frac{p(\boldsymbol{x}|\omega_j)P(\omega_j)}{p(\boldsymbol{x})}$$


© Nicole M. Artner

# Parameterschätzung

- aus dem Trainingsdatensatz schätzt man Mittelwertvektor $\hat{\boldsymbol{\mu}}_j$ und Kovarianzmatrix $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_j$ je Klasse





© Nicole M. Artner

# Parameterschätzung

… mit 4 Merkmalen

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_j = \begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} \qquad \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_j = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

- 4 Mittelwerte
- 4 Varianzen
- 6 Kovarianzen

Insgesamt 4 + (4 + 6) = 14 Parameter je Klasse *j*

Kann man die Anzahl der zu schätzenden Parameter reduzieren?


© Nicole M. Artner

# Naive Bayes-Klassifikator

- um Anzahl der Parameter zu reduzieren, werden Annahmen über die Form der Kovarianzmatrizen gemacht

- **Naive Bayes-Klassifikator** nimmt an, dass es **keine Korrelation zwischen den Merkmalen** gibt → $\sigma_{xy} = 0$

- je Klasse 8 Parameter
  - 4 Mittelwerte + 4 Varianzen
  - statt 14 Parameter

$$\widehat{\Sigma}_j = \begin{bmatrix} .. & 0 & 0 & 0 \\ 0 & .. & 0 & 0 \\ 0 & 0 & .. & 0 \\ 0 & 0 & 0 & .. \end{bmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# weitere Annahmen …

- Alle Klassen haben die **gleiche Kovarianzmatrix**
  - im Beispiel: $\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 = \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2$
  - 4 Mittelwerte je Klasse
  - 10 Parameter (1 Kovarianzmatrix) für alle Klassen
  - nur 2 x 4 + 10 = 18 Parameter → statt 14 x 2 = 28

- Alle Klassen haben die **gleiche Kovarianzmatrix** und sie ist **diagonal** → $\sigma_{xy} = 0$
  - 4 Mittelwerte je Klasse
  - 4 Varianzen (1 diagonale Kovarianzmatrix) für alle Klassen
  - nur 2 x 4 + 4 = 12 Parameter → statt 28 Parameter im allgemeinen Fall


© Nicole M. Artner

# Dichtefunktionen

… mit den geschätzten Parametern

Iris virginica

$$p(\boldsymbol{x}|\omega_1) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}}\left|\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1\right|^{\frac{1}{2}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_1)^T\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1^{-1}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_1)\right]}$$

Iris versicolor

$$p(\boldsymbol{x}|\omega_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}}\left|\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2\right|^{\frac{1}{2}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_2)^T\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2^{-1}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_2)\right]}$$


© Nicole M. Artner

# Bayes-Klassifikator

- anhand der Mahalanobisdistanz klassifizieren, wenn:
  - keine normalisierten/genauen Klassenwahrscheinlichkeiten $P(w_j|\boldsymbol{x})$ notwendig sind
  - die Priors gleich sind, im Beispiel: $P(w_1) = P(w_2)$

$$p(\boldsymbol{x}|\omega_1) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}}|\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1|^{\frac{1}{2}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_1)^T \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1^{-1}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_1)\right]}$$

→ Mahalanobisdistanz Klasse 1

$$p(\boldsymbol{x}|\omega_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}}|\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2|^{\frac{1}{2}}} e^{\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_2)^T \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2^{-1}(\boldsymbol{x}-\widehat{\boldsymbol{\mu}}_2)\right]}$$

→ Mahalanobisdistanz Klasse 2


© Nicole M. Artner

# Bayes-Klassifikator

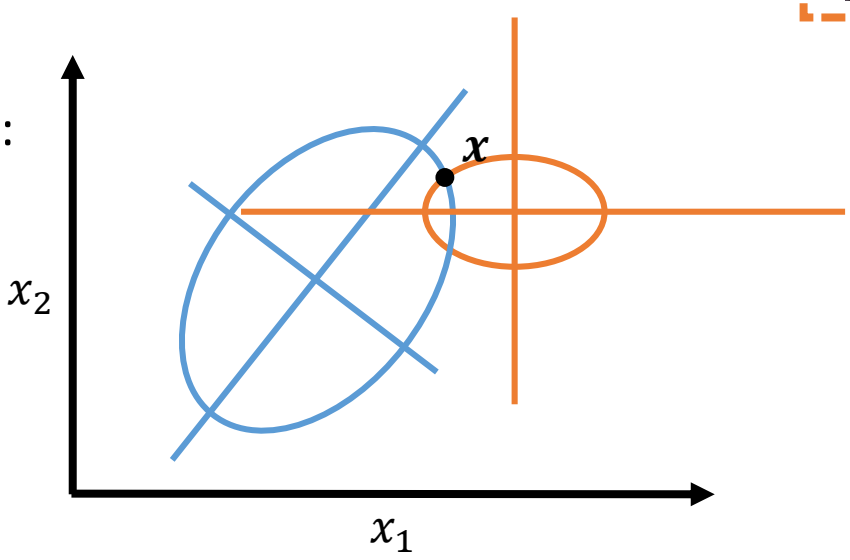
$$d^2_{w_1}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_1)^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1^{-1} (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_1) \qquad d^2_{w_2}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_2)^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_2^{-1} (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_2)$$

Iris virginica

$\boldsymbol{x}$ wird der Klasse mit der **kleinsten** Mahalanobisdistanz zugewiesen

Iris versicolor

Vereinfachte Darstellung:





© Nicole M. Artner

# VI. Diskriminanten-funktionen


© Nicole M. Artner

# Was ist das?

Ein Klassifikator kann als eine **Gruppe von Diskriminanten-funktionen** $g_i(\boldsymbol{x}), i = 1, \ldots, c$ dargestellt werden. Der Klassifikator weist den Merkmalsvektor $\boldsymbol{x}$ der Klasse $w_i$ zu, wenn gilt: $g_i(\boldsymbol{x}) > g_j(\boldsymbol{x})$ für alle $j \neq i$.

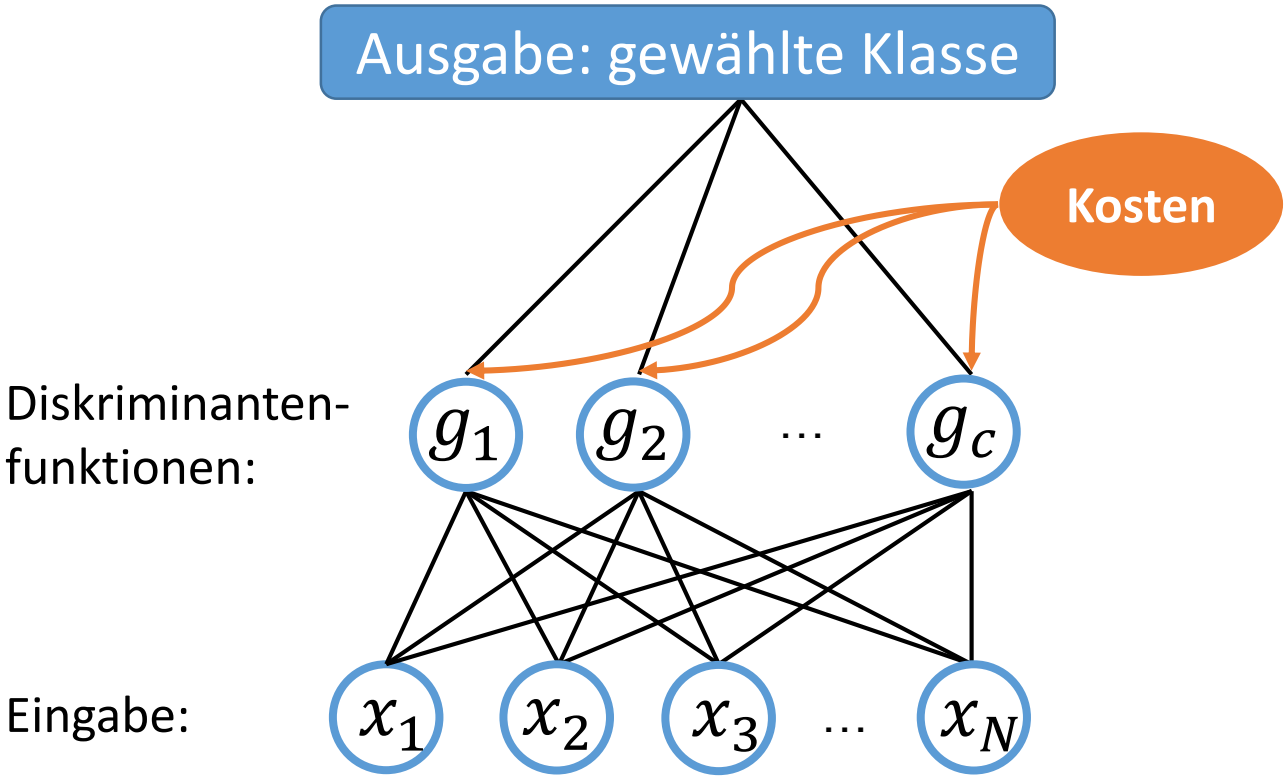
Beschreibung eines Bayes-Klassifikators mit Diskriminanten-funktionen:

$$g_i(\boldsymbol{x}) = P(w_i|\boldsymbol{x})$$


© Nicole M. Artner

# Was ist das?

Man kann sich einen Klassifikator als ein Netzwerk vorstellen, dass $c$ Diskriminantenfunktionen berechnet und die Klasse mit dem größten Diskriminanten auswählt.

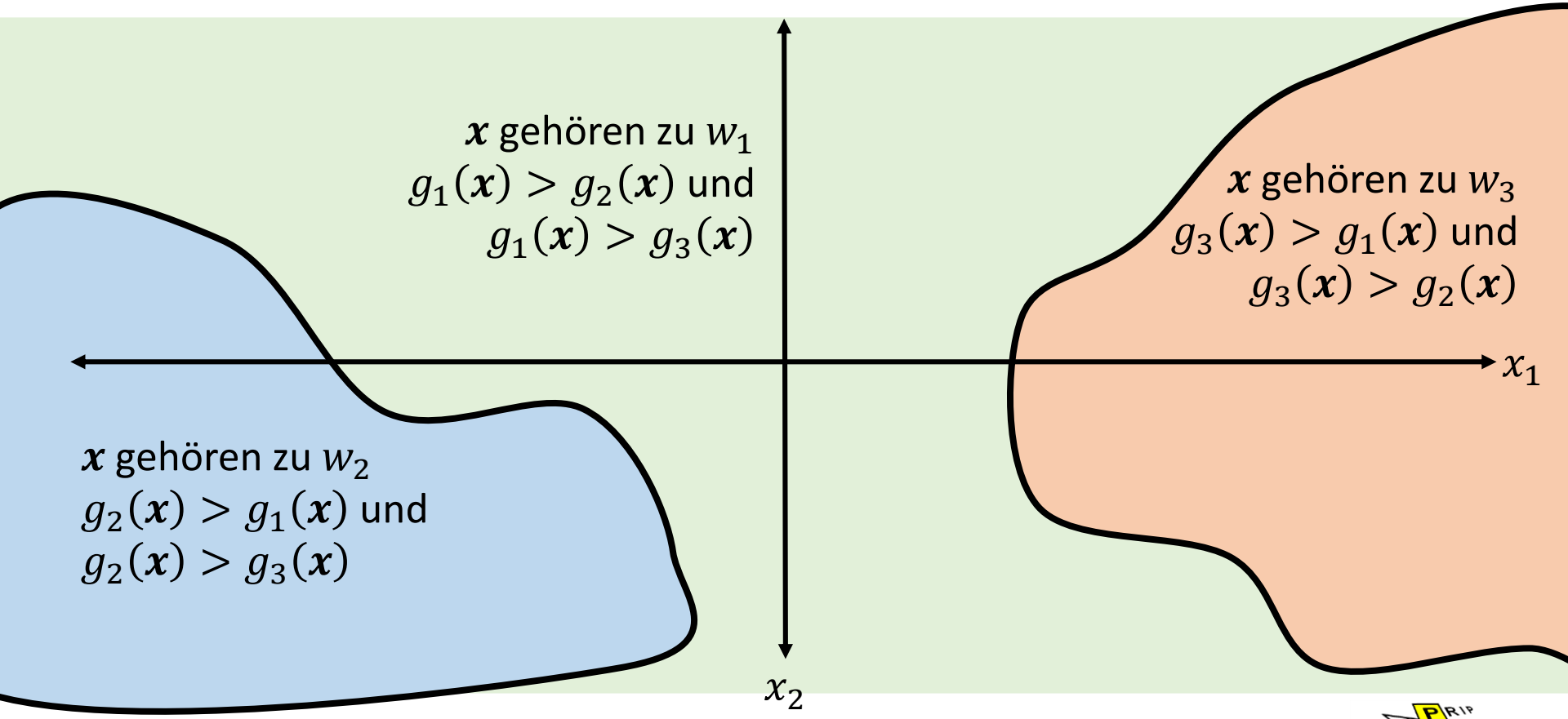




© Nicole M. Artner

# Beispiel

- 2 Merkmale $\boldsymbol{x} = \{x_1, x_2\}$
- 3 Klassen $w_1, w_2, w_3$ → 3 Diskriminatenfunk. $g_1(\boldsymbol{x}), g_2(\boldsymbol{x}), g_3(\boldsymbol{x})$



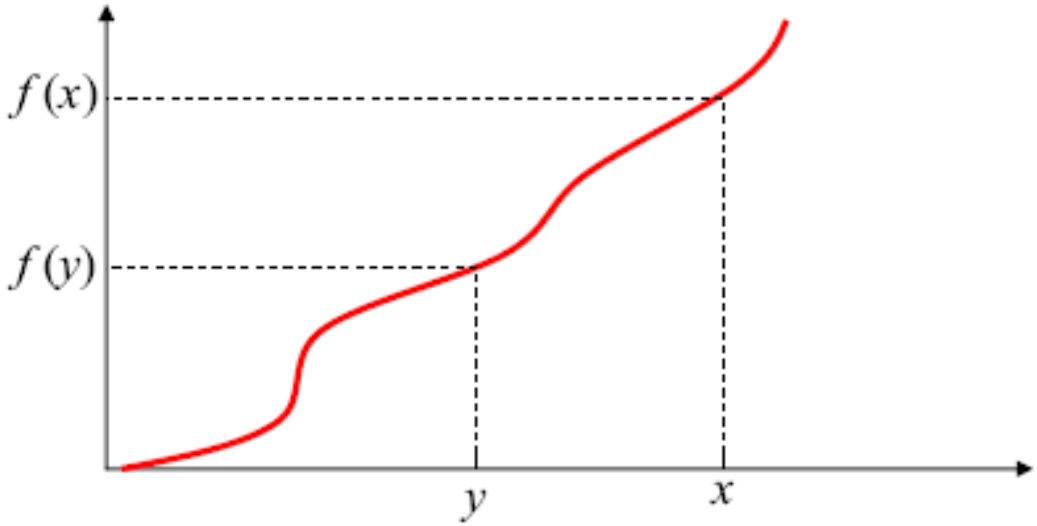


© Nicole M. Artner

# Wahl

… der Diskriminantenfunktion ist nicht eindeutig.

Wenn man alle $g_i(\boldsymbol{x})$ durch $f(g_i(\boldsymbol{x}))$ ersetzt, wobei $f(\cdot)$ eine streng monoton wachsende Funktion ist, dann wird das Ergebnis der Klassifikation dadurch nicht beeinflusst.



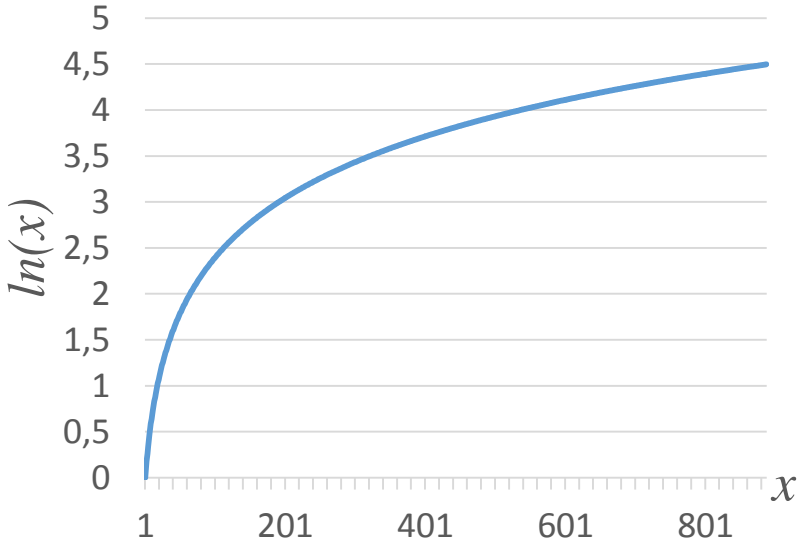


© Nicole M. Artner

# Optimierung durch kluge Wahl

- Folgende Diskriminantenfunktionen führen alle zum gleichen Klassifikationsergebnis:

$$g_i(\boldsymbol{x}) = P(\omega_i|\boldsymbol{x})$$
$$g_i(\boldsymbol{x}) = p(\boldsymbol{x}|\omega_i)P(\omega_i)$$
$$g_i(\boldsymbol{x}) = \ln p(\boldsymbol{x}|\omega_i) + \ln P(\omega_i)$$




Obwohl alle obigen Diskriminantenfunktionen zum gleichen Ergebnis führen, könnte eine davon besonders **einfach zu verstehen** oder **effizient zu berechnen** sein.


© Nicole M. Artner

# Spezialfall: 2 Klassen

Im Fall von 2 Klassen ist es üblich **nur eine Diskriminanten-funktion** zu definieren $g(\boldsymbol{x}) \equiv g_1(\boldsymbol{x}) - g_2(\boldsymbol{x})$. Diese Funktion entscheidet für Klasse $w_1$ wenn $g(\boldsymbol{x}) > 0$; ansonsten für Klasse $w_2$.

- z.B.: Minimierung der Fehlerrate („minimum-error-rate discriminant function“) beim Klassifizieren mit dem Bayes-Theorem → $g(\boldsymbol{x}) \equiv P(\omega_1|\boldsymbol{x}) - P(\omega_2|\boldsymbol{x})$

Klassifikatoren die nur zwischen zwei Klassen unterscheiden nennt man „Dichotomizer“. Klassifikatoren für $c \geq 3$ bezeichnet man als „Polychotomizer“.


© Nicole M. Artner

# Entscheidungsregionen und -grenzen

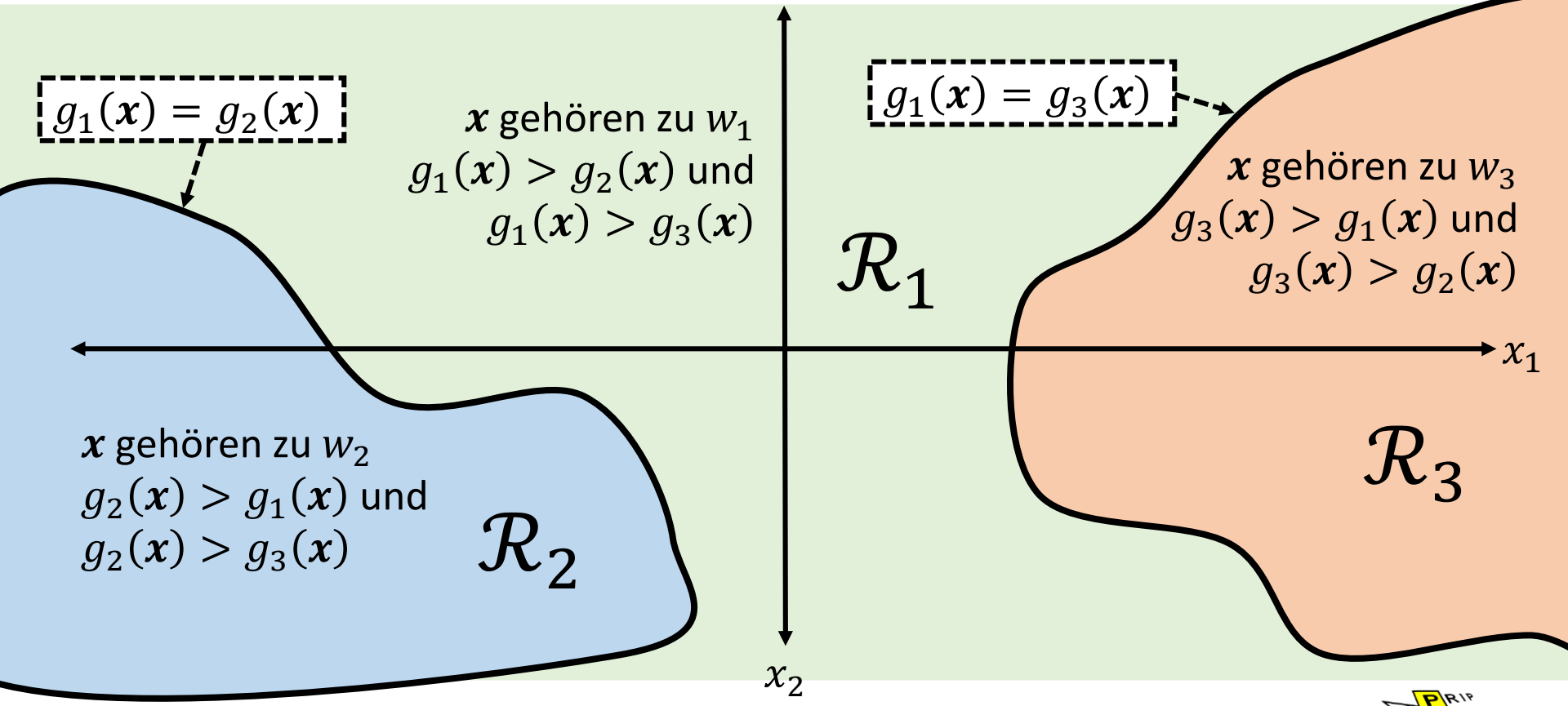
- Diskriminantenfunktionen unterteilen den Merkmalsraum in $c$ Entscheidungsregionen $\mathcal{R}_1, \ldots, \mathcal{R}_c$
- wenn $g_i(\boldsymbol{x}) > g_j(\boldsymbol{x})$ für alle $j \neq i$, dann liegt $x$ in $\mathcal{R}_i$
  - $\boldsymbol{x}$ wird der Klasse $w_i$ zugewiesen

- Entscheidungsregionen sind durch Entscheidungs-grenzen („decision boundaries“) getrennt
- Entscheidungsgrenze zwischen $\mathcal{R}_i$ und $\mathcal{R}_j$ ist durch die Gleichung $g_i(\boldsymbol{x}) = g_j(\boldsymbol{x})$ gegeben


© Nicole M. Artner

# Beispiel

- Entscheidungsregionen: $\mathcal{R}_1$, $\mathcal{R}_2$ und $\mathcal{R}_3$
- Entscheidungsgrenzen: $g_1(\boldsymbol{x}) = g_2(\boldsymbol{x})$ und $g_1(\boldsymbol{x}) = g_3(\boldsymbol{x})$



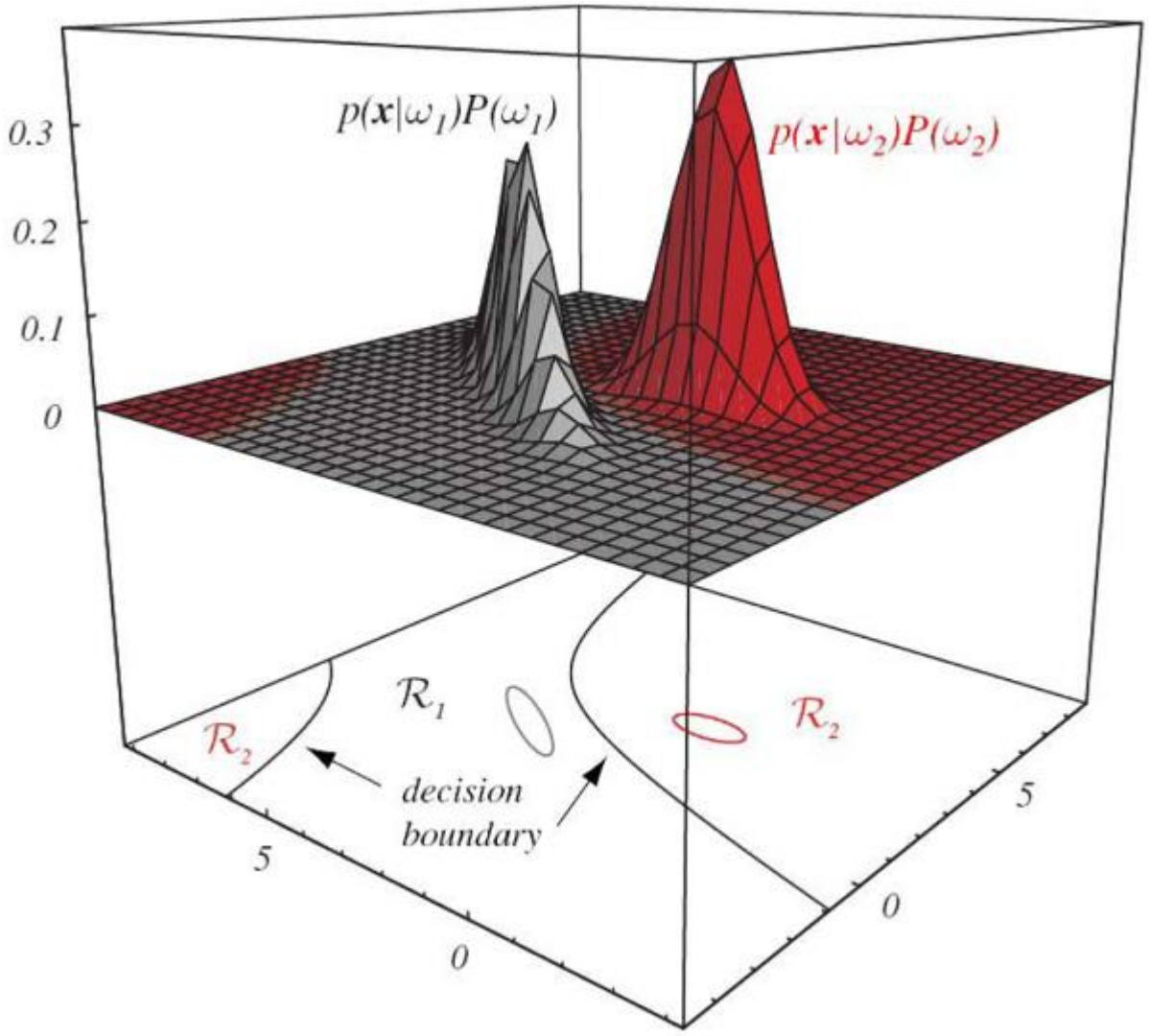


© Nicole M. Artner

# Beispiel

- bivariate Normal-verteilung je Klasse
- Entscheidungsgrenze besteht aus 2 Hyperbeln
- Entscheidungsregion $\mathcal{R}_2$ ist nicht zusammenhängend

[Quelle: Duda et al., 2001]



# Diskriminatenfunktionen

… für multivariate Normalverteilungen unter Verwendung eines **Bayes-Klassifikators**

- durch Logarithmieren der Posteriors

$$g_j(\boldsymbol{x}) = \ln \frac{p(\boldsymbol{x}|\omega_j)P(\omega_j)}{p(\boldsymbol{x})}$$

- erhält man die folgenden (optimalen) Diskriminanten-funktionen

$$g_j(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_j)^T\Sigma_j^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_j) - \frac{1}{2}\ln|\Sigma_j| + \ln P(\omega_j) - \frac{p}{2}\ln 2\pi - \ln p(\boldsymbol{x})$$


© Nicole M. Artner

# Vereinfachung

$$g_j(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_j)^T\Sigma_j^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_j) - \frac{1}{2}\ln|\Sigma_j| + \ln P(\omega_j) - \frac{p}{2}\ln 2\pi - \ln p(\boldsymbol{x})$$

- die letzten beiden Terme können weggelassen werden, weil sie unabhängig von den Klassen $\omega_j$ sind

- Diskriminantenfunktionen vereinfachen sich zu

$$g_j(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}d_j^2(\boldsymbol{x}) + \left[-\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_j| + \ln P(\omega_j)\right]$$

Mahalanobisdistanz

Determinante von $\boldsymbol{\Sigma}$

Prior


© Nicole M. Artner

# Beispiel

- Berechnung der Entscheidungsgrenze mit Hilfe der Diskriminatenfunktionen
- Annahme: $p(\boldsymbol{x}|\omega_j)$ → multivariate Normalverteilungen

Klasse 1

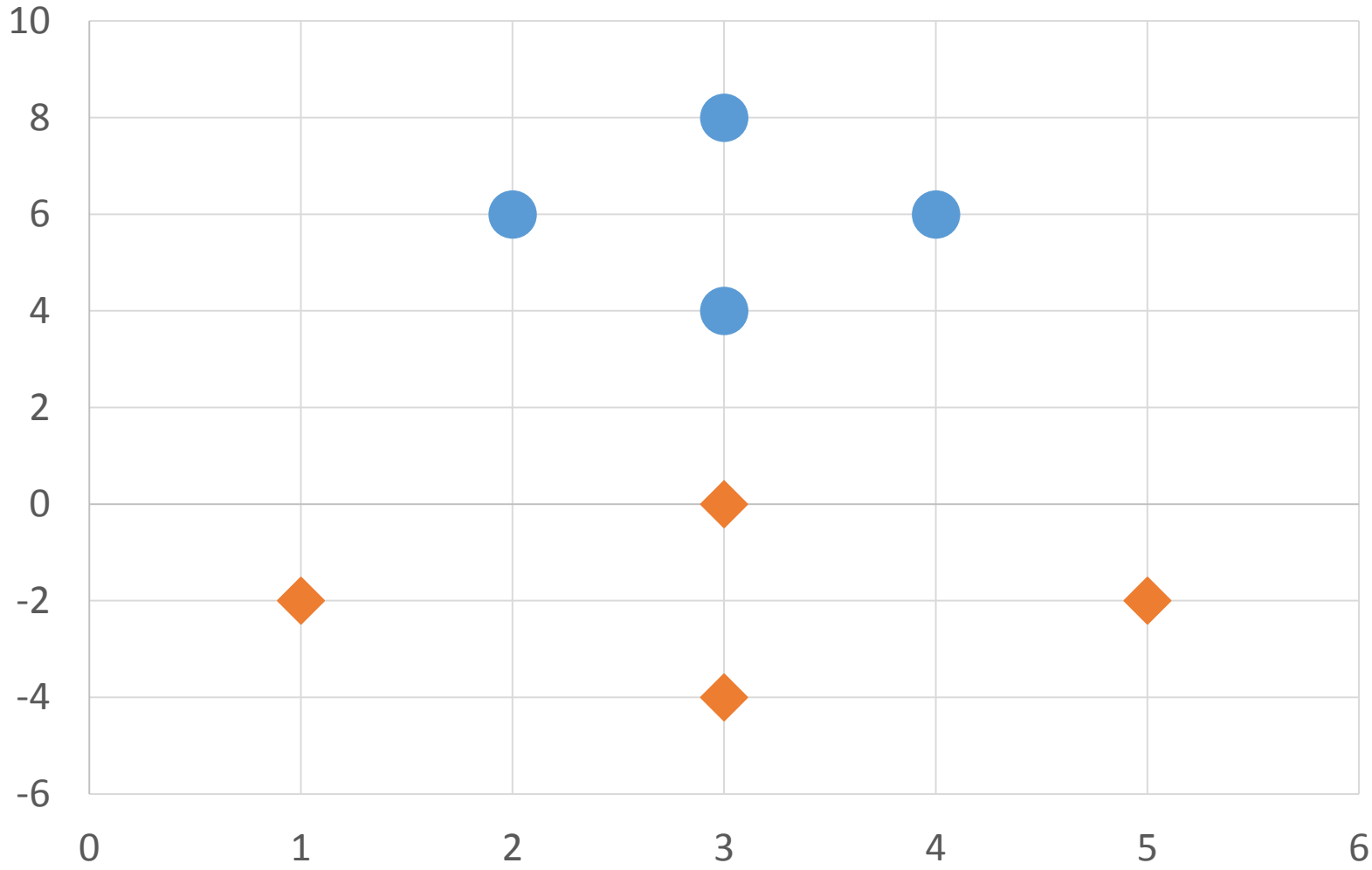
$$\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix}$$

Klasse 2

$$\begin{bmatrix}3\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}3\\-4\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}1\\-2\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}5\\-2\end{bmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# Beispieldaten





© Nicole M. Artner

# Beispiel

- angenommen die wahren Mittelwerte sind bekannt

$$\mu_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \end{bmatrix} \qquad \mu_2 = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

- die Kovarianzmatrizen sehen dann wie folgt aus

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel

- Determinanten

$$|\boldsymbol{\Sigma}| = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

$$|\boldsymbol{\Sigma_1}| = 1 \qquad |\boldsymbol{\Sigma_2}| = 4$$

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$$

- Inverse

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \qquad \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel

## 1. Ermittlung von $g_1(\boldsymbol{x})$ und $g_2(\boldsymbol{x})$

Annahme: $P(\omega_1) = P(\omega_2) = 0{,}5$

Einsetzen in …

$$g_j(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2} d_j^2(\boldsymbol{x}) + \left[-\frac{1}{2}\ln|\Sigma_j| + \ln P(\omega_j)\right]$$

$$d_j^2(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j)^T \Sigma_j^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j)$$


© Nicole M. Artner

# Beispiel

- Zwischenergebnisse: Diskriminatenfunktionen der beiden Klassen

$$g_1(\boldsymbol{x}) = -x_1^2 + 6x_1 - \frac{1}{4}x_2^2 + 3x_2 - 18 + \ln 0{,}5$$

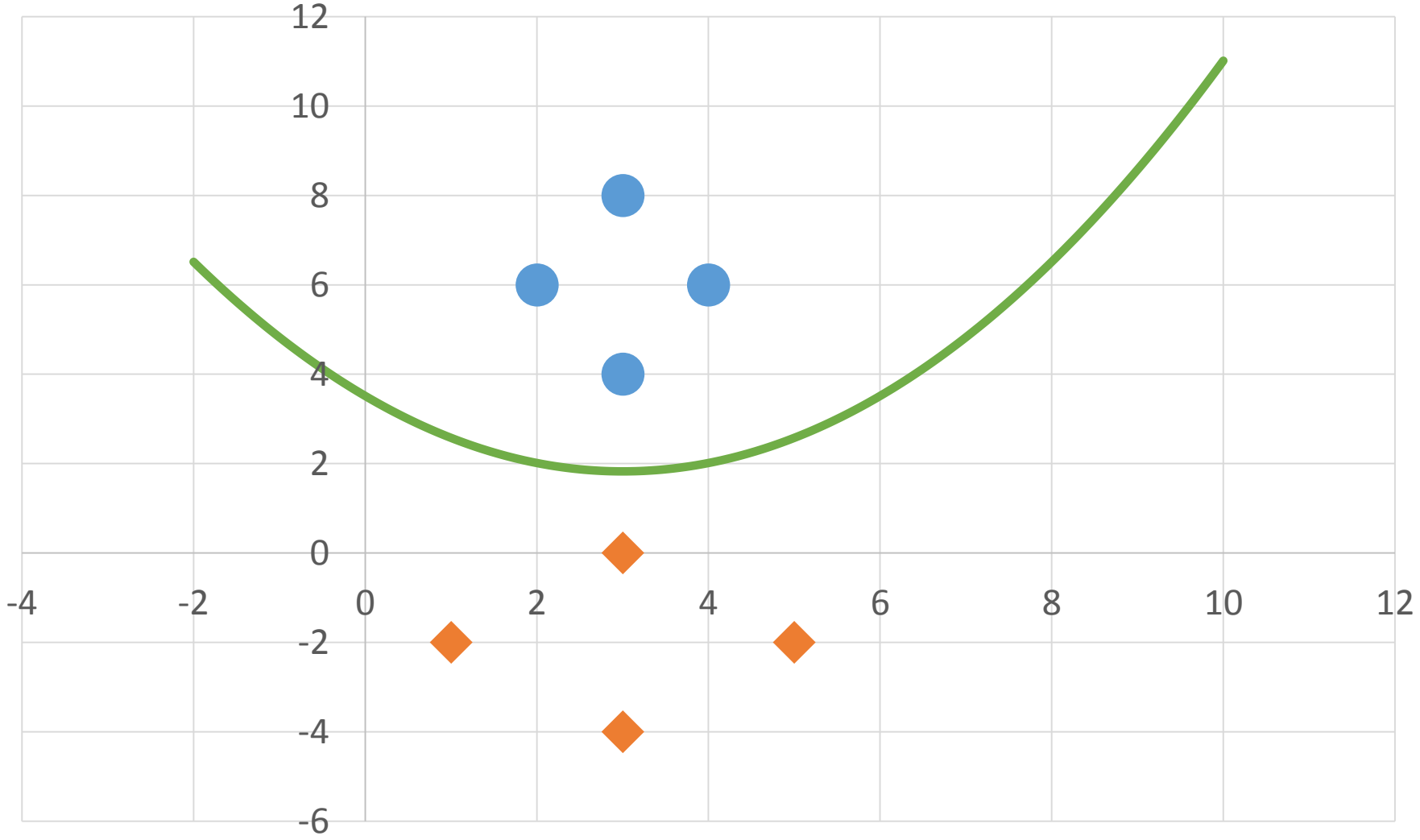
$$g_2(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4}x_1^2 + \frac{3}{2}x_1 - \frac{1}{4}x_2^2 - x_2 - \frac{13}{4} - \ln 2 + \ln 0{,}5$$

2. Finden der Entscheidungsgrenze durch $g_1(\boldsymbol{x}) = g_2(\boldsymbol{x})$

Ergebnis? Rechne selbst …


© Nicole M. Artner

# Ergebnis des Beispiels





© Nicole M. Artner

# Spezialfall 1

$$\boldsymbol{\Sigma_i = \sigma^2 I}$$

- Merkmale sind unabhängig $\sigma_{ij} = 0$ für alle $i \neq j$
- alle Merkmale haben dieselbe Varianz $\sigma_{ii} = \sigma^2$

$$g_j(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2} d_j^2(\boldsymbol{x}) + \left[-\frac{1}{2}\ln|\Sigma_j| + \ln P(\omega_j)\right]$$

$$g_j(\boldsymbol{x}) = \left(-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{\sigma^2}\right)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j)^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_j) - \frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_j| + \ln P(\omega_j)$$

$$= -\frac{1}{2\sigma^2}\left(\cancel{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}} - 2\boldsymbol{\mu}_j^T\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\mu}_j^T\boldsymbol{\mu}_j\right) - \cancel{\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_j|} + \ln P(\omega_j)$$

… für alle Klassen gleich


© Nicole M. Artner

# Spezialfall 1

… man erhält die äquivalente lineare Diskriminaten-funktion

$$g_j(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2\sigma^2}\left(-2\boldsymbol{\mu}_j^T\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\mu}_j^T\boldsymbol{\mu}_j\right) + \ln P(\omega_j)$$

$$\Downarrow$$

$$g_j(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x} + w_{j0}$$

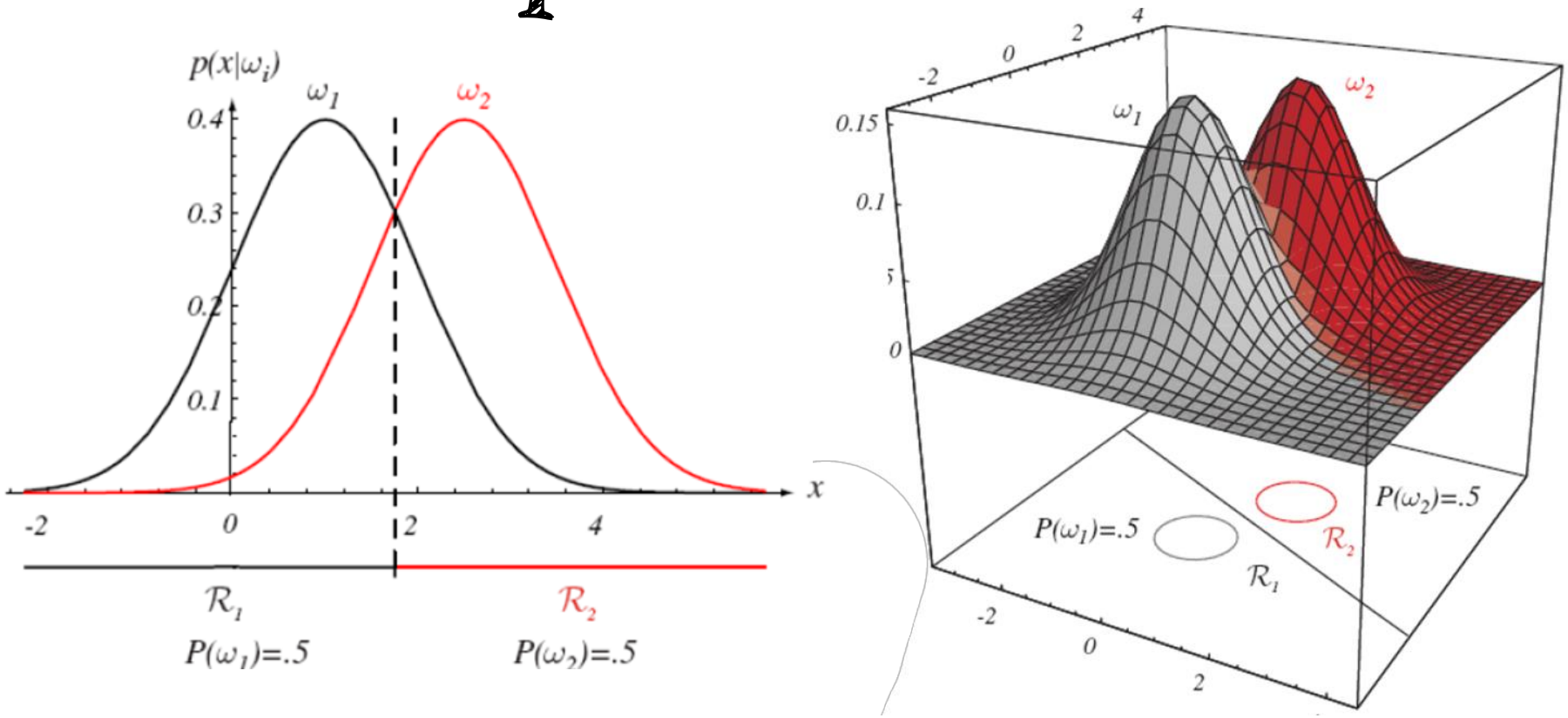
$$\boldsymbol{w}_j = \frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{\mu}_j$$

$$w_{j0} = -\frac{1}{2\sigma^2}\boldsymbol{\mu}_j^T\boldsymbol{\mu}_j + \ln P(\omega_j)$$


© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 1

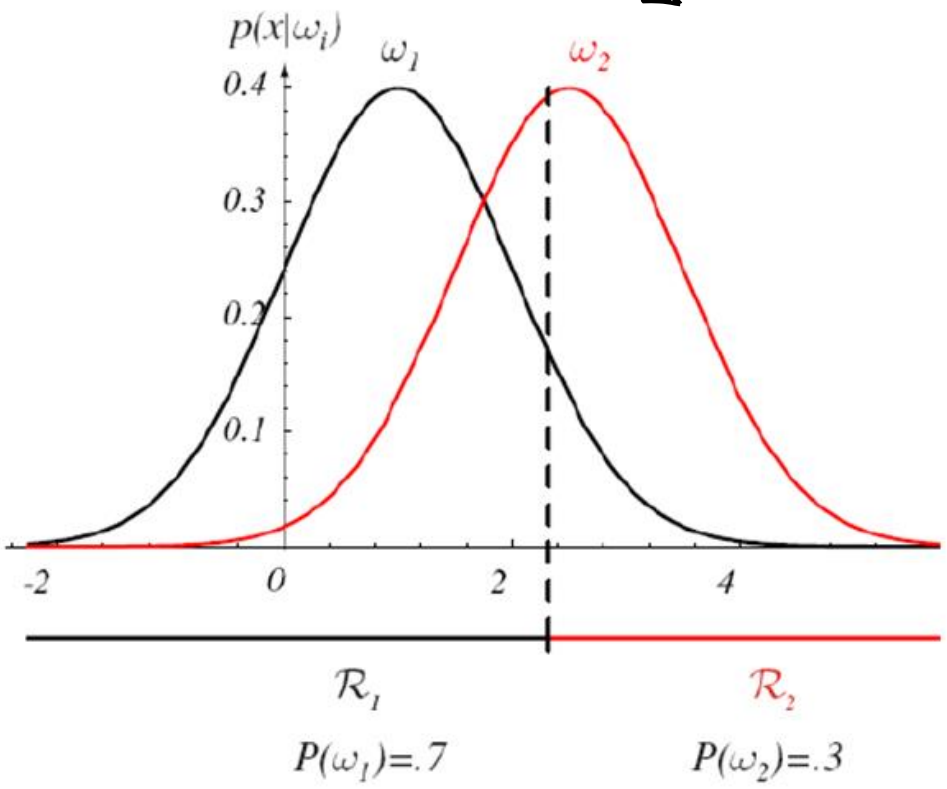


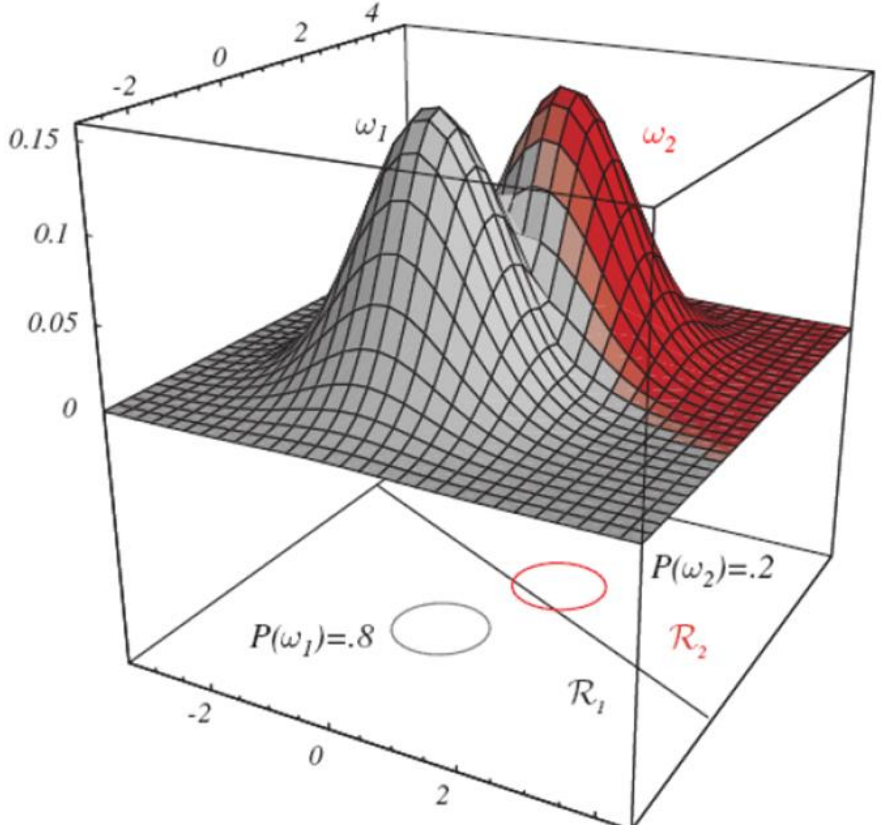

- univariate (links) bzw. bivariate (rechts) Normalverteilungen mit $\mathbf{\Sigma}_1 = \mathbf{\Sigma}_2 = I\sigma^2$
- Entscheidungsgrenzen sind linear und normal zur Verbindungsstrecke zwischen den beiden Klassenmitteln
- bei gleichen Priors verläuft Entscheidungsgrenze durch $(\mu_1 + \mu_2)/2$
- ansonsten wird sie von Prior der wahrscheinlicheren Klasse wegverschoben.


© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 1



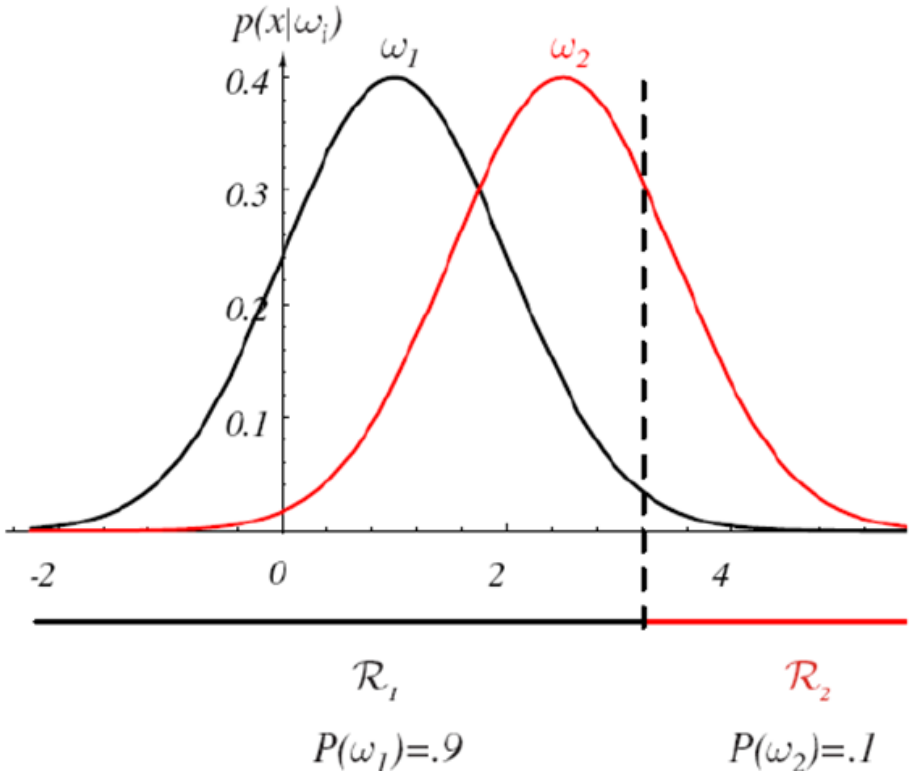



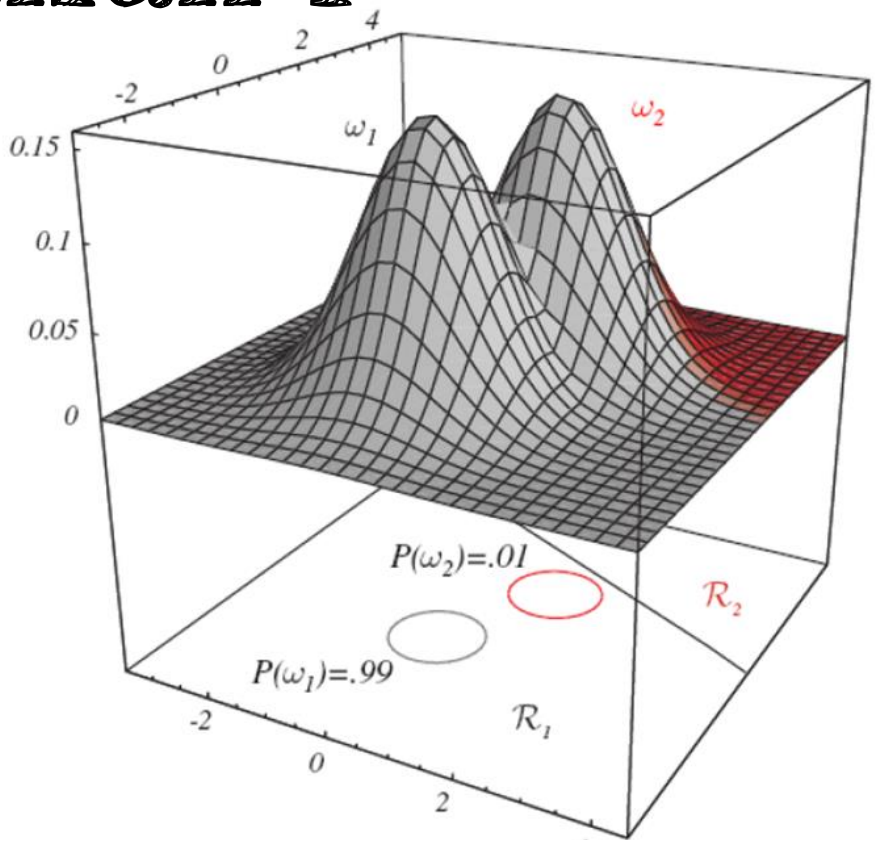

- univariate (links) bzw. bivariate (rechts) Normalverteilungen mit $\mathbf{\Sigma}_1 = \mathbf{\Sigma}_2 = I\sigma^2$
- Entscheidungsgrenzen sind linear und normal zur Verbindungsstrecke zwischen den beiden Klassenmitteln
- bei gleichen Priors verläuft Entscheidungsgrenze durch $(\mu_1 + \mu_2)/2$
- ansonsten wird sie von Prior der wahrscheinlicheren Klasse wegverschoben.


© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 1



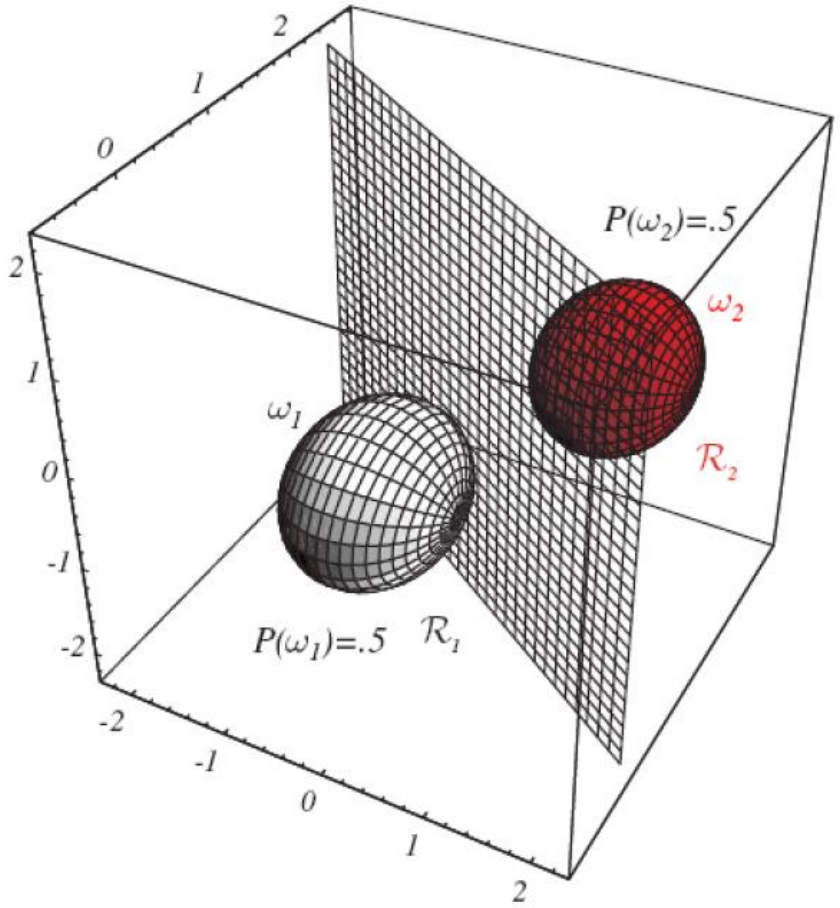

- univariate (links) bzw. bivariate (rechts) Normalverteilungen mit $\mathbf{\Sigma}_1 = \mathbf{\Sigma}_2 = I\sigma^2$
- Entscheidungsgrenzen sind linear und normal zur Verbindungsstrecke zwischen den beiden Klassenmitteln
- bei gleichen Priors verläuft Entscheidungsgrenze durch $(\mu_1 + \mu_2)/2$
- ansonsten wird sie von Prior der wahrscheinlicheren Klasse wegverschoben.


© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 1

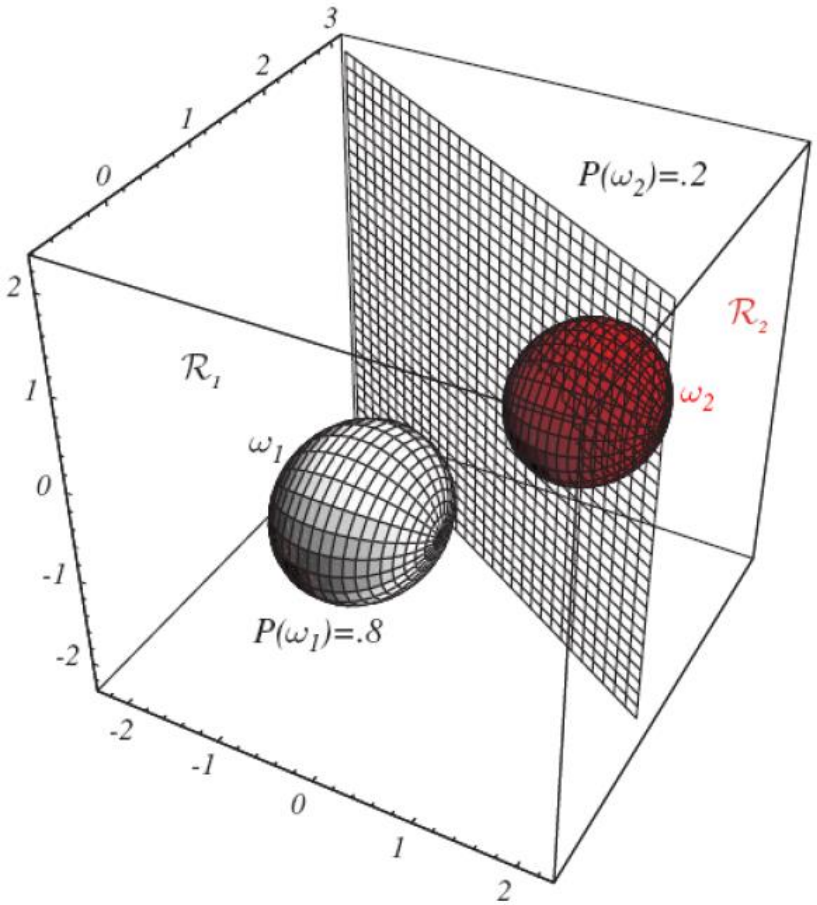
- Entscheidungsgrenze für zwei trivariate Normalverteilungen mit $\Sigma_1 = \Sigma_2 = I\sigma^2$.



[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 1

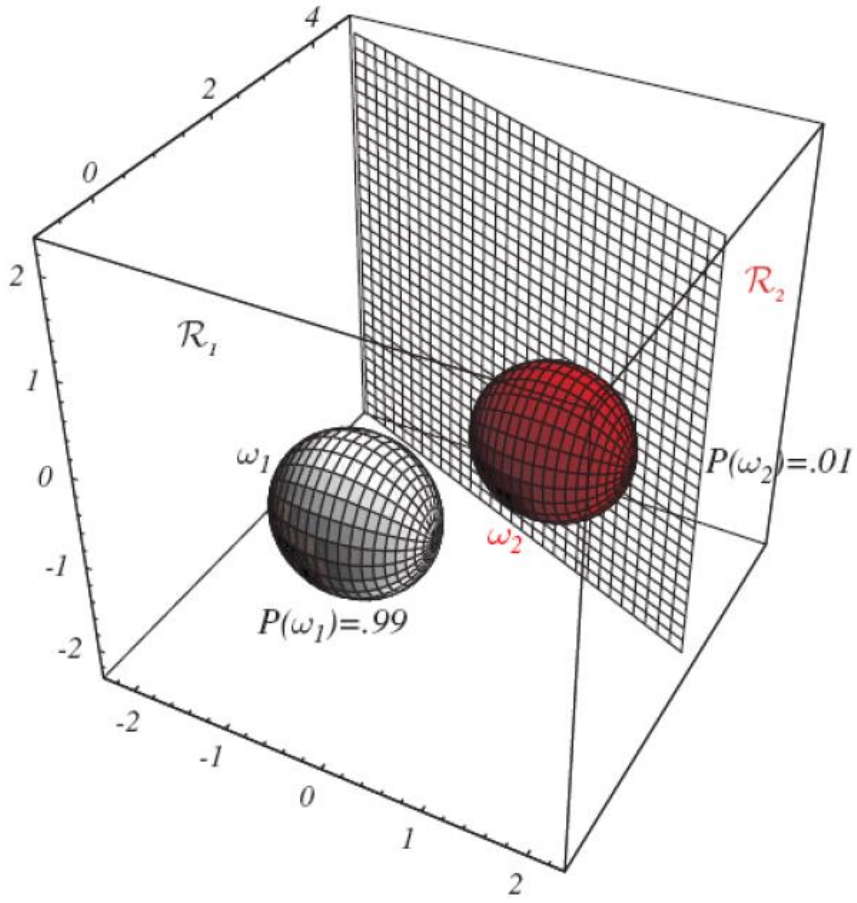
- Entscheidungsgrenze für zwei trivariate Normalverteilungen mit $\Sigma_1 = \Sigma_2 = I\sigma^2$.



[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 1

- Entscheidungsgrenze für zwei trivariate Normalverteilungen mit $\Sigma_1 = \Sigma_2 = I\sigma^2$.



# Spezialfall 2

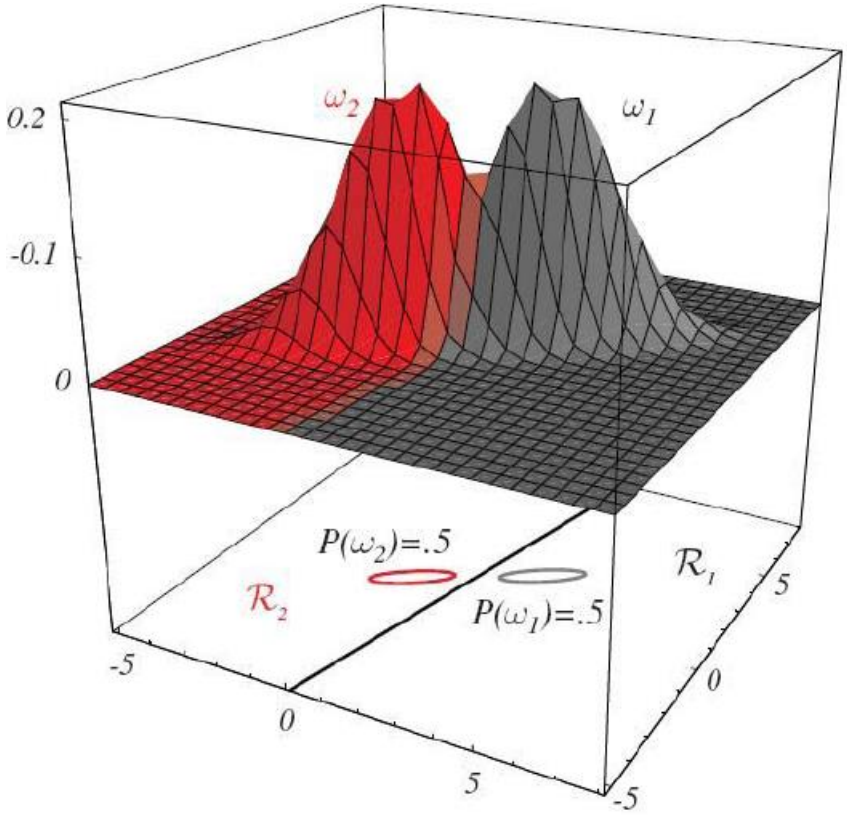
$$\boldsymbol{\Sigma_i = \Sigma}$$

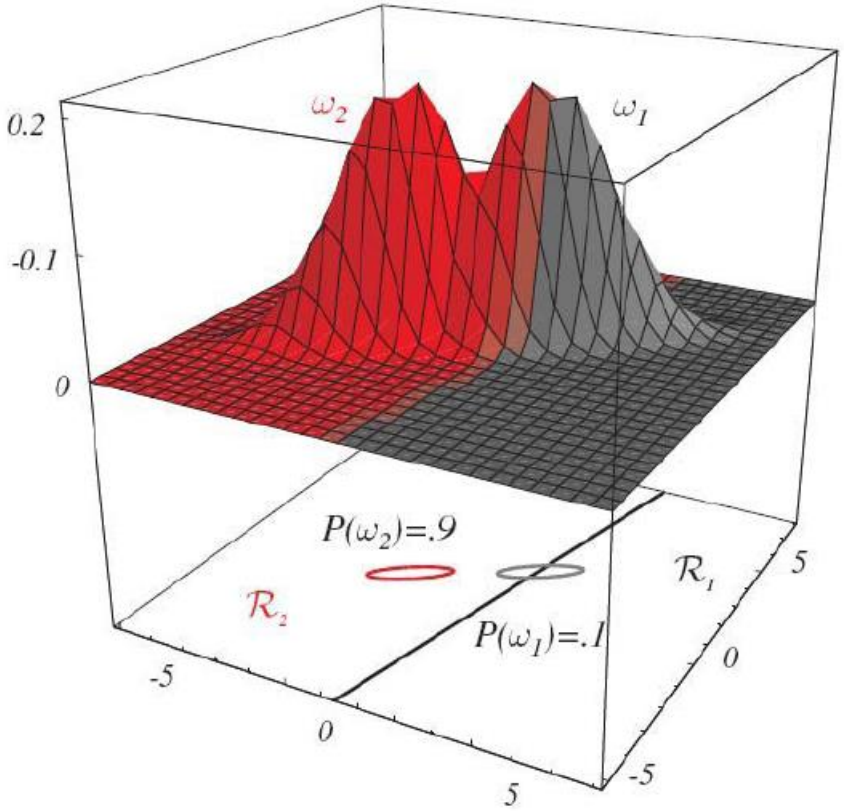
- alle Klassen haben dieselbe Kovarianzmatrix
- Form der Verteilungen ist durch Hyperellipsoide in $\mathcal{R}^p$ gegeben
- Entscheidungsgrenzen sind wieder linear
- jedoch nicht normal zur Verbindungsstrecke zwischen den beiden Klassenmitteln
- Details: siehe Kapitel 2, Duda et al., 2001


© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Spezialfall 2





© Nicole M. Artner

# Allgemeiner Fall

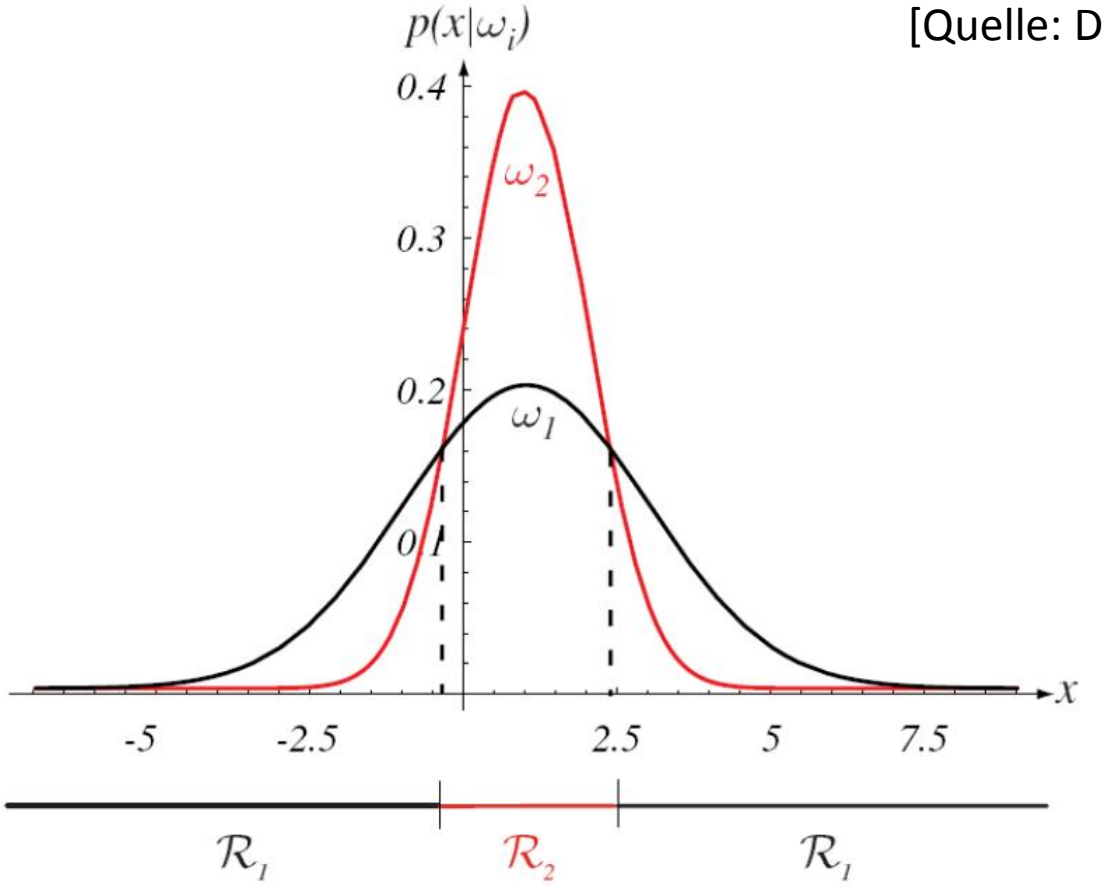
- bliebige Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma_i}$
- Entscheidungsgrenzen sind durch so genannte Hyperquadrics gegeben
- Hyperquadrics sind unter anderem: Hyperebenen, Hyperkugeln, Hyperellipsoide, Hyperparaboloide, etc.
- korrespondierenden Entscheidungsregionen müssen nicht einfach zusammenhängend sein


© Nicole M. Artner

# Nicht zusammenhängende Entscheidungsregionen

… entstehen im 1D-Fall z.B. durch Verteilungen mit gleichem Mittelwert aber unterschiedlichen Varianzen

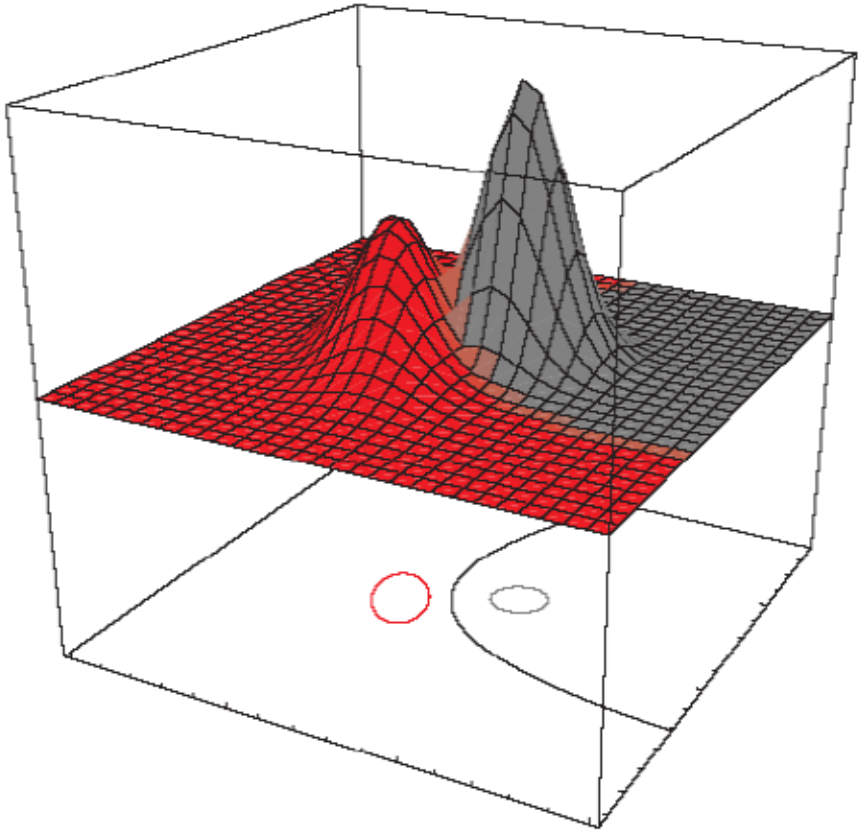
[Quelle: Duda et al., 2001]

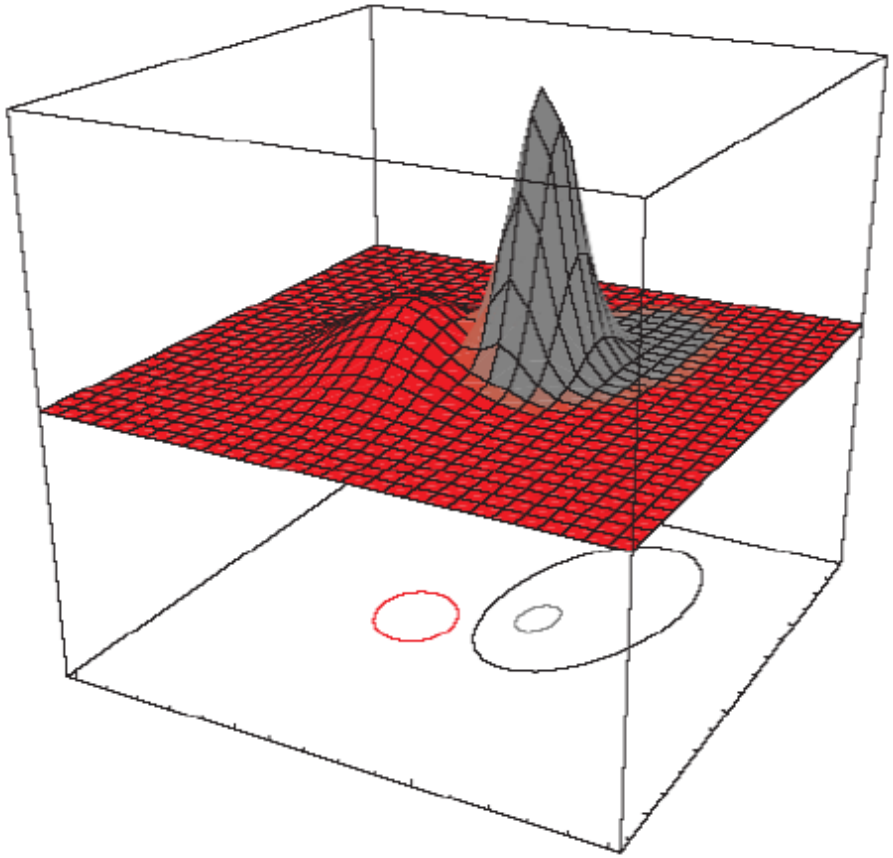


[Quelle: Duda et al., 2001]

# Beispiele

… für bivariate Normalverteilungen mit beliebigen Kovarianz-matrizen



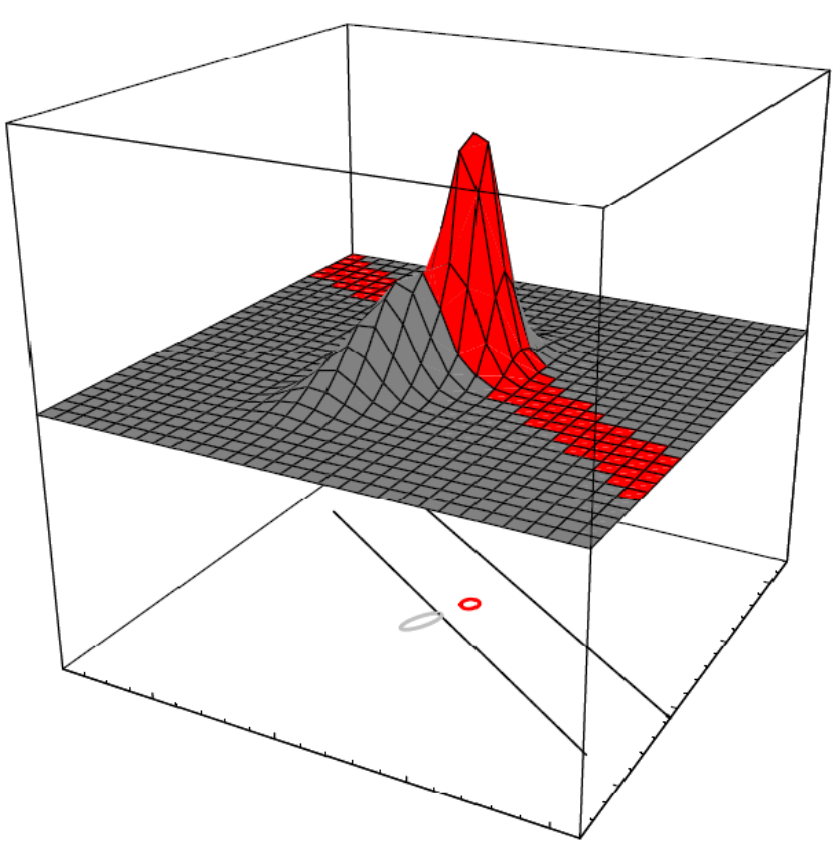


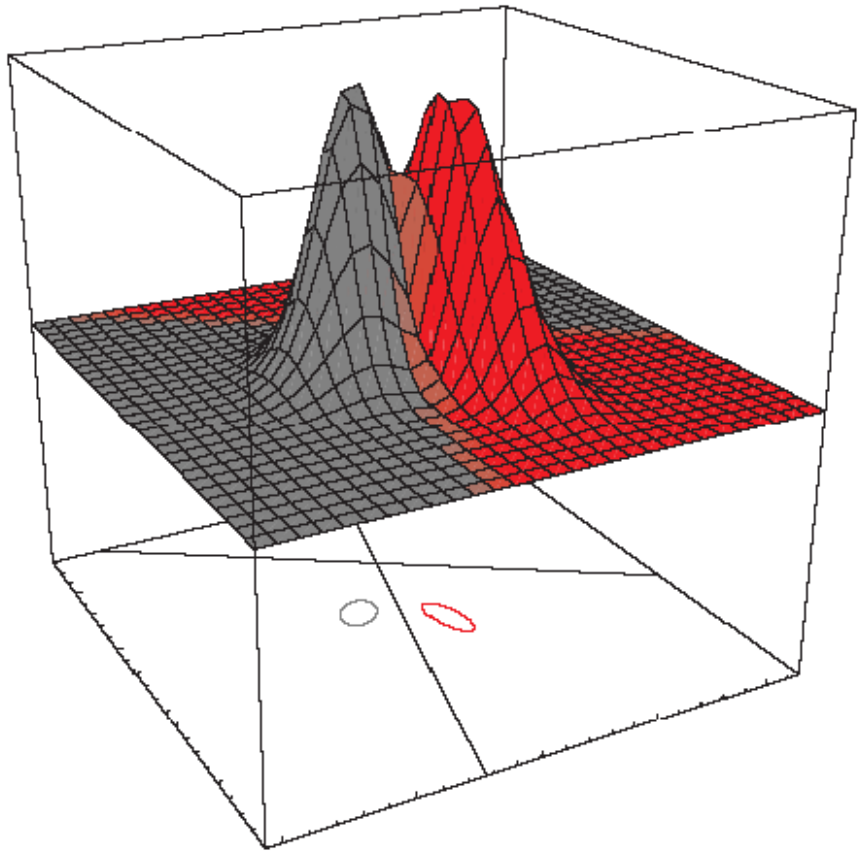

© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Beispiele

… für bivariate  Normalverteilungen mit beliebigen Kovarianz-matrizen



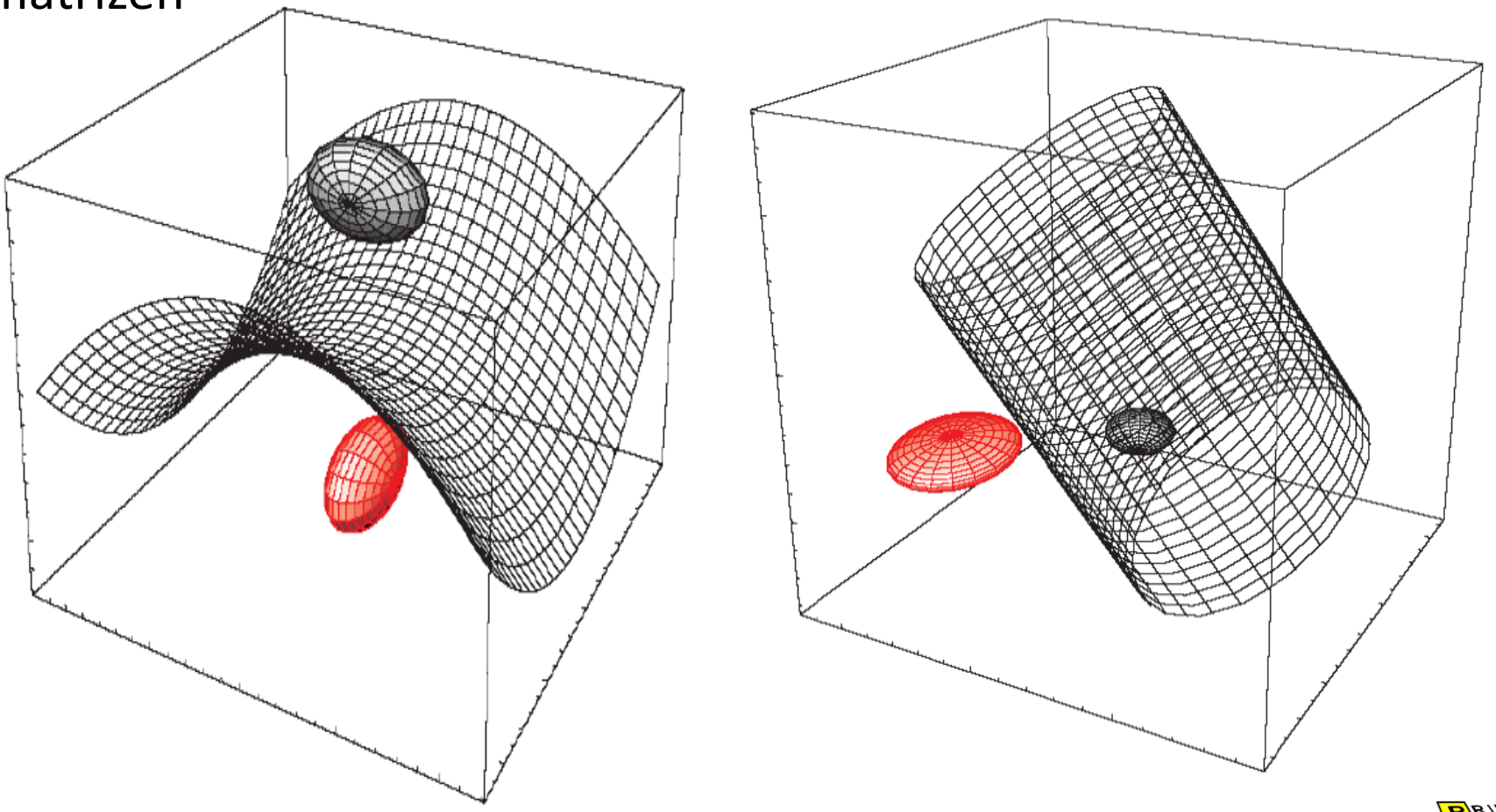



© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Beispiele

… für trivariate Normalverteilungen mit beliebigen Kovarianz-matrizen

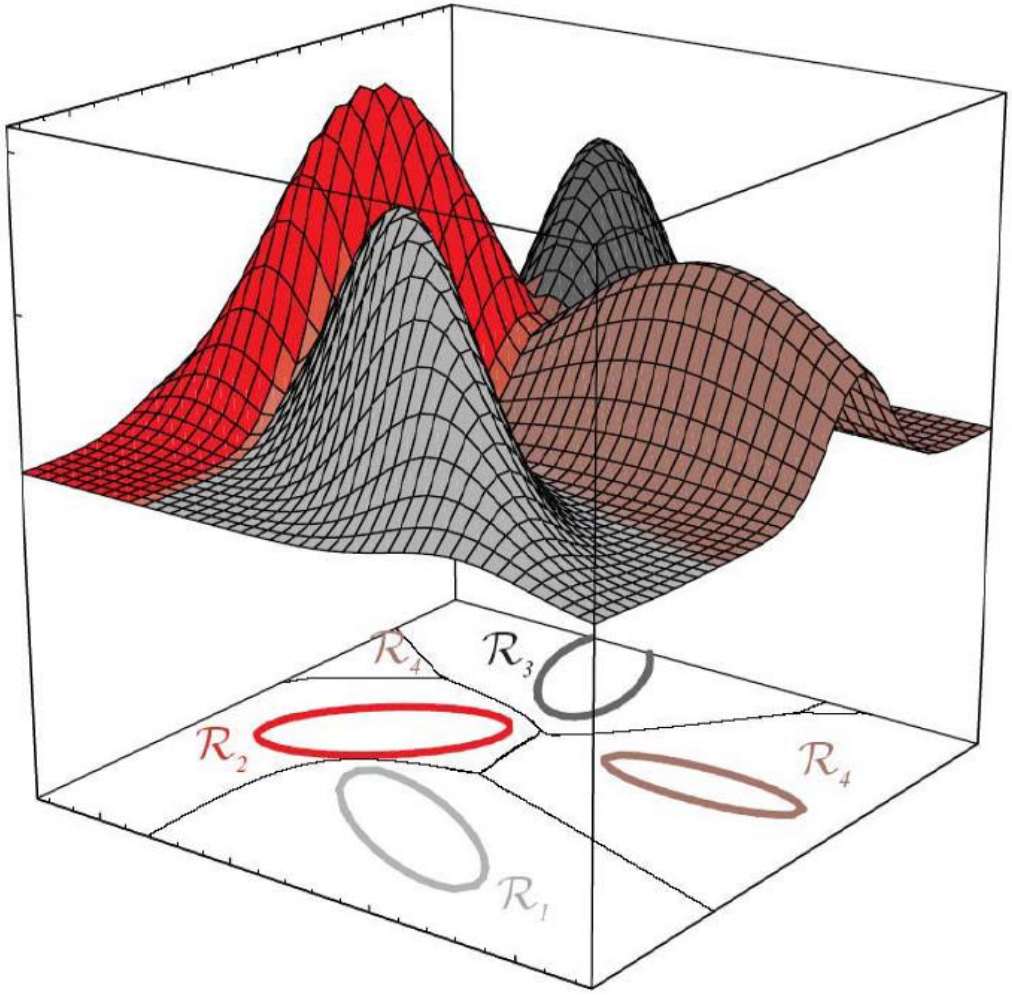



© Nicole M. Artner

[Quelle: Duda et al., 2001]

# Beispiele

- vier bivariate Normalverteilungen
- komplexe Entscheid-ungsregionenund grenzen





© Nicole M. Artner