

Implementação da Análise de Discriminante Linear (LDA)

Murillo Freitas Bouzon

Resumo—Um dos grande problemas de *machine learning* é o problema de classificação de dados, onde dado um conjunto de dados com classes conhecidas, deve-se identificar a classe de uma nova observação. Um método estatístico para esse problema é o LDA, sendo utilizado para encontrar eixos que melhor discriminam um conjunto de dados, maximizando a separação entre as classes e minimizando a variação dentro de cada classe. Neste trabalho foi implementado o método LDA para discriminar os dados da base Iris, sendo comparado e aplicado em conjunto com o PCA. Os resultados mostraram que o LDA discrimina os dados melhor do que o PCA e quando utilizado em conjunto pode discriminar os dados de maneira melhor, graças a capacidade de redução de dimensionalidade do PCA.

Index Terms—Análise de Discriminante Linear, LDA, Aprendizado Supervisionado, Machine Learning, Métodos Estatísticos

I. INTRODUÇÃO

Um problema clássico da estatística é o problema de classificação, onde dada uma observação, identifica-se a qual classe ela pertence, baseando-se em um conjunto de dados contendo observações cujas classes são conhecidas.

Para resolver problemas desse tipo de forma computacional, surgiram diversos algoritmos de aprendizado supervisionado baseados em métodos estatísticos, onde são estimados modelos preditivos a partir dos dados categorizados.

O algoritmo Análise de Discriminante Linear, também conhecido como LDA, é um exemplo de algoritmo supervisionado que originou-se na estatística e é muito utilizado na área de *machine learning*. O propósito do LDA é separar dados em grupos distintos de forma que maximize a separação entre as classes e minimizando a variância dentro das classes.

Uma aplicação comum do método LDA encontrada na literatura é reconhecimento facial, sendo feito no trabalho de [1] para reconhecimento facial lidando com o problema de poucas amostras, obtendo resultados que aprimoraram a performance de um sistema de reconhecimento facial. Outro trabalho é o de [2], onde foi utilizado o LDA para reconhecimento facial com dados de alta funcionalidade, obtendo como resultado um algoritmo que satisfaz o critério de Fisher, sendo S_w uma matriz singular ou não. Em [3] é proposto um algoritmo de reconhecimento facial baseado em LDA, sendo comparado com métodos tradicionais de reconhecimento facial, obtendo resultados superiores ao *eigenfaces*, *fisherfaces* e D-LDA.

Sendo assim, neste trabalho foi implementado o método LDA, sendo aplicado para discriminar a base de dados Iris e comparado os resultados com o método PCA.

II. CONCEITOS FUNDAMENTAIS

Nesta seção serão apresentadas as teorias relacionadas ao método desenvolvido neste trabalho

A. Análise de Discriminante Linear

O método Análise de Discriminante Linear, conhecido como LDA, foi proposta em [4]. O método calcula uma combinação linear das características de um conjunto de dados rotulados, que pertencem a um grupo ou uma classe, de forma que melhor discrimine cada classe. Pode-se dizer que o LDA busca maximizar a separação entre as classes e minimizar a variação dos dados de uma mesma classe. Para isso é necessário calcular a matriz de dispersão entre-classe S_b , dada pela Equação (1) e a matriz de dispersão intra-classe S_w , dada pela Equação(2).

$$S_b = \sum_{i=1}^g N_i (\bar{x}_i - \bar{x})(\bar{x}_i - \bar{x})^T \quad (1)$$

$$S_w = \sum_{i=1}^g (N_i - 1) S_i = \sum_{i=1}^g \sum_{j=1}^N i (x_{i,j} - \bar{x}_i)(x_{i,j} - \bar{x}_i)^T \quad (2)$$

Sendo N_i o número do observações contidas na classe i , g a quantidade de classes distintas, $x_{i,j}$ a representação vetorial da amostra j que pertence a classe i , \bar{x}_i o vetor de médias de cada classe e \bar{x} o vetor de médias geral.

O principal objetivo do LDA é encontrar a matriz de projeção P_{lda} que maximiza o determinante de S_b sobre o determinante de S_w , ou seja, o critério de Fisher, dado pela Equação (3).

$$P_{lda} = \operatorname{argmax} \frac{|P^T S_b P|}{P^T S_w P} \quad (3)$$

A solução de P_{lda} pode ser demonstrada pela Equação(4). Desta forma, pode-se encontrar P_{lda} encontrando os autovetores e autovalores da matriz $S_w^{-1} S_b$.

$$(S_w^{-1} S_b) P = P \Lambda \quad (4)$$

III. METODOLOGIA

A metodologia deste trabalho foi dividida em 6 etapas.

- 1) Leitura da base
- 2) Cálculo dos vetores de médias para cada classe
- 3) Cálculo da matriz de dispersão entre classes
- 4) Cálculo da matriz de dispersão dentro de cada classe
- 5) Cálculo dos autovetores e autovalores para as matrizes de dispersão
- 6) Escolha dos discriminantes lineares

A implementação foi feita em *Python*, utilizando a biblioteca *numpy* para o cálculo dos autovalores e autovetores e a biblioteca *matplotlib* para plotagem de gráficos.

IV. BASE DE DADOS

Para validar se a implementação foi feita corretamente, foram realizados experimentos em uma base de dados, sendo descrita a seguir:

A. Iris Data Set

Uma das bases mais conhecidas na literatura utilizada para reconhecimento de padrões, sendo criada pelo R.A Fisher, que também criou o LDA. Esta base possui 3 classes com 50 amostras cada classe e 5 características, sendo elas:

- Comprimento da sépala em cm
- Largura da sépala em cm
- Comprimento da pétala em cm
- Largura da pétala em cm
- Classes: *Iris Setosa*, *Iris Versicolor*, *Iris Virginica*

V. EXPERIMENTOS E RESULTADOS

Para avaliar o método implementado, foram feitos dois experimentos sobre a base de dados apresentada em IV-A. O primeiro experimento foi aplicar o LDA e projetar os dados transformados em novas coordenadas 2D e 1D, sendo comparado com os resultados do método PCA, feito no relatório anterior.

A Figura 1 apresenta os resultados da aplicação do LDA com os dados transformados sendo projetados em 1 dimensão. A Figura 2 apresenta os resultados da aplicação do LDA com os dados transformados sendo projetados em 2 dimensões. A Figura 3 apresenta os resultados da aplicação do PCA com os dados transformados sendo projetados em 1 dimensão. A Figura 4 apresenta os resultados da aplicação do PCA com os dados transformados sendo projetados em 2 dimensões.

Os resultados mostram que com o LDA em 1 dimensão, é possível discriminar bem a classe *Iris setosa* das outras duas. Para as classes *Iris versicolor* e *Iris virginica* é possível discriminá-las, porém existe um pequeno intervalo onde elas se intersectam. Com os dados transformados pelo LDA em 2 dimensões, as classes ficaram bem discriminadas, porém também houve uma pequena intersecção entre as classes *Iris versicolor* e *Iris virginica*.

Para os resultados do PCA em 1 e 2 dimensões, a classe *Iris setosa* consegue ser bem discriminada entre as duas outras classes. A região de intersecção entre as classes *Iris versicolor* e *Iris virginica* ficou maior do que no método LDA, sendo mais difícil de discriminá-las utilizando o PCA.

O segundo experimento foi feito a aplicação do PCA no dados originais para reduzir a dimensionalidade e então utilizou-se os dados transformados como entrada no LDA. O número de componentes utilizadas foi variada de 1 a 3. A Figura 5 mostra os resultados deste experimento. Com os resultados, pode-se observar que para o PCA com 1 componente o resultado foi o mesmo do que aplicar apenas o PCA sem o LDA e projetar a primeira componente. Para 2 componentes foi possível separar bem a *Iris setosa* das demais classes, porém as classes *Iris versicolor* e *Iris virginica* tiveram uma pequena região em comum. Para 3 componentes, o método LDA conseguiu separar bem as três classes, diminuindo a região em comum entre as classes *Iris versicolor* e *Iris virginica*.

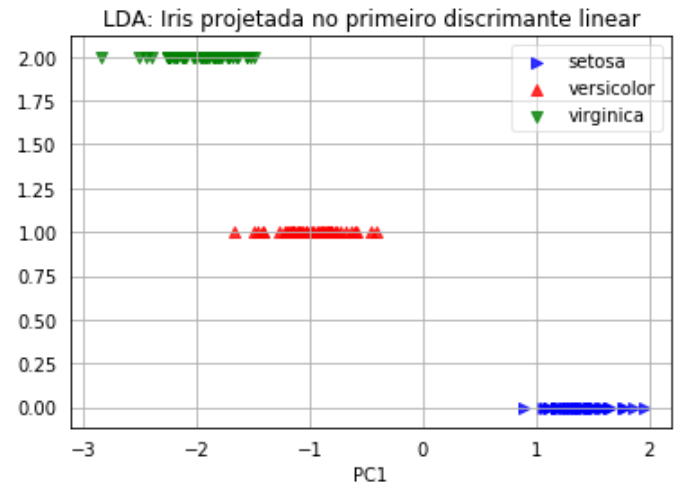


Figura 1: Projeção dos dados em 1 dimensão após a aplicação do LDA na base de dados Iris.

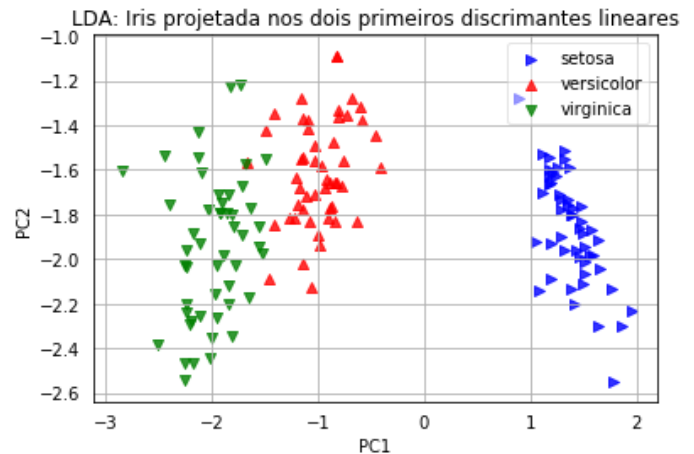


Figura 2: Projeção dos dados em 2 dimensões após a aplicação do LDA na base de dados Iris.

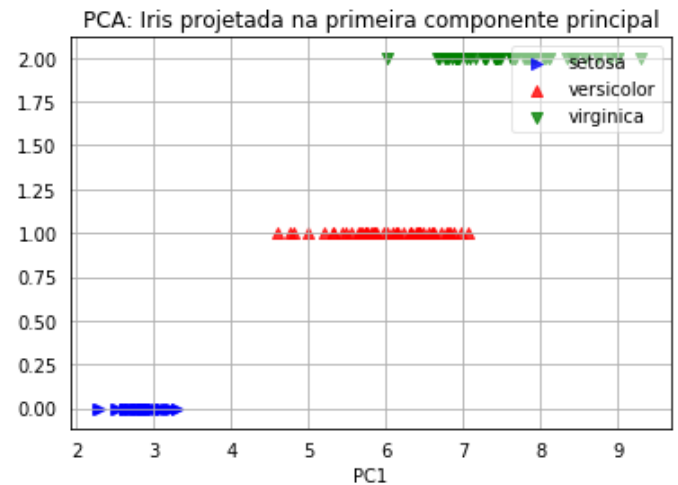


Figura 3: Projeção dos dados em 1 dimensão após a aplicação do PCA na base de dados Iris.

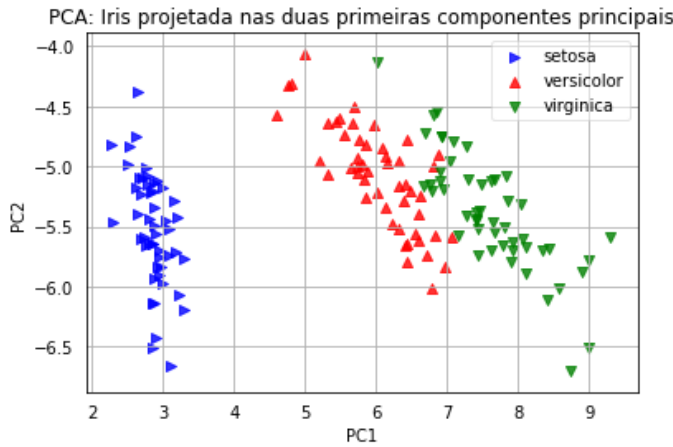


Figura 4: Projeção dos dados em 2 dimensões após a aplicação do PCA na base de dados Iris.

VI. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi implementado o método estatístico LDA para discriminar as classes da base de dados Iris, encontrando um novo sistema de coordenadas para isso e visualizar os dados de forma que fiquem melhor discriminados.

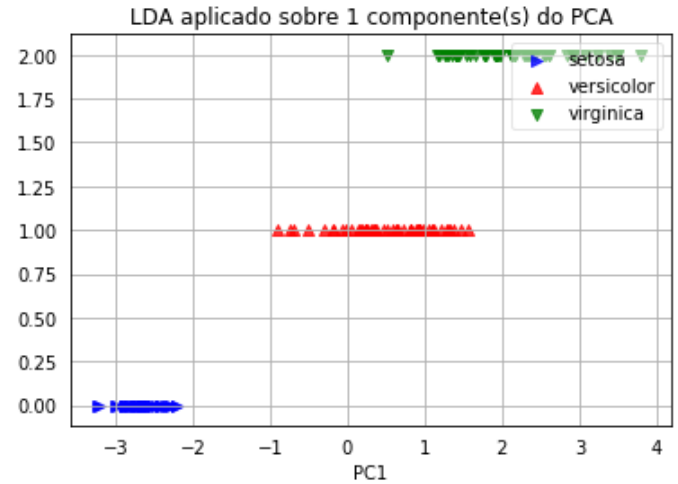
Para validar o método foram feitos dois experimentos, onde também foi aplicado o método PCA. No primeiro experimento foi aplicado o LDA e comparado com o método PCA em 1 e 2 dimensões. Os resultados mostraram que o método que melhor discrimina os dados é o LDA, sendo que o PCA tem como objetivo representar a maior variância entre os dados, reduzindo a dimensionalidade.

No segundo experimento, aplicou-se o PCA previamente para reduzir a dimensionalidade dos dados originais. O número de componentes foi variado de 1 a 3, sendo que aplicando o LDA com os dados transformados em 3 componentes foi o que obteve o resultado que melhor discrimina os dados em um espaço 2D.

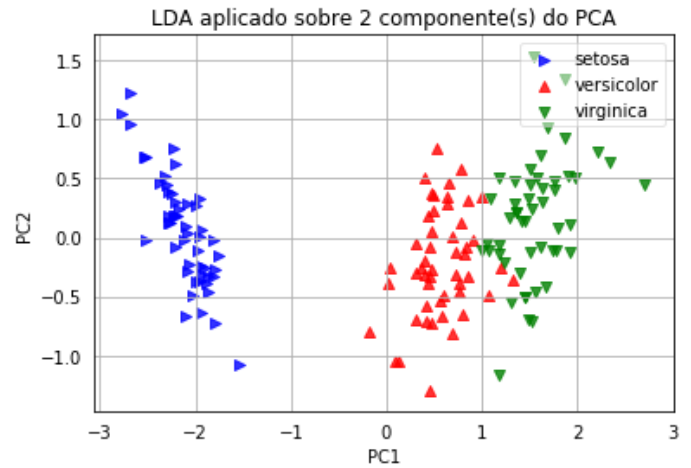
O método LDA mostrou-se uma boa opção para problemas de classificação, podendo ser aplicado em dados multi-classes e multi-variados, sendo facilmente implementável. Além disso, em casos onde a dimensão é muito alta, pode ser utilizado em conjunto com o PCA para reduzir a dimensionalidade dos dados originais e melhorar a performance do LDA.

REFERÊNCIAS

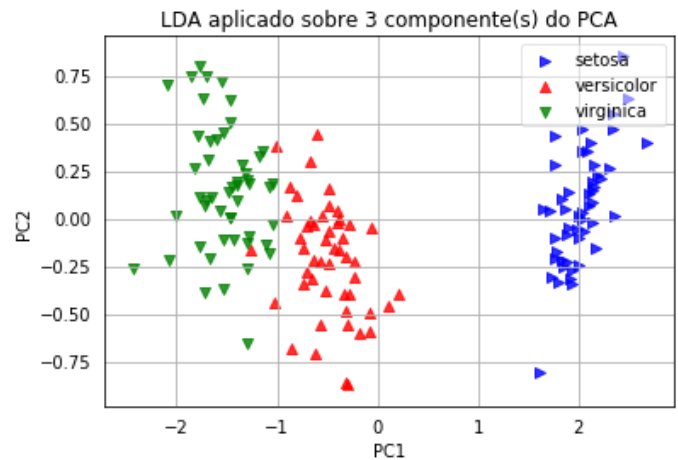
- [1] Li-Fen Chen, Hong-Yuan Mark Liao, Ming-Tat Ko, Ja-Chen Lin, and Gwo-Jong Yu. A new lda-based face recognition system which can solve the small sample size problem. *Pattern Recognition*, 33:1713–1726, 2000.
- [2] Hua Yu and Jie Yang. A direct lda algorithm for high-dimensional data - with application to face recognition. *Pattern Recognition*, 34:2067–2070, 2001.
- [3] Juwei Lu, Konstantinos N. Plataniotis, and Anastasios N. Venetsanopoulos. Face recognition using lda-based algorithms. *IEEE transactions on neural networks*, 14 1:195–200, 2003.
- [4] R. A. FISHER. The use of multiple measurements in taxonomic problems. *Annals of Eugenics*, 7(2):179–188, 1936.



(a) LDA aplicado sobre os dados transformados na primeira componente principal.



(b) LDA aplicado sobre os dados transformados nas duas primeiras componente principais.



(c) LDA aplicado sobre os dados transformados nas três primeiras componente principais.

Figura 5: Resultados da aplicação do LDA sobre os dados transformado pelo PCA.