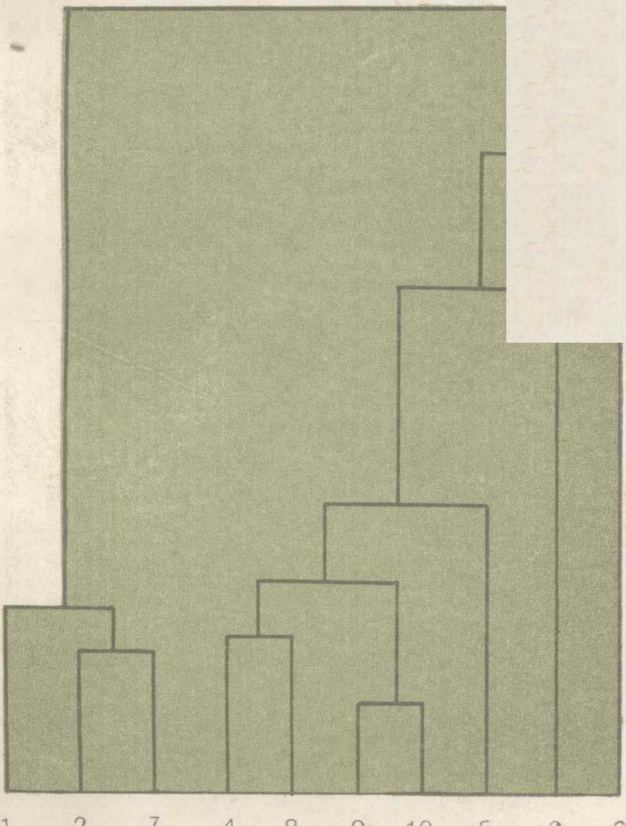
多元统计分析方法

中国地质大学出版社

蒋耀淞　编



多元统计分析方法

蒋耀淞 编

中国地质大学出版社

多元统计分析方法

蒋 耀 淞 编

责任编辑 方 菊

•

中国地质大学出版社出版

中国地质大学出版社印刷厂印刷 湖北省新华书店经销

•

开本 787×1092 1/32 印张 7.9375 字数 170千字

印数1—1000册

ISBN 7-5625-0201-3/O·7

定价：1.50 元

内容简介

本书是作者在多年讲授多元统计分析课程而积累的丰富教学经验的基础上编写成的.

主要内容为地质中常用的多元统计方法：回归分析、逐步回归、趋势面分析、判别分析、聚类分析、主成分分析、因子分析及对应分析等。对各种方法的叙述力求简明，以利读者理解，为配合教学，章后附有适量的习题. 并且，大部分方法书末附有FORTRAN计算机程序，可在微机上运行，便于读者使用.

本书可作为地质类研究生和高校高年级学生的多元统计课程教材，也可供地质科技人员、高校教师及其它有关专业的科技人员参考.

前　　言

多元统计分析是数理统计学中的一个重要分支，近数十年来广泛应用于气象、医学、生物、经济及工农业生产，并已成为边际学科数学地质（或地质数学）中的主要内容，普遍应用于地质科学研究与矿床统计预测实践。本教材是在地质找矿勘探应用研究的基础上，为地质类研究生开设课程所编写的讲义经整理改写而成。根据教学要求，编者着重考虑了以下几点：（1）内容包括地质找矿勘探工作中常用的多元统计分析方法，叙述简明扼要，便于读者接受。篇幅按40至50学时授课安排。（2）在地质类学生能够接受的基础上，尽可能将各种方法的数学原理讲解清楚，以免读者知其然而不知其所以然，追求计算而不善于对所得结果进行合理解释。同时为便于应用，在介绍方法时尽可能选择结合地质的例子来加以说明。（3）方法原理必须通过解题与实例计算才能理解与掌握，而多元统计分析方法的运算必须通过计算机来实现。考虑到我国目前微机比较普及，因此将部分方法的FORTRAN程序编入附录，以便于应用。

本书既可用作地质类研究生和高年级大专学生的教材，也可供从事地质找矿工作的研究人员和工程技术人员参考使用。由于编者水平所限，书中缺点错误在所难免，敬希读者批评指正。

目　　录

第一章 矩　　阵

矩阵代数的知识是多变量统计分析的研究所必不可少的。为此，在这一章中，我们汇集了矩阵代数中一些有关的定义与定理，大部分只予以陈述，只对一些不常包括在矩阵代数书中的结果在这里给出简单的证明。

§1.1 矩阵的定义及其运算

一个$m\times n$的实矩阵A是元素a_{ij}（实数）的一个有次序的矩形排列

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots a_{2n} \\ \vdots & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots a_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

可以简记作$A=(a_{ij})$，$i=1, 2, \cdots, m$；$j=1,2,\cdots, n$. 通常，我们用大写斜体字母表示矩阵，而其元素则用带有下标的相应小写字母来表示。

两个有相同行数与列数的$m\times n$矩阵A与B，如果$a_{ij}=b_{ij}$（$i=1, \cdots,m$, $j=1,\cdots, n$），则称它们是相等的，并记作$A=B$.

两个有相同行数与列数的矩阵A与B的和定义为

$$A+B=(a_{ij})+(b_{ij})=(a_{ij}+b_{ij}) \quad .$$

矩阵与实数λ的乘积定义为

$$\lambda A = A\lambda = (\lambda a_{ij}).$$

可以验证这些运算具有以下代数性质

$$A+B=B+A;$$

$$(A+B)+C=A+(B+C);$$

$$A+(-1)A=(0);$$

$$(\lambda+\mu)A=\lambda A+\mu A;$$

$$\lambda(A+B)=\lambda A+\lambda B;$$

$$\lambda(\mu A)=(\lambda\mu)A.$$

全部元素均为0的矩阵(0)可以记作0.

如果矩阵A的列数与矩阵B的行数相同，即，$A=(a_{ij})$，$i=1,\ \cdots,\ l,\ j=1,\ \cdots,\ m,\ B=(b_{jk}),\ j=1,\ \cdots,\ m,\ k=1,\ \cdots,\ n$，则两矩阵$A$与$B$可以按照下面的规则相乘

$$AB=(a_{ij})(b_{jk})=\left(\sum_{j=1}^{m}a_{ij}b_{jk}\right),$$

$$i=1,\ \cdots,\ l,\ k=1,\ \cdots,\ n$$

积AB是一个有l行n列的矩阵，其第i行，第k列的元素是$\sum_{j=1}^{m}a_{ij}b_{jk}$. 要注意的是，即使$AB$是有意义的（即行数与列数使得乘法运算可以完成），乘积BA可以没有意义；即使两者均有意义，它们也不一定相等.

矩阵乘法有以下性质

$$(AB)C=A(BC); \tag{1.2}$$

$$A(B+C)=AB+AC; \tag{1.3}$$

$$(A+B)C=AC+BC. \tag{1.4}$$

关系式（1.2）到（1.4）要求如果等号一边是有意义的，则

另一边也有意义，且上述等式成立。由（1.2），我们可以写

$$(AB)C=A(BC)=ABC.$$

$l\times m$矩阵$A=(a_{ij})$的转置定义为$m\times l$矩阵A'，它在第j行第i列上的元素即是A在i行j列上的元素。转置运算具有以下性质

$$(A')'=A,$$
$$(A+B)'=A'+B',$$
$$(AB)'=B'A'.$$

注意仍要限制至少式子的一边是有意义的。

一个具有m个分量的列向量x可以看作是一个m行一列的矩阵。

我们现在将涉及行数与列数均为p的同样大小的方阵，可以任意地相加和相乘。如果$A=A'$，则A称为对称阵。一个有特别重要意义的矩阵是单位阵

$$I=\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}=(\delta_{ij}),$$

其中δ_{ij}是Kronecker的记号，定义为

$$\delta_{ij}=\begin{cases} 1 & \text{如果} i=j; \\ 0 & \text{如果} i\neq j. \end{cases}$$

单位阵满足

$$IA=AI=A.$$

对于任何方阵A其行列式$|A|$定义为

$$|A|=\sum(-1)^{f(i_1,\cdots,i_p)}\prod_{i=1}^{p}a_{i j_i}. \qquad (1.5)$$

其中求和号取遍整数组（1，…，p）的一切排列（j_1，…，j_p），而$f(j_1,\cdots,j_p)$是将$(1,\cdots,p)$改变为$(j_1,\cdots,j_p)$所需的变换次数，每一个变换由交换两个数所构成。可以证明，虽然有很多不同的方法将（1，…，p）变换成为（j_1，…，j_p），但所需的变换次数总是偶数或总是奇数，因而$(-1)^{f(j_1,\cdots,j_p)}$总是确定的。可以证明

$$|AB|=|A|\cdot|B|$$

以及

$$|A|=|A'|.$$

由A删去某些行与列而得的矩形数阵称为A的子矩阵。A的方的子矩阵的行列式称为余子式。一个元素a_{ij}的余子式是删去第i行和第j列所得A的子矩阵的行列式。a_{ij}的余子式乘上$(-1)^{i+j}$称为a_{ij}的代数余子式，并记作A_{ij}。可以证明

$$|A|=\sum_{j=1}^{p}a_{ij}A_{ij}=\sum_{j=1}^{p}a_{jh}A_{jh}. \tag{1.6}$$

如果$|A|\neq0$，则存在一个唯一的矩阵B使得$AB=BA=I$. 这时，方阵A称为可逆的，B称为A的逆矩阵，并记作A^{-1}. 若以a^{hk}记A^{-1}中第h行第k列的元素，则

$$a^{hk}=\frac{A_{kh}}{|A|}.$$

如果A，B是可逆的矩阵，则

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1},$$

这由

$$(AB)(B^{-1}A^{-1})=(B^{-1}A^{-1})(AB)=I \tag{1.7}$$

即得。还有

$$(A^{-1})'=(A')^{-1},$$

这由$AA^{-1}=A^{-1}A=I$　两边取转置，有

$$(A^{-1})'A'=A'(A^{-1})'=I'=I$$

即可看出。

一个方阵其行列式不为零时，称为非奇异的。如果$|A|\neq 0$，则方程组

$$Az=0 \tag{1.8}$$

的唯一解是平凡解$z=0$〔将（1.8）式左乘A^{-1}即得〕。如果$|A|=0$，则（1.8）有非平凡解。因此A是非奇异阵等价于（1.8）仅有平凡解。

一组向量z_1，…，z_r称为是线性独立的，如果不存在不全为零的数组c_1，…，c_r使得$\sum_{i=1}^{r}c_i z_i=0$．设A是一个$q\times p$矩阵，如果其线性独立的列（或行）数的最大数目是r（$r\leqslant\min(p,\ q)$），则称A的秩是r．这时每一个$r+1$阶的余子式（如存在）必为零（将上一段的结果应用于相应的$r+1$阶方阵即得），并且至少有一个r阶余子式不为零。反之，如果至少有一个r阶余子式不为零，则至少有一组r列（或行）是线性独立的。如果一切$r+1$阶余子式均为零，则不可能有任何组的$r+1$列（或行）是线性独立的，因为这样的线性独立意味着有$r+1$阶的非零余子式，而这与假设矛盾。因此，矩阵的秩是r等价地也可用线性独立的行（或列）的最大数目（或用非零的余子式的最大阶数）r来定义．

下面，我们来考虑二次型

$$x'Ax=\sum_{i,j=1}^{p}a_{ij}x_i x_j. \tag{1.9}$$

其中$x'=(x_1, \cdots, x_p)$，而$A=(a_{ij})$，$(i, j=1, \cdots, p)$，矩阵A是对称的。如果对一切$x\neq 0$，有$x'Ax\geqslant 0$，这个矩阵A和二次型称为是非负定的；如果对一切$x\neq 0$，有$x'Ax>0$，则A与该二次型称为是正定的。

定理1 如果p行p列的对称矩阵A是正定的，且如果p行q列（$q>p$）的矩阵B的秩是q，则$B'AB$是正定的。

证明 给定一个q维向量$y\neq 0$，令$x=By$. 由于B的秩为q，$By=x\neq 0$，则

$$y'(B'AB)y=(By)'A(By)=x'Ax>0,$$

再看到$B'AB$是对称的，证明完毕。

作为其反面，我们看到$B'AB$是正定的仅当B的秩是q，因为不然将存在$y\neq 0$使$By=0$.

推论1 如果A是正定的，而B是非奇异的，则$B'AB$是正定的.

推论1对于非负定阵也适用.

推论2 如果A是正定的，则A^{-1}是正定的.

证明 A必定是非奇异的，因为如果对$x\neq 0$，$Ax=0$，则对这个x，$x'Ax=0$，这与A是正定的假设相矛盾。

取定理1中的B为A^{-1}，则$B'AB=(A^{-1})'AA^{-1}=(A^{-1})'$. 将$AA^{-1}=I$转置，我们有$(A^{-1})'A'=(A^{-1})'A=I$. 因此$A^{-1}=(A^{-1})'$. 证毕。

推论3 设D是一个由正定阵A删去$p-q$行和相应的$p-q$列而形成的$q\times q$矩阵，则D是正定的。

证明 由定理1可得，只要取B为由$p\times p$单位阵删去相应于从A中删去的列而得的矩阵。

一个p阶方阵A的迹定义为$\mathrm{Tr}A=\sum_{i=1}^{p}a_{ii}$. 下列性质可通过直接验证而得

$$\mathrm{Tr}(A+B)=\mathrm{Tr}A+\mathrm{Tr}B,$$

$$\mathrm{Tr}AB=\mathrm{Tr}BA.$$

一个p阶方阵A称为是对角阵，如果$a_{ij}=0$，$i\neq j$. 这时$|A|=\prod_{i=1}^{p}a_{ii}$，因为由(1.6)可得$|A|=a_{11}A_{11}$，然后对$A_{11}$又可类似地计算，直至得到上述结果。

一个方阵A称为是上（下）三角阵，如果对于$i>j$（对于$i<j$）有$a_{ij}=0$. 两个同类型的三角阵的乘积仍是同样形式的三角阵。以上三角阵为例：AB的第i, j项$(i>j)$有$\sum_{k=1}^{p}a_{ik}b_{kj}=0$，这是因为对$k<i$，有$a_{ik}=0$以及对于$k<j$有$b_{kj}=0$，其中$j<i$.

一个方阵A称为是正交阵，如果有$AA'=A'A=I$.

§1.2 特征值与特征向量

一个$p\times p$的方阵A的特征值定义为其特征方程

$$|A-\lambda I|=0 \tag{1.10}$$

的根. 左端的行列式是λ的p次多项式，因此A有p个特征值. 例如，对于二阶方阵$A=\begin{bmatrix}5&2\\2&5\end{bmatrix}$,

$$|A-\lambda I|=\begin{vmatrix}5-\lambda & 2\\ 2 & 5-\lambda\end{vmatrix}=25-4-10\lambda+\lambda^2$$
$$=\lambda^2-10\lambda+21$$

是λ的二次式。

展开（1.10）有

$$|A-\lambda I|=(-\lambda)^p+s_1(-\lambda)^{p-1}+\cdots-s_{p-1}\lambda+|A|.$$

其中s_1即是A的主对角元素之和，或$\mathrm{Tr}A$，由多项式方程的理论可知

（1）A的特征值之积等于$|A|$.

（2）A的特征值之和等于$\mathrm{Tr}A$.

特征值有以下性质

（1）实对称矩阵的特征值全是实数。

（2）正定矩阵的特征值全是正数。

（3）如果一个$n\times n$对称矩阵是非负定的，其秩为r，则它恰有r个正的特征值以及$n-r$个0特征值。

（4）乘积AB的非零特征值与BA的非零特征值相等。

（5）对角阵的特征值就是对角元素本身。

联系于方阵A的每个特征值λ_i有一个特征向量x_i（$\neq 0$），其元素满足下面的齐次线性方程组

$$(A-\lambda_i I)x_i=0. \tag{1.11}$$

由特征值的定义，（1.11）的系数行列式为零，所以总存在不全为零的解x_i．x_i与任意数量的乘积显然也是特征向量。

对于对称矩阵A，如果λ_i与λ_j是它的两个不同的特征值，则相应的特征向量x_i与x_j是正交的（即有$x_i'x_j=x_j'x_i=0$）.

证明如下：

由特征向量的定义，有

$$Ax_i=\lambda_i x_i,\quad Ax_j=\lambda_j x_j.$$

分别前乘x_j'和x_i'，可得

$$\lambda_i x_j' x_i = \lambda_j x_i' x_j .$$

由于$\lambda_i \neq \lambda_j$，可知x_i与x_j是正交的。

定理2 对于任意的实对称矩阵A，存在一个正交矩阵Γ，使得

$$\Gamma' A \Gamma = D.$$

其中D是一个对角矩阵，其对角元素是A的特征值。

可取A的标准化了的特征向量（即取其长为1）作为Γ的各列。即使特征值不是互不相同的，仍然可以选出个数与A的阶数相同的一组相互正交的特征向量。

推论4 如果A是正定的，则存在一个非奇异矩阵C，使得$C' AC = I$.

证明 令

$$D^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{d_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{d_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{d_p} \end{bmatrix},$$

$$D^{-1/2} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{d_1}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{d_2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\sqrt{d_p}} \end{bmatrix}$$

由定理2可知$\Gamma D^{-1/2}$就是这样的一个矩阵C.

推论5 如果A是正定的，则$|A| > 0$

证明 由推论4可得

$$|A| = |C'|^{-1} \cdot |I| \cdot |C|^{-1} = |C|^{-2}.$$

推论6 如果A是正定的，则A的每个主子式是正的。

主子式是由A删去某些行和相应的列所形成的矩阵的行列式。推论6由推论3与推论5可得，证明略.

推论7 如果A是正定的，则存在非奇异阵L使

$$A = L'L.$$

证明 由推论4

$$A = (C')^{-1} I (C)^{-1} = (C^{-1})' (C)^{-1},$$

取$L = C^{-1}$，则

$$A = L'L.$$

其中L为非奇异阵。

如果对p个变量的二次型$x'Ax$作正交变换

$$x = \Gamma y,$$

该二次型变为

$$x'Ax = y'\Gamma' A \Gamma y = y'Dy = \lambda_1 y_1^2 + \cdots + \lambda_r y_r^2.$$

其中λ_i是A的特征值，r是该二次型的秩。

对于一对$p \times p$的矩阵A（非奇异的）和B，我们考虑如下的方程

$$|B - \lambda A| = 0, \tag{1.12}$$

对于非奇异的C，下式

$$|C'BC - \lambda(C'AC)| = 0$$

的根与（1.12）的是相同的，这是由于

$$\begin{aligned} |C'BC - \lambda C'AC| &= |C'(B - \lambda A)C| \\ &= |C'| \cdot |B - \lambda A| \cdot |C|, \end{aligned}$$

而$|C'| = |C| \neq 0$.

定理3 给定B是$p \times p$的非负定阵和A是同样阶数的正