

Fisherowska dyskryminacja liniowa – zastosowanie dla nowych danych

Marcin Samojluk , Gabriel Rączkowski

December 12, 2024

Fisherowska dyskryminacja liniowa (LDA) jest techniką statystyczną wykorzystywaną w analizie danych. Jej celem jest maksymalizacja rozróżnienia między klasami w zbiorze danych. Wykorzystywana jest głównie w klasyfikacji.

- ▶ LDA znajduje liniową kombinację cech, która najlepiej oddziela klasy.
- ▶ Jest szeroko stosowana w wielu dziedzinach, takich jak biologia, rozpoznawanie twarzy czy analiza tekstów.

Fisherowska dyskryminacja liniowa została zaproponowana przez Ronalda A. Fishera w 1936 roku. Początkowo była stosowana w analizie danych botanicznych, aby rozróżnić różne gatunki roślin na podstawie pomiarów ich cech morfologicznych.

Motywacja do stosowania LDA

Wyobraźmy sobie, że mamy dwie klasy (np. Klasa A i Klasa B), które chcemy skutecznie od siebie oddzielić. Każda klasa może być opisana przez wiele różnych cech, takich jak:

- ▶ Wzrost, waga,
- ▶ Wiek, poziom wykształcenia,
- ▶ Wyniki testów itp.

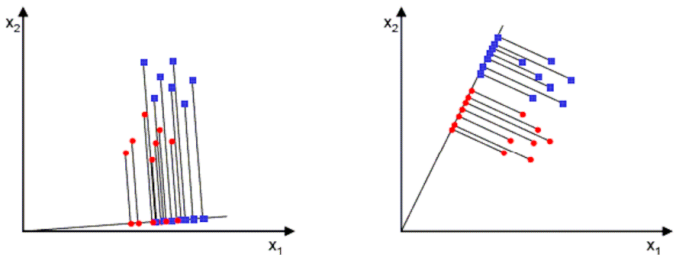
****Problem z jedną cechą:**** Jeśli użyjemy tylko jednej cechy (np. wzrostu), klasy mogą częściowo się nakładać. Nie będziemy w stanie jednoznacznie przypisać danych punktów do jednej z klas.

Przykład: Przykład danych w przestrzeni 1D, gdzie klasy nachodzą na siebie.



Motywacja do stosowania LDA

Docelowo chcemy rzutować punkty na linię prostą eliminując wymiar



Ułatwia to późniejsze przyporządkowywanie do jednej z klas

LDA opiera się na kilku kluczowych założeniach:

- ▶ **Rozkład Gaussa:** Dane w każdej klasie są rozkładane normalnie (Gaussowsko).
- ▶ **Równość macierzy kowariancji:** Macierze kowariancji dla różnych klas są równe.
- ▶ **Liniowa rozdzielność:** Istnieje liniowa granica decyzyjna, która może rozdzielić różne klasy.

Założenia te mogą nie zawsze być spełnione w rzeczywistych danych, co wpływa na skuteczność LDA.

Fisherowska dyskryminacja liniowa polega na znalezieniu takiej linii (hiperpłaszczyzny), która maksymalizuje stosunek wariancji między klasami do wariancji wewnątrz klas.

Wzór na funkcję celu:

$$J(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}}$$

Gdzie:

- ▶ S_B - macierz rozrzutu między klasami,
- ▶ S_W - macierz rozrzutu wewnątrz klas,
- ▶ \mathbf{w} - wektor wag, który określa kierunek linii separującej.

Wyprowadzenie optymalnego \mathbf{w}

Celem jest maksymalizacja funkcji celu:

$$J(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}}$$

Aby znaleźć optymalny wektor \mathbf{w} , liczymy pochodną $\nabla J(\mathbf{w})$ względem \mathbf{w} :

$$\nabla J(\mathbf{w}) = 0$$

Rozwijamy krok po kroku w kolejnych slajdach.

Liczenie pochodnej $\nabla J(\mathbf{w})$

Funkcja celu:

$$J(\mathbf{w}) = \frac{\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}}$$

Liczmy pochodną z licznika i mianownika:

$$\nabla (\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w}) = 2S_B \mathbf{w}, \quad \nabla (\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}) = 2S_W \mathbf{w}$$

Stosujemy wzór na pochodną ilorazu:

$$\nabla J(\mathbf{w}) = \frac{2S_B \mathbf{w} \cdot (\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}) - 2S_W \mathbf{w} \cdot (\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w})}{(\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w})^2}$$

Szukamy, kiedy $\nabla J(\mathbf{w}) = 0$.

Warunek stacjonarności

Aby znaleźć maksimum funkcji celu, przyrównujemy pochodną do zera:

$$\nabla J(\mathbf{w}) = 0$$

Co oznacza, że:

$$S_B \mathbf{w} (\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}) = S_W \mathbf{w} (\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w})$$

Dzielimy obie strony przez $(\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w})$:

$$S_B \mathbf{w} = \frac{\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}} S_W \mathbf{w}$$

Definiujemy:

$$\lambda = \frac{\mathbf{w}^T S_B \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T S_W \mathbf{w}}$$

Przejdźcie do równania własnego

Otrzymane równanie:

$$S_B \mathbf{w} = \lambda S_W \mathbf{w}$$

Przemnażamy obustronnie przez S_W^{-1} (zakładamy, że S_W jest odwracalna):

$$S_W^{-1} S_B \mathbf{w} = \lambda \mathbf{w}$$

Jest to równanie własne, gdzie:

- ▶ $S_W^{-1} S_B$ - macierz,
- ▶ λ - wartość własna,
- ▶ \mathbf{w} - wektor własny.

Interpretacja równania własnego

- ▶ Rozwiązujemy równanie $S_W^{-1} S_B \mathbf{w} = \lambda \mathbf{w}$.
- ▶ Wartości własne λ określają zdolność rozróżnienia klas.
- ▶ Optymalny wektor \mathbf{w} to ten, który odpowiada największemu λ .

Podsumowanie:

\mathbf{w} = wektor własny dla największej λ

$J(\mathbf{w})$ maksymalizowane przy λ_{\max}

Wektory Własne w LDA

W metodzie Linear Discriminant Analysis (LDA), kluczowym zadaniem jest znalezienie odpowiednich kierunków w przestrzeni, które najlepiej oddzielają dane. Te kierunki są reprezentowane przez ****wektory własne****.

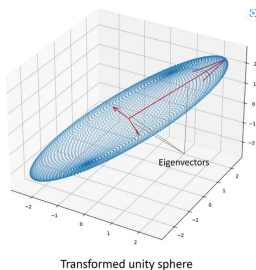
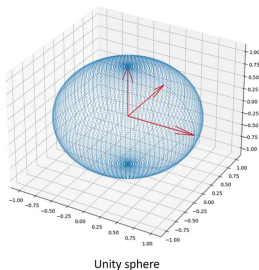
Co to są wektory własne?

- ▶ Wektory własne to kierunki, w których dane są najbardziej rozciągnięte, co pomaga je lepiej oddzielić.
- ▶ Wartości własne odpowiadają za "intensywność" tego rozciągania w danym kierunku — większa wartość oznacza silniejszą separację.

Dlaczego to ważne?

- ▶ Wybieramy te wektory, które mają największe wartości własne, ponieważ pozwalają one uzyskać jak najlepszą separację między klasami.

Obrazek przedstawiający przekształcenie danych



Obrazek przedstawia:

- ▶ Jak dane przekształcają się w przestrzeni, gdy używamy wektorów własnych.
- ▶ Wektory własne pokazują kierunki rozciągania danych, co pomaga w lepszej separacji klas.

Jak działają wektory własne?

W przestrzeni 3D możemy mieć więcej niż jeden wektor własny. W tym przypadku zazwyczaj wybieramy tylko te, które najlepiej rozdzielają klasy.

Jak to działa w praktyce?

- ▶ W przestrzeni 3D mamy trzy główne wektory, które wskazują kierunki o największej zmienności danych.
- ▶ W LDA, dla dwóch klas, zazwyczaj wystarcza tylko jeden wektor, aby efektywnie oddzielić klasy.
- ▶ Dla większej liczby klas możemy wybrać więcej wektorów, ale w podstawowych przypadkach wystarczy jeden.

Obrazek przedstawia:

- ▶ Jak dane przekształcają się w przestrzeni, gdy używamy wektorów własnych.
- ▶ Przekształcenie pozwala lepiej rozdzielić klasy.

Macierz rozrzutu między klasami S_B

- ▶ **Macierz rozrzutu między klasami S_B :** Mierzy, jak różnią się średnie poszczególnych klas w stosunku do globalnej średniej. Celem jest zmaksymalizowanie tej różnicy, aby klasy były jak najbardziej oddzielone.

Wzór na macierz rozrzutu między klasami:

$$S_B = \sum_{i=1}^k N_i (\mu_i - \mu)(\mu_i - \mu)^T$$

Gdzie:

- ▶ N_i – liczba próbek w klasie i ,
- ▶ μ_i – średnia klasy i ,
- ▶ μ – globalna średnia wszystkich próbek.

Macierz rozrzutu wewnątrz klas S_W

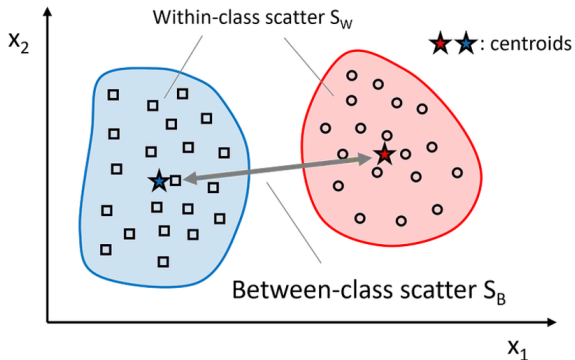
- ▶ **Macierz rozrzutu wewnątrz klas S_W :** Mierzy, jak rozproszone są punkty danych w obrębie każdej klasy. Celem jest minimalizacja tej zmienności, aby dane w obrębie każdej klasy były jak najbardziej jednorodne.

Wzór na macierz rozrzutu wewnątrz klas:

$$S_W = \sum_{i=1}^k \sum_{x_j \in C_i} (x_j - \mu_i)(x_j - \mu_i)^T$$

Gdzie:

- ▶ C_i – zbiór punktów należących do klasy i ,
- ▶ x_j – pojedyncza próbka w klasie i ,
- ▶ μ_i – średnia klasy i .



- ▶ Intuicyjnie rozproszenie wewnątrz klasy sprawdza, jak zwarta jest każda klasa.
- ▶ Rozproszenie między klasami bada, jak daleko od siebie znajdują się różne klasy.

Przykład zastosowania

Założmy, że mamy dane dotyczące roślin i chcemy je sklasyfikować na podstawie cech takich jak długość i szerokość liści.

- ▶ Wybieramy dwie cechy (np. długość i szerokość liści).
- ▶ Fisherowska dyskryminacja liniowa oblicza najlepszą linię separującą te dwie klasy.

Dzięki tej metodzie możemy łatwo oddzielić klasy roślin na podstawie dwóch prostych cech.

Zastosowanie w rozpoznawaniu twarzy

LDA jest także szeroko stosowane w rozpoznawaniu twarzy, gdzie cechy twarzy (np. odległości między oczami, szerokość nosa) służą do klasyfikacji osób.

- ▶ Twarze osób są reprezentowane jako wektory cech.
- ▶ LDA znajduje projekcję, która maksymalizuje różnice między twarzami różnych osób.

"Rozpoznawanie twarzy jest jednym z najczęściej stosowanych zastosowań LDA."

LDA może być również wykorzystywana w analizie tekstów. Na przykład w klasyfikacji e-maili na spam i nie-spam:

- ▶ Cechy: obecność słów, długość e-maila, liczba załączników.
- ▶ LDA identyfikuje najlepsze cechy, które pozwalają na skuteczną klasyfikację.

„Fisherowska dyskryminacja liniowa jest bardzo efektywna w zadaniach klasyfikacji tekstów.”

Przykład z danymi medycznymi

LDA jest także używane w medycynie, np. w klasyfikacji przypadków chorób:

- ▶ Zbieramy dane o pacjentach, np. wyniki badań krwi, ciśnienie.
- ▶ LDA pomaga oddzielić pacjentów zdrowych od chorych na podstawie cech medycznych (przykład w R).

Wzór na linię separującą

Jeśli mamy dane 2D, najlepsza linia separująca jest opisana przez wzór:

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$$

Gdzie:

- ▶ \mathbf{w} to wektor wag (prostopadły do linii),
- ▶ \mathbf{x} to dane (punkt na wykresie),
- ▶ b to przesunięcie (odległość od początku układu współrzędnych).

Zalety i wady korzystania z LDA

Zalety:

- ▶ Prosty i wydajny obliczeniowo algorytm.
- ▶ Może działać dobrze nawet przy dużej liczbie cech w porównaniu do liczby próbek treningowych.
- ▶ Potrafi uwzględnić multikolinearność (korelację między cechami) w danych.

Wady:

- ▶ Zakłada, że dane mają rozkład Gaussa, co nie zawsze jest prawdą.
- ▶ Zakłada, że macierze kowariancji różnych klas są równe, co nie musi być prawdą w przypadku niektórych zbiorów danych.
- ▶ Zakłada, że dane są liniowo rozdzielne, co nie musi być prawdą w przypadku niektórych zbiorów danych.
- ▶ Może nie działać dobrze w przestrzeniach cech o dużej liczbie wymiarów.

Fisherowska dyskryminacja liniowa jest prostą, ale potężną techniką klasyfikacji. Znajduje szerokie zastosowanie w różnych dziedzinach, takich jak medycyna, analiza twarzy czy analiza tekstów. Choć jest to technika liniowa, może być wystarczająca w wielu praktycznych zastosowaniach.

- ▶ Fisher, R. A. (1936). "The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems". *Annals of Eugenics*.
- ▶ Bishop, C. M. (2006). "Pattern Recognition and Machine Learning". *Springer*.
- ▶ James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2013). "An Introduction to Statistical Learning". *Springer*.
- ▶ Towards Data Science. (2020, August 10). Linear Discriminant Analysis (LDA). Towards Data Science. <https://towardsdatascience.com/linear-discriminant-analysis-lda-598d8e90f8b9>
- ▶ GeeksforGeeks. (n.d.). ML | Linear Discriminant Analysis. GeeksforGeeks. <https://www.geeksforgeeks.org/ml-linear-discriminant-analysis/4dcb39dfb8851756e08debd21516e8d797d8b50a>