对 $\boldsymbol{x}$ 中的各个成分作线性组合, 得到 $y=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$, 这样 n 个样本 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_m$ 就产生了 n 个投影结果 $y_1,\cdots,y_n$, 相应的属于集合 Y_0 和 Y_1, 即 $Y_i=\boldsymbol{w}^T X_i\ (i=0,1)$. 如果 $\boldsymbol{\mu}_i$ 为 d 维样本均值为

$$\boldsymbol{\mu}_i=\frac{1}{n_i}\sum_{\boldsymbol{x}\in X_i}\boldsymbol{x},\quad i=0,1,$$

定义**类间散度矩阵** $\boldsymbol{S}_b=(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)^T$, 可证明其为对称半正定的. 投影后两类样本均值之差展开为

$$|\tilde{\mu}_0-\tilde{\mu}_1|^2=\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)^T\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}.$$

原样本空间 X_1 和 X_2 的协方差矩阵

$$C_1=\frac{1}{n_1}\sum_{x\in X_0}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_0)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_0)^T$$

$$C_2=\frac{1}{n_2}\sum_{x\in X_1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)^T$$

定义原样本空间 X_1 和 X_2 中的**类内散度矩阵**

$$\boldsymbol{\Sigma}_0=\sum_{x\in X_0}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_0)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_0)^T,$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_1=\sum_{x\in X_1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_1)^T.$$

则总类内散度矩阵 $\boldsymbol{S}_w=\boldsymbol{\Sigma}_0+\boldsymbol{\Sigma}_1$, 可证明其是对称半正定的.

投影后第 i 内的类内散度为:

$$\begin{aligned}\tilde{s}_i^2&=\sum_{y\in Y_i}(y-\tilde{\mu}_i)^2\\&=\sum_{y\in Y_i}(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}-\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\mu}_i)^2\\&=\sum_{\boldsymbol{x}\in X_i}\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_i)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_i)^T\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\Sigma}_i\boldsymbol{w}.\end{aligned}$$

故散度矩阵总和可写为 $\tilde{s}_0^2+\tilde{s}_1^2=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}$. 所以

$$J(\boldsymbol{w})=\frac{|\tilde{\mu}_0-\tilde{\mu}_1|^2}{\tilde{s}_0^2+\tilde{s}_1^2}=\frac{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}}.$$

- m维空间到一维空间投影轴的最佳方向

$$\boldsymbol{w}^* = \mathbf{S}_w^{-1}(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)$$ （因$\boldsymbol{w}$与大小无关，只与方向有关）

- J(w) 最大值

$$(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w^{-1}(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)$$

- 最佳投影变换为

$$y = (\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w^{-1}\boldsymbol{x}$$

由两类二维数据计算线性判别分析(LDA)投影向量

第一类采样数据ω_1： $\mathbf{X}_1=(x_1,x_2)=\{(4,2),(2,4),(2,3),(3,6),(4,4)\}$ （红色点）

第二类采样数据ω_2： $\mathbf{X}_2=(x_1,x_2)=\{(9,10),(6,8),(9,5),(8,7),(10,8)\}$ （蓝色点）

$$\mu_1 = \frac{1}{N_1}\sum_{x\in\omega_1} x = \frac{1}{5}\left[\begin{pmatrix}4\\2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}2\\3\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3\\6\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}4\\4\end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}$$ 均值

$$\mu_2 = \frac{1}{N_2}\sum_{x\in\omega_2} x = \frac{1}{5}\left[\begin{pmatrix}9\\10\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}6\\8\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}9\\5\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}8\\7\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}10\\8\end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}$$

第一类样本的**类内散度矩阵**为：

$$S_1 = \sum_{x\in\omega_1}(x-\mu_1)(x-\mu_1)^T = \left[\begin{pmatrix}4\\2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}\right]^2 + \left[\begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}\right]^2$$

$\frac{1}{n-1}$

$$+\left[\begin{pmatrix}2\\3\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}\right]^2 + \left[\begin{pmatrix}3\\6\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}\right]^2 + \left[\begin{pmatrix}4\\4\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}\right]^2$$

$$= \begin{pmatrix}1 & -0.25\\ -0.25 & 2.2\end{pmatrix}$$

日期:　　/

第二类样本的**类内散度矩阵**为:

$$S_2=\sum_{x\in\omega_2}(x-\mu_2)(x-\mu_2)^T=\left[\begin{pmatrix}9\\10\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]^2+\left[\begin{pmatrix}6\\8\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]^2$$

$$+\left[\begin{pmatrix}9\\5\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]^2+\left[\begin{pmatrix}8\\7\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]^2+\left[\begin{pmatrix}10\\8\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]^2$$

$$=\begin{pmatrix}2.3&-0.05\\-0.05&3.3\end{pmatrix}\rightarrow\begin{matrix}9.2&0.2\\-0.2&13.2\end{matrix}$$

总类内散度矩阵为:

$$S_w=S_1+S_2=\begin{pmatrix}1&-0.25\\-0.25&2.2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}2.3&-0.05\\-0.05&3.3\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}3.3&-0.3\\-0.3&5.5\end{pmatrix}\qquad\begin{matrix}13.2&1.2\\-1.2&22\end{matrix}$$

类间散度矩阵为:

$$S_B=(\mu_1-\mu_2)(\mu_1-\mu_2)^T$$

$$=\left[\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]\left[\begin{pmatrix}3\\3.8\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}8.4\\7.6\end{pmatrix}\right]^T$$

$$=\begin{pmatrix}-5.4\\-3.8\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-5.4&-3.8\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}29.16&20.52\\20.52&14.44\end{pmatrix}$$

日期: /

直接计算w：

$$w^* = S_W^{-1}(\mu_1 - \mu_2) = \begin{pmatrix} 3.3 & -0.3 \\ -0.3 & 5.5 \end{pmatrix}^{-1} \left[\begin{pmatrix} 3 \\ 3.8 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 8.4 \\ 7.6 \end{pmatrix} \right]$$

$$\begin{bmatrix} 13.2 & 1.2 \\ -1.2 & 22 \end{bmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} 0.3045 & 0.0166 \\ 0.0166 & 0.1827 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -5.4 \\ -3.8 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0.9088 \\ 0.4173 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 22 & 1.2 \\ -1.2 & 13.2 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{\underbrace{13.2 \times 22 + 1.2 \times 1.2}_{=291.84}} \begin{bmatrix} -5.4 \\ -3.8 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{matrix} -0.42226 \\ -0.1496 \end{matrix}$$