

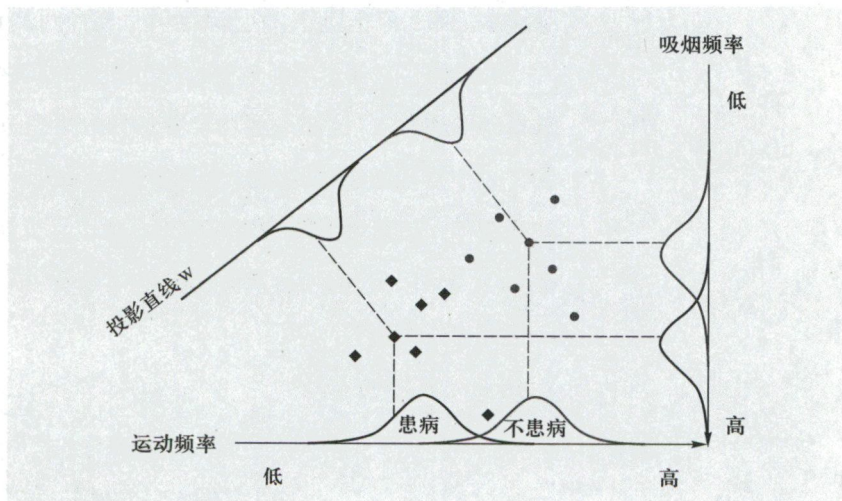


图4.8 两个类别数据所对应的不同投影方式

位于方向投影，则可见两类数据可被完全区分开来，更进一步分析，在所得投影空间中，同一类别人群数据聚集在一起、不同类别人群数据具有较大间隔，体现了“类内方差小、类间间隔大”的原则。

这好比《论语·子路》中所言“君子和而不同，小人同而不和。”虽然同一类别中每个数据各有特色，但是它们均具有类似内在模式（如在它们所嵌入低维空间存在一个由均值和方差所构成的恰当高斯分布，使得同一类别数据可被投影映射到一起）。

有了直观的认识之后，下面从定量的角度来介绍如何找到投影方向。

假设样本集为 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \dots, (x_N, y_N)\}$ ，样本 $x_i \in \mathbb{R}^d$ 的类别标签为 y_i 。其中， y_i 的取值范围是 $\{C_1, C_2, \dots, C_K\}$ ，即一共有 K 类样本。

定义 X 为所有样本构成集合、 N_i 为第 i 个类别所包含样本个数、 X_i 为第 i 类样本的集合、 m 为所有样本的均值向量、 m_i 为第 i 类样本的均值向量。 Σ_i 为第 i 类样本的协方差矩阵，其定义为：

$$\Sigma_i = \sum_{x \in X_i} (x - m_i)(x - m_i)^T$$

先来看 $K=2$ 的情况，即二分类问题。在二分类问题中，训练样本归属于 C_1 或 C_2 两个类别，并通过如下的线性函数投影到一维空间上：

$$y(x) = w^T x \quad (w \in \mathbb{R}^n)$$

投影之后类别 C_1 的协方差矩阵 s_1 为：