

多元统计分析导论

Ny *

nymath@163.com

2022 年 11 月 11 日

摘要

测试

目录

1 样本几何	2
2 多元假设检验	3
3 判别分析	4
3.1 贝叶斯判别法	4
3.2 Fisher 判别法	5
4 主成分分析	6
4.1 协方差矩阵法	6
4.2 相关系数法	8
4.3 主成分的几何含义	8

插图

*我会不定期更新笔记，如果感兴趣的话，可以前往<https://github.com/nymath/notes4master>获取最新版本。

1 样本几何

弹到坐标，必须得提到基，我们把坐标定义为一个矩阵。

1.1 Definition 坐标

Suppose $x \in \mathbb{R}^n$, then the matrix of x is defined by

$$\mathcal{M}(x, e) = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

where e is the standard orthonormal basis of \mathbb{R}^n .

1.2 Theorem 坐标变换

Suppose $x \in \mathbb{R}^n$, e, ν are basis of \mathbb{R}^n , then

$$\mathcal{M}(x, e) = \mathcal{M}(I, \nu, e) \mathcal{M}(x, \nu)$$

or equivalently,

$$\mathcal{M}(x, \nu) = \mathcal{M}(I, e, \nu) \mathcal{M}(x, e)$$

1.3 Definition

$$\mathcal{M}(I, e, \nu) = \frac{\partial \nu}{\partial x}$$

Example 1.4:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

假定样本点为 P, p 在 e 下的坐标为 x, y, z , 那么 p 在 ν 下的坐标为 (u, v, w) , 其中 ν 可以通过 $A^{-1}e$ 得到

Remark: 可能你发现了，我在说基的时候，只写了 e, ν . 思考一下我为什么写? (family 是映射，不是集合)

2 多元假设检验

3 判别分析

3.1 贝叶斯判别法

这里顺便复习一下，贝叶斯统计。假设总体有 k 个类别，我们用 Θ 表示， $\Theta \sim (p_1, \dots, p_k)$ 。用 X 代表数据展现出的特征，同时我们有条件密度函数

$$f(x|\Theta = i) = f_i(x)$$

这个条件密度函数可以通过样本进行估计（或者直接给定，但前者更好）。基于此，我们得到参数的后验分布， $\Theta_{|X=x}$ ，他服从

$$\Theta_{|X=x} \sim \left(\frac{f_i(x)P_i}{\sum_{i=1}^k P_i f_i(x)} \right)$$

接下来，我们想选择一个随机变量（估计量），他与 $\Theta_{|X=x}$ 的”距离”充分接近。常用的备选有

- L^2 距离: $L(\theta, \Theta_{|X=x}) = E(\theta - \Theta_{|X=x})^2$.
- L^1 距离: $L(\theta, \Theta_{|X=x}) = E(|\theta - \Theta_{|X=x}|)$.
-

Remark: 特别的，在 L^2 距离意义下，我们的估计是 $E(\Theta|X = x)$ 。

但是呢，在判别分析中，我们有更一般的损失函数，即

$$L(\theta, \Theta_{|X=x}) = E(c(\theta|\Theta_{|X=x})).$$

Example 3.1: 当 $c(\theta|\Theta_{|X=x}) = 1 - \chi_\theta(\Theta_{|X=x})$ 时，期望损失为

$$1 - \sum_{i=1}^n \chi_\theta(i) \frac{f_i(x)P_i}{\sum_{i=1}^k P_i f_i(x)}$$

因此，当 θ 等于 $\Theta_{|X=x}$ 的众数时，期望损失最小。

更一般的，我们的损失函数可以定义为

$$L(\theta, \Theta_{|X=x}) = \sum_{j=1}^k c(\theta|j) \frac{f_j(x)P_j}{\sum_{i=1}^k P_i f_i(x)}$$

3.2 Fisher 判别法

Fisher 判别法的思路在于, \mathbb{R}^p 的一个向量, 将我们的各组数据投影在这个向量上, 使得组内距离充分小, 组间距离充分大。(实际上是一维的方差分析)。由于我们的数据都在同一个方向, 所以我们只需要计算各组数据与这个向量的内积即可。具体而言

$$G_1: x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_{n_1}^{(1)}$$

$$G_2: x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \dots, x_{n_2}^{(2)}$$

$$\vdots$$

$$G_k: x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{n_k}^{(k)}$$

4 主成分分析

主成分分析可以用于降维，同时保持数据的大部分变差。一般来说，当数据相关性较强时，使用主成分分析的效果较好。

4.1 Definition

主成分应当具有如下性质：

- 每一个主成分是原始变量的线性组合
- 主成分数目远远小于变量的数量
- 主成分保留了原始变量的大部分信息
- 第一主成分应当保留最多的信息
- 各主成分之间互不相关

Remark: 我们这里提到的信息，使用方差进行刻画。

4.2 Theorem Real Spectrum

实数域上的自伴随正算子 (在标准正交基下为正定的实对称矩阵)，有如下分解

$$\mathcal{M}(T, \nu, \nu) = \mathcal{M}(I, e, \nu) \mathcal{M}(T, e, e) \mathcal{M}(I, \nu, e)$$

其中 ν 为特征向量构成的基，而且

$$\mathcal{M}(T, \nu, \nu) = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

$$\mathcal{M}(I, \nu, e) = [\nu_1, \dots, \nu_n]$$

即 T 在特征基下的矩阵为一个对角矩阵。

4.1 协方差矩阵法

4.3 Theorem

假定 Σ 正定， λ_i 为其特征值， ν_i 为对应的特征向量，则

$$\max_{x \perp \text{span}\{\nu_1, \dots, \nu_k\}} \frac{\langle \Sigma x, x \rangle}{\langle x, x \rangle} = \lambda_{k+1}$$

4.4 Theorem

假定 p 维随机向量的协方差矩阵为 $\mathcal{M}(T, e, e) = \Sigma$ ，则正交变换

$$Y = \mathcal{M}(T, e, \nu)X = P^{-1}X.$$

生成了 p 个主成分，且 $Y[k] = \nu_k'X$ 为第 k 主成分。

值得注意的是，

$$\text{Var}(Y_i) = \text{Var}(\nu_k'X) = \nu_k'\Sigma\nu_k = \lambda_k.$$

4.5 Theorem PC 的性质

- Y 的协方差矩阵为 $\mathcal{M}(T, \nu, \nu)$
- Y 的总方差为 $\mathcal{M}(T, \nu, \nu)$ 的 trace.

Proof

$$\begin{aligned}\text{Var}(\iota'Y) &= \text{tr}(\mathcal{M}(T, \nu, \nu)) \\ &= \text{tr}(\mathcal{M}(T, e, e))\end{aligned}$$

□

4.6 Definition 贡献率

主成分 Y_i 的贡献率定义为：

$$\frac{\lambda_i}{\sum_{i=1}^p \lambda_i}$$

累积贡献率定义为

$$\frac{\sum_{i=1}^m \lambda_i}{\sum_{i=1}^p \lambda_i}$$

4.7 Definition 因子负荷量 (*Factor Loadings*)

X_i 与 Y_k 的 Pearson rho 定义为因子负荷量

$$\rho(Y_k, X_i) = \frac{\nu_{ik}\sqrt{\lambda_k}}{\sqrt{\sigma_{ii}}}$$

Proof

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Y_k, X_i) &= \text{Cov}(\nu_k' X, e_i' X) \\ &= \nu_k' \Sigma e_i \\ &= \lambda_k \nu_{ik}. \end{aligned}$$

□

Remark: ν_{ik} 可以解释为第 k 个主成分对第 i 个变量的敏感性。

而因子负荷量的绝对值大小刻画了该主成分的主要意义及其成因，在解释第 i 个变量是第 k 个主成分的重要性时，应该根据因子负荷量进行分析，而不是仅仅 ν_{ik} 。

4.8 Theorem

$$\sum_{i=1}^p \rho^2(Y_k, X_i) \sigma_{ii} = \lambda_k$$

4.2 相关系数法

4.3 主成分的几何含义

随机向量 X 在 e 下的坐标为 (X_1, \dots, X_p) ，这些指标的 coordinate 不是独立的。然后呢，我们找了一个新的坐标系 $\nu = P \circ e$ ，在这个坐标系下， X 的坐标为 (Y_1, \dots, Y_p) ，而且这些坐标之间是独立的。同时呢，我们也稍微的对 P 的行 (列) 进行一些交换。这么做之后达到了一个怎么样的效果呢？ X 在 ν_1 方向上的变差，也就是 $\text{Var}(Y_1)$ ，最大。(这体现为，对 X 不断抽样，然后把它投影到 ν_1 上，轨迹应该最长才对)