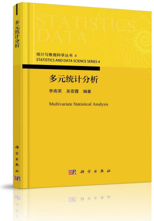
第11章
判别分析

李高荣

北京师范大学统计学院

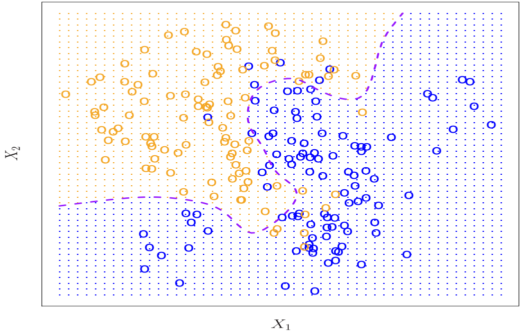
E-mail: *ligaorong@bnu.edu.cn*



- 扫二维码获取在线课件和相关教学电子资源
- 请遵守电子资源使用协议

- 判别分析(discriminant analysis)：使用具有类别信息的观测数据(training set) 建立一个分类器(classifier) 或者分类法则(classification rule)，其可以最大可能的区分事先定义的类。
- 分类(Classification)：给定一组新的未知类别信息的观测数据集，使用分类器将其分配到一些已知的类中。
- 实际应用中，判别分析与分类常常混在一起：
  - 一个作为判别分析的p 元函数也可以用于对新的观测数据进行分类
  - 一个分类准则常常作为判别法则使用

- 假设有K个总体(类)，$G = 1, 2, \cdots, K$ 表示类别。$\boldsymbol{x}$为取值Ω 上的多元观测，且$\boldsymbol{x}|G = g \sim f_g(\boldsymbol{x})$，$g = 1, 2, \cdots, K$，其中$f$ 为概率函数；
- 对任意给定的观测$\boldsymbol{x}_0$，目的是把$\boldsymbol{x}_0$归到K 个类中的某个。



- 患者来到急症室，医生通过患者的一系列症状将患者归到三类可能病症中的一类
- 网上银行服务需要基于用户的IP 地址、历史交易记录等信息辨别一个在线网上交易是否存在诈骗行为
- 一位生物学家对一定数量患先天疾病的患者和未患病的人进行DNA排列信息分析，发现哪些DNA 突变是致病的，哪些是不致病的
- $\cdots$

判别分析的准则

- 目的：使错判概率最小，或者使判别错误的平均值最小
- 问题：存在两个总体π_1和π_2，给定一个个体的测量值向量$\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_p)'$，判断该个体是来自总体$\pi_1$，还是总体$\pi_2$?
- 解决方案：寻找判别方法，把$\mathbb{R}^p$空间分成两个区域R_1和R_2，记为$R=(R_1,R_2)$。如果这个个体的观测值向量$\boldsymbol{x}\in R_1$，则把它判断为来自总体π_1，否则为来自总体π_2。
- 两种错误：(1) 个体来自总体π_1，却被误判为来自总体π_2；(2) 个体来自总体π_2，却被误判为来自总体π_1。

Table: 判别的两类错误

统计决策	π_1	π_2
π_1	0	$C(2\|1)$
π_2	$C(1\|2)$	0

- $C(2|1)$: 个体来自于总体π_1，却被误判为来自总体π_2 的损失
- $C(1|2)$: 个体来自于总体π_2，却被误判为来自总体π_1 的损失
- 好的判别方法的标准: 错判带来的损失达到最小

两个总体的情形

- 先验概率：令q_1是来自π_1的观测值的先验概率，q_2 是来自π_2的观测值的先验概率，满足$q_1+q_2=1$
- 密度函数：假设总体π_1的密度函数为$f_1(\boldsymbol{x})$，总体π_2的密度函数为$f_2(\boldsymbol{x})$
- 正确判别的概率：若个体来自总体π_1，则被正确判别的概率为：

$$\Pr(1|1,R)=\int_{R_1} f_1(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \quad \mathrm{d}\boldsymbol{x}=\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_p$$

- 错判概率：若个体来自总体π_1，则被错判为来自总体π_2的概率为：

$$\Pr(2|1,R)=\int_{R_2} f_1(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

- **正确判别的概率：** 同样，若个体来自总体π_2，则被正确判别的概率为：

$$\Pr(2|2,R)=\int_{R_2} f_2(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

- **错判概率：** 若个体来自总体π_2，则被错判为来自总体π_1的概率为：

$$\Pr(1|2,R)=\int_{R_1} f_2(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

先验信息：观测值来自总体π_1的先验概率是q_1，来自总体π_2的先验概率是q_2。

- 先验概率下正确判别的概率：观测值来自总体π_1且被正确判别的概率为：
$$q_1 \Pr(1|1,R)$$
- 错判概率：观测值来自总体π_1且被错判为来自总体π_2的错判概率为：
$$q_1 \Pr(2|1,R)$$
- 类似地，可以定义两种概率分别为：

$$q_2 \Pr(2|2,R), \qquad q_2 \Pr(1|2,R)$$

- 错判的平均损失为：

$$\mathrm{ECM}(R_1, R_2) = C(2|1)\Pr(2|1, R)q_1 + C(1|2)\Pr(1|2, R)q_2$$

- 目的：找最优判别方法，把空间划分成R_1和R_2，使得错判的平均损失达到最小。

- Bayes判别方法：给定先验概率q_1和q_2，使错判的平均损失达到最小的方法称为Bayes判别方法。

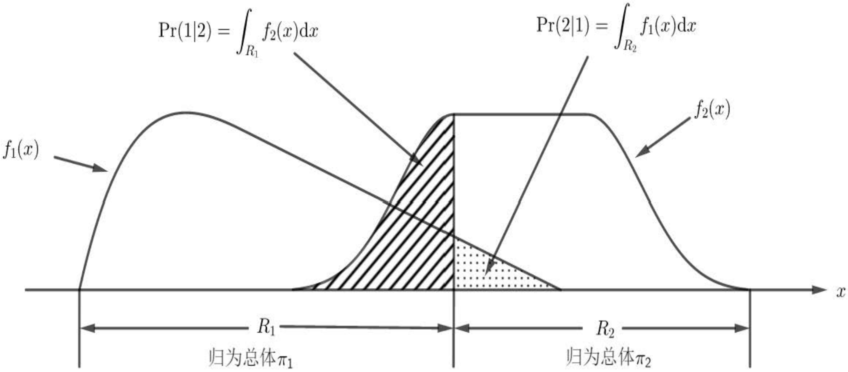


Figure: 当维数$p = 1$时，错判概率的示意图。

先验分布未知情形：

- 观测值来自总体π_1的期望损失为：

$$C(2|1)\Pr(2|1,R) = r(1,R)$$

- 观测值来自总体π_2的期望损失为：

$$C(1|2)\Pr(1|2,R) = r(2,R)$$

- 在实际应用中，我们并不知道观测值是来自总体π_1，还是来自总体π_2，也不知道这两个类别的先验概率，这时如何解决？

设R^*是另一个判别方法，则

- 若$r(1,R) \le r(1,R^*)$且$r(2,R) \le r(2,R^*)$，则称R至少和R^*一样好；若其中一个不等号严格成立，则称R比R^*真好。
- 容许性：如果存在一种方法，没有任何其他方法比它真好，或者至少它和其他方法一样好，那么说这个判别方法，或者这个样本空间的划分R是容许的。
- Minimax原则：如果一个方法的最大期望损失$r(i,R)$达到最小，则称这个方法是minimax 的。
- 完备性：对于方法类以外的任何一个方法R^*，如果能从这个方法类中找到一个方法R比R^* 好，则称这个方法类是完备的。

问题：如何划分区域R_1和R_2，使得错判的平均损失达到最小。

- 对先验概率q_1，来自总体π_1的观测值的每一个随机变量小于$\boldsymbol{y}=(y_1,\cdots,y_p)'$对应的分量的概率为：

$$\int_{-\infty}^{y_1}\cdots\int_{-\infty}^{y_p} q_1 f_1(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

- 计算在给定观测值的条件下，它来自某个总体的概率。如，给定观测值$\boldsymbol{x}$，它来自总体π_1的条件概率为：

$$\frac{q_1 f_1(\boldsymbol{x})}{q_1 f_1(\boldsymbol{x})+q_2 f_2(\boldsymbol{x})}$$

- 期望损失，也称为错判概率，定义为：

$$q_1 \int_{R_2} f_1(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x} + q_2 \int_{R_1} f_2(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{3.1}$$

- 对于一个给定的观测向量$\boldsymbol{x}$，我们将把这个个体指定到有最高条件概率的总体，这样就能使错判概率达到最小。
- 如果

$$\frac{q_1 f_1(\boldsymbol{x})}{q_1 f_1(\boldsymbol{x}) + q_2 f_2(\boldsymbol{x})} \geq \frac{q_2 f_2(\boldsymbol{x})}{q_1 f_1(\boldsymbol{x}) + q_2 f_2(\boldsymbol{x})}$$

这时把观测向量$\boldsymbol{x}$指定到总体π_1，否则指定到总体π_2。

- 由于每个观测点上的错判概率都达到最小，因此可以说在整个空间上达到最小，故判别准则是：

$$
\begin{aligned}
R_1 &= \{\boldsymbol{x} : q_1 f_1(\boldsymbol{x}) > q_2 f_2(\boldsymbol{x})\} \\
R_2 &= \{\boldsymbol{x} : q_1 f_1(\boldsymbol{x}) < q_2 f_2(\boldsymbol{x})\}
\end{aligned}
\tag{3.2}
$$

- 如果$q_1 f_1(\boldsymbol{x}) = q_2 f_2(\boldsymbol{x})$，则观测值可以任意判别为来自总体$\pi_1$ 或π_2；

- 如果$q_1 f_1(\boldsymbol{x}) + q_2 f_2(\boldsymbol{x}) = 0$，则该观测值可以归类为任意区域，但是发生这种情形的概率为0。

- 现在证明判别准则(3.2)是最好的准则。对任意的划分$R^* = (R_1^*, R_2^*)$，错判概率为：

$$
\begin{aligned}
& q_1 \int_{R_2^*} f_1(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} + q_2 \int_{R_1^*} f_2(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
= & \int_{R_2^*} [q_1 f_1(\boldsymbol{x}) - q_2 f_2(\boldsymbol{x})] \mathrm{d}\boldsymbol{x} + q_2.
\end{aligned}
$$

- 既然q_2是一个给定的数，故只需要选取划分使上式第一部分达到最小，也就是说，使R_2^*只包含$q_1 f_1(\boldsymbol{x}) - q_2 f_2(\boldsymbol{x}) < 0$的点$\boldsymbol{x}$，不包含使$q_1 f_1(\boldsymbol{x}) - q_2 f_2(\boldsymbol{x}) > 0$的点$\boldsymbol{x}$。

- 进一步假定，若

$$\Pr\left(\frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} = \frac{q_2}{q_1}\middle|\pi_i\right) = 0, \quad i = 1, 2,$$

则除了零概率集外，Bayes方法是唯一的。

- 总结：给定非负先验概率q_1和q_2，以及非负函数$f_1(\boldsymbol{x})$ 和$f_2(\boldsymbol{x})$，采用的判别准则就是划分(3.2)，使得期望损失或错判概率(3.1)达到最小。

- 考虑不同的损失，使

$$C(2|1)\Pr(2|1,R)q_1 + C(1|2)\Pr(1|2,R)q_2$$

达到最小，则有

$$\int_{R_2}\Big([C(2|1)q_1]f_1(\boldsymbol{x}) - [C(1|2)q_2]f_2(\boldsymbol{x})\Big)\mathrm{d}\boldsymbol{x} + C(1|2)q_2$$

- 这时判别准则为：

$$R_1 = \{\boldsymbol{x} : [C(2|1)q_1]f_1(\boldsymbol{x}) \geq [C(1|2)q_2]f_2(\boldsymbol{x})\}$$
$$R_2 = \{\boldsymbol{x} : [C(2|1)q_1]f_1(\boldsymbol{x}) < [C(1|2)q_2]f_2(\boldsymbol{x})\}$$

- 由于$C(2|1)q_1$和$C(1|2)q_2$是非负常数，则上面准则可以写成另一种形式：

$$R_1 = \left\{ \boldsymbol{x} : \frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} \geq \frac{C(1|2)q_2}{C(2|1)q_1} \right\}$$
$$R_2 = \left\{ \boldsymbol{x} : \frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} < \frac{C(1|2)q_2}{C(2|1)q_1} \right\} \tag{3.3}$$

定理11.2.1

若q_1和q_2分别是来自总体π_1和π_2的观测值的先验概率，其密度函数分别为$f_1(\boldsymbol{x})$ 和$f_2(\boldsymbol{x})$，且来自总体π_1的观测值错判到总体π_2的损失为$C(2|1)$，而来自总体π_2的观测值错判到总体π_1的损失为$C(1|2)$，则由式(3.3)定义的准则使判别区域R_1和R_2的期望损失达到最小。若进一步假定

$$\Pr\left(\frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} = \frac{C(1|2)q_2}{C(2|1)q_1}\bigg|\pi_i\right) = 0, \quad i = 1, 2,$$

则除了零概率集外，此准则唯一。

- 问题：在许多实际判别例子里，统计学家不能对两个总体假定有一个先验概率，这时如何进行判别分析？
- 解决办法：寻找一类容许方法，也就是不能进一步改进的方法族。具体证明如下：
- 如果两个总体的分布有相同的支撑集，则所有的Bayes方法是容许的。

- 给定先验概率q_1, q_2，令$R=(R_1,R_2)$是一个Bayes方法，那么是否存在另一个划分$R^*=(R_1^*,R_2^*)$，使得
  $$\Pr(1|2,R^*) \le \Pr(1|2,R) \text{ 和 } \Pr(2|1,R^*) \le \Pr(2|1,R)$$
  同时成立且至少有一个不等号严格成立呢？
- 假定这样的划分存在，且不妨假定：
  $$\Pr(1|2,R^*) < \Pr(1|2,R).$$
  由于R是一个Bayes方法，由定理11.2.1，则有
  $$q_1\Pr(2|1,R) + q_2\Pr(1|2,R) \le q_1\Pr(2|1,R^*) + q_2\Pr(1|2,R^*).$$

- 这个不等式可以改写成：

$$q_1[\Pr(2|1,R)-\Pr(2|1,R^*)]\le q_2[\Pr(1|2,R^*)-\Pr(1|2,R)]. \qquad (3.4)$$

- 由R^*的选择可知，式(3.4)的左端非负，右端非正，故只能两端都等于0。
- 如果$0<q_1,q_2<1$，则有$\Pr(2|1,R)=\Pr(2|1,R^*)$且$\Pr(1|2,R^*)=\Pr(1|2,R)$。导致R^*比R真好发生矛盾。

- 如果$q_1 = 0$，则有$q_2 = 1$。式(3.4)说明：$\Pr(1|2, R^*) = \Pr(1|2, R)$。对Bayes方法来说，$q_1 = 0$ 说明R_1只能包含使$f_2(\boldsymbol{x}) = 0$的点，因此，$\Pr(1|2, R) = 0$。
- 由于$\Pr(f_2(\boldsymbol{x}) = 0|\pi_1) = 0$，故不妨假设$R_1 = \{\boldsymbol{x} : f_2(\boldsymbol{x}) = 0\}$。进而由$\Pr(1|2, R^*) = 0$ 知，$R_1^* \subset R_1$。
- 这时，R_2^*的区域比R_2区域要大，则

$$\Pr(2|1, R^*) \geq \Pr(2|1, R),$$

这又导致了与假设R^*不会比R真好的矛盾。

- 同理，$q_1 = 1$时也可以导出矛盾。因此，R是容许的。

定理11.2.2

若$\Pr(f_2(\boldsymbol{x})=0|\pi_1)=0$且$\Pr(f_1(\boldsymbol{x})=0|\pi_2)=0$，则每个Bayes方法是容许的。

现在来证明这个定理的逆定理，即每个容许判别方法是Bayes判别方法。

- 假设

$$\Pr\left(\frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})}=k\Big|\pi_i\right)=0,\ i=1,2,\ 0\leq k\leq\infty, \tag{3.5}$$

则对任意q_1，Bayes方法是唯一的，并且$f_1(\boldsymbol{x})/f_2(\boldsymbol{x})$在总体$\pi_1$和$\pi_2$下的分布函数都是连续的。

先验概率未知的情形

- 令R是一个容许的判别方法，则存在k 使得

$$\Pr(2|1,R)=\Pr\left(\frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})}\le k\middle|\pi_1\right)=\Pr(2|1,R^*).$$

- 在这里R^*是Bayes方法，符合$q_2/q_1=k$。
- 由于R是容许的，$\Pr(2|1,R)\le\Pr(2|1,R^*)$。由定理11.2.2，可知$R^*$ 是容许的，则有$\Pr(2|1,R)\ge\Pr(2|1,R^*)$，这时有：

  $\Pr(2|1,R)=\Pr(2|1,R^*)$。
- 因此，R也是一个Bayes方法，由Bayes方法的唯一性，可知$R=R^*$。

定理11.2.3

若式(3.5)成立，则每个容许方法是一个Bayes方法。

定理11.2.3说明：

- Bayes方法是完备的：若R是这个集族外的任意方法，可以构造一个Bayes方法R^*，使得$\Pr(2|1,R)=\Pr(2|1,R^*)$。又由于R^*是容许的，则$\Pr(2|1,R)\geq\Pr(2|1,R^*)$。
- 若Bayes方法族与容许方法族完全相同，则Bayes方法族是最小完备类。

定理11.2.4

若式(3.5)成立，则Bayes方法族是最小完备类。

- 考虑两个正体总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \Sigma_1)$和$N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \Sigma_2)$，其中
  - $\boldsymbol{\mu}_i = (\mu_{i1}, \cdots, \mu_{ip})'$为第$i$个总体的均值向量，$i = 1, 2$
  - Σ_i是两个总体的协方差矩阵，$i = 1, 2$
- 对$i = 1, 2$，第i个总体的密度函数为：

$$f_i(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\Sigma_i|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)'\Sigma_i^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\right]$$

- 则似然比可以定义为：

$$\frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} = \frac{|\Sigma_2|^{1/2}}{|\Sigma_1|^{1/2}} \times \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_1)'\Sigma_1^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_1)\right]}{\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_2)'\Sigma_2^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_2)\right]}.$$

- 当$\dfrac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} \geq k$时，判别区域$R_1$属于总体$\pi_1$。由于对数函数是单调递增的，该不等式可以写成：

$$\ln f_1(\boldsymbol{x}) - \ln f_2(\boldsymbol{x}) \geq \ln k.$$

- 记

$$\delta(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}\boldsymbol{x}'(\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1})\boldsymbol{x} + (\boldsymbol{\mu}_1'\Sigma_1^{-1} - \boldsymbol{\mu}_2'\Sigma_2^{-1})\boldsymbol{x} - \xi.$$

- $\delta(\boldsymbol{x})$包含了二次项：$-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}'(\Sigma_1^{-1} - \Sigma_2^{-1})\boldsymbol{x}$，它是关于$\boldsymbol{x}$的二次函数，故把$\delta(\boldsymbol{x})$称为二次判别函数。

当$\Sigma_1 \neq \Sigma_2$时，正态总体的判别

- 这里，$\xi = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{|\Sigma_1|}{|\Sigma_2|}\right) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1'\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2'\Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2)$。

定理11.3.1：二次判别准则(QDA)

若总体π_i的密度函数为$f_i(\boldsymbol{x})$，$i = 1, 2$，对$\Sigma_1 \neq \Sigma_2$，则最好的判别区域为：

$$R_1 = \{\boldsymbol{x}: \ \delta(\boldsymbol{x}) \geq \ln k\}, \qquad R_2 = \{\boldsymbol{x}: \ \delta(\boldsymbol{x}) < \ln k\}.$$

若先验概率q_1和q_2已知，则$k = \dfrac{q_2 C(1|2)}{q_1 C(2|1)}$。

先验概率不存在的情形

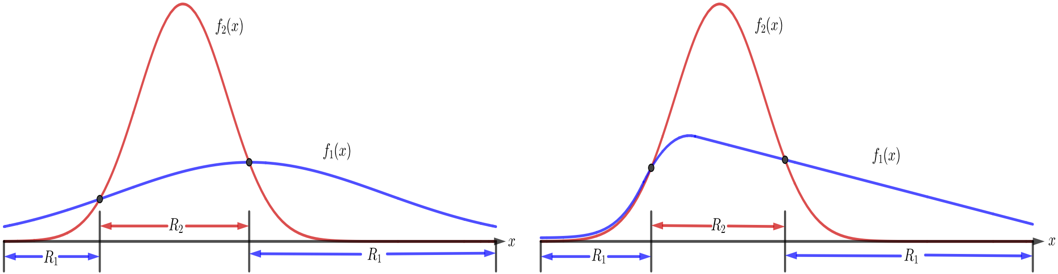


Figure: 当维数$p=1$时，两个总体的二次判别区域。左图：两个总体π_1和π_2都为正态分布情形；右图：π_1 总体为非正态分布，π_2总体为正态分布。

- 当协方差矩阵相等时，即$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma$，则似然比可以定义为：

$$\frac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})} = \frac{\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)\right]}{\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_2)\right]}$$

$$= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1) - (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_2)\right]\right\}.$$

- 当$\dfrac{f_1(\boldsymbol{x})}{f_2(\boldsymbol{x})}\geq k$时，判别区域$R_1$属于总体$\pi_1$。由于对数函数是单调递增的，该不等式可以写成：

$$-\frac{1}{2}\left[(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_2)\right]\geq \ln k.$$

- 对上式左边简单计算，有

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2),$$

其中上式左边第一项为判别函数，或称为线性判别函数。

定理11.3.2：线性判别准则(LDA)

若总体π_i的密度函数为多元正态密度函数$f_i(\boldsymbol{x}), i = 1, 2$，则最好的判别区域为：

$$R_1 : \boldsymbol{x}'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \geq \ln k,$$
$$R_2 : \boldsymbol{x}'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)'\Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) < \ln k.$$

若先验概率q_1和q_2已知，则$k = \dfrac{q_2 C(1|2)}{q_1 C(2|1)}$。

- 考虑下面的模拟例子，从两个二元正态分布产生随机数据，比较Bayes判别方法、LDA方法和QDA方法的决策边界和错误率。
- 假设有两个正态总体，分别为$\pi_1 \sim N_2(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1)$和$\pi_2 \sim N_2(\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2)$，其中$\boldsymbol{\mu}_1 = (-1, 1)'$，$\boldsymbol{\mu}_2 = (1.5, 2)'$。
- 分别考虑下面两种情形：
  1. $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1 \end{pmatrix}$
  2. $\begin{pmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}_1 \neq \boldsymbol{\Sigma}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0.7 \\ 0.7 & 1 \end{pmatrix}$

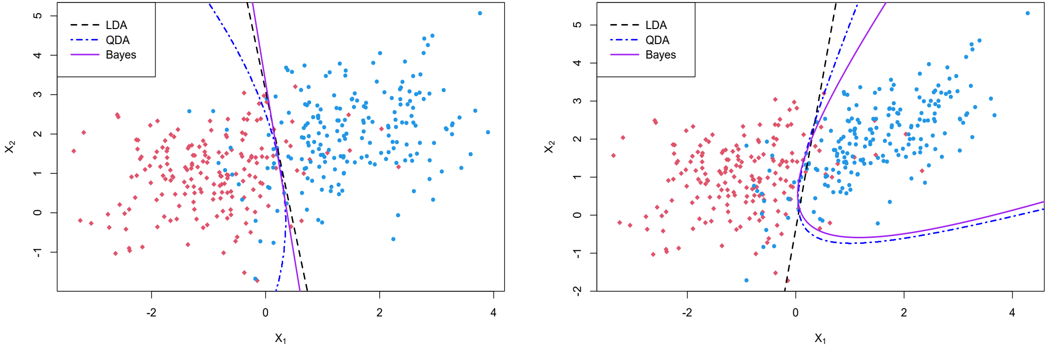


Figure: 左：当$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma$时，Bayes判别方法(紫色实线)、LDA方法(黑色虚线)和QDA 方法(蓝色点断线)的决策边界，三种方法的错误率分别为：0.1、0.108和0.103；右：当$\Sigma_1 \neq \Sigma_2$时，Bayes判别方法(紫色实线)、LDA方法(黑色虚线)和QDA 方法(蓝色点断线)的决策边界，三种方法的错误率分别为：0.087、0.1和0.087。

- 选择$\ln k = c$。令$\boldsymbol{X}$是一个随机观测向量，希望找到下式定义的随机变量U的分布：

$$U = \boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2).$$

- 如果$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma})$，则$U$是正态分布，其均值为：

$$\begin{aligned} E_1(U) &= \boldsymbol{\mu}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \end{aligned}$$

- 方差为：

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}_1(U) &= (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}E_1[(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu}_1)']\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \\ &= (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \end{aligned}$$

- 记$N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma})$和$N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma})$之间的马氏距离为：

$$(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) = \Delta^2$$

- 则$U \sim N(\Delta^2/2, \Delta^2)$。当$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma})$时，同样可计算均值为：

$$\begin{aligned} E_2(U) &= \boldsymbol{\mu}_2'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) = -\frac{1}{2}\Delta^2 \end{aligned}$$

- 方差为：$\mathrm{Var}_2(U) = \mathrm{Var}_1(U)$，则$U \sim N(-\Delta^2/2, \Delta^2)$。

- 来自总体π_1的观测值被错判的概率为：

$$\begin{aligned}\Pr(2|1) &= \int_{-\infty}^{c} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \exp\left[-\frac{1}{2\Delta^2}\left(z-\frac{1}{2}\Delta^2\right)^2\right] \mathrm{d}z \\ &= \int_{-\infty}^{(c-\Delta^2/2)/\Delta} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y^2/2)\mathrm{d}y\end{aligned}$$

- 来自总体π_2的观测值被错判的概率为：

$$\begin{aligned}\Pr(1|2) &= \int_{c}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \exp\left[-\frac{1}{2\Delta^2}\left(z+\frac{1}{2}\Delta^2\right)^2\right] \mathrm{d}z \\ &= \int_{(c+\Delta^2/2)/\Delta}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y^2/2)\mathrm{d}y\end{aligned}$$

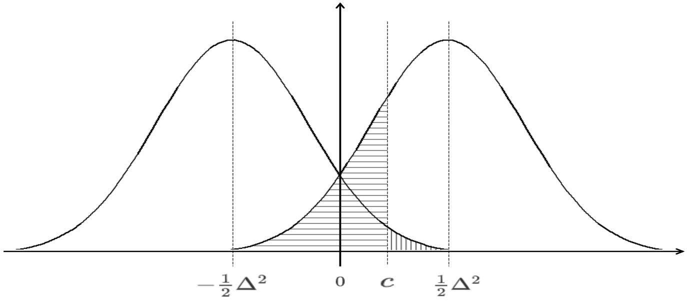


Figure: 两个错判概率的意义。

注：两个错判概率见图中阴影部分。

- 由minimax方法，选择c使得

$$
\begin{aligned}
&C(1|2)\int_{(c+\Delta^2/2)/\Delta}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-y^2/2)dy \\
=&C(2|1)\int_{-\infty}^{(c-\Delta^2/2)/\Delta}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-y^2/2)dy
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

定理11.3.3

若总体π_i的密度函数为多元正态密度函数$f_i(\boldsymbol{x}), i=1,2$，则minimax的判别区域在定理11.3.2中给出，其中$c=\ln k$由式(4.1)给出，$C(i|j)$为错判损失。

- 当错判损失相等时，有$c=0$，且错判概率为：

$$\int_{\Delta/2}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-y^2/2)\mathrm{d}y.$$

- 当错判损失不等的情况下，c可以尝试由正态分布的性质来决定。
- 注意式(4.1)，两部分都含有共同的向量：

$$\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2).$$

- 问题：
  - $\boldsymbol{\theta}$的几何意义是什么？
  - 它为什么会出现在判别函数中？

- 夏普指数(Sharpe Ratio)： 在金融领域，两个分布的中心相对于标准误差的距离，称为夏普指数。

- 对于两个一元正态总体的判别分析中，夏普指数越大就越容易判别，即错判概率越小。

- 解决思路和办法：希望把一个多元向量投影到某一个方向上去，使其最容易判别，即考虑$\xi' X$，使得

$$\frac{[E_1(\xi' X) - E_2(\xi' X)]^2}{\mathrm{Var}(\xi' X)} = \frac{\xi'(\mu_1 - \mu_2)(\mu_1 - \mu_2)'\xi}{\xi'\Sigma\xi}$$

达到最大。

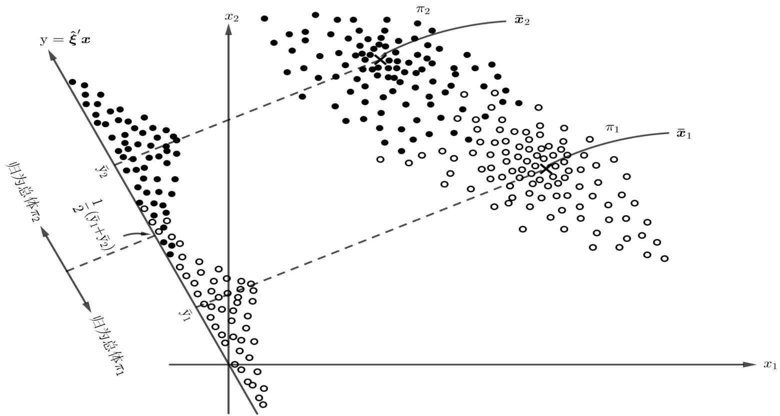
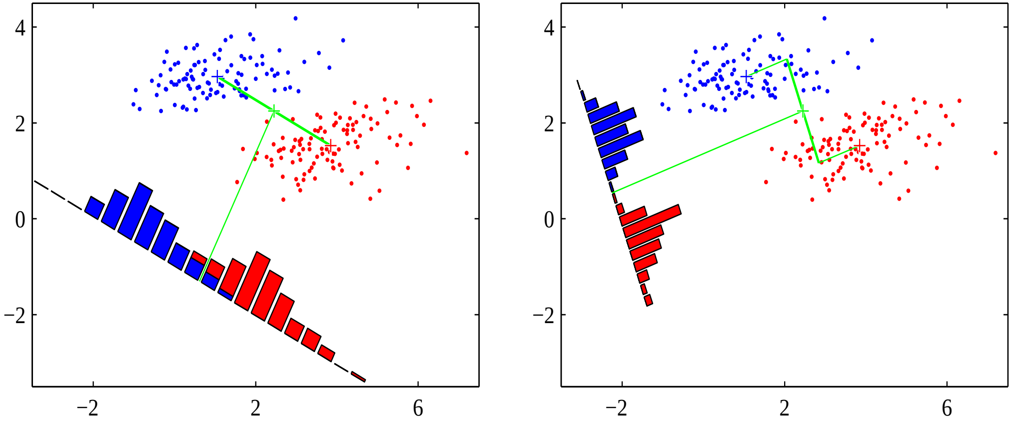


Figure: Fisher判别的示意图。

先验概率不存在的情形



- 令$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\xi}$，代入上式，则有

$$\frac{\boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|^2} \tag{4.2}$$

- 使式(4.2)达到最大值的$\boldsymbol{\beta}$必须与$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$落在同一个方向上，即$\boldsymbol{\beta} = a\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$。
- 把$\boldsymbol{\beta} = a\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$ 代入式(4.2)，则式(4.2)得最大值Δ^2。
- 把$\boldsymbol{\beta} = a\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$ 代入$\boldsymbol{\xi}$，则有

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\beta} = a\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) = a\boldsymbol{\theta}.$$

- 可见：$\boldsymbol{\xi}$与$\boldsymbol{\theta}$成比例，即$\boldsymbol{\theta}$是使得$\boldsymbol{X}$投影最容易的判别方向，所以它会出现在最佳判别函数中。

问题：在实际应用中，如果对两个总体一无所知，如何对观测值进行判别分析？

解决方案：

- 假设对两个总体存在两组历史样本，也称为训练样本，见如下
  1. 设样本$\boldsymbol{x}_1^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{n_1}^{(1)} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \Sigma)$
  2. 设样本$\boldsymbol{x}_1^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{n_2}^{(2)} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \Sigma)$
- 根据上面的训练样本，如何把一个新的观测值$\boldsymbol{x}$判别为来自总体π_1或π_2

- 估计量：
  1. $\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 = \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} = \frac{1}{n_1}\sum_{i=1}^{n_1}\boldsymbol{x}_i^{(1)}$
  2. $\hat{\boldsymbol{\mu}}_2 = \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)} = \frac{1}{n_2}\sum_{i=1}^{n_2}\boldsymbol{x}_i^{(2)}$
  3. $\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{S} = \frac{\mathbf{V}^{(1)} + \mathbf{V}^{(2)}}{n_1 + n_2 - 2}$，其中

$$\mathbf{V}^{(1)} = \sum_{i=1}^{n_1}(\boldsymbol{x}_i^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})(\boldsymbol{x}_i^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})',$$

$$\mathbf{V}^{(2)} = \sum_{i=1}^{n_2}(\boldsymbol{x}_i^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})(\boldsymbol{x}_i^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'$$

分别为两组样本的样本离差矩阵。

- Fisher (1936)建议把参数估计代入式(4.1)，可得下面的判别函数：

$$W(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}'\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 - \hat{\boldsymbol{\mu}}_2) - \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 + \hat{\boldsymbol{\mu}}_2)'\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 - \hat{\boldsymbol{\mu}}_2). \tag{5.1}$$

讨论：

- 当总体分布的参数已知时，可以说由式(4.1)定义的判别准则在某种意义下是最好的，因为它在先验概率已知的情况下，它能使得期望损失达到最小。
- 当先验概率未知时，我们可以用容许性来评价判别方法的好坏。但是不能用同样的方法对式(5.1) 定义的判别准则进行评价。

- 假设有一个来自总体π_1或π_2的样本$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$，下面我们将样本视为一个整体来进行判别。
- 估计量：
  1. $\bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i$
  2. $\widehat{\Sigma} = \mathbf{S} = \frac{\mathbf{V}^{(1)} + \mathbf{V}^{(2)} + \mathbf{V}}{n_1 + n_2 + n - 3}$，其中$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})'$为新样本的样本离差矩阵。
- 则定义Fisher判别准则为：

$$\left[\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 + \hat{\boldsymbol{\mu}}_2)\right]' \widehat{\Sigma}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 - \hat{\boldsymbol{\mu}}_2). \tag{5.2}$$

- 如果样本量n越大，错判概率就越小。

- 令

$$W = \boldsymbol{X}'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)}) - \frac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} + \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)})$$
$$= \left[\boldsymbol{X} - \frac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} + \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)})\right]'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)}),$$

其中$\boldsymbol{X}$, $\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)}$, $\overline{\boldsymbol{X}}^{(2)}$和$\mathbf{S}$是随机的。

- W的分布是相当复杂的，因为它不仅依赖于样本量大小，而且还和未知量Δ^2有关。

- 令
$$Y_1 = c_1[\boldsymbol{X} - (n_1+n_2)^{-1}(n_1\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} + n_2\overline{\boldsymbol{X}}^{(2)})], \quad Y_2 = c_2(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)}),$$
其中$c_1 = \sqrt{(n_1+n_2)/(n_1+n_2+1)}$ 和 $c_2 = \sqrt{n_1 n_2/(n_1+n_2)}$。
- 可以算出$\boldsymbol{Y}_1$和$\boldsymbol{Y}_2$分别服从具有协方差矩阵$\boldsymbol{\Sigma}$的两个独立正态分布，且$\boldsymbol{Y}_2$的数学期望总是$c_2(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$；
- $\boldsymbol{Y}_1$的数学期望为：
$$E(\boldsymbol{Y}_1) = \begin{cases} c_1[n_2/(n_1+n_2)](\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2), & 若\boldsymbol{X} \sim \pi_1; \\ -c_1[n_1/(n_1+n_2)](\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2), & 若\boldsymbol{X} \sim \pi_2. \end{cases}$$

- 若记$\boldsymbol{Y} = (\boldsymbol{Y}_1, \boldsymbol{Y}_2)$，且

$$\mathbf{M} = \boldsymbol{Y}'\mathbf{S}^{-1}\boldsymbol{Y} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

- 则有：$W = \sqrt{\frac{n_1+n_2+1}{n_1 n_2}} m_{12} + \frac{n_1 - n_2}{2n_1 n_2} m_{22}.$
- Sitgreaves (1952)给出了$\mathbf{M}$的密度函数，Anderson (1951)和Wald (1944)也对W的分布做了研究。

如果训练样本足够大，可以通过极限分布理论导出判别准则的渐近分布。

- 由Kolmogorov强大数定律知，当$n_i \to \infty$时，$\overline{\boldsymbol{X}}^{(i)}$是$\boldsymbol{\mu}_i$的强相合估计，$i = 1, 2$。
- 当$n_1 + n_2 \to \infty$时，$\mathbf{S}$是$\boldsymbol{\Sigma}$的强相合估计。
- 可以证明，$\mathbf{S}^{-1}$存在，并且有

$$\lim \mathbf{S}^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}, \qquad \text{a.s.}$$

- 因此，有

$$\lim_{n_1, n_2 \to \infty} \mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)}) = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2),$$

$$\lim_{n_1, n_2 \to \infty} (\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} + \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)})' \mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{X}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{X}}^{(2)}) = (\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2).$$

- 由上面的讨论，可以看出，当$n_1, n_2 \to \infty$时，W的极限分布就是U的分布。这时，给出下面的定理。

定理11.4.1

在W的定义中，$\overline{X}^{(1)}$是由总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \Sigma)$中抽取的容量为$n_1$的样本均值向量，$\overline{X}^{(2)}$是由总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \Sigma)$中抽取的容量为$n_2$的样本均值向量，且$\mathbf{S}$是$\Sigma$的估计量。当$n_1, n_2 \to \infty$时，且$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \Sigma)$时，则$W$的极限分布为$N(\Delta^2/2, \Delta^2)$；当$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \Sigma)$时，则$W$的极限分布为$N(-\Delta^2/2, \Delta^2)$。

似然比准则：从假设检验的角度介绍另一种判别准则，即似然比准则。

- 考虑下面的假设检验问题：
  1. 原假设H_0：样本$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}_1^{(1)},\cdots,\boldsymbol{x}_{n_1}^{(1)}$来自总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma})$，
     且样本$\boldsymbol{x}_1^{(2)},\cdots,\boldsymbol{x}_{n_2}^{(2)}$来自总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma})$；
  2. 备择假设H_1：样本$\boldsymbol{x}_1^{(1)},\cdots,\boldsymbol{x}_{n_1}^{(1)}$来自总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma})$，
     且样本$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{x}_1^{(2)},\cdots,\boldsymbol{x}_{n_2}^{(2)}$来自总体$N_p(\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma})$。
- $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2$和$\boldsymbol{\Sigma}$是未知的。
- 令

$$\mathbf{A}=\sum_{k=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_k}(\boldsymbol{x}_i^{(k)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(k)})(\boldsymbol{x}_i^{(k)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(k)})'.$$

在原假设H_0下，$\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2$和$\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计：

- $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11} = \dfrac{n_1\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} + \boldsymbol{x}}{n_1 + 1}$， $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{21} = \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}$
- $\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计为：

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 = \frac{1}{n_1 + n_2 + 1}\Big[\sum_{i=1}^{n_1}(\boldsymbol{x}_i^{(1)} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})(\boldsymbol{x}_i^{(1)} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})' + (\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})(\boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})' + \sum_{i=1}^{n_2}(\boldsymbol{x}_i^{(2)} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{21})(\boldsymbol{x}_i^{(2)} - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{21})'\Big]$$

- 由于

$$\sum_{i=1}^{n_1}(\boldsymbol{x}_i^{(1)}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})(\boldsymbol{x}_i^{(1)}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})'+(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})'$$

$$=\sum_{i=1}^{n_1}(\boldsymbol{x}_i^{(1)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})(\boldsymbol{x}_i^{(1)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'+n_1(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})(\overline{\boldsymbol{x}}+1-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})'+(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_{11})'$$

$$=\sum_{i=1}^{n_1}(\boldsymbol{x}_i^{(1)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})(\boldsymbol{x}_i^{(1)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'+\frac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'$$

- 则有

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_1=\frac{1}{n_1+n_2+1}\left[\mathbf{A}+\frac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'\right]$$

在备择假设H_1下，$\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2$和$\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计：

- $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{12} = \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}$
- $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{22} = \dfrac{n_2\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)} + \boldsymbol{x}}{n_2 + 1}$
- $\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计为：

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_2 = \frac{1}{n_1 + n_2 + 1}\left[\mathbf{A} + \frac{n_2}{n_2 + 1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\right]$$

- 因此，似然比准则为：

$$\frac{|\widehat{\Sigma}_2|}{|\widehat{\Sigma}_1|} = \frac{\left|\mathbf{A} + \dfrac{n_2}{n_2+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\right|}{\left|\mathbf{A} + \dfrac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'\right|}$$

- 令$n = n_1 + n_2 - 2$，进一步可以改写成：

$$\frac{|\widehat{\Sigma}_2|}{|\widehat{\Sigma}_1|} = \frac{1 + \dfrac{n_2}{n_2+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})}{1 + \dfrac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})} = \frac{n + \dfrac{n_2}{n_2+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})}{n + \dfrac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})}.$$

- 对给定的$K_n > 0$，当$\dfrac{|\widehat{\Sigma}_2|}{|\widehat{\Sigma}_1|} \geq K_n$时，判别区域落在总体$\pi_1$中，即

$$R_1 = \left\{ \boldsymbol{x} : n + \frac{n_2}{n_2+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})' \mathbf{S}^{-1} (\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}) \right.$$
$$\left. \geq K_n \left[n + \frac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})' \mathbf{S}^{-1} (\boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}) \right] \right\}$$

- 若令$K_n = 1 + 2c/n$，且n_1和n_2都很大，则R_1近似为$\{\boldsymbol{x} : W(\boldsymbol{x}) \geq c\}$。
- 若令$K_n = 1$，则当$\dfrac{|\widehat{\Sigma}_2|}{|\widehat{\Sigma}_1|} \geq 1$ 时，判定为π_1；

- 当 $\dfrac{|\widehat{\Sigma}_2|}{|\widehat{\Sigma}_1|} < 1$时，判定为$\pi_2$。这就是极大似然比准则。
- 令

$$Z = \frac{1}{2}\left[\frac{n_2}{n_2+1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}) - \frac{n_1}{n_1+1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})\right]$$

- 极大似然准则是：当$Z > 0$，归类为π_1；当$Z < 0$，归类为π_2。
- 容易看到：把观测值$\boldsymbol{x}$判别到哪个总体，就看它到哪个总体的样本均值的马氏距离比较近。如，到$\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}$的距离近，就判别到$\pi_1$，否则判别到$\pi_2$。

- 计算W与Z之间的差为：

$$W - Z = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{n_2+1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}) - \frac{1}{n_1+1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})'\mathbf{S}^{-1}(\boldsymbol{x}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)})\right]$$

- 当$n_1, n_2 \to \infty$时，$W - Z \xrightarrow{P} 0$。因此，从大样本的角度可以看出，判别准则W和Z导致的错判概率是渐近相等的。
- 当$n_1 = n_2$，$Z = [n_1/(n_1+1)]W$，对于临界点$c = 0$而言，用W和Z进行判别是等价的。

错判概率

- 在实际应用中，当决定抽取这两个训练样本之前，需要预先知道错判概率；
- 或在抽取这两个训练样本之后，需要计算错判的条件概率；
- 但是如前面所述，W和Z的精确分布很难得到，这时很难计算错判概率。
- 当$n_1, n_2 \to \infty$时，前面已经证明：
  1. 若$\boldsymbol{x}$来自总体π_1时，W和Z的极限分布是$N(\Delta^2/2, \Delta^2)$；
  2. 若$\boldsymbol{x}$来自总体π_2时，W和Z的极限分布是$N(-\Delta^2/2, \Delta^2)$。
- 因此，当$n_1, n_2 \to \infty$时，可以利用它们的极限分布计算错判概率的渐近展开。

- Okamoto (1963)将W的分布展开到n^{-2}阶;
- Siotani 和Wang (1975,1977)将W的分布展开到n^{-3} 阶。
- 令$\Phi(\cdot)$和$\phi(\cdot)$分别表示标准正态分布$N(0,1)$的分布函数和密度函数。

定理11.5.1

当$n_1 \to \infty, n_1/n_2 \to \kappa > 0, n = n_1 + n_2 - 2$时，对任何的$u$，有

$$\begin{aligned}\Pr\left(\frac{W - \frac{1}{2}\Delta^2}{\Delta} \leq u \Big| \pi_1\right) &= \Phi(u) - \phi(u)\Big\{\frac{1}{2n_1\Delta^2}[u^3 + (p-3)u - p\Delta] \\ &+ \frac{1}{2n_2\Delta^2}[u^3 + 2\Delta u^2 + (p-3+\Delta^2)u + (p-2)\Delta] \\ &+ \frac{1}{4n}[4u^3 + 4\Delta u^2 + (6p-6+\Delta^2)u + 2(p-1)\Delta]\Big\} + O(n^{-2}).\end{aligned}$$

当n_1和n_2互换时，$\Pr(-(W+\Delta^2/2)/\Delta \leq u|\pi_2)$也是上式。

统计量W的判别准则：

- 若$W(\boldsymbol{x}) > c$，则认为观测值$\boldsymbol{x}$来自于总体π_1；错判概率由定理11.5.1给出，均值为$u = (c - \Delta^2/2)/\Delta$；
- 若$W(\boldsymbol{x}) \le c$，则认为观测值$\boldsymbol{x}$来自于总体π_2；错判概率由定理11.5.1给出，均值为$u = -(c + \Delta^2/2)/\Delta$；
- 当$c = 0, u = -\Delta/2$时，若$n_1 = n_2$，则所定义的判别是minimax 的。

推论11.5.1

当n_1和n_2充分接近时，则

$$
\begin{aligned}
\Pr\left(W \le 0 \middle| \pi_1\right) &= \Phi\left(-\frac{\Delta}{2}\right) + \frac{1}{n}\phi\left(\frac{\Delta}{2}\right)\left(\frac{p-1}{\Delta} + \frac{p}{4}\Delta\right) + o(n^{-1}) \\
&= \Pr\left(W \ge 0 \middle| \pi_2\right).
\end{aligned}
$$

- 渐近展开式中的第一项是均值向量和协方差矩阵已知时的错判概率；
- 第二项是修正项，它永远是正的；
- 说明由训练样本得到的错判概率比参数已知时的错判概率要大；
- 修正项随着维数p的增大而增大，随着Δ和n的增大而减小，且修正项的阶数是n^{-1}。

- 由于Δ未知，但它与学生化的W有关，则样本的马氏平方距离为：

$$D^2 = (\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)}).$$

- 可见，它是两个总体间马氏平方距离Δ^2的一个估计。
- D^2的期望为：

$$E(D^2) = \frac{n}{n-p-1}\left[\Delta^2 + p\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\right].$$

- 显然，当$n_1 \to \infty$和$n_2 \to \infty$时，$E(D^2) \to \Delta^2$。

Anderson (1973)给出了下面定理：

定理11.5.2

若 $\lim\limits_{n\to\infty}\frac{n_1}{n_2}\to\kappa>0$ 时，其中$n=n_1+n_2-2$，对任何的u，则

$$\Pr\left(\frac{W-\frac{1}{2}D^2}{D}\leq u\Big|\pi_1\right)=\Phi(u)-\phi(u)\left\{\frac{1}{n_1}\left(\frac{u}{2}-\frac{p-1}{\Delta}\right)+\frac{1}{n}\left[\frac{u^3}{4}+\left(p-\frac{3}{4}\right)u\right]\right\}+O(n^{-2}),$$

$$\Pr\left(-\frac{W+\frac{1}{2}D^2}{D}\leq u\Big|\pi_2\right)=\Phi(u)-\phi(u)\left\{\frac{1}{n_2}\left(\frac{u}{2}-\frac{p-1}{\Delta}\right)+\frac{1}{n}\left[\frac{u^3}{4}+\left(p-\frac{3}{4}\right)u\right]\right\}+O(n^{-2}).$$

基于W错判概率的渐近展开

- 可以通过选择临界点c来控制某一个错判概率，令$\Pr(W < c|\pi_1) = \alpha$，Anderson (1973)给出了下面的定理。

定理11.5.3

令u_0使得$\Phi(u_0) = \alpha$，以及

$$u = u_0 - \frac{1}{n_1}\left(\frac{p-1}{D} - \frac{u_0}{2}\right) + \frac{1}{n}\left[\left(p - \frac{3}{4}\right)u_0 + \frac{u_0^3}{4}\right],$$

当$n_1 \to \infty, n_2 \to \infty, n_1/n_2 \to \kappa > 0$ 时，则

$$\Pr\left(\frac{W - \frac{1}{2}D^2}{D} \le u \middle| \pi_1\right) = \alpha + O(n^{-2}),$$

且$c = Du + D^2/2$能达到期望的概率α。

下面计算给定两个训练样本后的条件错判概率：

- 给定$\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}$和$\mathbf{S}$，当$\boldsymbol{x}$来自总体$\pi_k, k=1,2$，因为随机变量$W$是正态分布

1. 则其条件均值为：

$$E(W|\pi_k, \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S}) = \left[\boldsymbol{\mu}_k - \frac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} + \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})\right]' \mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})$$
$$=: u_k(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S})$$

2. 则其条件方差为：

$$\mathrm{Var}(W|\pi_k, \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S}) = (\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})$$
$$=: \sigma^2(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S})$$

- 注意到：条件均值和条件方差是样本的函数，且极限为：

$$\lim_{n_1,n_2\to\infty} u_k(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S}) = (-1)^{k-1}\frac{1}{2}\Delta^2,$$

$$\lim_{n_1,n_2\to\infty} \sigma^2(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S}) = \Delta^2.$$

- 说明：对于大的样本量n_1, n_2来说，条件错判概率近似于参数已知时的错判概率。

- 如果c是临界点，则给定$\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}$和$\mathbf{S}$的条件错判概率分别为：

$$\Pr(2|1,c,\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S})=\Phi\left[\frac{c-u_1(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S})}{\sigma(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S})}\right], \tag{6.1}$$

$$\Pr(1|2,c,\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S})=1-\Phi\left[\frac{c-u_2(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S})}{\sigma(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)},\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S})}\right]. \tag{6.2}$$

- 在式(6.1)中，令$c = Du_1 + D^2/2$，则式(6.1)中$\Phi(\cdot)$的变量变为：

$$u_1 D/\sigma + (\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}_1)/\sigma.$$

- 当$n_1 \to \infty, n_2 \to \infty$时，则

$$u_1 D/\sigma \xrightarrow{P} u_1$$

$$(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \boldsymbol{\mu}_1)/\sigma \xrightarrow{P} 0$$

- 这时式(6.1)收敛到$\Phi(u_1)$。

- 在式(6.2)中，令$c = Du_2 - D^2/2$，则式(6.2)中$\Phi(\cdot)$的变量变为：

$$u_2 D/\sigma + (\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)})' \mathbf{S}^{-1} (\bar{\boldsymbol{x}}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}_2)/\sigma.$$

- 当$n_1 \to \infty, n_2 \to \infty$时，则

$$u_2 D/\sigma \xrightarrow{P} u_2$$

$$(\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)})' \mathbf{S}^{-1} (\bar{\boldsymbol{x}}^{(2)} - \boldsymbol{\mu}_2)/\sigma \xrightarrow{P} 0$$

- 这时式(6.2)收敛到$1 - \Phi(u_2)$。

- 对于式(6.1)，考虑当$c = Du_1 + D^2/2$，通过选择适当的u_1来控制条件错判概率$\Pr(2|1, c, \bar{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S})$。
- 作为$\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)}$和$\mathbf{S}$的函数，这个条件错判概率是一个随机变量，它的分布是可以逼近的。

定理11.5.4

当$n_1 \to \infty, n_1/n_2 \to \kappa > 0$时，则

$$\Pr\left(\sqrt{n}\frac{\Pr\left(2|1, Du_1 + \frac{1}{2}D^2, \bar{\boldsymbol{x}}^{(1)}, \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)}, \mathbf{S}\right) - \Phi(u_1)}{\phi(u_2)\left(\frac{1}{2}u_1^2 + \frac{n}{n_1}\right)^{1/2}} \leq x\right)$$

$$= \Phi\left(x - \frac{(p-1)\frac{n}{n_1} - \left(p - \frac{3}{4} + \frac{n}{n_1}\right)u_1 - u_1^3/4}{\sqrt{n}\left(\frac{1}{2}u_1^2 + \frac{n}{n_1}\right)^{1/2}}\right) + O(n^{-2}).$$

- Memon 和Okamoto (1971)将Z的分布展开到n^{-2} 阶；
- Siotani 和Wang (1975,1977)将Z的分布展开到n^{-3} 阶。

定理11.5.5

当$n_1 \to \infty, n_1/n_2 \to \kappa > 0, n = n_1 + n_2 - 2$时，对任何的$u$，则

$$\begin{aligned}\Pr\left(\frac{Z - \frac{1}{2}\Delta^2}{\Delta} \le u \middle| \pi_1\right) &= \Phi(u) - \phi(u)\Big\{\frac{1}{2n_1\Delta^2}[u^3 + \Delta u^2 \\ &+ (p-3)u - \Delta] + \frac{1}{2n_2\Delta^2}[u^3 + \Delta u^2 + (p - 3 - \Delta^2)u - \Delta^3 - \Delta] \\ &+ \frac{1}{4n}[4u^3 + 4\Delta u^2 + (6p - 6 + \Delta^2)u + 2(p-1)\Delta]\Big\} + O(n^{-2}).\end{aligned}$$

当n_1和n_2互换时，$\Pr(-(Z + \Delta^2/2)/\Delta \le u|\pi_2)$也是上式。

统计量Z的判别准则：

- 若$Z > c$，则认为观测值$\boldsymbol{x}$来自于总体π_1；错判概率由定理11.5.5给出，均值为$u = (c - \Delta^2/2)/\Delta$；
- 若$Z \leq c$，则认为观测值$\boldsymbol{x}$来自于总体π_2；错判概率由定理11.5.5给出，均值为$u = -(c + \Delta^2/2)/\Delta$；
- 当$c = 0, u = -\Delta/2$时，若$n_1 = n_2$，则用Z的判别准则和用W的判别准则是等价的。

Fujikoshi 和Kanazawa (1976)给出了下面定理：

定理11.5.6

若 $\lim_{n\to\infty}\frac{n_1}{n_2}\to\kappa>0$ 时，其中$n=n_1+n_2-2$，对任何的u，则

$$\Pr\left(\frac{Z-\frac{1}{2}D^2}{D}\le u\Big|\pi_1\right)=\Phi(u)-\phi(u)\Big\{\frac{1}{2n_1\Delta}[u^2+\Delta u-(p-1)]$$
$$-\frac{1}{2n_2\Delta}\left[u^2+2\Delta u+p-1+\Delta^2\right]+\frac{1}{4n}[u^3+(4p-3)u]\Big\}+o(n^{-2}),$$
$$\Pr\left(-\frac{Z+\frac{1}{2}D^2}{D}\le u\Big|\pi_2\right)=\Phi(u)-\phi(u)\Big\{-\frac{1}{2n_1\Delta}[u^2+2\Delta u$$
$$+(p-1)+\Delta^2]+\frac{1}{2n_2\Delta}\left[u^2+\Delta u-(p-1)\right]+\frac{1}{4n}[u^3+(4p-3)u]\Big\}+o(n^{-2}).$$

- Kanazawa (1979)给出了下面定理：

定理11.5.7

令u_0使得$\Phi(u_0)=\alpha$，以及

$$\begin{aligned}u =& u_0+\frac{1}{2n_1D}[u_0^2+Du_0-(p-1)]\\ &-\frac{1}{2n_2D}[u_0^2+Du_0+(p-1)-D^2]+\frac{1}{4n}[u_0^3+(4p-5)u_0],\end{aligned}$$

当$n_1\to\infty, n_1/n_2\to\kappa>0$时，则

$$\Pr\left(\frac{Z-\frac{1}{2}D^2}{D}\leq u\Big|\pi_1\right)=\alpha+O(n^{-2}).$$

- 考虑训练样本给定后的错判概率，除非当$n_1 = n_2$时，Z是$\boldsymbol{x}$的二次型，所以Z的条件分布不是正态的，这时没有类似式(6.1) 和(6.2)的表达式。
- Siotani (1980)证明了下面的定理。

定理11.5.8

当$n_1 \to \infty, n_1/n_2 \to \kappa > 0$时，则

$$\Pr\left(2\sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1+n_2}}\frac{\Pr\left(2|1,0,\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)},\bar{\boldsymbol{x}}^{(2)},\mathbf{S}\right)-\Phi\left(-\frac{1}{2}\Delta\right)}{\phi\left(\frac{1}{2}\Delta\right)}\le x\right)$$

$$=\Phi\left(x-2\sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1+n_2}}\left\{\frac{1}{16 n_1 \Delta}[4(p-1)-\Delta^2]\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{1}{16 n_2}[4(p-1)+3\Delta^2]-\frac{(p-1)\Delta}{4n}\right\}\right)+o(n^{-2}).$$

现在考虑多个总体的判别问题：

- 令$\pi_1, \cdots, \pi_K$是K个总体，其密度函数分别为

$$f_1(\boldsymbol{x}), \cdots, f_K(\boldsymbol{x})$$

- 将整个空间划分成K个互不相交的区域$R_1, \cdots, R_K$
- 若观测值$\boldsymbol{x}$落在区域R_i中，则把它判定为来自总体π_i
- 令来自总体π_i的观测值错判到$\pi_j (j \neq i)$的损失效应为$C(j|i)$，则错判概率为：

$$\Pr(j|i, R) = \int_{R_j} f_i(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

- 假设对每个总体，有先验概率$q_1, \cdots, q_K$，则期望损失为：

$$\sum_{i=1}^{K} q_i \left\{ \sum_{j=1, j\neq i}^{K} C(j|i) \Pr(j|i, R) \right\}.$$

- 目的：选择区域$R_1, \cdots, R_K$使得上面的期望损失达到最小。
- 如何完成上面的目标？

- 由于已知总体的先验概率，可以定义观测值的条件概率，观测来自总体π_i的条件概率为：

$$\frac{q_i f_i(\boldsymbol{x})}{\sum_{k=1}^{K} q_k f_k(\boldsymbol{x})}.$$

- 若将观测值$\boldsymbol{x}$判别到总体π_j中，则给定$\boldsymbol{x}$时其条件期望损失为：

$$\sum_{i=1, i\neq j}^{K} \frac{q_i f_i(\boldsymbol{x}) C(j|i)}{\sum_{k=1}^{K} q_k f_k(\boldsymbol{x})}. \tag{7.1}$$

- 选择j使得式(7.1)达到最小，也就是使期望损失达到最小。

- 对所有的j，考虑

$$\sum_{i=1,i\neq j}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x}) C(j|i). \tag{7.2}$$

- 选择使式(7.2)最小的j。通过该方法，可以定义$\boldsymbol{x} \in R_j$。
- 对每一个$\boldsymbol{x}$，可以使用上述方法划分区域$R_1, \cdots, R_K$。
- 判别方法：当观测值$\boldsymbol{x}$落在区域R_j时，就将它归类为来自总体π_j。

定理11.6.1

假设观测值来自总体π_i的先验概率为q_i，π_i的密度函数为$f_i(\boldsymbol{x}), i = 1, \cdots, K$，来自总体$\pi_i$的观测值被错误地归类到总体$\pi_j$的损失为$C(j|i)$，则使得期望损失最小的判别方法可由下式定义。如果

$$\sum_{i=1, i\neq k}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x}) C(k|i) < \sum_{i=1, i\neq j}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x}) C(j|i),\ j = 1, \cdots, K,\ j \neq k, \tag{7.3}$$

则将观测值$\boldsymbol{x}$归类为R_k。对于任意的k和j，若式(7.3)左右两边相等的概率为0，则除了零概率集之外最优判别方法是唯一的。

证明：令$h_j(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1, i\neq j}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x}) C(j|i)$，则判别方法$R$的期望损失，即风险为

$$\sum_{j=1}^{K} \int_{R_j} h_j(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int h(\boldsymbol{x}|R) \mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

其中如果$\boldsymbol{x} \in R_j, h(\boldsymbol{x}|R) = h_j(\boldsymbol{x})$。在定理11.6.1 中描述的Bayes方法$R^*$，满足$h(\boldsymbol{x}|R^*) = \min_i h_i(\boldsymbol{x})$。因此，任意判别方法$R$和Bayes方法$R^*$的风险之差为：

$$\int [h(\boldsymbol{x}|R) - h(\boldsymbol{x}|R^*)] \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \sum_{j} \int_{R_j} [h_j(\boldsymbol{x}) - \min_i h_i(\boldsymbol{x})] \mathrm{d}\boldsymbol{x} \geq 0.$$

上式等号成立当且仅当除了零概率集外$h_j(\boldsymbol{x}) = \min_i h_i(\boldsymbol{x})$ 对任意的$\boldsymbol{x} \in R_j$成立。

现在考虑损失$C(j|i)=1, \forall i,j, i\neq j$的情形：

- 当$\boldsymbol{x}\in R_k$时，

$$\sum_{i=1,i\neq k}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x}) < \sum_{i=1,i\neq j}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x}), \quad j\neq k \tag{7.4}$$

- 从式(7.4)两边减去$\sum_{i=1,i\neq k,j}^{K} q_i f_i(\boldsymbol{x})$，可得

$$q_j f_j(\boldsymbol{x}) < q_k f_k(\boldsymbol{x}), \quad j\neq k \tag{7.5}$$

- 可知，当点$\boldsymbol{x}\in R_k$时，k就是那个使得$q_i f_i(\boldsymbol{x})$达到最大值的下标。即断定π_k是最可能的总体。

- 假定没有先验概率，不能定义判别准则的无条件期望损失。
- 但在观测值来自给定总体的条件下，可以定义一个期望损失，若观测值来自总体π_i，则

$$\sum_{j=1, j\neq i}^{K} C(j|i) \Pr(j|i, R) = r(i, R).$$

1. 若$r(i,R) \leq r(i,R^*), i = 1, \cdots, m$，则说明方法$R$至少和$R^*$一样好；
2. 若有一个不等号严格成立，则说方法R比R^*真好；
3. 容许性：若没有方法R^*比R真好，则说R是容许的；
4. 完备性：若对给定判别方法类外的每一个判别方法R，判别方法类中都有一个方法R^*比R好，则称该判别方法类是完备的。

现在来证明Bayes方法是容许的：

- 令R是一个Bayes判别方法，R^*是另一个判别方法。由于R是Bayes方法，则
$$\sum_{i=1}^{K} q_i r(i,R) \leq \sum_{i=1}^{K} q_i r(i,R^*).$$
- 假设$q_1 > 0, q_2 > 0, r(2,R^*) \leq r(2,R)$且$r(i,R^*) \leq r(i,R), i = 3, \cdots, K$，则
$$q_1[r(1,R) - r(1,R^*)] \leq \sum_{i=2}^{K} q_i[r(i,R^*) - r(i,R)] < 0$$
- 显然，$r(1,R) < r(1,R^*)$。因此，R^*不会比R真好。

定理11.6.2

若先验概率$q_i > 0$，$i = 1, \cdots, K$，则Bayes方法是容许的。

定理11.6.3

若$C(i|j) = 1$，$i \neq j$且$\Pr\{f_i(\boldsymbol{x}) = 0|\pi_j\} = 0$，则任何Bayes方法都是容许的。

定理11.6.3的证明作为练习，课下参考Anderson (2003)。

定理11.6.4

每一个容许的判别方法是Bayes判别方法。

- 令$N_p(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma)$是$\pi_i$的分布，密度函数用$f_i(\boldsymbol{x})$表示，$i = 1, \cdots, K$。
- 假定错判损失是相等的，则使用函数

$$
\begin{aligned}
u_{jk}(\boldsymbol{x}) &= \ln \frac{f_j(\boldsymbol{x})}{f_k(\boldsymbol{x})} \\
&= \left[\boldsymbol{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_j + \boldsymbol{\mu}_k)\right]' \Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_j - \boldsymbol{\mu}_k).
\end{aligned} \tag{8.1}
$$

- 如果先验概率已知，则区域R_j有如下的定义：

$$
R_j = \left\{\boldsymbol{x} : u_{jk}(\boldsymbol{x}) > \ln \frac{q_k}{q_j}, k = 1, \cdots, K, \ \ k \neq j\right\}. \tag{8.2}
$$

定理11.7.1

若q_i是观测值来自$\pi_i = N_p(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma), i = 1, \cdots, K$ 的先验概率，且错判损失是相等的，则由式(8.2) 的判别区域$R_1, \cdots, R_K$使得期望损失达到最小，其中$u_{jk}(\boldsymbol{x})$由式(8.1)所定义，其中$j \neq k$。

1. $u_{jk}(\boldsymbol{x})$是与第j个总体和第k个总体相关的判别函数，且$u_{jk}(\boldsymbol{x}) = -u_{kj}(\boldsymbol{x})$。
2. 既然这些判别函数是线性的，所以区域R_i是被某些超平面界定的。
3. 对于每个$j \neq k$，不等式(8.2)是用超平面$u_{jk}(\boldsymbol{x}) = \ln(q_k/q_j)$把欧氏空间$\mathbb{R}^p$分成了两部分，$R_j$落在$u_{jk} > \ln(q_k/q_j)$的那半个空间里。

- 在先验概率未知的情况下，区域R_j由下列不等式定义：

$$u_{jk}(\boldsymbol{x}) \geq c_j - c_k, \quad k = 1, \cdots, K, \quad k \neq j, \tag{8.3}$$

其中c_k可取为负。这些区域形成一个容许方法族。

- 对于minimax方法，常数的选取方法是使所有的$\Pr(i|i, R)$都相等。
- 现在来看如何计算正确判别的概率。若$\boldsymbol{X}$是一个随机观测向量，考虑下面的随机变量：

$$U_{ji} = \left[\boldsymbol{X} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_j + \boldsymbol{\mu}_i)\right]' \Sigma^{-1}(\boldsymbol{\mu}_j - \boldsymbol{\mu}_i) = -U_{ij}.$$

如果这K个总体的均值向量张成一个$K-1$维空间(即指K个均值向量线性无关)，则可以利用上述$K(K-1)/2$个判别函数来进行判别。方法如下：

- 若$\boldsymbol{X}$来自总体π_j，则U_{ji}的分布为$N(\Delta_{ji}^2/2, \Delta_{ji}^2)$，其中

$$\Delta_{ji}^2 = (\boldsymbol{\mu}_j - \boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_j - \boldsymbol{\mu}_i).$$

- U_{ji}和U_{jk}的协方差为：$\Delta_{jk,ji} = (\boldsymbol{\mu}_j - \boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_j - \boldsymbol{\mu}_k)$。
- 为了确定常数c_j，考虑积分

$$\Pr(j|j,R) = \int_{c_j-c_m}^{\infty} \cdots \int_{c_j-c_1}^{\infty} f_j \mathrm{d}u_{j1} \cdots \mathrm{d}u_{j,j-1}\mathrm{d}u_{j,j+1} \cdots \mathrm{d}u_{jm},$$

其中f_j是$\{U_{ji}, i=1,\cdots,K,\ i\neq j\}$的联合密度函数。

定理11.7.2

若$\pi_i = N_p(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma})$，$i = 1, \cdots, K$，且错判损失是相等的，则判别区域$R_1, \cdots, R_K$使得由式(8.3) 定义的最大条件期望损失达到最小，其中$u_{jk}(\boldsymbol{x})$由式(8.1) 所定义，其中$j \neq k$，常数c_j的选取是由上述积分相等来确定。

1. 上面的定理的结果是在参数已知的情况下得到的，在实际问题中这些参数是未知。
2. 如果这些参数是未知的，且每个总体有一个训练样本可用，则可以把这些未知参数通过训练样本估计出来，代入到$u_{ij}(\boldsymbol{x})$的定义中，进而进行判别分析。

- 设有样本$\boldsymbol{x}_1^{(i)},\cdots,\boldsymbol{x}_{n_i}^{(i)}\sim N_p(\boldsymbol{\mu}_i,\Sigma),i=1,\cdots,K$
- 均值向量$\boldsymbol{\mu}_i$的估计：$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i=\overline{\boldsymbol{x}}^{(i)}=\frac{1}{n_i}\sum_{k=1}^{n_i}\boldsymbol{x}_k^{(i)}$
- Σ的估计为$\mathbf{S}$，定义为：

$$\left(\sum_{i=1}^{K}n_i-K\right)\mathbf{S}=\sum_{i=1}^{K}\sum_{k=1}^{n_i}(\boldsymbol{x}_k^{(i)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(i)})(\boldsymbol{x}_k^{(i)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(i)})'$$

- 则可定义下面的判别函数：

$$w_{ij}(\boldsymbol{x})=\left[\boldsymbol{x}-\frac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(i)}+\overline{\boldsymbol{x}}^{(j)})\right]'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\boldsymbol{x}}^{(i)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(j)}),\quad i\neq j.$$

- Rao (1948)考虑了贵族(π_1)，工匠(π_2)和贫民(π_3)三个阶层。每个阶层的测量值为x_1(身高)，x_2(坐高)，x_3(鼻深)和x_4(鼻长)。这些变量的均值由下表给出。

Table: 三个印度阶层关于身高、坐高、鼻深和鼻长的均值。

测量	贵族(π_1)	工匠(π_2)	贫民(π_3)
x_1(身高)	164.51	160.53	158.17
x_2(坐高)	86.43	81.47	81.16
x_3(鼻深)	25.49	23.84	21.44
x_4(鼻长)	51.24	48.62	46.72

- 所有总体的相关系数矩阵为：

$$\begin{pmatrix} 1.0000 & 0.5849 & 0.1774 & 0.1974 \\ 0.5849 & 1.0000 & 0.2094 & 0.2170 \\ 0.1774 & 0.2094 & 1.0000 & 0.2910 \\ 0.1974 & 0.2170 & 0.2910 & 1.0000 \end{pmatrix}$$

- 标准差分别为：$\sigma_1 = 5.74$，$\sigma_2 = 3.20$，$\sigma_3 = 1.75$，$\sigma_4 = 3.50$。
- 问题：假定每个总体是正态的，将由四个变量x_1，x_2，x_3，x_4 形成的空间划分成三个判别区域。

假定错判损失是相等的，要找到：

1. 一个区域族，使得一个新的观测值来自每个总体是等可能的，即$q_1 = q_2 = q_3 = \dfrac{1}{3}$
2. 该区域族使得错判的最大概率达到最小，即minimax判别。

求解：

- 首先计算：$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$和$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_3)$的系数，即

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_3) = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_3) - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2).$$

- 然后计算：

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_i + \boldsymbol{\mu}_j)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j).$$

- 可获得判别函数：

$$
\begin{aligned}
u_{12}(\boldsymbol{x}) &= -0.0708x_1 + 0.4990x_2 + 0.3373x_3 + 0.0887x_4 - 43.13, \\
u_{13}(\boldsymbol{x}) &= 0.0003x_1 + 0.3550x_2 + 1.1063x_3 + 0.1375x_4 - 62.49, \\
u_{23}(\boldsymbol{x}) &= 0.0711x_1 - 0.1440x_2 + 0.7690x_3 + 0.0488x_4 - 19.36.
\end{aligned}
$$

- 其他三个函数为：$u_{21}(\boldsymbol{x}) = -u_{12}(\boldsymbol{x})$，$u_{31}(\boldsymbol{x}) = -u_{13}(\boldsymbol{x})$ 和$u_{32}(\boldsymbol{x}) = -u_{23}(\boldsymbol{x})$。
- 若它们有一个先验概率，并且相等，则最好的判别区域为：

$$
\begin{aligned}
R_1 &: u_{12}(\boldsymbol{x}) \geq 0, \quad u_{13}(\boldsymbol{x}) \geq 0; \\
R_2 &: u_{21}(\boldsymbol{x}) \geq 0, \quad u_{23}(\boldsymbol{x}) \geq 0; \\
R_3 &: u_{31}(\boldsymbol{x}) \geq 0, \quad u_{32}(\boldsymbol{x}) \geq 0.
\end{aligned}
$$

- 例如，若测量值$\boldsymbol{x}$的个体满足：$u_{12}(\boldsymbol{x}) \geq 0$且$u_{13}(\boldsymbol{x}) \geq 0$，则把它归类为贵族。
- 当一个个体来自总体π_k时，为了找到错判概率，需要知道u中任意两个均值，方差和协方差，见下表。

Table: 三个印度阶层的判别函数

总体	u	均值	标准差	相关系数
π_1	u_{12}	1.491	1.727	
	u_{13}	3.487	2.641	0.8658
π_2	u_{21}	1.491	1.727	
	u_{23}	1.031	1.436	−0.3894
π_3	u_{31}	3.487	2.641	
	u_{32}	1.031	1.436	0.7983

- 错判概率可以通过二元正态分布表得到，这些错判概率分别为：
  1. 样本来于π_1时0.21；
  2. 样本来于π_2时0.42；
  3. 样本来于π_3时0.25。
- 例如，若个体来自贵族，却将其错误归类到工匠或贫民的概率为0.21。
- Minimax方法是通过式(8.3)选择c_1, c_2, c_3使得错判概率相等，这些判别区域为：

$$
\begin{aligned}
R_1' &: u_{12}(\boldsymbol{x}) \geq 0.54, \quad u_{13}(\boldsymbol{x}) \geq 0.29; \\
R_2' &: u_{21}(\boldsymbol{x}) \geq -0.54, \quad u_{23}(\boldsymbol{x}) \geq -0.25; \\
R_3' &: u_{31}(\boldsymbol{x}) \geq -0.29, \quad u_{32}(\boldsymbol{x}) \geq 0.25.
\end{aligned}
$$

- 错判的共同概率为0.30，因此，错判的最大概率从0.42减少到0.30。

- 在R语言中，QDA和LDA方法分别可以使用程序包MASS中的函数qda()和lda()来实现，它们有三种调用格式。

```
#### 第一种调用格式：
qda(formula, data, ..., subset, na.action)
lda(formula, data, ..., subset, na.action)
```

其中formula表示判别公式，形式为：groups~x1+x2+...；
data表示数据集；subset表示子样本；na.action表示处理缺失值的方法，默认为如果样本中有缺失值，则函数无法运行；如果设置为na.omit，则表示自动删除样本中的缺失值，然后进行计算。

```
#### 第二种调用格式:
qda(x, grouping, prior = proportions, method, CV = FALSE, nu, ...)
lda(x, grouping, prior = proportions, tol = 1.0e-4,
    method, CV = FALSE, nu, ...)
```

其中x表示数据框数据；grouping表示每个观测样本的所属类别；prior表示各类别的先验概率，默认取训练集中各样本的比例；tol表示筛选变量，默认取0.0001；如果CV=TRUE，表示返回结果是采用了去一交叉验证(LOOCV)方法得到的分类结果或后验概率；其他参数见在线帮助。

```
#### 第三种调用格式:
qda(x, grouping, ..., subset, na.action)
lda(x, grouping, ..., subset, na.action)
```

其中x表示数据矩阵，其他参数相同于上面两种调用格式。

- 例：三文鱼数据
- 目的：试用LDA和QDA 方法对三文鱼数据集进行判别分析，并对结果进行可视化分析。
- 数据集来自程序包rrcov，数据的值放大了100 倍，单位是英寸
- X_1表示第一年淡水(Freshwater)生长年轮直径大小
- X_2 表示第一年深海(Marine)生长年轮直径大小
- “1" 表示雌性，“2" 表示雄性

表 11.4　三文鱼数据

Alaskan						Canadian					
Gender	X_1	X_2	Gender	X_1	X_2	Gender	X_1	X_2	Gender	X_1	X_2
2	108	368	2	85	444	1	129	420	2	134	383
1	131	355	1	109	397	1	148	371	1	117	355
1	105	469	2	106	442	1	179	407	2	126	345
2	86	506	1	82	431	2	152	381	1	118	379
1	99	402	2	118	381	2	166	377	2	120	369
2	87	423	1	105	388	2	124	389	1	153	403
1	94	440	1	121	403	1	156	419	2	150	354
2	117	489	1	85	451	2	131	345	1	154	390
2	79	432	1	83	453	1	140	362	1	155	349
1	99	403	1	53	427	2	144	345	2	109	325
1	114	428	1	95	411	2	149	393	2	117	344
2	123	372	1	76	442	1	108	330	1	128	400
1	123	372	1	95	426	1	135	355	1	144	403
2	109	420	2	87	402	2	170	386	2	163	370
2	112	394	1	70	397	1	152	301	2	145	355
1	104	407	2	84	511	1	153	397	1	133	375
2	111	422	2	91	469	1	152	301	1	128	383
2	126	423	1	74	451	2	136	438	2	123	349
2	105	434	2	101	474	2	122	306	1	144	373
1	119	474	1	80	398	1	148	383	2	140	388
1	114	396	1	95	433	2	90	385	2	150	339
2	100	470	2	92	404	1	145	337	2	124	341
2	84	399	1	99	481	1	123	364	1	125	346
2	102	429	2	94	491	2	145	376	1	153	352
2	101	469	1	87	480	2	115	354	1	108	339

```
library(rrcov); library(MASS); data(salmon)
lda.fit = lda(Origin~Freshwater+Marine,data=salmon,prior=c(1,1)/2)
#### 函数lda()的输出结果:
Call:
lda(Origin ~ Freshwater+Marine, data=salmon, prior=c(1, 1)/2)
Prior probabilities of groups:
 Alaskan Canadian
     0.5      0.5
Group means:
         Freshwater Marine
Alaskan       98.38 429.66
Canadian     137.46 366.62
Coefficients of linear discriminants:
                   LD1
Freshwater  0.04458572
Marine     -0.01803856
#### 利用函数predict()进行预测:
lda.predict = predict(lda.fit, newdata=salmon)
table(salmon[,4],lda.predict$class)
#### 输出混淆矩阵:
           Alaskan Canadian
  Alaskan       44        6
  Canadian       1       49
```

- 函数plot()绘制线性判别图像
- 使用程序包klaR中的函数partimat()对判别分析效果进行可视化
- 不仅给出了分类的错判率，还给出了分类情况和决策边界

```
#### 函数plot()绘制线性判别图像:
plot(lda.fit)

library(klaR)
partimat(Origin ~ Marine+Freshwater, data=salmon,
         method="lda",
         main = "Linear Discriminant Analysis")
```

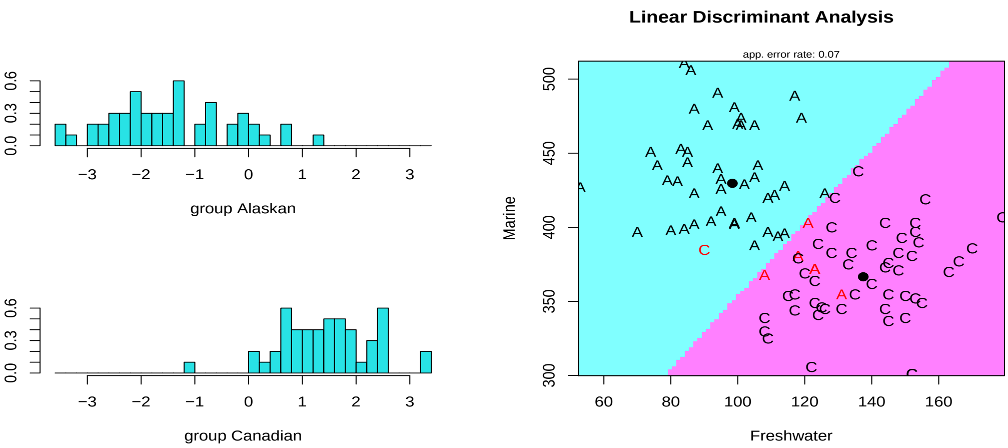


Figure: 左：线性判别图像；右：线性判别函数的决策边界。

(1) 函数lda()输出了先验概率，类平均值，以及线性判别函数中的淡水和深海的组合系数，用来形成LDA方法的决策准则，线性判别函数为：

$$0.044 \times \text{Freshwater} - 0.018 \times \text{Marine};$$

(2) 函数predict()返回一个三元列表，第一个元素$class 给出了LDA方法关于三文鱼的预测结果；第二个元素$posterior是一个$100 \times 2$的矩阵，其中第$k$列是观测值属于第$k$类的后验概率，且$k = 1, 2$；第三个元素$x给出了每个样本的线性判别；

(3) 由预测结果可知，当线性判别的值为正时，把该样本判别为加拿大三文鱼，否则判别为阿拉斯加三文鱼；

(4) 从混淆矩阵可知，LDA 方法的错判率为$(6+1)/100=0.07$；

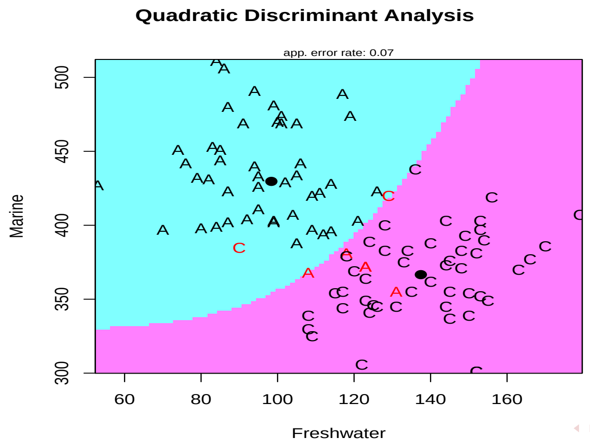
(5) 线性判别的决策边界是一条线性函数，LDA 方法只能用于协方差矩阵相等的情形，而经计算，阿拉斯加和加拿大的样本协方差矩阵分别为：

$$\mathbf{S}_{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 260.6078 & -188.0927 \\ -188.0927 & 1399.0861 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{S}_{\mathrm{C}} = \begin{pmatrix} 326.0902 & 133.5049 \\ 133.5049 & 893.2608 \end{pmatrix}.$$

```
qda.fit = qda(Origin~Marine+Freshwater, data=salmon)
#### 函数qda()的输出结果:
Call:
qda(Origin ~ Marine + Freshwater, data = salmon)
Prior probabilities of groups:
 Alaskan Canadian
     0.5      0.5
Group means:
         Marine Freshwater
Alaskan  429.66      98.38
Canadian 366.62     137.46
#### 利用函数predict()进行预测:
qda.predict = predict(object=qda.fit, newdata=salmon)
table(salmon[,4], qda.predict$class)
#### 输出混淆矩阵:
           Alaskan Canadian
  Alaskan       45        5
  Canadian       2       48
```

```
partimat(Origin ~ Marine+Freshwater, data=salmon,
         method="qda", main= "Quadratic Discriminant Analysis")
```



- 例：Fisher Iris数据集
  1. R语言中自带的Iris数据有四个属性，萼片长度、萼片宽度、花瓣长度和花瓣宽度
  2. 数据共有150个样本，分为三类：前50个样本是属于第一类—Setosa，中间的50 个样本属于第二类—Versicolor，最后50个样本属于第三类—Virginica
- 现将该数据集随机分成两部分：
  1. 75个样本作为训练集训练判别函数
  2. 75个样本作为测试集来测试判别精度
- 目的：试用LDA和QDA方法建立判别分类器，并对结果进行可视化分析。

```
library(MASS); data(iris); set.seed(2021)
train = sample(1:150, 75)
table(iris$Species[train])          ## 展示训练样本
    setosa versicolor  virginica
        24         21         30
lda.iris=lda(Species ~ ., iris, prior=c(24,21,30)/75, subset=train)
plot(lda.iris, abbrev=T, col=as.numeric(iris$Species[train]))
#### 输出结果:
Call:
lda(Species ~ ., data=iris, prior=c(24, 21, 30)/75, subset=train)
Prior probabilities of groups:
    setosa versicolor  virginica
      0.32       0.28       0.40
```

```
Group means:
           Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
setosa         5.079167    3.541667     1.462500   0.2666667
versicolor     5.961905    2.704762     4.228571   1.2857143
virginica      6.570000    2.930000     5.553333   2.0100000
Coefficients of linear discriminants:
                   LD1         LD2
Sepal.Length  1.276769  0.06739943
Sepal.Width   1.204560 -2.29478268
Petal.Length -2.737373  0.51175177
Petal.Width  -2.104923 -2.18494902
Proportion of trace:
   LD1    LD2
0.9901 0.0099
```

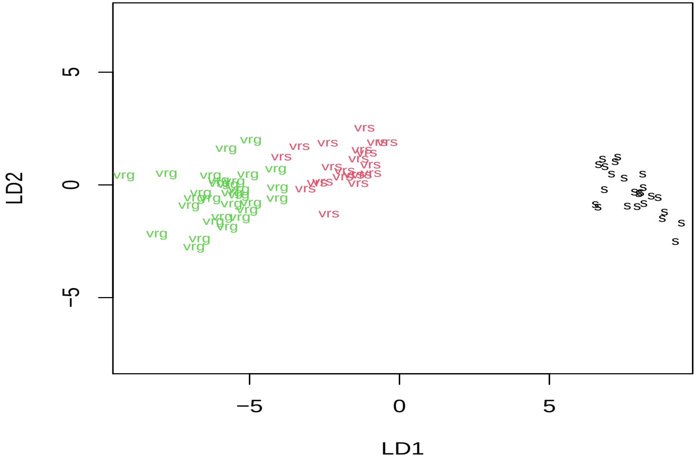


Figure: 基于Fisher Iris训练数据的线性判别图像。

- 函数lda()输出的结果包括每个类别的先验概率、每个类别数据的组平均值、第一和第二线性判别函数的系数(因为有三个类别，所以需要两个判别函数)、以及第一和第二线性判别函数解释方差的比例
- 第一线性判别函数能够解释总体数据99.01%的方差
- 两个线性判别函数为：

$$
\begin{aligned}
W_1 =& 1.28 \times \text{Sepal.Length} + 1.20 \times \text{Sepal.Width} \\
& - 2.74 \times \text{Petal.Length} - 2.10 \times \text{Petal.Width}, \\
W_2 =& 0.07 \times \text{Sepal.Length} - 2.29 \times \text{Sepal.Width} \\
& + 0.51 \times \text{Petal.Length} - 2.18 \times \text{Petal.Width}.
\end{aligned}
$$

```
piris.lda = predict(lda.iris,  iris[-train, ])$class
cl.test   = iris$Species[-train]
table(cl.test, piris.lda)
#### 输出结果:
            piris.lda
cl.test      setosa versicolor virginica
  setosa         26          0         0
  versicolor      0         27         2
  virginica       0          0        20
#### 利用函数classError()计算分类错误率:
library(mclust); classError(piris.lda,cl.test)
$misclassified
[1] 41 47
$errorRate
[1] 0.02666667
```

- 采用LOOCV方法在整个数据集上对LDA方法的判别精度进行评价，只需要在函数lda() 中设置参数CV=TRUE

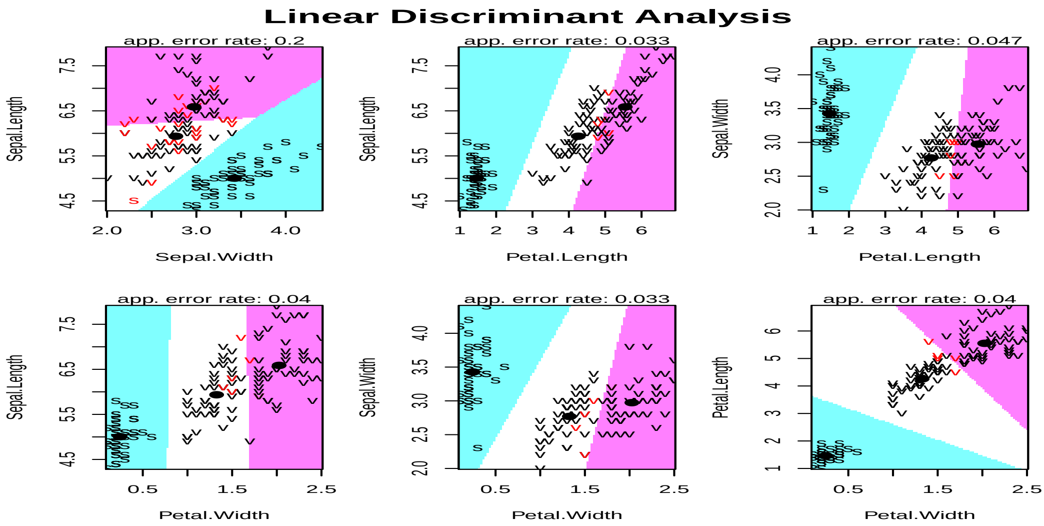
```
cv.lda=lda(Species~.,iris,prior=c(24,21,30)/75,CV=TRUE)
table(iris$Species, cv.lda$class)
#### 输出混淆矩阵:
             setosa versicolor virginica
  setosa         50          0         0
  versicolor      0         48         2
  virginica       0          1        49
> mean(iris$Species!=cv.lda$class)
[1] 0.02
```

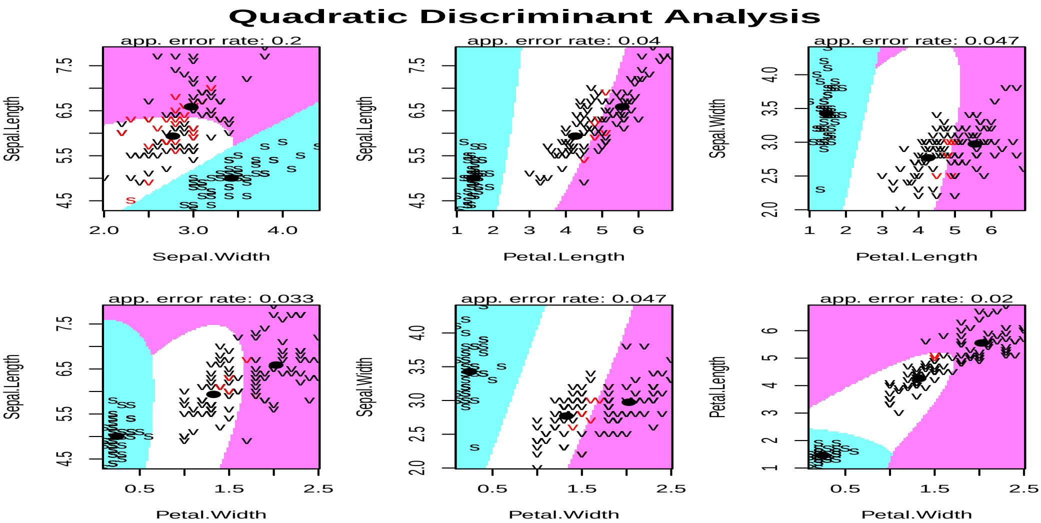
```
set.seed(2021); tr.id = sample(1:50, 25)
train = rbind(iris3[tr.id,,1], iris3[tr.id,,2], iris3[tr.id,,3])
test = rbind(iris3[-tr.id,,1], iris3[-tr.id,,2], iris3[-tr.id,,3])
cl = factor(c(rep("s",25), rep("c",25), rep("v",25)))
qda.iris = qda(train, cl, method="mle")
piris.qda = predict(qda.iris,test)$class
classError(piris.qda,cl)
$misclassified
[1] 45 70
$errorRate
[1] 0.02666667
```

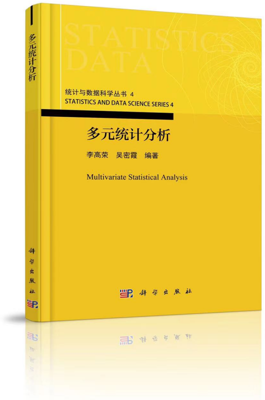
```
#### LOOCV方法的QDA评价:
cv.qda = qda(Species~., data=iris, CV=TRUE)
cv.qda$class
table(iris$Species, cv.qda$class)
#### 输出混淆矩阵:
             setosa versicolor virginica
  setosa         50          0         0
  versicolor      0         47         3
  virginica       0          1        49
> mean(iris$Species!=cv.qda$class)
[1] 0.02666667
```

- 使用程序包klaR中的函数partimat()对判别分析效果进行可视化

```
library(MASS)
library(klaR)
partimat(Species ~ ., data = iris, method = "lda",
         main = "Linear Discriminant Analysis")
partimat(Species ~ ., data = iris, method = "qda",
         main = "Quadratic Discriminant Analysis")
```


Linear Discriminant Analysis
app. error rate: 0.2
app. error rate: 0.033
app. error rate: 0.047
app. error rate: 0.04
app. error rate: 0.033
app. error rate: 0.04
Sepal.Length
Sepal.Width
Petal.Length
Petal.Width


Quadratic Discriminant Analysis
app. error rate: 0.2
app. error rate: 0.04
app. error rate: 0.047
app. error rate: 0.033
app. error rate: 0.047
app. error rate: 0.02
Sepal.Length
Sepal.Width
Petal.Length
Petal.Width
Sepal.Width
Petal.Length
Petal.Length
Sepal.Length
Sepal.Length
Petal.Width
Sepal.Width
Petal.Width
Petal.Length
Petal.Width



多元统计分析
STATISTICS
DATA
统计与数据科学丛书 4
STATISTICS AND DATA SCIENCE SERIES 4
多元统计分析
李高荣 吴密霞 编著
Multivariate Statistical Analysis
科学出版社

谢谢，请多提宝贵意见！