

PEL208 — Relatório Atividade 3

Implementação do *Linear Discriminant Analysis* (LDA)

Miller Horvath

Mestrando em Engenharia Elétrica (Processamento de Sinais e Imagens)

Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, SP, Brasil

7 de novembro de 2018

1 Introdução

Este trabalho apresenta o relatório do desenvolvimento da terceira atividade avaliativa referente à disciplina PEL208, intitulada Tópicos Especiais em Aprendizagem, apresentada pelo Prof. Dr. Reinaldo Augusto da Costa Bianchi.

O objetivo desta atividade é implementar o *Linear Discriminant Analysis* (LDA), conforme abordado em sala de aula. Para isso, a linguagem de programação *C++* foi adotada. A atividade permite a utilização de bibliotecas que proveem operações de álgebra linear, especialmente para calcular os autovalores e autovetores de uma matriz.

2 Conceitos Fundamentais

2.1 Análise de Componentes Principais (PCA)

A técnica de PCA, primeiramente formulada em (PEARSON, 1901) e posteriormente desenvolvida para a forma como conhecemos hoje em (HOTELLING, 1933), aplica uma transformação ortogonal em um conjunto de dados, no qual as variáveis podem ou não ser correlacionadas, convertendo-o em um novo conjunto de dados representado por variáveis linearmente independentes, chamadas de componentes principais (CP).

Desta forma, cada CP é composta por uma combinação linear das variáveis do conjunto de dados original (RINGNÉR, 2008). A primeira CP é calculada de modo a representar a maior variância possível dos dados originais, a segunda CP deve ser ortogonal a primeira, e as demais CPs são calculadas de maneira similar (ABDI; WILLIAMS, 2010). O método tradicional para determinar as CPs calcula os autovetores (a) e autovalores (λ) da matriz de covariância (S) do conjunto de dados, através da Equação 1 presente em (JOLLIFFE; CADIMA, 2016); sendo que a quantidade de CP para um conjunto

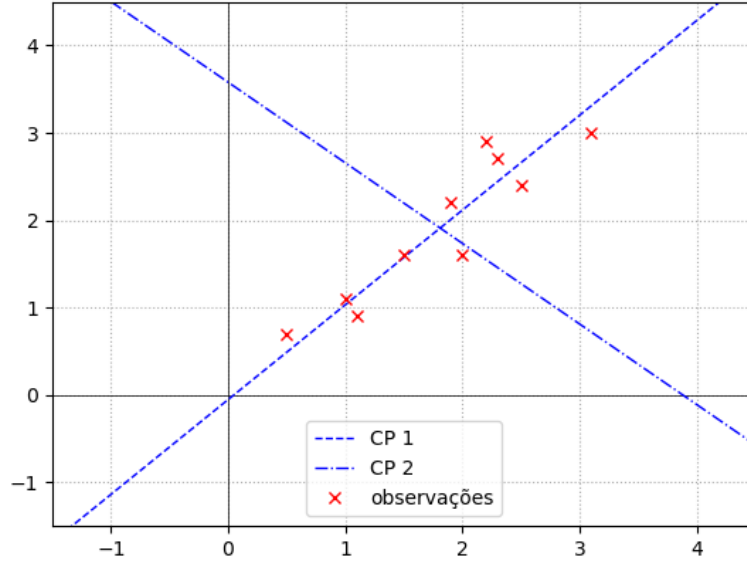


Figura 1 – Representação gráfica do cálculo das componentes principais de um conjunto de dados bidimensional.

de dados é sempre igual ao número de variáveis contidas no mesmo e apenas matrizes quadradas possuem autovetores, mas nem toda a matriz quadrada possui autovetores. A Figura 1 ilustra o cálculo do PCA para um conjunto de dados bidimensional.

$$Sa - \lambda a = 0 \iff Sa = \lambda a \quad (1)$$

Uma das principais aplicações do PCA é a redução de dimensionalidade, onde o conjunto de dados passa a ser representado pelas CPs mais importantes, ou seja, aquelas que representam maior variabilidade dos dados, dado que a importância de uma CP é determinada pelo seu autovalor correspondente. Quando todas as CPs são utilizadas, é possível reconstruir os dados originais perfeitamente. Por outro lado, ainda é possível reconstruir os dados utilizando um número limitado de CPs, porém, quanto menor é a quantidade de CPs utilizadas, maior é perda de informações. A Figura 2 mostra o conjunto de dados utilizado na Figura 1 reconstruídos utilizando apenas a CP de maior importância.

Ademais, o método de decomposição em valores singulares (SVD) é bastante relacionado com o PCA, podendo-se utilizar o SVD como uma forma generalizada para solução do PCA (SHLENS, 2014).

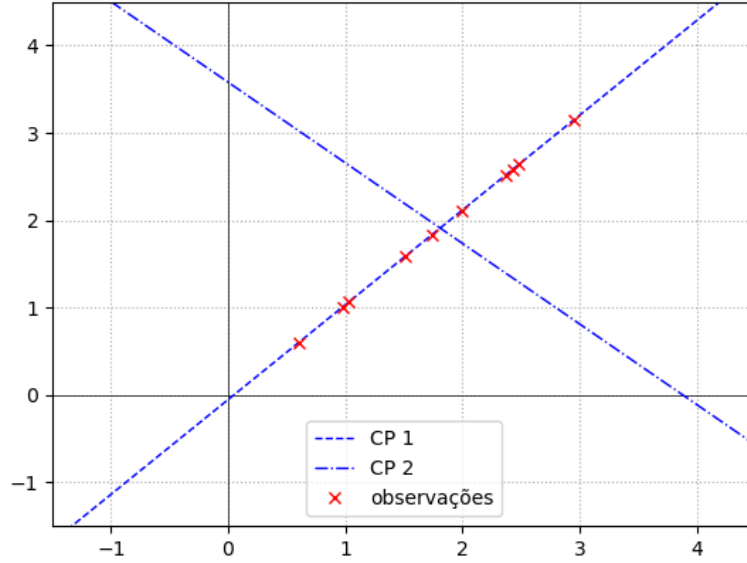


Figura 2 – Representação gráfica da reconstrução dos dados utilizando apenas uma componente principal.

2.2 Linear Discriminant Analysis (LDA)

A técnica de LDA, primeiramente proposta por Ronald A. Fisher em 1936 (COHEN et al., 2003), calcula uma combinação linear das variáveis de um conjunto de dados anotados (separados em grupos ou classes), de modo a discriminar os grupos de dados. De um modo geral, o LDA busca maximizar a separação entre as classes e minimizar a variabilidade entre os dados de uma mesma classe.

$$\bar{x}_i = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} x_{i,j} \quad (2)$$

$$S_i = \frac{1}{(N_i - 1)} \sum_{j=1}^{N_i} (x_{i,j} - \bar{x}_i)(x_{i,j} - \bar{x}_i)^T \quad (3)$$

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N_i} N_i x_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^g \sum_{j=1}^{N_i} x_{i,j} \quad (4)$$

Sendo N_i o número de observações contidas na classe i , g quantidade de classes, $x_{i,j}$ a representação vetorial da observação j pertencente à classe i ; o vetor da média de cada classe (\bar{x}_i) é dada pela Equação 2, a covariância de cada classe (S_i) é dada pela

Equação 3 e o vetor da média global do conjunto de dados é dado pela Equação 4.

$$S_b = \sum_{i=1}^g N_i (\bar{x}_i - \bar{x})(\bar{x}_i - \bar{x})^T \quad (5)$$

$$S_w = \sum_{i=1}^g (N_i - 1) S_i = \sum_{i=1}^g \sum_{j=1}^{N_i} (x_{i,j} - \bar{x}_i)(x_{i,j} - \bar{x}_i)^T \quad (6)$$

Sendo assim, a matriz de dispersão entre as classes é dada pela Equação 5 e a matriz de dispersão interna da classe é dada pela Equação 6.

$$(S_w^{-1} S_b) a - \lambda a = 0 \iff (S_w^{-1} S_b) a = \lambda a \quad (7)$$

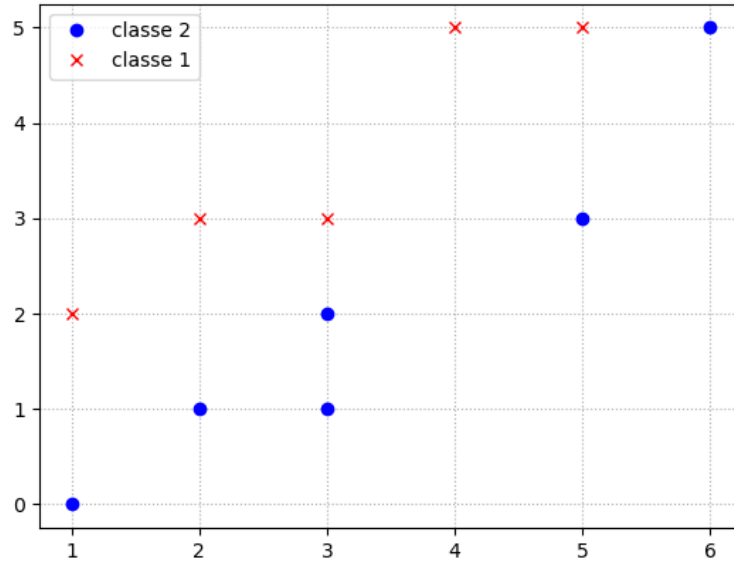
Similarmente ao PCA, apresentado na Seção 2.1, o cálculo dos autovalores e autovetores é um método tradicional para determinar as componentes discriminantes de um conjunto de dados. Através de uma modificação da Equação 1, O LDA calcula os autovetores (a) e autovalores (λ) da matriz de dispersão entre classes (S_b) sobre a matriz de dispersão interna da classe (S_w), através da Equação 7. Por fim, o LDA utiliza até $g - 1$ autovetores que possuem autovalores diferentes de 0 (zero) para aplicar transformação ortogonal, redução de dimensionalidade ou classificação num conjunto de dados.

A diferença básica entre o PCA e o LDA pode ser observada na Figura 3. Dado um conjunto de dados anotados X , ilustrado na Figura 3.a, se projetarmos os dados em X utilizando apenas o autovetor mais relevante resultantes do PCA e do LDA, o projeção resultante é bastante diferente. A transformação resultante do PCA, ilustrada na Figura 3.b, projeta os dados na reta que representa a maior variância dos dados em X , sendo que os dados de classes diferentes se misturam. Por outro lado, a transformação resultante do LDA, ilustrada na Figura 3.c, projeta os dados na reta que mais discrimina as classes dos dados em X , evidenciando a separação entre elementos de classes diferentes.

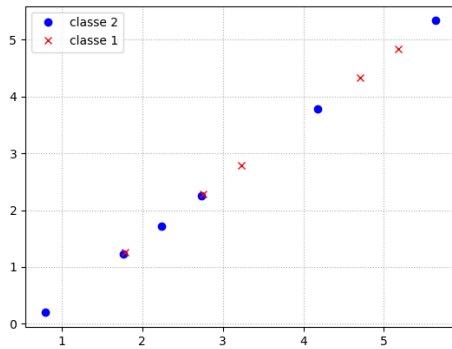
3 Trabalhos Relacionados

O LDA possui diversas aplicações, tais como redução de dimensionalidade, classificação e análise de importância de variáveis (XANTHOPOULOS; PARDALOS; TRAFALIS, 2013). Nesta seção, são apresentados alguns trabalhos acadêmicos recentes que utilizam LDA.

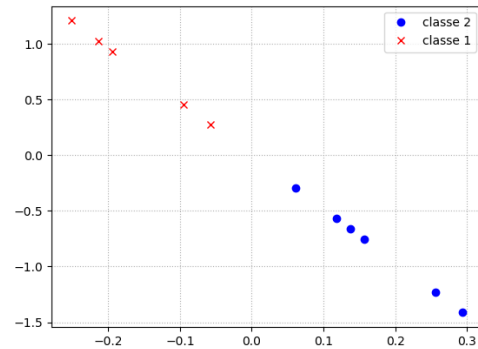
Em (JIN et al., 2014), uma nova técnica baseada no LDA, chamada *trace ratio linear discriminant analysis* (TR-LDA). O TR-LDA, focado especificamente em redução de dimensionalidade, visa lidar com conjunto de dados que não respeitam uma distribuição Gaussiana, característica inerente de dados reais em diagnóstico de falhas.



(a)



(b)



(c)

Figura 3 – Gráficos utilizados para ilustrar a diferença entre o PCA e o LDA. Sendo (a) a representação original de um conjunto de dados anotados, (b) a resultante da aplicação do PCA em (a) e (c) a resultante da aplicação do LDA em (a).

Em (YAN et al., 2014), o LDA é utilizado para otimizar algoritmos descritores de característica de imagens para melhorar a performance dos mesmos quando lidam com imagens que apresentam alta variação de perspectiva.

Em (WU; SHEN; HENGEL, 2017), é proposta uma arquitetura de redes neurais profundas para identificação de faces que utiliza uma variação dos cálculos utilizadas no LDA, de modo a forçar a rede a produzir uma distribuição de características que discrimina observações de classes distintas.

Também no domínio de faces, o trabalho em (SIDDIQI et al., 2015) propõe

a utilização de uma variação do LDA, chamada *stepwise linear discriminant analysis* (SWLDA), para reconhecimento de expressões faciais.

4 Metodologia

A implementação da atividade foi desenvolvida na linguagem *C++*, utilizando o software Visual Studio 2017. Para apoiar os cálculos algébricos, foram utilizados os seguintes recursos da biblioteca *Eigen* ([GUENNEBAUD; JACOB et al., 2010](#)):

- Classe *MatrixXd*, sendo uma estrutura de dados para matrizes multidimensionais compostas por valores do tipo *double*;
- Classe *VectorXd*, sendo uma estrutura de dados para vetores multidimensionais compostos por valores do tipo *double*;
- Sobrecarga de operadores para soma, subtração; divisão e multiplicação de vetores e matrizes;
- Métodos de transposição e inversão de matrizes;
- Classe *EigenSolver*, para calcular os autovetores e autovalores de uma matrix.

Foi desenvolvida uma classe chamada LDA, que recebe a matriz de dados X e um vetor com as respectivas classes dos dados em X como parâmetro de sua função construtora para que LDA seja aplicado em X . Após o cálculo do LDA, a classe armazena os seguintes atributos privados:

- Dados da matriz X ;
- Os autovalores de X (ordenados de forma decrescente);
- Os autovetores de X (ordenados de forma decrescente em relação aos seus respectivos autovalores);
- A importância de cada componente discriminante de X (que são os autovalores normalizados);
- A média global dos dados em X ;
- As médias internas de cada classe pertencentes X ;
- A matriz de dispersão entre classes em X ;
- A matriz de dispersão interna entre elementos de uma mesma classe em X ;

Além disso, a classe também oferece as seguintes funções:

- As funções *getters* para acessar os atributos privados;
- Função *transform* — recebe como parâmetro um valor inteiro c e aplica uma redução de dimensionalidade em X , retornando uma nova matriz com c variáveis;
- Função *rebuild* — recebe como parâmetro uma matriz B , resultante da função *transform*, e retorna uma matriz com a quantidade de variáveis originais de X reconstruída a partir dos dados em B .

5 Experimentos

Para testar e analisar a implementação desenvolvida, foram utilizadas uma base de dados de classificação, que será descrita na sequência. Foi utilizado o PCA, descrito na Seção 2.1, para encontrar as suas componentes principais e o LDA, descrito na Seção 2.2, para encontrar as componentes discriminantes. Para comparar as técnicas, foi aplicada a redução de dimensionalidade de quatro para uma e de quatro para duas dimensões. Por fim, ambas as técnicas são combinadas, aplicando o PCA para reduzir a dimensionalidade de quatro para três, e, em seguida, a transformação dos dados através do LDA para representar os dados em uma e duas dimensões.

5.1 Bases de Dados

5.1.1 Iris Data Set

Está é uma das bases de dados mais tradicionais em classificação. Esta base possui informações sobre três diferentes classes de flores, tendo um total de 150 observações, sendo 50 de cada classe, e 5 características, que são:

- Comprimento da sépala em centímetros;
- Largura da sépala em centímetros;
- Comprimento da pétala em centímetros;
- Largura da pétala em centímetros;
- Classes: *Iris Setosa*, *Iris Versicolour* e *Iris Virginica*.

6 Resultados

Nesta seção, são apresentados os gráficos obtidos através do desenvolvimento experimental descrito na Seção 5.

6.1 Iris Data Set

As Figuras 4 e 5 apresentam, as resultantes da aplicação do PCA e do LDA para redução de dimensionalidade dos dados da base *Iris Data Set* para duas dimensões e uma dimensão respectivamente. Sendo as Figuras 4.a e 5.a equivalentes à aplicação do PCA e as Figuras 4.b e 5.b equivalentes a aplicação do LDA.

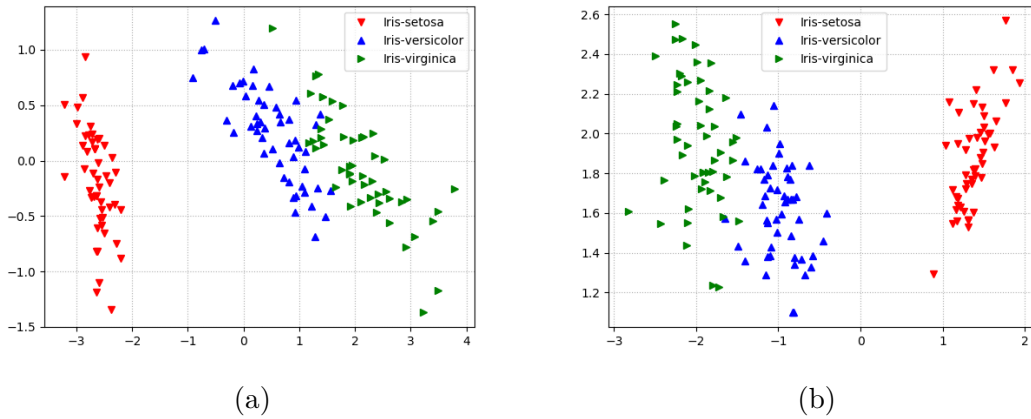


Figura 4 – Comparação da redução de dimensionalidade dos dados da *Iris Data Set*, vide Seção 5.1.1, para duas dimensões através do PCA (a) e do LDA (b).

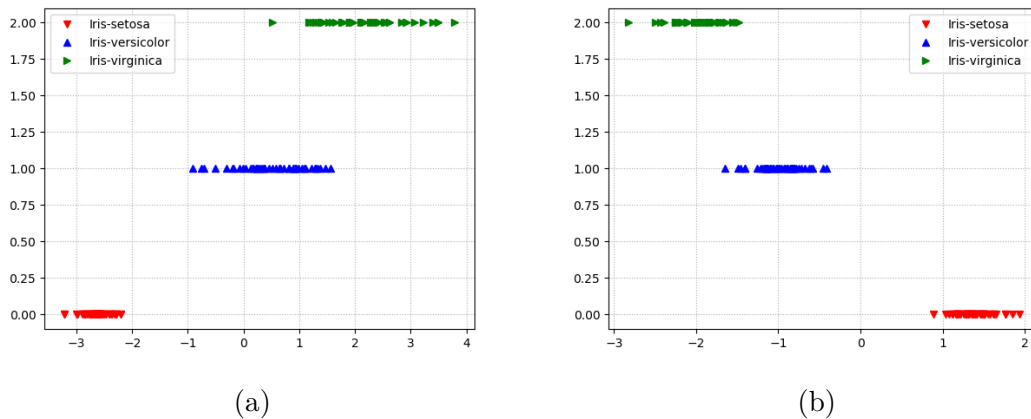


Figura 5 – Comparação da redução de dimensionalidade dos dados da *Iris Data Set*, vide Seção 5.1.1, para uma dimensão através do PCA (a) e do LDA (b).

A primeira evidência que mostra que, apesar de ambas as técnicas poderem executar redução de dimensionalidade, elas diferem em seu objetivo é o fato das observações nas Figuras 4.a e 4.b terem distribuições de dados bem diferentes.

No âmbito de classificação de dados, os dados das classes *Iris-versicolour* e *Iris-virginica* possuem alguns elementos com características parecidas. Por outro lado, os dados da classe *Iris-setosa* não possui intersecção com as demais classes. A Figura 5.a mostra que o PCA não é ideal para classificação, já que muitos elementos de classes distintas

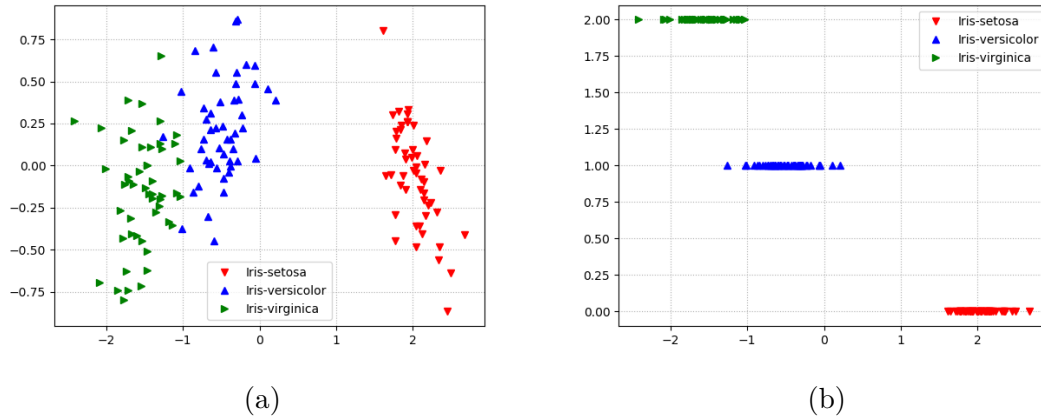


Figura 6 – Combinação do PCA e do LDA, conforme descrito na Seção 5, reduzindo a dimensionalidade dos dados da base *Iris Data Set*, vide Seção 5.1.1, para duas dimensões (a) e uma dimensão (b).

se interseccionam no intervalo entre $x = 1$ e $x = 2$, causando uma maior taxa de erro de classificação por terem muitos elementos no limite da divisão entre as classes. Em contrapartida, apesar de também haver intersecção entre classes no intervalo entre $x = -2$ e $x = -1$ para o LDA, pode-se observar na Figura 5.b que a quantidade de intersecção entre elementos no limite da divisão entre classes é bem menor, diminuindo a taxa de erros de classificação.

No âmbito de regressão, pode-se observar na resultantes do LDA (Figura 4.b), que os dados de mesma classe são bem mais dispersos entre si, quando comparados com a resultante do PCA (Figura 4.a). Sugerindo que o PCA tende a ser mais adequado para problemas de regressão, já que a maior dispersão dos dados resultantes do LDA resultaria em maior acumulo de resíduos entre os dados e a resultante da regressão.

Por fim, a combinação de ambas as técnicas, conforme descrito na Seção 5, resulta numa quantidade ainda menor de observações no limite da divisão entre classes, quando comparado com a aplicação individual dos métodos, como pode ser observado na Figura 6, reduzindo ainda mais a quantidade de erros de classificação.

7 Conclusão

Este trabalho visa relatar a implementação d LDA, utilizando *C++* como linguagem de programação, como tarefa do curso PEL208 do programa de pós-graduação em engenharia elétrica do Centro Universitário FEI. O fato dos resultados, apresentados na Seção 6, serem condizentes com os apresentados em aula sugere que a implementação foi adequada.

O LDA é uma técnica que aplica uma transformação ortogonal em um conjunto de dados anotado de modo a identificar as componentes que mais discriminam dados de

classes diferentes. Este método é frequentemente utilizado para aplicar uma redução de dimensionalidade e classificação de dados.

Comparando o LDA com o PCA, o LDA mostrou-se mais eficaz para tarefas de classificação de dados e o PCA mostrou-se mais adequado para aplicar transformações nos dados para tarefas de regressão. Por fim, a combinação de ambas as técnicas para classificação apresentou melhores do que as mesmas quando aplicadas individualmente.

Referências

ABDI, H.; WILLIAMS, L. J. Principal component analysis. *Wiley interdisciplinary reviews: computational statistics*, Wiley Online Library, v. 2, n. 4, p. 433–459, 2010. Citado na página 1.

COHEN, J. et al. *Applied multiple regression/correlation analysis for the behavioral sciences*. [S.l.]: Mahwah, NJ: erlbaum (3rd ed.), 2003. Citado na página 3.

GUENNEBAUD, G.; JACOB, B. et al. *Eigen v3*. 2010. [Http://eigen.tuxfamily.org](http://eigen.tuxfamily.org). Citado na página 6.

HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *Journal of educational psychology*, Warwick & York, v. 24, n. 6, p. 417, 1933. Citado na página 1.

JIN, X. et al. Motor bearing fault diagnosis using trace ratio linear discriminant analysis. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, IEEE, v. 61, n. 5, p. 2441–2451, 2014. Citado na página 4.

JOLLIFFE, I. T.; CADIMA, J. Principal component analysis: a review and recent developments. *Phil. Trans. R. Soc. A*, The Royal Society, v. 374, n. 2065, p. 20150202, 2016. Citado na página 1.

PEARSON, K. Liii. on lines and planes of closest fit to systems of points in space. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Taylor & Francis, v. 2, n. 11, p. 559–572, 1901. Citado na página 1.

RINGNÉR, M. What is principal component analysis? *Nature biotechnology*, Nature Publishing Group, v. 26, n. 3, p. 303, 2008. Citado na página 1.

SHLENS, J. A tutorial on principal component analysis. *arXiv preprint arXiv:1404.1100*, 2014. Citado na página 2.

SIDDIQI, M. H. et al. Human facial expression recognition using stepwise linear discriminant analysis and hidden conditional random fields. *IEEE Transactions on Image Processing*, IEEE, v. 24, n. 4, p. 1386–1398, 2015. Citado na página 5.

WU, L.; SHEN, C.; HENGEL, A. van den. Deep linear discriminant analysis on fisher networks: A hybrid architecture for person re-identification. *Pattern Recognition*, Elsevier, v. 65, p. 238–250, 2017. Citado na página 5.

XANTHOPOULOS, P.; PARDALOS, P. M.; TRAFALIS, T. B. Linear discriminant analysis. In: *Robust data mining*. [S.l.]: Springer, 2013. p. 27–33. Citado na página [4](#).

YAN, Y. et al. Multitask linear discriminant analysis for view invariant action recognition. *IEEE Transactions on Image Processing*, IEEE, v. 23, n. 12, p. 5599–5611, 2014. Citado na página [5](#).