Análise Discriminante Linear e Quadrática

Prof. Jefferson T. Oliva

Aprendizado de Máquina e Reconhecimento de Padrões (AM28CP)
Engenharia de Computação
Departamento Acadêmico de Informática (Dainf)
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR)
Campus Pato Branco

Sumário

- Análise Discriminante Linear e Quadrática
- Exemplo de Classificação
- Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear

Introdução

- A análise discriminante é um método estatístico de análise multivariada utilizado para identificar diferenças entre grupos
  - Relacionamento entre uma variável dependente (*e.g.* classe/alvo) e variáveis independentes
  - Obtenção da combinação linear de variáveis independentes com maior discriminação entre grupos
  - Introduzida por Fisher em 1936
  - Exemplos de métodos
    - Análise discriminante linear (LDA – *linear discriminant analysis*)
    - Análise discriminante quadrática (QDA – *quadratic discriminant analysis*)

Introdução

- LDA e QDA são derivados de modelos probabilísticos simples

- Probabilidades
  - $P(A)$: probabilidade de ocorrência do evento A
  - $p(x)$: função de densidade de probabilidade (pdf) para uma variável x
  - $p(X)$: pdf para um vetor de variáveis aleatórias X

- Probabilidades condicionais:
  - $P(A|B)$: probabilidade condicional de A dado B
  - $P(x|B)$ e $P(X|B)$

Análise Discriminante Linear e Quadrática

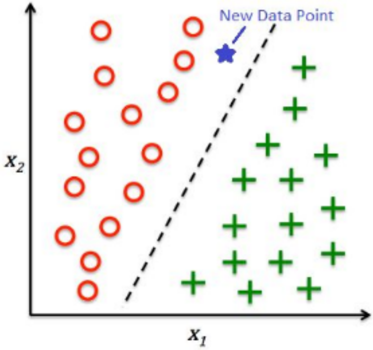
Análise Discriminante Linear e Quadrática

- LDA é uma técnica de aprendizado de máquina supervisionado que tem o propósito de separar grupos ou classes de dados com base em combinações lineares de características
  - Generalização do discriminante linear de Fisher
- Dadas características (atributos) de um grande conjunto de treinamento para a classe ω_i
- Cada um desses padrões de treinamento tem um valor x diferente para as características
  - Probabilidade condicional da classe: $p(x|\omega_i)$

- Com que frequência os exemplos de classe ω_i apresentam a característica x?

Outlook			Temperature		Humidity		Windy			Play	
	Yes	*No*	*Yes*	*No*	*Yes*	*No*		*Yes*	*No*	*Yes*	*No*
Sunny	2	3	64, 68,	65, 71,	65, 70,	70, 85,	False	6	2	9	5
Overcast	4	0	69, 70,	72, 80,	70, 75,	90, 91,	True	3	3		
Rainy	3	2	72, ...	85, ...	80, ...	95, ...					
Sunny	2/9	3/5	μ =73	μ =75	μ =79	μ =86	False	6/9	2/5	9/14	5/14
Overcast	4/9	0/5	σ =6.2	σ =7.9	σ =10.2	σ =9.7	True	3/9	3/5		
Rainy	3/9	2/5									

- Classificação
  - Dado um vetor de características X, qual a probabilidade do mesmo pertencer a uma classe ω_i?
    $P(\omega_i, X)$



Análise Discriminante Linear e Quadrática

- Durante o treinamento, é dada $p(X|\omega_i)$ (*a priori*), as o que é desejável seria $p(\omega_i|X)$ (*a posteriori*)

- Teorema de Bayes
  - Forma geralmente apresentada

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}$$

  - Contexto deste material

$$P(\omega_i|X) = \frac{P(X|\omega_i)P(\omega_i)}{P(X)}$$

$$P(\omega_i|X) = \frac{P(X|\omega_i)P(\omega_i)}{P(X)}$$

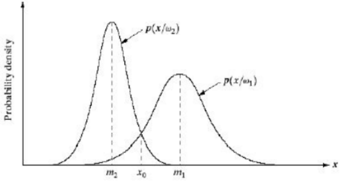
- $P(X|\omega_i)$: probabilidade ou verossimilhança condicionada à classe
- $P(\omega_i)$: probabilidade *a priori*
- $P(X)$: evidência (geralmente ignorada)
- $P(\omega_i|X)$: probabilidade *posteriori*

Análise Discriminante Linear e Quadrática

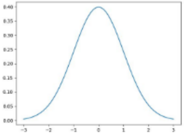
- Estrutura de classificadores baseados em análise discriminante (linear e quadrática)
  - Treinamento: estimar $p(X|\omega_i)$ de cada classe
  - Conhecimento *a priori*: estimar $p(\omega_i)$ da população em geral
- Classificação
  - Extração de características (X) para o novo padrão
  - Calcular probabilidades *a posteriori* $P(\omega_i|X)$ para cada classe
  - Atribuir uma classe ao novo padrão para o que obteve maior valor de $P(\omega_i|X)$

- Suposição de de normalidade
  - Para as análises discriminantes linear e quadrática, assume-se que $p(x|\omega_i)$ tenha sido modelada como uma distribuição Gaussiana multivariada
    - Probabilidades condicionais de classe normalmente distribuídas (1D)

$$p(x|\omega_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_i)^2/\sigma_i^2}$$



- De probabilidades para discriminantes: caso 1-D
  - Desejável maximizar: $P(\omega_i|X) = \frac{p(X|\omega_i)P(\omega_i)}{p(x)}$
  - O mesmo que maximizar: $p(X|\omega_i)P(\omega_i)$
  - Que para uma distribuição normal é: $\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i}} e^{-\frac{1}{2}(X-\mu_i)^2/\sigma_i^2} P(\omega_i)$
  - Aplicação do logaritmo na base 2:
    $\log_2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \log_2 \sigma_i - \frac{1}{2}(X-\mu_i)^2/\sigma_i^2 + \log_2 P(\omega_i)$
  - Remoção de constantes: $\log_2 P(\omega_i) - \log_2 \sigma_i - \frac{1}{2}(X-\mu_i)^2/\sigma_i^2$



$$p(x|\omega_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_i)^2/\sigma_i^2}$$

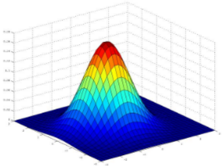
- De probabilidades para discriminantes: múltiplas características
  - O termo-chave para uma distribuição normal 1-D é a distância ao quadrado da média em desvios-padrão: $(X - \mu)^2/\sigma_i^2$
  - A modelagem acima pode ser estendida para múltiplas características por meio da normalização da distância de cada atributo pelo respectivo desvio-padrão
    - Em seguida, utilizar a classificação pela distância mínima
  - Essa normalização é também denominada como naïve Bayes por ignorar relações entre características

Análise Discriminante Linear e Quadrática

- Distribuição Gaussiana multivariada

$$p(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^d \frac{1}{|\mathbf{C}|^{1/2}} \, e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m})^T\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m})}$$

$$= (2\pi)^{-d/2}\,|\mathbf{C}|^{-1/2} \; e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m})^T\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m})}$$

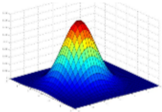


- Para a classificação multiclasse, cada classe ω_i tem um vetor de médias (m_i) e uma matriz de covariância (C_i)
  - Dessa forma, as probabilidades condicionais de classe são das pela equação abaixo:

$$p(X|\omega_i) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}}|C_i|^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}(X-m_i)^T C_i^{-1}(X-m_i)}$$

Análise Discriminante Linear e Quadrática

- De probabilidades para discriminantes: caso N-D
  - Desejável maximizar: $P(\omega_i|X) = \frac{p(X|\omega_i)P(\omega_i)}{p(x)}$
  - O mesmo que maximizar: $p(X|\omega_i)P(\omega_i)$
  - O mesmo que maximizar: $\log_2 p(X|\omega_i) + \log_2 P(\omega_i)$
  - Que para uma distribuição normal é:
    $-\frac{d}{2}\log_2 2\pi - \frac{1}{2}\log_2 |C_i|$
    $-\frac{1}{2}(X-m_i)^T C_i^{-1}(X-m_i) + \log_2 P(\omega_i)$
  - Maximize: $\log_2 P(\omega_i) - \frac{1}{2}\log_2 |C_i| - \frac{1}{2}(X-m_i)^T C_i^{-1}(X-m_i)$



$$p(\mathbf{x}|\omega_i) = (2\pi)^{-d/2}|\mathbf{C}_i|^{-1/2} \; e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T\mathbf{C}_i^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)}$$

- Distância de Mahalanobis
  - A expressão $(X - m_i)^T C_i^{-1}(x - m_i)$ pode ser também definido como $||x - m_i||^2_{C^{-1}}$
    - Por mais que pareça uma distância quadrática (como a Euclidiana), a inversa da matriz de covariância C^{-1} atua como uma métrica
    - O reconhecimento de padrões usando distribuições normais multivariadas é simplesmente um classificador de distância mínima (de Mahalonobis)!
    - Temos 3 casos de matriz de covariância a serem considerados

- Caso 1: matriz de identidade (*naïve* Bayes)
  - Suponha que a matriz de covariância para todas as classes seja uma matriz identidade: $C_i = I$ ou $C_i = \sigma^2 I$
  - Se os dados estão normalizados por meio do método z-score e não estão correlacionados, a matriz de correlação é a matriz identidade com desvio padrão unitário unitário

$$g_i(X) = -\frac{1}{2}(X - m_i)^T(X - m_i) + \log_2 P(\omega_i)$$

  - Supondo que todas as classes sejam igualmente prováveis *a priori*: $g_i(X) = -\frac{1}{2}(X - m_i)^T(X - m_i)$
  - Ao ignorarmos a constante $\frac{1}{2}$, temos: $g_i(X) = -(X - m_i)^T(X - m_i)$

- Caso 2: mesma matriz de covariância (análise discriminante linear)
  - Caso cada classe possua a mesma matriz de covariância: $g_i(X) = -\frac{1}{2}(X - m_i)^T C(X - m_i) + \log_2 P(\omega_i)$
  - Os loci de probabilidade constante são hiper-elipses orientados com os autovetores de C
    - Direções dos autovetores dos eixos da elipse
    - variância dos autovalores (comprimento do eixo ao quadrado) na direção do eixo
  - Os limites de decisão ainda são hiperplanos, embora possam não ser mais normais às linhas entre as respectivas médias de classe

- Caso 3: diferentes matrizes de covariância para cada classe (análise discriminante quadrática)
  - Suponha que cada classe tenha sua própria matriz de covariância arbitrária (o caso mais geral): $C_i \neq C_j$

$$g_i(X) = \log_2 P(\omega_i) - \frac{1}{2}\log_2 |C_i| - \frac{1}{2}(X - m_i)^T C_i^{-1}(X - m_i)$$

  - Os loci de probabilidade constante para cada classe são orientados por hiper-elipses com os autovetores de C_i para essa classe

  - Os limites de decisão são quadráticos, especificamente, hiper-elipses ou hiper-hiperboloides.

Exemplo de Classificação

Exemplo de Classificação

- Treinamento: determinar médias e matriz de covariâncias

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 2.95 & 6.63 \\ 2.53 & 7.79 \\ 3.57 & 5.65 \\ 3.16 & 5.47 \\ 2.58 & 4.46 \\ 2.16 & 6.22 \\ 3.27 & 3.52 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 0.2403 & -0.2694 \\ -0.2694 & 1.9742 \end{pmatrix}$$

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} 4.9129 & 0.6705 \\ 0.6705 & 0.5980 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 2.88 & 5.6771 \end{bmatrix} \qquad g = 2$$

Exemplo de Classificação

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^T \mathbf{C}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i) + \log P(\omega_i)$$

Classificação: $\mathbf{x} = [3 \quad 7]$ $\qquad P(i \mid \mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) - 2\ln(P(i))$

- Classe 1: $P(1 \mid \mathbf{x}) = ([3 \quad 7] - [3.05 \quad 6.38])^T \begin{pmatrix} 4.9129 & 0.6705 \\ 0.6705 & 0.5980 \end{pmatrix} ([3 \quad 7] - [3.05 \quad 6.38]) + 1.1192$

  $\boldsymbol{\mu}_1 = [3.05 \quad 6.38]$ $\qquad P(1) = 4/7$

- Classe2: $P(2 \mid \mathbf{x}) = ([3 \quad 7] - [2.67 \quad 4.73])^T \begin{pmatrix} 4.9129 & 0.6705 \\ 0.6705 & 0.5980 \end{pmatrix} ([3 \quad 7] - [2.67 \quad 4.73]) + 1.6946$

  $P(2) = 3/7$

  $\boldsymbol{\mu}_2 = [2.67 \quad 4.73]$

$$g_i(\mathbf{x}) = \log P(\omega_i) - \frac{1}{2}\log|\mathbf{C}_i| - \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T\mathbf{C}_i^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)$$

$$\mathbf{X}_{classe1} = \begin{bmatrix} 2.95 & 6.63 \\ 2.53 & 7.79 \\ 3.57 & 5.65 \\ 3.16 & 5.47 \end{bmatrix} \qquad C_1 = \begin{pmatrix} 0.1876 & -0.4127 \\ -0.4127 & 1.1372 \end{pmatrix} \qquad C_1^{-1} = \begin{pmatrix} 26.3961 & 9.5785 \\ 9.5785 & 4.3552 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \begin{bmatrix} 3.05 & 6.38 \end{bmatrix} \qquad P(1) = 4/7$$

$$\mathbf{X}_{classe2} = \begin{bmatrix} 2.58 & 4.46 \\ 2.16 & 6.22 \\ 3.27 & 3.52 \end{bmatrix} \qquad C_2 = \begin{pmatrix} 0.3141 & -0.7308 \\ -0.7308 & 1.8785 \end{pmatrix} \qquad C_2^{-1} = \begin{pmatrix} 33.5580 & 13.0550 \\ 13.0550 & 5.6111 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\mu}_2 = \begin{bmatrix} 2.67 & 4.73 \end{bmatrix} \qquad P(2) = 3/7$$

Exemplo de Classificação

- QDA: P(1|**x**)=-0.8791; P(2|**x**)=50.9385
  - x é da **classe 2**

$$g_i(\mathbf{x}) = \log P(\omega_i) - \frac{1}{2}\log|\mathbf{C}_i| - \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T\mathbf{C}_i^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)$$

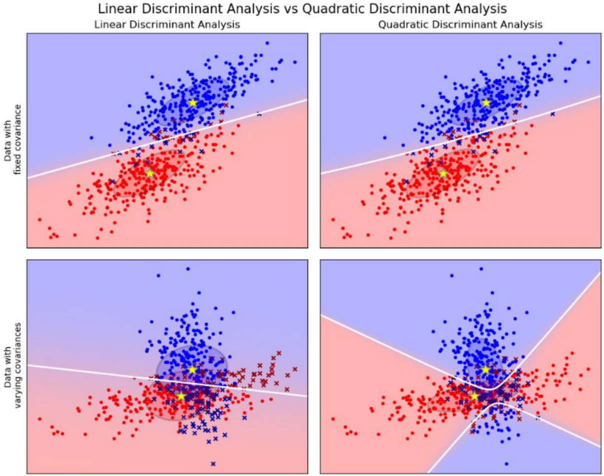
- Fisher: P(1|**x**)=1.3198; P(2|**x**)=6.3157
  - x é da **classe 2**

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T\mathbf{C}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i) + \log P(\omega_i)$$

- Bayes: P(1|**x**)=1.5061; P(2|**x**)=6.9564
  - x é da **classe 2**

$$g_i(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^T(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)$$

Exemplo de Classificação



Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear

Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear

- A redução de dimensionalidade tem a finalidade de facilitar a visualização e o processamento de conjuntos de exemplos com várias características (multidimensional)

- A LDA busca maximizar a separabilidade entre as classes

- Passo-a-passo para a redução de dimensionalidade usando LDA:
  1. Cálculo das médias para cada classe
  2. Obtenção da matriz de dispersão intra-classe
  3. Obtenção da matriz de dispersão entre-classe
  4. Geração de autovalores e autovetores
  5. Seleção dos autovetores com maiores autovalores
  6. Projeção dos dados em novo espaço

Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear

- Passo 1: cálculo das médias para cada classe
  - Para cada classe ω_i, obter o vetor de médias: $m_i = \frac{1}{N_i} \sum_{x \in \omega_i} x$
  - Cálculo da média global: $m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$
- Passo 2: obtenção da matriz de dispersão intra-classe (S_W)
  - Determinar o quanto os dados estão dispersos dentro de cada classe, onde t é o número total de classes:

$$S_W = \sum_{i=1}^{t} \sum_{x \in \omega_i} (x - m_i)(x - m_i)^T$$

Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear

- Passo 3: obtenção da matriz de dispersão entre-classe (S_B)
  - Determinação de quanto as médias das classes diferem da média global

$$S_B = \sum_{i=1}^{t} N_i (m_i - m)(m_i - m)^T$$

- Passo 4: geração de autovalores e autovetores
  - Para a obtenção da matriz de projeção W, maximizar a razão:

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

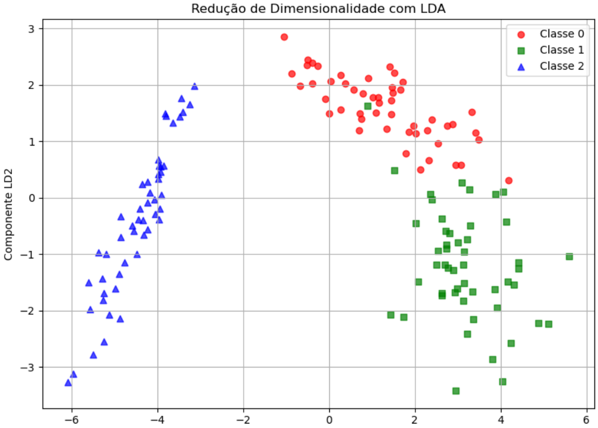
  - Restrição de ortogonalidade: $W^T W = I$
  - Problema de autovalores generalizados, resultando em $\frac{S_B}{S_W} W_{max} = \lambda W_{max}$, onde:
    - W são autovetores
    - λ são autovalores

Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear

- Passo 5: seleção dos autovetores com maiores autovalores
  - Seleção dos k maiores autovalores, onde $k < d$
  - A matriz W_k terá dimensão $d \times k$
- Passo 6: projeção dos dados em novo espaço

$$X_{reduzido} = X.W_k$$

Redução de Dimensionalidade Utilizando Análise Discriminante Linear



Considerações Finais

- Atributos
  - Numéricos e simétricos
  - Suportam probabilidades *a priori*
  - Assume que atributos são igualmente importantes
  - Seleção de atributos
- Capacidade de classificar padrões com valores ausentes
- Hipótese de dependência entre atributos
- Pode ter melhor desempenho em comparação com o Naïve Bayes, especialmente caso sejam utilizados atributos correlacionados
- Complexidade computacional entre $O(n)$ e $O(n^3)$

BISHOP, C. M.
Pattern Recognition and Machine Learning.
Springer, 2006.

CASANOVA, D.
LDA and QDA. Aprendizado de Máquina.
Slides. Engenharia de Computação. Dainf/UTFPR, 2020.

DUDA R., Hart P., STORK D.
Pattern Classification.
Willey Interscience, 2002.

MENOTTI D.
Classificação. Aprendizado de Máquinas.
Slides. Especialização em Engenharia Industrial 4.0. UFPR, 2020.

Referências II

MITCHELL T.
Machine Learning.
WCB McGraw-Hill, 1997.

RASCHKA, S.; MIRJALILI, V.
Python Machine Learning.
Packt, 2017.