概率统计计算方法

肖云茹 编著

南开大学出版社

概率统计计算方法

肖云茹　编著

南 开 大 学 出 版 社

内 容 提 要

应用统计方法解决各种实际问题时，最终归结为数学模型的数值计算问题．本书的目的就是力求把统计推导、数值计算步骤和计算机上实现有机地结合起来，使读者掌握用统计方法解决实际问题的全过程．

全书分常用数值计算方法、基本统计计算、蒙特卡洛方法和各种统计分析方法及应用等四部分．内容深入浅出，应用实例丰富，对于培养读者应用统计方法解决实际问题的能力非常实用．

本书可供应用统计工作者参考，也可作为高等院校统计专业、计算数学专业教材．

〔津〕新登字011号

概率统计计算方法

肖云茹　编著

南开大学出版社出版
（天津八里台南开天大学校内）
邮编：300071　电话：3358542
新华书店天津发行所发行
河北省邮电印刷厂印刷

1994年2月第1版　　1994年2月第1次印刷
开本：850×1168 1/32　印张：12　插页 2
字数：300千　　印数：1—4 000

ISBN 7-310-00578-3
O·74　定价：8.00元

前　言

统计计算（Statistical Computing）是统计学、计算数学与计算机科学的一门交叉学科科目．随着国民经济各个领域的深刻变化和飞速发展，尤其是电子计算机的普遍应用，统计计算已成为我国应用学科中很重要很实用的分支之一．

利用统计方法解决科学计算中的实际问题是很普遍的．解决任何一个与统计有关的社会学、经济学及自然科学中的实际问题，首先要经过统计理论分析把其抽象为统计模型，如回归模型、判别模型等．然后归纳出求解该模型的数学问题（也叫数学模型），例如线性方程或超定方程组求解、矩阵的特征值和特征向量的计算等等，最后给出相应的数值计算方案．利用电子计算机实现后，再结合实际问题给出计算精度、误差分析和必要的解释．本书的目的就是力求把统计推导、数值计算步骤和计算机上实现有机地结合起来，使读者掌握用统计方法解决实际问题的全过程．

本书内容共分四部分．第一部分（第1章）较系统地归纳和总结了一些常用的数值计算方法；第二部分（第2章）是基本统计计算，包括常用分布函数和分位数的数值计算，给出一些近年来发展起来的新方法以及应用广泛、精度较高的近似公式；第三部分（第3章）为蒙特卡洛（M-C）方法，给出产生各种分布随机数的方法以及用M-C方法数值求积分、求解非线性方程组的方法；第四部分（第4—9章）介绍用于讨论变量间相关关系、简化数据结构、判别、分类等方面的几种多元统计分析方法，包括逐步回归分析、典型相关分析、主成分分析、因子分析、判别分析和聚类分析．介绍

中有理论推导和分析，但侧重于计算机上实现的算法步骤. 这些算法步骤主要结合国内的SASD统计软件包给出，同时也考虑到国际上常用的统计软件包如SAS，SPSS等的使用.

本书是在作者多年讲授“统计计算”课的讲义基础上写成的，这门课对于统计专业及其有关专业的学生，培养其应用统计方法解决实际问题的能力起到了重要作用，学生普遍反映收获很大. 本书可作为统计专业、计算专业和其它有关专业的本科生或研究生的教材. 课程讲授为80—100学时，并配备适当的统计实习. 本书也适合从事社会、经济、生物、环保、地质、水文等方面的实际统计工作者. 内容由浅入深，前后联系紧密. 对于每一种统计方法，从提取统计模型到选用数值计算方法以及具体算法步骤，都有一个较完整的论述. 各章节还配有综合应用算例，读者从例子中也可受到启发.

作者感谢杨自强、沈世镒和张润楚教授对编写本书所给予的指教，感谢南开大学出版社裴志明、王家骅先生在编写出版过程中的指导和帮助，南开大学数学系计算数学教研室和数理统计教研室领导对此书的出版也给予了大力支持，在此一并表示感谢.

由于作者水平所限，书中难免有一些错误和不足之处，诚恳希望读者批评指正.

目　　次

1 统计计算中常用的数值方法

1.1 引言

本章介绍统计计算中常用的一些数值方法. 前言中曾经说过，用统计计算方法解决实际问题时，化成的数学模型许多是数值代数或数值积分问题. 例如，计算常用分布函数和分位数，实为计算无穷积分（无穷级数）和求解非线性方程组；多元统计计算中的主成分分析和因子分析，归结为标准特征值和特征向量的计算. 因此，数值计算中的矩阵分解、奇异值分解、线性（非线性）方程（组）求解、广义逆矩阵以及广义特征值的计算等方法，被广泛地运用到判别分析、典型相关分析、蒙特卡洛方法等方法中. 所以数值代数、数值积分等是统计计算中最重要、最基本的工具.

一般的数值方法在“计算方法”类的书中有介绍. 但有些数值方法，如上面提到的奇异值分解、广义逆、广义特征问题等往往涉及不多；还有如很常用的求标准特征值的QR方法等，一般书中语焉不详，尤其从理论方法到计算机上具体实现的算法步骤阐述不多；又如用于求分位数的“基于二阶展开的迭代法”，计算常见的正态分布函数的连分式逼近等方法较少见到有关介绍. 因此本章针对上述一些缺欠，对在统计计算中常使用的数值计算方法，多予较系统、详细的介绍. 其中有的方法详细给出理论推导和算法步骤；有的方法给出重要、实用的公式；有的方法属于一般计算方法书中难以查到的增补内容，等等.

1.2 矩阵的三角分解

矩阵的三角分解是数值代数中最基本的内容之一，在统计计算中应用广泛. 如“判别分析”中常常用到正定矩阵的 Cholesky 分解，等等.

这一节，我们给出矩阵的Doolittle分解和Crout分解以及正定矩阵的Cholesky分解.

1.2.1 矩阵的Doolittle分解（LU分解）

设线性方程组

$$Ax=b, \tag{1.2.1}$$

其中$A=(a_{ij})_{n\times n}$，$x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)'$，$b=(b_1, b_2, \cdots, b_n)'$. 若矩阵$A$非奇，则方程组（1.2.1）有唯一解.我们用 Gauss 消去法求解方程组（1.2.1）.

假设A的各阶顺序主子式$\Delta_i\neq 0$，$i=1, 2, \cdots, n$，则对系数矩阵A进行的Gauss消去过程可顺序进行到底，消去过程如下.

令$A^{(1)}=A$，由假设$\Delta_1=a_{11}^{(1)}\neq 0$，将$A^{(1)}$的第1行依次乘以 $-\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $-\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $\cdots$, $-\frac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$，并分别加到第2，3，…，$n$行上去，则$A^{(1)}$化为

$$A^{(2)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix},$$

其中

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-a_{i1}^{(1)}a_{1j}^{(1)}/a_{11}^{(1)}, \quad i, j=2, 3, \cdots, n.$$

一般地，若第$r-1$步得到

$$A^{r}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1r}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2r}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{rr}^{(r)} & \cdots & a_{rn}^{(r)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nr}^{(r)} & \cdots & a_{nn}^{(r)} \end{pmatrix},$$

由假定，$\Delta_r \neq 0$，即 $a_{rr}^{(r)} \neq 0$，将 A^r 的第 r 行依次乘以 $\frac{-a_{r+1\,r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}$，$-\frac{a_{r+2\,r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}$，…，$-\frac{a_{nr}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}$，分别加到第 $r+1$，$r+2$ …，n行上去，则A^r化为

$$A^{r+1}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1r}^{(1)} & a_{1\,r+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2r}^{(2)} & a_{2\,r+1}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{rr}^{(r)} & a_{r\,r+1}^{(r)} & \cdots & a_{rn}^{(r)} \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & a_{r+1\,r+1}^{(r+1)} & \cdots & a_{r+1\,n}^{(r+1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & a_{n\,r+1}^{(r+1)} & \cdots & a_{nn}^{(r+1)} \end{pmatrix}.$$

其中

$$a_{ij}^{(r+1)}=a_{ij}^{(r)}-a_{ir}^{(r)}a_{rj}^{(r)}/a_{rr}^{(r)},\quad i,j=r+1,\ r+2,\ \cdots,\ n.$$

如上进行 $n-1$ 步，则得到上三角阵

$$A^{(n)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

于是，对系数矩阵A经过 $n-1$ 步Gauss消去变换，可使其化为上三角矩阵$A^{(n)}$. 因而求解方程组（1.2.1）等价于求解三角形方程组

$$A^{(n)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}. \tag{1.2.2}$$

显然，三角方程组（1.2.2）求解简单易行，只须从最后一个方程逐步回代即可求出方程组的解$\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, \cdots, x_n)'$.

以上对矩阵A进行消去变换的每一步，实际上等价于用初等矩阵左乘以矩阵A. 具体地，第1步消元相当于

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\dfrac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\dfrac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix} = A^{(2)} \triangleq L_1^{-1} A^{(1)}, \tag{1.2.3}$$

其中

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \dfrac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \dfrac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$\triangleq \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

而

$$L_1^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

形为L_1的初等矩阵称为Frobenins矩阵，用L_1^{-1}左乘以矩阵A，可把A的第1列对角元以下各元素化为零.

一般地，定义

$$L_r=\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{r+1\,r} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{nr} & & & 1 \end{pmatrix}, \quad r=1,2,\cdots,n-1,$$

其中

$$l_{ir}=\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \quad i=r+1, \ \cdots n.$$

由式（1.2.3）看出，对A进行$n-1$步消元，等价于用$n-1$个初等矩阵L_1^{-1}，L_2^{-1}，…，L_{n-1}^{-1}依次左乘以矩阵A，

$$L_{n-1}^{-1}L_{n-2}^{-1}\cdots L_2^{-1}L_1^{-1}A=A^{(n)}\triangleq U,$$

即

$$A=L_1L_2\cdots L_{n-1}U\triangleq LU, \tag{1.2.4}$$

其中U为上三角矩阵$A^{(n)}$，而$L=L_1L_2\cdots L_{n-1}$是单位下三角矩阵，并且L形为

$$L=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

其中

$$l_{ij}=\frac{a_{ij}^{(j)}}{a_{jj}^{(j)}},\quad i=2,3,\cdots,n;\quad j<i.$$

因此，对矩阵A进行$n-1$步Gauss消元，就实现了对A的三角分解

$$A=LU.$$

我们称A的这种分解为Doolittle分解，或称LU分解．分解的算法公式如下．

（1）$u_{1i}=a_{1i}$，$i=1,2,\cdots,n$；

$l_{i1}=a_{i1}/u_{11}$，$i=2,3,\cdots,n$．

（2）计算矩阵U的第r行和矩阵L的第r列元素（$r=2,3,\cdots,n$）．

$$u_{ri}=a_{ri}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{rk}u_{ki},\ i=r,r+1,\cdots,n;$$

$$l_{ir}=\left(a_{ir}-\sum_{k=1}^{r-1}l_{ik}u_{kr}\right)/u_{rr},\quad i=r+1,r+2,\cdots,n,\quad r\neq n.$$

对矩阵A施行LU分解之后，求解方程组（1.2.1）可化为求解以下两个三角形方程组：

$$\left.\begin{aligned}L\boldsymbol{y}&=b,\\ U\boldsymbol{x}&=\boldsymbol{y}.\end{aligned}\right\}\qquad(1.2.5)$$

求解的算法公式为

（1）$y_1=b_1$，

$$y_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}y_k,\quad i=2,3,\cdots,n;$$

（2）$x_n=y_n/u_{nn}$，

$$x_i=\left(y_i-\sum_{k=i+1}^{n}u_{ik}x_k\right)\Big/u_{ii},\quad i=n-1,n-2,\cdots,1.$$

这种求解方程组（1.2.1）的方法称为直接三角分解法.

可以证明，对于 $n\times n$ 矩阵 A（奇异的或非奇异的），若 A 的顺序主子式 $\Delta_k\neq 0$（$k=1,2,\cdots,n-1$），则 A 可分解为一个单位下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积，且这种分解是唯一的.

我们知道，Gauss消去法分为选主元的和不选主元的两种，同样，矩阵 A 的 LU 分解也分为选主元的和不选主元的两种.

1.2.2 矩阵的Crout分解

当矩阵 A 的顺序主子式 $\Delta_k\neq 0$（$k=1,2,\cdots,n-1$）时，A 还存在另一形式的三角分解

$$A=\overline{L}\,\overline{U},\tag{1.2.6}$$

其中 $\overline{L}$ 为下三角矩阵，$\overline{U}$ 为单位上三角矩阵. 称 A 的这种三角分解为Crout分解.

实际上，A 的Crout分解是在 A 的Doolittle分解的基础上得到的另一形式的结果. 由1.2.1，当 A 的各阶顺序主子式 $\Delta_k\neq 0$（$k=1,2,\cdots,n$）时，A 可唯一分解为单位下三角阵 L 和上三角阵 U 之乘积，即

$$A=LU.$$

令矩阵 $D=\mathrm{diag}(u_{11},u_{22},\cdots,u_{nn})\triangleq\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$，易证

$$\Delta_i=u_{11}u_{22}\cdots u_{ii}=d_1d_2\cdots d_i,$$

于是

$$D=\mathrm{diag}\left(\Delta_1,\frac{\Delta_2}{\Delta_1},\cdots,\frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}\right).$$

显然 D^{-1} 存在. 令 $\overline{U}=D^{-1}U$，则

$$A=LU=LDD^{-1}U=(LD)\overline{U}\triangleq\overline{L}\,\overline{U},$$

其中 $\overline{L}=LD$ 为下三角矩阵，$\overline{U}$ 为单位上三角矩阵. 这就得到 A 的Crout分解.