

**Mestrado em Inteligência Artificial e
Sistemas Inteligentes**

Base de Dados e Programação

“Classificador de Mahalanobis”

28 de Janeiro de 2005

António Jesus Monteiro de Castro

Aluno 040594004

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

ÍNDICE

INTRODUÇÃO TEÓRICA	3
<i>O que é um classificador?</i>	3
<i>O que é o Classificador de Mahalanobis?</i>	5
<i>Aplicações Práticas</i>	6
DESCRIÇÃO DA IMPLEMENTAÇÃO	7
EXPERIÊNCIAS EFECTUADAS	10
<i>Observações Utilizadas do Data Frame Iris</i>	10
<i>Resultados obtidos com o Classificador</i>	10
CONCLUSÕES.....	11
<i>Limitações</i>	11
<i>Possíveis Desenvolvimentos</i>	11
<i>Package</i>	11
BIBLIOGRAFIA	12
NOTA FINAL	12
ANEXO A – CLASSIFICADOR DE MAHALANOBIS	13
<i>Média</i>	13
<i>Variância</i>	13
<i>Desvio Padrão</i>	13
<i>Escala (Scale)</i>	13
<i>Co-variância</i>	14
<i>A Matriz Co-variância</i>	14
<i>A Métrica de Mahalanobis e o Classificador de Mahalanobis</i>	15
<i>Discriminantes Lineares Invariáveis</i>	16
ANEXO B - MANUAL DO UTILIZADOR	17

Introdução Teórica

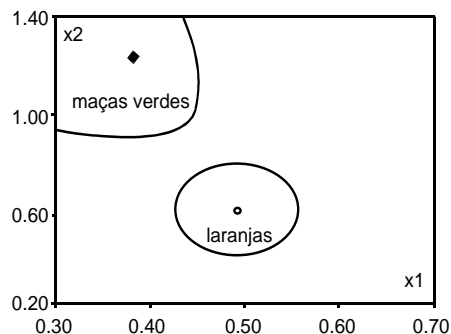
O objectivo deste trabalho é implementarmos em R o Classificador de Mahalanobis. Nesta introdução teórica ao tema vamos começar por dar um exemplo do que é um classificador (em termos gerais) e, depois, um pouco do que é um Classificador de Mahalanobis.

O que é um classificador?

Usando um exemplo que encontramos em [1]:

“(…) Para avaliar as semelhanças entre objectos recorre-se a características ou atributos de natureza diferente dos objectos.

Considere-se o exemplo onde se pretende distinguir maçãs verdes de laranjas. Pode considerar-se as características cor e forma. Para obter uma representação numérica da característica cor pode começar-se por separar a imagem do objecto nas componentes vermelho-verde-azul. Escolhe-se uma região central de interesse no objecto e calcula-se, para essa região, atendendo ao histograma de intensidade de luz, o valor para as componentes vermelho e verde nos respectivos valores possíveis ([0, 255]: 0= sem cor; 255= cor total). Considere-se que os valores obtidos são 186 para a cor verde e 150 para a cor vermelha para um determinado protótipo. Para obter uma representação numérica da característica forma pode-se, por exemplo, medir a distância que difere a largura máxima do objecto com a altura do objecto e normalizar com a altura do objecto (x/h , com $x = h - l$, $h =$ altura e $l =$ largura máxima). Considere-se que para o mesmo exemplar se tem: $x/h = 0.37$. Efectuando uma escolha adequada de exemplares espera-se que os exemplos representativos de maçãs verdes e laranjas definam concentrações de pontos dos referidos exemplares, no espaço característico bidimensional. Na figura estão representadas essas concentrações.



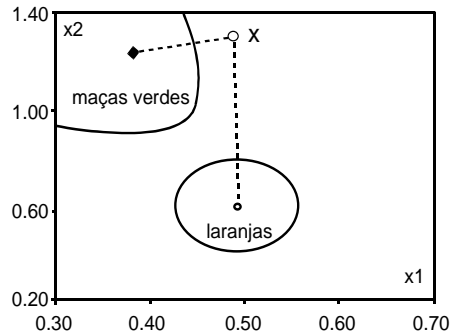
Ao fazer uma boa escolha das características, espera-se que as concentrações estejam razoavelmente separadas, permitindo distinguir as suas classes de frutos. A tarefa de classificação consiste em relacionar um objecto (exemplo) a uma determinada classe.

Matematicamente, nas tarefas de classificação é conveniente representar um exemplo por um vector de características. Neste caso teríamos:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} cor \\ forma \end{bmatrix}$$

Considere-se que se tem uma máquina para separar maçãs verdes das laranjas usando as características descritas.

O procedimento consiste em dada uma peça de fruta calcular os valores das características. Seja \mathbf{x} o valor obtido como se mostra na figura:



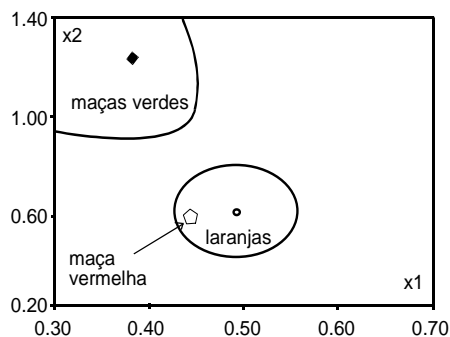
A máquina tem que decidir, tendo como *inputs* os valores calculados das características (\mathbf{x}), se a peça de fruta é uma maçã verde ou uma laranja. Uma decisão razoável baseia-se na distância Euclidiana do ponto \mathbf{x} aos exemplares, ou seja, para a máquina a semelhança é a distância e neste caso decide que a peça de fruta é uma maçã verde. O *output* da máquina para este caso de duas variáveis pode ser, por exemplo:

0 se é maçã verde

1 se é laranja

Assim a máquina é chamada de **classificador**.

Observe-se que, por exemplo, se considerarmos uma maçã vermelha, pode obter-se os valores como se mostra na figura:



A maçã vermelha é erradamente classificada como laranja pois está mais próxima dos exemplos de laranja.

Geralmente os sistemas de classificação não são infalíveis e podem esperar-se erros que podem dever-se a várias causas:

- características inadequadas e insuficientes;
- o conjunto de exemplos usados para a determinação do classificador podem não ser suficientemente significativos;
- o classificador pode não ser suficientemente eficiente para separar as classes;
- pode existir uma sobreposição intrínseca das classes.

Assim é importante a selecção de características adequadas e a determinação de classificadores eficientes. (...) "

O que é o Classificador de Mahalanobis?

Basicamente o Classificador Mahalanobis permite classificar um novo exemplo (uma observação, instância, um objecto) por semelhança com exemplos que já existam, usando a distância de Mahalanobis como métrica para encontrar o exemplo mais semelhante. O exemplo mais semelhante é aquele cuja distância de Mahalanobis até ao novo exemplo é mais curta e, assim, passa a ser classificado com a classe corresponde a esse exemplo.

O que distingue este classificador de outros é que este toma em consideração erros associados com as medidas de previsão, tal como o ruído, usando a Matriz co-variância dos atributos exemplo para escalar os atributos de acordo com as suas variâncias. Para melhor compreendermos o processo, tomemos o seguinte exemplo [4]:

Sendo X o conjunto dos exemplos observados que são mais semelhantes ao vector exemplo f a ser classificado, o classificador de Mahalanobis usa a distância de Mahalanobis [DM] para calcular a distância entre o vector f e o conjunto X. A fórmula para a DM é

$$DM_i(f) = \frac{1}{n} (f - m_i)' C_i^{-1} (f - m_i)$$

Em que f é o vector a classificar, m é o vector com a média dos exemplos e C é a matriz co-variância calculada a partir dos n exemplos guardados como linhas nos vectores de dados de exemplo X_i . O índice $i=1,2,\dots,k$ indica as classes do exemplo.

Para classificar o f calcula-se o valor da distância DM para cada classe usando a equação indicada acima. Como resultado obtemos um número de k diferentes DM para o vector exemplo f. A classe a atribuir é aquela cuja DM for mais pequena.

Como já referimos a distância de Mahalanobis considera, não só a média como também a variância e a covariância das variáveis de medida. Isto permite compensar as interacções entre variáveis.

Pode-se concluir que a distância de Mahalanobis é muito útil para determinar a "semelhança" entre um exemplo "desconhecido" e um conjunto de valores determinados por uma colecção de exemplos "conhecidos". É superior à distância Euclidiana pois tem em consideração a distribuição dos pontos (correlação). A distância de Mahalanobis deve ser usada para classificar observações em diferentes grupos.

Para além de termos apresentado a formula matemática da Distância de Mahalanobis, gostaríamos, também, de apresentar algumas definições não matemáticas que encontramos durante a nossa pesquisa. Assim e segundo [2]:

"As distancias de Mahalanobis são uma generalização das distancias Euclidianas clássicas que permitem que mudanças em determinada direcção tenham mais peso, ou mais custo, que para outra determinada direcção. O respectivo custo das diferenças é resumido numa matriz de peso W e a distância é calculada como raiz

quadrada de $(x-y)'W(xy)$, onde x e y são os vectores característica dos respectivos objectos que estão a ser comparados.”

[Taguchi & Jugulum, 2002] dão-nos a seguinte definição:

“Medida de distância: baseada em correlações entre as variáveis, onde diferentes padrões podem ser identificados e analisados tendo como referencia um determinado ponto.”

No anexo A – Classificador de Mahalanobis apresentamos uma explicação teórica mais detalhada deste assunto.

Aplicações Práticas

As distâncias de *Mahalanobis* aparecem relacionadas com métodos de *Instance Based Learning* (Aprendizagem Baseada em Instâncias) e, também, de *Pattern Recognition* (Reconhecimento de Padrões). Compreende-se esta relação uma vez que, quer num caso quer noutra, procura-se semelhanças.

Na Aprendizagem Baseada em Instâncias procura-se classificar novas instâncias através da semelhança com instâncias já existentes. Ao fazer essa comparação usa-se uma métrica de distância para encontrar as instâncias que estão mais perto. Um dos métodos que usa uma métrica de distância é o *Nearest – Neighbor Classification*.

As aplicações das técnicas e sistemas de reconhecimento de padrões são numerosas e cobrem um vasto número de actividades. Por exemplo:

- Agricultura
 - Analises de produções
 - Avaliações de solos
- Astronomia
 - Analises de imagens telescópicas
- Biologia
 - Propriedades dos cromossomas
 - Estudos genéticos
- Geologia
 - Classificação das rochas
 - Analises sísmicas
 - Estimação dos recursos da exploração mineira
- Medicina
 - Análise de electrocardiogramas
 - Analises de imagens medicinais
- Segurança
 - Identificação de imagens digitais
 - Vigilância e sistemas de alarme

Descrição da Implementação

Foram criadas duas funções:

- (1) calcula.distancia.mahalanobis
- (2) classificador.mahalanobis

A primeira tem como objectivo calcular a distância de Mahalanobis entre a observação a classificar e cada um dos elementos do conjunto de treino. Para invocar esta função são necessários os seguintes parâmetros (pela ordem indicada):

- Observação a classificar sem as variáveis nominais.
- Conjunto de treino também sem as variáveis nominais.
- A matriz de variâncias-covariâncias do conjunto de treino.

A função vai garantir que todos os dados são numéricos e, depois, calcula a distância de acordo com a formula apresentada na introdução deste trabalho e, também, de acordo com o que está no Anexo A.

O código é o seguinte:

```
#  
# função para calcular a distância de Mahalanobis  
#  
calcula.distancia.mahalanobis <- function(obs.classificar.corrigidas, novo.conj.treino,  
covariancia.novo.conj.treino)  
{  
  novo.conj.treino <- as.matrix(novo.conj.treino)  
  obs.classificar.corrigidas <-  
  matrix(data=as.numeric(obs.classificar.corrigidas),  
         nrow=nrow(novo.conj.treino),  
         ncol=ncol(novo.conj.treino),  
         byrow = TRUE,  
         dimnames = NULL)  
  distancia.calculada <- (novo.conj.treino-  
  obs.classificar.corrigidas)%*(solve(covariancia.novo.conj.treino))%*(t(novo.conj.treino-  
  obs.classificar.corrigidas))  
  return(diag(distancia.calculada))  
}
```

A segunda formula contém o classificador propriamente dito, recebendo os vários valores, preparando-os e mostrando o resultado final. Para invocar esta função são necessários os seguintes parâmetros (pela ordem indicada):

- Observação a classificar de acordo com a estrutura dos dados de treino.
- Conjunto de treino.
- Número da coluna que contém o atributo com a classificação.
- Números das colunas dos atributos a serem usados na classificação.

O código comentado desta função é o seguinte:

```
classificador.mahalanobis <- function(obs.classificar, conj.treino, atr.classificar,
atr.usar)
{
#
# novo conjunto de treino somente com os atributos indicados
#
num.colunas <- ncol(conj.treino)
num.linhas <- nrow(conj.treino)
novo.conj.treino <- conj.treino[,atr.usar]
vector1 <- c(1:num.colunas)
vector1 <- vector1[-atr.classificar]
#
# retira os atributos nominais
#
vector2 <- c()
if (is.null(ncol(novo.conj.treino))==TRUE) {
  vector2 <- is.numeric(novo.conj.treino)
  novo.conj.treino <-novo.conj.treino[vector2]
}
else {
  for (i in 1:ncol(novo.conj.treino)) {
    vector2 <- c(vector2,is.numeric(novo.conj.treino[,i]))
  }
  novo.conj.treino <- novo.conj.treino[,vector2]
}

#
# atualiza o vector com a observação a classificar de acordo com os atributos
# indicados
#
vector1 <- obs.classificar[match(atr.usar,vector1)]
obs.classificar.corrigidas <- vector1[vector2]
#
# Usa a co-variância ou a variância do atributo para calcular a
# distância de Mahalanobis
#
if (is.null(nrow(novo.conj.treino))==TRUE) {
  covariancia.novo.conj.treino <- var(novo.conj.treino)
}
else {
  covariancia.novo.conj.treino <- cov(novo.conj.treino)
}

#
# Calcula a distância de Mahalanobis entre a observação a classificar e
# cada um dos elementos do conjunto de treino
#
distancias <- calcula.distancia.mahalanobis(obs.classificar.corrigidas,
novo.conj.treino, covariancia.novo.conj.treino)
#
# Classifica em função da distancia mais próxima
# que, se tudo correr bem é a que estará em primeiro lugar após ser ordenada
#
classes.possiveis.atribuir <- conj.treino[, atr.classificar]
```



```
distancias.ordenadas <- order(c(distancias))
valores <- classes.possiveis.atribuir[distancias.ordenadas[1]]
factores <- levels(valores)
classificacao.obtida <- factores[which.max(summary(valores))]
cat("A classificação obtida foi: ",classificacao.obtida,"\n")
}
```

Experiências Efectuadas

Fiz experiências usando o data frame IRIS que já vem com o R. Aliás, estas experiências foram fundamentais porque só assim é que foi possível corrigir alguns erros que no início existiam no algoritmo.
Segue-se os resultados dessas experiências.

Observações Utilizadas do Data Frame Iris

```
> iris[c(10),]
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
10          4.9         3.1         1.5         0.1      setosa

> iris[c(100),]
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
100          5.7         2.8         4.1         1.3      versicolor

> iris[c(150),]
      Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
150          5.9         3         5.1         1.8      virginica
```

Resultados obtidos com o Classificador

Para a observação 10:

```
> classificador.mahalanobis(iris[c(10),-5],iris[c(10),],5,c(1:4))
A classificação obtida foi: setosa
```

Para a observação 100:

```
> classificador.mahalanobis(iris[c(100),-5],iris[c(100),],5,c(1:4))
A classificação obtida foi: versicolor
```

Para a observação 150:

```
> classificador.mahalanobis(iris[c(150),-5],iris[c(150),],5,c(1:4))
A classificação obtida foi: virginica
```

Conclusões

Limitações

A implementação que fiz tem, sobretudo, duas limitações:

- (1) Só trata uma observação de cada vez. Será mais lógico que possa receber um data frame com várias observações para classificar.
- (2) Não verifica os parâmetros de entrada, ou seja, espera que o utilizador forneça os parâmetros da forma indicada e correctos. Se alguma coisa não estiver bem, “estoura”.

Possíveis Desenvolvimentos

Existem três possíveis desenvolvimentos que eu considero importantes:

- (1) Possibilidade de passar um data.frame com várias observações a classificar, removendo desta forma a limitação (1) indicada anteriormente.
- (2) Validar os parâmetros de entrada para que se prever os erros antecipadamente.
- (3) Possibilidade de ler que o conjunto de treino quer as observações a classificar a partir de um ficheiro de texto.

Package

Infelizmente e devido a um problema para o qual não encontrei solução, não consegui fazer o build do package, apesar de o ter todo preparado. Em anexo envio o directório do package devidamente configurado. O erro que obtive penso que está ligado a um problema de instalação em que deverá faltar um qualquer software adicional. O Erro obtido é:

```
C:\Program Files\R\rw2000pat>bin\r CMD build ClassMahalanobis
* checking for file 'ClassMahalanobis/DESCRIPTION' ... OK
* preparing 'ClassMahalanobis':
* cleaning src
* removing junk files
* building 'ClassMahalanobis_1.0.tar.gz'
'sh' is not recognized as an internal or external command,
operable program or batch file.
'sh' is not recognized as an internal or external command,
operable program or batch file.
Error: cannot open file 'ClassMahalanobis/DESCRIPTION' for reading
```

Bibliografia

[1] Sá, J. P. Marques de: *Pattern Recognition, Concepts, Methods and Applications*.

[2] William J. Raynor, Jr.: *The International Dictionary of Artificial Intelligence*.

[3] Witten, Ian H e Eibe, Frank: *Data Mining Practical Machine Learning*.

[4] Hacker, Engelhardt, Frey: *Robust Manufacturing Inspection and Classification with Machine Vision*.

[5]

http://www.cs.princeton.edu/courses/archive/fall04/cos436/Duda/PR_Mahal/PR_Mahal.htm:

Mahalanobis Classifiers.

Nota Final

Gostaria de salientar que a primeira parte deste trabalho foi efectuado em conjunto com o Mário Wilson que, entretanto, optou por desistir do mestrado.

Anexo A – Classificador de Mahalanobis

(resumo baseado na referência [5] da bibliografia)

Vamos supor que temos um atributo x com n exemplos que pertencem à mesma classe. Os diferentes valores de x são $x(1)$, $x(2)$, ..., $x(n)$.

Média

A **média** será $m = [x(1) + x(2) + \dots + x(n)] / n$

Nota:

se os dados "caírem" num *cluster* a média ficará mais ou menos no meio do *cluster*.

Variância

A **variância** será $v = [(x(1) - m)^2 + (x(2) - m)^2 + \dots + (x(n) - m)^2] / (n - 1)$

Nota:

A variância é a medida do tamanho do *cluster*.

Desvio Padrão

$$s = \sqrt{v}$$

Escala (Scale)

O valor numérico de x depende das unidades usadas, ie, da escala. Se x for multiplicado por um factor escala a , então

$$m' = ma ; s' = sa ; v' = va^2$$

- Algumas vezes é desejável escalar os dados de forma a que o s resultante seja a unidade. Para isso basta fazer $\frac{x}{s}$
- Ao medir a distância de x a m , muitas vezes faz sentido medi-la relativamente ao s . A isto chama-se a **distância padrão** e é dada por

$$r = \left| \frac{x - m}{s} \right|$$

Nota: r é invariável com a *translation* e a *scale*.

Se $x(i)$ for o valor do atributo i ,

Se $m(i,j)$ for a média do atributo i para a classe j

Se $s(i,j)$ for o desvio padrão do atributo i para a classe j

Ao medir a distância entre o vector de atributo x e o vector da média m_j para a

classe j e utilizando a **distância padrão**, fica

$$r(x, m_j)^2 = \left[\frac{x(1) - m(1, j)}{s(1, j)} \right]^2 + \left[\frac{x(2) - m(2, j)}{s(2, j)} \right]^2 + \dots + \left[\frac{x(d) - m(d, j)}{s(d, j)} \right]^2$$

Esta distância tem uma propriedade importante que é ser invariável com a escala, ou seja, se medirmos a distância desta forma, as unidades que usarmos para os vários atributos não terão efeito nas distâncias resultantes e, assim, sem efeito na classificação final.

A **Distância de Mahalanobis** é uma generalização da **distância padrão**.

Co-variância

É a média dos produtos do desvio dos valores dos atributos para as suas médias, ou seja, considerando o atributo i com os seguintes n exemplos:

$$\{x(1,i), x(2,i), \dots, x(n,i)\}$$

e o atributo j com os seguintes n exemplos:

$$\{x(1,j), x(2,j), \dots, x(n,j)\} \text{ em que } x(k,i) \text{ e } x(k,j) \text{ são atributos do mesmo padrão k.}$$

e sendo $m(i)$ média do atributo i e $m(j)$ média do atributo j a co-variância do atributo i e do atributo j é

$$c(i, j) = \frac{\{[x(1,i) - m(i)][x(1,j) - m(j)] + \dots + [x(n,i) - m(i)][x(n,j) - m(j)]\}}{(n-1)}$$

Propriedades importantes da co-variância:

- Se o atributo i e o atributo j tendem a aumentar juntos, então $c(i,j) > 0$
- Se o atributo i tende a diminuir e o atributo j a aumentar, então, $c(i,j) < 0$
- Se são independentes então $c(i,j) = 0$
- $c(i, j) = s(i)^2 = v(i)$

Então, a co-variância $c(i,j)$ é um número entre $-s(i)s(j)$ e $+s(i)s(j)$ que mede a dependência entre o atributo i e o atributo j, com $c(i,j) = 0$ se não há dependências.

A Matriz Co-variância

Todas as co-variâncias $c(i,j)$ podem ser colocadas numa matriz

$$C = \begin{pmatrix} c(1,1) & c(1,2) \cdots & c(1,d) \\ c(2,1) & c(2,2) \cdots & c(2,d) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ c(d,1) & c(d,2) \cdots & c(d,d) \end{pmatrix}$$

Esta matriz providencia-nos uma maneira de medir a distância que é invariante com a transformação linear dos dados.

Se começarmos com um atributo vector x de dimensão d que tem um vector média m_x e uma matriz de co-variância C_x . Se usarmos a matriz A para transformar x em y através de $y = Ax$, então o vector média para y é dado por $m_y = Am_x$ e a matrix co-variância para y é dada por $C_y = AC_xA'$

Se quisermos medir a distância de x a m_x ou de y a m_y , o que faremos é normalizar a distância, de uma forma semelhante ao que fizemos quando definimos a **distância padrão** para um único atributo. Assim, o que queremos é saber qual a matriz generalização da expressão escalar

$$r^2 = \left[\frac{x-m}{s} \right]^2 = (x-m) \frac{1}{s^2} (x-m)$$

A resposta é

$$r^2 = (x-m_x)' C_x^{-1} (x-m_x)$$

Esta expressão é invariante para qualquer transformação linear não singular, ou seja, se se substituir $y=Ax$ e usar as formulas acima para m_y e C_y , obteremos o mesmo valor numérico para r , independentemente do que a matriz A seja.

Agora suponhamos que existe um espaço de atributos em que os *clusters* são esféricos e a métrica Euclidiana providencia a maneira certa para medir a distância de y a m_y . Neste espaço, a matriz co-variância é a matriz identidade e r é exactamente a **distância Euclidiana** de y a m_y . Mas, uma vez que podemos chegar a esse espaço a partir do espaço x através duma transformação linear, e uma vez que r é invariante com as transformações lineares, podemos computar r a partir da expressão

$$r^2 = (x-m_x)' C_x^{-1} (x-m_x)$$

A Métrica de Mahalanobis e o Classificador de Mahalanobis

O valor e em $r^2 = (x-m_x)' C_x^{-1} (x-m_x)$ é a **Distância de Mahalanobis** do vector atributo x ao vector média m_x , onde C_x é a matriz co-variância para x .

Pode-se provar que as superfícies onde r é constante são elipsoidais centradas à volta da média m_x . No caso especial em que os atributos não são correlacionados e as variâncias entre todas as direcções são as mesmas, estas superfícies são esféricas e a **Distância de Mahalanobis** torna-se equivalente à **Distância Euclidiana**.

Pode-se usar a **Distância de Mahalanobis** num **Classificador de Distâncias Mínimas** da seguinte forma:

Sejam m_1, m_2, \dots, m_c as médias (modelos) para as classes c e C_1, C_2, \dots, C_c as correspondentes matrizes de co-variância.

Classificamos um vector atributo x medindo a distância de Mahalanobis de cada x para cada uma das médias e atribuímos a x a classe para a qual a distância de Mahalanobis é mínima.

Esta métrica remove várias limitações da métrica Euclidiana:

- Tem em conta automaticamente a escala dos eixos das coordenadas.
- Corrige para a correlação entre atributos diferentes.
- Pode providenciar fronteiras de decisão curvas e lineares.

O preço a pagar:

- As matrizes de co-variância podem ser difíceis de determinar com exactidão.
- A memória e o tempo de computação crescem quadraticamente em vez de linearmente com o número de atributos.

Este problemas podem ser insignificantes quando são precisos poucos atributos mas podem tornar-se mais sérios quando há mais atributos.

Discriminantes Lineares Invariáveis

Existe um caso especial importante em que a métrica de Mahalanobis resulta novamente em funções discriminantes lineares.

Ocorre quando os *clusters* em todas as classes c têm a mesma matriz de co-variância C .

Geometricamente esta situação acontece quando os *clusters* para todas as categorias têm a mesma forma elipsoidal.

Fisicamente esta situação acontece quando o problema é para detectar um entre c sinais diferentes na presença de ruído adicional, onde o ruído não depende em função de quais dos sinais está presente.

Neste caso podemos expandir o quadrado da distância de Mahalanobis do vector atributo x ao vector média m_k da seguinte forma:

$$\begin{aligned} r^2 &= (x - m_k)' C^{-1} (x - m_k) \Leftrightarrow \\ r^2 &= x' C^{-1} x - m_k' C^{-1} x - x' C^{-1} m_k + m_k' C^{-1} m_k \Leftrightarrow \\ r^2 &= -2 \left[(C^{-1} m_k)' x - 0.5 m_k' C^{-1} m_k \right] + x' C^{-1} x \end{aligned}$$

Esta expressão faz lembrar uma expressão semelhante obtida para o **Classificador de Distância Euclidiana Mínima**.

Podemos obter funções discriminantes lineares maximizando a expressão entre parêntesis rectos. Desta vez definimos a função discriminante linear como

$$g_k(x) = w_k' x + w_{k0} \text{ em que } w_k = C^{-1} m_k \text{ e } w_{k0} = -0.5 m_k' C^{-1} m_k$$

Este resultado é mais útil apesar de desistir das vantagens de ter fronteiras de decisão curvas. Mantém a vantagem de ser invariante a transformações lineares. Adicionalmente reduz os requisitos de memória e aumenta a velocidade de computação.

Finalmente, quando a matriz co-variância é a mesma para todas as c classes, podemos obter dados de todas as classes e obter resultados muito melhores a partir dum volume limitado de dados.

Anexo B - Manual do Utilizador

Juntamente com este documento foram fornecidos dois ficheiros, um com o código correspondente e com o nome ClassificadorMahalanobis.R e um outro em forma de Package.

Para se poder utilizar o código enviado basta proceder da seguinte maneira:

- 1) Arrancar com o gui do R.
- 2) Escolher FILE/Source R Code.
- 3) Escolher o ficheiro com o nome ClassificadorMahalanobis.R

Para experimentar com os dados indicados neste documento, proceda da seguinte maneira:

Carregue o data set IRIS
> data(iris)

Agora escreva o seguinte para cada um dos exemplos:

```
> iris[c(10),];classificador.mahalanobis(iris[c(10),-5],iris[c(10),],5,c(1:4))  
>   Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species  
10      4.9        3.1        1.5         0.1    setosa  
A classificação obtida foi: setosa
```

```
> iris[c(100),];classificador.mahalanobis(iris[c(100),-5],iris[c(100),],5,c(1:4))  
>   Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species  
100    5.7         2.8         4.1         1.3  versicolor  
A classificação obtida foi: versicolor
```

```
> iris[c(150),];classificador.mahalanobis(iris[c(150),-5],iris[c(150),],5,c(1:4))  
>   Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species  
150    5.9         3         5.1         1.8   virginica  
A classificação obtida foi: virginica
```