



# Tema 6. Representación basada en Kernels y LDA

Percepción (PER)

Curso 2020/2021

Departamento de Sistemas Informáticos y Computación

- 1 Introducción ▷ 3
- 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
- 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
- 4 Tipos de Kernel ▷ 16
- 5 Kernels generalizados ▷ 21
- 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25



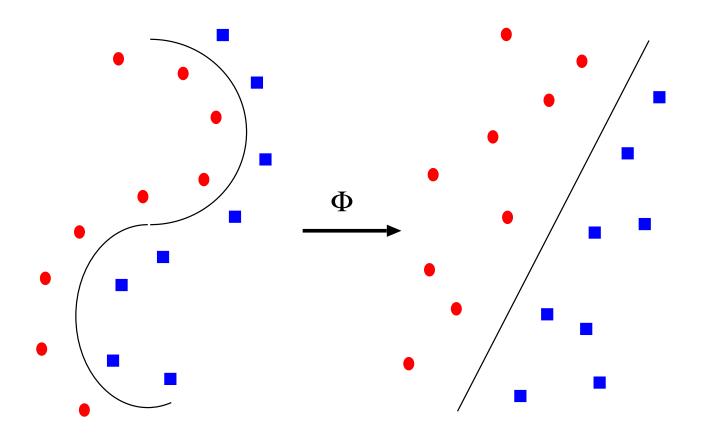
- 1 Introducción ▷ 3
  - 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
  - 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
  - 4 Tipos de Kernel ▷ 16
  - 5 Kernels generalizados ▷ 21
  - 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25



#### Introducción

Objetivo principal de la representación basada en kernels:

Cambio de espacio de representación para obtener separabilidad lineal







#### Introducción

Problema principal de la reducción por PCA: no supervisada

La técnica de LDA sí tiene en cuenta las etiquetas de clase

LDA se basa en vectores propios generalizados:

■ Definición: dadas dos matrices W y V encontrar aquellos vectores y escalares que son solución de la siguiente expresión:

$$W^t \mathbf{x} = \lambda V^t \mathbf{x}$$

Los posibles valores propios deben de satisfacer la ecuación:

$$\det(W^t - \lambda V^t) = 0$$

■ El problema original se podría reescribir como un problema de vectores propios usual:

$$(V^t)^{-1} W^t \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$$

ullet En la práctica, por estabilidad numérica, se resuelve el problema de vectores propios generalizados en lugar de invertir la matriz  $V^t$ 





- 1 Introducción ▷ 3
- 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
  - 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
  - 4 Tipos de Kernel ▷ 16
  - 5 Kernels generalizados ▷ 21
  - 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25





#### Clasificación binaria y kernels

- Usualmente se estudian los métodos kernel en problemas de clasificación binarios
- Conjunto de entrenamiento

$$X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$$
 con  $c_i \in \{-1, +1\}$ 

■ La clasificación de una nueva muestra  $\mathbf{x}$  se realiza por el signo de una función discriminante  $g(\mathbf{x})$ :

$$c(\mathbf{x}) = \begin{cases} +1 & \text{si } g(\mathbf{x}) \ge 0 \\ -1 & \text{si } g(\mathbf{x}) < 0 \end{cases}$$

■ El algoritmo Perceptron se puede reescribir para la clasificación en dos clases





#### Aprendizaje - Perceptron de 2 clases

- Entrada:  $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$  y factor de aprendizaje  $\alpha$
- Salida: w y  $w_0$  // vector de pesos entrenados y término independiente
- Algoritmo:

```
\mathbf{w}=\mathbf{0};\ w_0=0\ //\ \mathrm{vector}\ \mathrm{de}\ \mathrm{pesos}\ \mathrm{iniciales}\ \mathrm{y}\ \mathrm{peso}\ \mathrm{umbral}\ \mathrm{nulos} do
```

```
m=0; // número de muestras bien clasificadas
```

for 
$$(n = 1; n \le N; n++)$$
  
 $g(\mathbf{x}_n) = \mathbf{w}^t \cdot \mathbf{x}_n + w_0$ 

if 
$$c_n \cdot g(\mathbf{x}_n) \leq 0$$
 then  $//$  Si hay un error de clasificación

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} + \alpha \, c_n \, \mathbf{x}_n; \ w_0 = w_0 + \alpha \, c_n$$

else

$$m = m + 1$$

while 
$$(m < N)$$





#### Aprendizaje - Perceptron de 2 clases

- Entrada:  $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$ , factor de aprendizaje  $\alpha \in \mathbb{R}^N \land \alpha_i = \alpha_j \ \forall i, j$
- Salida:  $g(\mathbf{x})$  // función de clasificación
- Algoritmo:

$$g(\mathbf{x}) = 0$$

do

m=0; // número de muestras bien clasificadas for (n=1;  $n\leq N;$  n++)

if 
$$c_n \cdot g(\mathbf{x}_n) \leq 0$$
 then  $//$  Si hay un error de clasificación  $g(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + \alpha_n c_n (\mathbf{x}_n^t \cdot \mathbf{x}) + \alpha_n c_n$ 

else

$$m = m + 1$$
;

while (m < N)





#### Clasificación binaria y kernels

•  $g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t \mathbf{x} + w_0$  es un clasificador con vector de pesos  $\mathbf{w}$  y peso umbral  $w_0$ :

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n \mathbf{x}_n \qquad w_0 = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n$$

•  $g(\mathbf{x})$  relaciona  $\mathbf{x}$  con algunas muestras de entrenamiento por el producto escalar y  $\alpha_i$  pasa de factor de aprendizaje al peso de cada muestra:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n (\mathbf{x}_n^t \cdot \mathbf{x}) + \alpha_n c_n$$

- Generalizar producto escalar para resolver tareas no linealmente separables
- Cambio por una función  $kernel\ K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x})$ : proyecta a un espacio donde las muestras son linealmente separables y realiza el producto escalar
- La proyección es **implícita** y se obtiene al calcular la función kernel:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + \alpha_n c_n = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n (\Phi(\mathbf{x}_n^t) \cdot \Phi(\mathbf{x})) + \alpha_n c_n$$





#### Clasificación binaria y kernels

■ **Función kernel**: función que dado un par de objetos del espacio de representación original nos devuelve un valor real:

$$K: E \times E \to \mathbb{R}$$

Usualmente la representación es vectorial, entonces:

$$K: \mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}$$

Dicho valor real modela el producto escalar de esos dos objetos en un nuevo espacio de representación:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{y})$$

■ La representación alternativa no se llega a producir, sólo se necesita el resultado del producto escalar en esa representación para usarlo en un clasificador lineal





- 1 Introducción ▷ 3
- 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
- 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
  - 4 Tipos de Kernel ▷ 16
  - 5 Kernels generalizados ▷ 21
  - 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25





#### Aprendizaje - Kernel Perceptron

■ El algoritmo Kernel Perceptron aprende la siguiente función:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + \alpha_n c_n$$

Es decir, una función lineal en un espacio de representación alternativo:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \,\Phi(\mathbf{x}) + w_0$$

con

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n \Phi(\mathbf{x}_n) \qquad w_0 = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n c_n$$

- Los únicos parámetros a aprender son los  $\alpha_n$
- En fase de aprendizaje la función kernel se representa por una matriz  $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  tal que  $\mathbf{K}_{i,j} = K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  (matriz Gramm)





#### Aprendizaje - Kernel Perceptron

Desde el punto de vista de la función a aprender:

- Entrada:  $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$
- Salida:  $g(\mathbf{x})$
- Algoritmo:

$$g(\mathbf{x}) = 0;$$

while (m < N)

do

m=0; // número de muestras bien clasificadas for  $(n=1;\,n\leq N;\,n++)$  if  $c_n\cdot g(\mathbf{x}_n)\leq 0$  then // Si hay un error de clasificación  $g(\mathbf{x})=g(\mathbf{x})+c_n\,K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x})+c_i$  else m=m+1



#### Aprendizaje - Kernel Perceptron

Desde el punto de vista de los parámetros  $\alpha$ :

```
■ Entrada: X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}
```

• Salida:  $\alpha \in \mathbb{R}^N$ 

while (m < N)

Algoritmo:

```
\alpha=\mathbf{0}; do m=0; \ // \ \text{n\'umero de muestras bien clasificadas} for (n=1; \ n\leq N; \ n++) if c_n\cdot g(\mathbf{x}_n)\leq 0 then // Si hay un error de clasificación \alpha_n=\alpha_n+1 else m=m+1
```



- 1 Introducción ⊳ 3
- 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
- 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
- 4 Tipos de Kernel > 16
  - 5 Kernels generalizados ▷ 21
  - 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25





#### Tipos de Kernel

Entre los más usados están el *polinomial* y el *gaussiano* (o radial)

Kernel polinomial:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}^t \cdot \mathbf{y} + c)^d$$
 con c,d > 0

• Ejemplo d=2

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left( \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} + c \right)^2 = (x_1 y_1 + x_2 y_2 + c) (x_1 y_1 + x_2 y_2 + c)$$
$$= x_1^2 y_1^2 + x_2^2 y_2^2 + 2 x_1 y_1 x_2 y_2 + 2 x_1 y_1 c + 2 x_2 y_2 c + c^2$$

$$= \begin{bmatrix} x_1^2 & x_2^2 & \sqrt{2}x_1 x_2 & \sqrt{2c}x_1 & \sqrt{2c}x_2 & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1^2 \\ y_2^2 \\ \sqrt{2}y_1 y_2 \\ \sqrt{2c}y_1 \\ \sqrt{2c}y_2 \\ c \end{bmatrix}$$

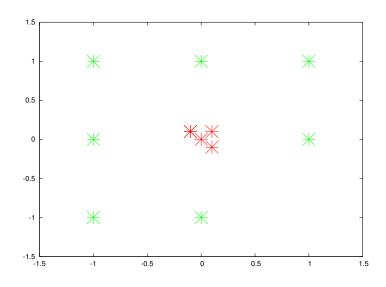
$$= \Phi(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{y})$$



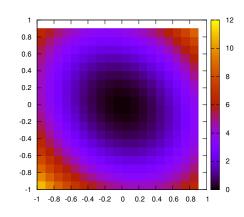


#### Kernel polinomial

#### Conjunto de entrenamiento



## Representación de $g(\mathbf{x})$ con $\mathbf{x} \in [-1,1]$ y $\alpha_n = 1, \forall n$



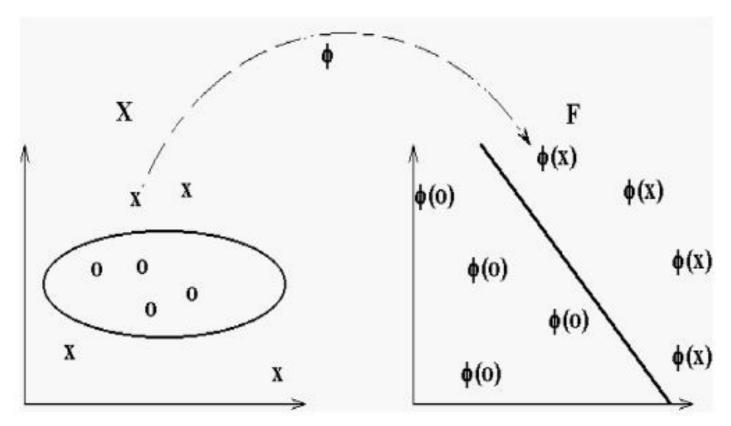
Recordad  $g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})$  siendo  $K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})$  un kernel polinómico





#### Kernel polinomial

En el ejemplo previo hay una proyección implícita a un nuevo espacio donde las muestras de entrenamiento son linealmente separables:



http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/b1/Svm\_8\_polinomial.JPG





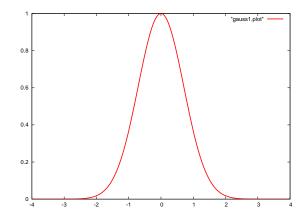
#### Kernel gaussiano

Kernel Gaussiano:

Eso es distancia euclídea

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(\frac{-||\mathbf{x} - \mathbf{y}||^2}{2\sigma^2}\right)$$

Representación gráfica de la gaussiana (unidimensional):



- ullet Kernel muy empleado, pues asume que la función  $\Phi(\cdot)$  implícitamente relacionada proyecta los puntos a un espacio de dimensionalidad infinita
- En dimensionalidad infinita los datos son siempre linealmente separables

- 1 Introducción ▷ 3
- 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
- 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
- 4 Tipos de Kernel ▷ 16
- 5 Kernels generalizados ▷ 21
  - 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25



#### Kernels generalizados

- Objetivo: definir y evaluar diferentes funciones kernel
- La función kernel debe cumplir que:

$$\exists \Phi : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^{D'} : K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi(\mathbf{x}^t) \Phi(\mathbf{y})$$

• Mercer condition: condición necesaria y suficiente para caracterizar que K sea un kernel válido:

"La matriz Gramm  $\mathbf{K}_{i,j}$  definida para el conjunto de entrenamiento  $\{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N\}$  es semidefinida positiva  $(\mathbf{z}^t\mathbf{K}\mathbf{z}\geq 0, \forall \mathbf{z}\in\mathbb{R}^{N\times 1}, \mathbf{z}\neq \mathbf{0})$ "

■ La matriz Gramm **K** es semidefinida positiva si se cumple:

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) z_i z_j \ge 0 \quad \forall z_i, z_j \in \mathbb{R}$$

Usando esta propiedad podemos construir kernels desde kernels más simples





$$\text{Kernels generalizados}$$
 Si  $K_1$  y  $K_2$  son kernels, entonces  $K$  es un kernel: 
$$\begin{cases} c \cdot K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) & c > 0 \\ f(\mathbf{x}) \cdot K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot f(\mathbf{y}) & \text{para cualquier función } f \\ q(K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})) & q & \text{polinomio con coeficientes no negativos} \\ (c + K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}))^d & d, c > 0 \\ K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ \exp\left(K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})\right) \\ \frac{K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\sqrt{K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})}} & \exp\left(e^{A\mathbf{k}}\right) \end{cases}$$



#### Kernels generalizados

■ Sea  $A \in \mathbb{R}^{D \times D}$  una matriz semidefinida positiva, entonces K es un kernel:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^t \ \mathcal{A} \ \mathbf{y}$$

- lacksquare Sean  $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^D$ , tales que  $\mathbf{x}=(\mathbf{x}_a,\mathbf{x}_b)$ ,  $\mathbf{y}=(\mathbf{y}_a,\mathbf{y}_b)$ , con:
  - $\bullet$   $\mathbf{x}_a, \mathbf{y}_a \in \mathbb{R}^{D_a}$
  - $\bullet$   $\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b \in \mathbb{R}^{D_b}$
  - $\bullet \ D = D_a + D_b$

Si  $K_a$  y  $K_b$  son kernels en  $\mathbb{R}^{D_a}$  y  $\mathbb{R}^{D_b}$ , respectivamente, K es un kernel:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} K_a(\mathbf{x}_a, \mathbf{y}_a) + K_b(\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b) \\ K_a(\mathbf{x}_a, \mathbf{y}_a) \cdot K_b(\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b) \end{cases}$$





- 1 Introducción ▷ 3
- 2 Clasificación binaria y kernels ▷ 6
- 3 Aprendizaje Kernel Perceptron ▷ 12
- 4 Tipos de Kernel ▷ 16
- 5 Kernels generalizados ▷ 21
- 6 Linear Discriminant Analysis (LDA) ▷ 25





#### Introducción a LDA

- LDA: Linear Discriminant Analysis
- Técnica de reducción de dimensionalidad *supervisada*
- Se pretende que la proyección lineal:
  - Preserve la separación de las clases del espacio original
  - Que los puntos de una misma clase permanezcan cercanos entre ellos
- Estas dos propiedades se resumen en dos estadísticos:
  - La separación de las medias de las clases
  - La reducción de las covarianzas intra-clase
- Se basa en *vectores propios generalizados*  $(W^t\mathbf{x} = \lambda V^t\mathbf{x})$





#### **Conceptos previos**

■ Recordemos que  $\mathbf{x}' = W^t \mathbf{x}$ , donde  $W \in \mathbb{R}^{D \times k}$ 

- Bajo este supuesto tenemos:
  - $\overline{\mathbf{x}}' = W^t \overline{\mathbf{x}}$  (media de los puntos proyectados)
  - $\Sigma'_{\mathcal{X}} = W^t \Sigma_{\mathcal{X}} W$  (matriz de covarianzas de los puntos proyectados)
- Por lo tanto:
  - La media de los puntos en el espacio proyectado es la proyección de la media de los puntos en el espacio original
  - La matriz de covarianza en el espacio proyectado es la proyección (dos veces) de la matriz de covarianzas de los puntos en el espacio original





#### **LDA**

#### Definiciones:

- lacktriangle Conjunto de muestras etiquetadas:  $\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2) \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$
- Conjunto de clases:  $\mathbb{C} = \{1, 2, \dots, C\}$ ,  $c_n \in \mathbb{C}$
- Media total:  $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$
- lacktriangle Número de muestras de la clase c:  $N_c$
- Media de clase c:  $\overline{\mathbf{x}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} \mathbf{x}_n$
- Matriz de covarianzas de clase c:  $\Sigma_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} (\mathbf{x}_n \overline{\mathbf{x}}_c) (\mathbf{x}_n \overline{\mathbf{x}}_c)^t$

LDA propone encontrar una matriz de proyección W que separe las medias  $\overline{\mathbf{x}}_c$  pero reduzca las matrices de covarianzas  $\Sigma_c$ 





#### **LDA**

- Se proponen dos tipos de matrices relacionadas con el anterior objetivo:
  - La matriz *entre-clases*<sup>1</sup>:

$$S_b = \sum_{c=1}^{C} N_c (\overline{\mathbf{x}}_c - \overline{\mathbf{x}}) (\overline{\mathbf{x}}_c - \overline{\mathbf{x}})^t$$

• La matriz *intra-clases*<sup>2</sup>:

$$S_w = \sum_{c=1}^{C} \Sigma_c$$

- Una buena proyección lineal debería conseguir en el espacio proyectado:
  - $S_b$  grande, y
  - $S_w$  pequeño





<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>between-class

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>within-class

#### **LDA**

■ En el espacio proyectado ambas matrices,  $S_b$  y  $S_w$  se pueden calcular como:

$$S_b' = W^t S_b W \qquad \qquad S_w' = W^t S_w W$$

- Suponiendo W ortonormal,  $S_b'$  y  $S_w'$  son matrices diagonales, donde cada elemento es la varianza en la dimensión a la que se proyecta
- Varianza total: operador traza Tr (suma de elementos de la diagonal)
- lacktriangle Buscamos una proyección lineal W que:
  - Maximice la varianza entre-clase  $Tr(S_b')$ , y
  - Minimice la varianza intra-clase  $Tr(S'_w)$
- Se puede demostrar que es equivalente a la siguiente función objetivo:<sup>3</sup>

$$\widehat{W} = \underset{W}{\operatorname{argmax}} \frac{Tr(W^t S_b W)}{Tr(W^t S_w W)}$$





Por simplicidad, optimizaremos la proyección a una única dimensión

$$\widehat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmax}} \frac{\mathbf{w}^t S_b \mathbf{w}}{\mathbf{w}^t S_w \mathbf{w}}$$

■ Dado que la función objetivo es invariante al escalado de  $\mathbf{w}$ , simplificaremos el problema de optimización condicionándolo a que  $\mathbf{w}^t S_w \mathbf{w} = 1$ 

$$\widehat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmax}} \mathbf{w}^t S_b \mathbf{w}$$
 sujeto a  $\mathbf{w}^t S_w \mathbf{w} = 1$ 

Expresado con el multiplicador de Lagrange correspondiente

$$\widehat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmax}} \, \underset{\lambda}{\operatorname{max}} \, \mathbf{w}^t S_b \mathbf{w} + \lambda (1 - \mathbf{w}^t S_w \mathbf{w})$$

lacktriangle Tras derivar respecto de f w y  $\lambda$  e igualar a cero, obtenemos

$$S_b \mathbf{w} = \lambda S_w \mathbf{w}$$

donde  $\mathbf{w}$  es el vector propio generalizado de  $S_b$  y  $S_w$  de mayor valor propio





ullet En el caso general se busca la matriz de proyección W

$$\widehat{W} = \underset{W}{\operatorname{argmax}} \ Tr(W^t S_b W) \quad \text{sujeto a} \quad \mathbf{w}_j^t S_w \mathbf{w}_j = 1 \quad \forall j$$

que se puede expresar mediante un sumatorio de multiplicadores de Lagrange

$$\widehat{W} = \underset{W}{\operatorname{argmax}} \max_{\Lambda} \ Tr(W^t S_b W) + Tr(\Lambda \cdot (I - W^t S_w W))$$

donde  $\Lambda$  es una matriz diagonal con los multiplicadores de Lagrange en la diagonal, uno por cada vector de proyección; e I es la matriz identidad

■ Derivando con respecto a W y  $\Lambda$  e igualando a 0 nos queda:

$$S_b W = \Lambda S_w W$$

donde W son los vectores propios generalizados de  $S_b$  y  $S_w$ 





 Los vectores propios que maximizan la función objetivo original son aquellos con mayor valor propio asociado

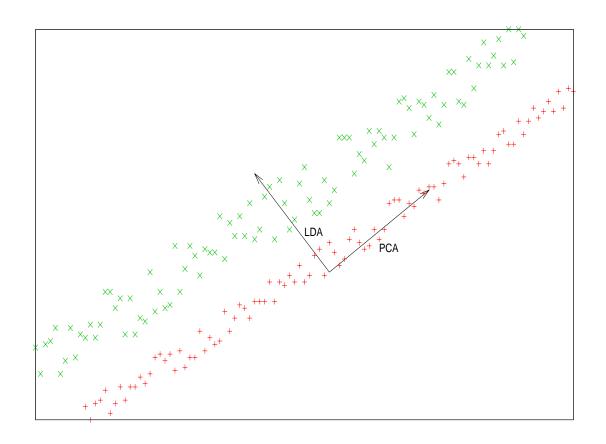
$$W_{D\times k} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1 & \mathbf{w}_2 & \dots & \mathbf{w}_k \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_k$$

- La configuración de la matriz  $S_b$  hace que no tengan más de C-1 vectores propios linealmente independientes
- lacktriangle Por ello no tiene sentido proyectar a una dimensionalidad k>C-1





#### LDA vs. PCA







Page 6.34

#### Algoritmo LDA

■ Entrada: N,D,k, $\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$ 

■ Salida: W

- Algoritmo:
  - 1. Calcular la media de los datos:  $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$
  - 2. Calcular la media por clase:  $\overline{\mathbf{x}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} \mathbf{x}_n$
  - 3. Calcular la matriz de covarianzas de clase:  $\Sigma_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} (\mathbf{x}_n \overline{\mathbf{x}}_c) (\mathbf{x}_n \overline{\mathbf{x}}_c)^t$
  - 4. Calcular  $S_w = \sum_{c=1}^C \Sigma_c$
  - 5. Calcular  $S_b = \sum_{c=1}^C n_c (\overline{\mathbf{x}}_c \overline{\mathbf{x}}) (\overline{\mathbf{x}}_c \overline{\mathbf{x}})^t$
  - 6. Encontrar vectores propios generalizados de  $S_b$  y  $S_w$
  - 7. Ordenarlos según los valores propios asociados
  - 8. Definir W como la matriz con los k primeros vectores propios





#### Consideraciones prácticas

- La inversión de la matriz  $S_w$  y la solución del problema de vectores propios generalizados pueden acarrear problemas numéricos
  - Habitual si  $D \gg n$  (D dimensión espacio original, n número de muestras)
  - En estos casos la aplicación directa de LDA no es aconsejable
- En este caso, para hacer una proyección lineal discriminativa se aconseja:
  - Realizar una primera reducción de dimensionalidad mediante PCA
  - Realizar una segunda reducción de dimensionalidad mediante LDA
- La proyección quedaría como:

$$\mathbf{x}' = V^t W^t (\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})$$

- W: matriz de proyección PCA
- ullet V: matriz de proyección LDA



