科學圖書大庫

應用之多變量統計學

本會編輯部編譯

徐氏基金會出版
世界圖書出版公司

应用之多变量统计学
徐氏基金会编辑部编译

徐氏基金会　出版
世界图书出版公司
北京朝内大街137号
新华书店北京发行所发行　各地新华书店经售

1989年12月第一版　　开本：850×1168　1/32
1989年12月第一次印刷　　印张：13.5
ISBN　7－5062－0483－5
定价：7.50元

经徐氏基金会允许，世界图书出版公司重印，1990。

序

本書是根據作者*M. S. Srivastava*及*E. M. Carter*二人分別在多倫多大學和蓋爾府大學（*Guelph*）為研究所一年級學生授課的講義整理而成的，主要目的在使學者學習如何將多變量的技巧應用於不同學門所得的數據中，其應用範圍如：森林學、生物學、藥學及教育學等。理論方面的細節已經儘可能的減至最少。學者若能具備矩陣符號及運算方面的知識，對於研讀本書會大有助益，因此，在矩陣方面知識不足的學者，先研讀第一章會很有幫助。當然，本書假定讀者對於單變量的基本理論已經有了充分的認識。

本書所強調的重點是在多變量統計學目前所應用的方法上。對於每一個新的主題，不但介紹問題的所在及其解決方法，同時也提供一些有效的例子，這些例子都是取自各不同的領域。每一章的結尾，皆對目前可得的一些電腦套裝軟體加以討論，再加上其他的例子。

本書採用似然比值法以檢驗所給假設的顯著性，同時介紹洛伊（*Roy*）聯一交原理和信賴區間的波非洛尼（*Bonferoni*）不等式。對於每一項統計檢驗，都將所觀測之顯著水準的公式列出。用來計算信賴區間的百分點則可見於附錄中。

第一章和第二章讓學者有機會複習矩陣理論和統計學理論，這是研讀本書所需的。第一章且對*SAS*矩陣過程加以討論，這是計算固有值、固有向量和廣義反矩陣所必須的過程。第三至七章的內容包括：將t檢驗之單變量過程推廣至多變量、變異數分析，以及多重回歸。

為使多變量過程確實有效，某些假定是必要的，第十二章對這些假定進行檢驗，包括共變量相等之檢驗與獨立性檢驗。第八至十一章由判別式的分析開

始，介紹嚴格多變量過程。為了能在總體或各組之間作判別，有關判別函數的尋找方法也在這一部分討論。由於判別而需要減縮特徵值的個數，這個過程在接下來的判別式分析一節中說明。第九至十一章講解維數簡約的過程，包括正準相關與主成分分析。正準相關是為了研究各變量的線性組合間的相關；主成分分析是用來將所測度的特徵值集合簡約成較少的成分。例如，對目的物所作的二十次測量，可就其大小及形狀而簡約成二或三個成分。因素分析也具有同樣的作用，但須先假定該項觀察具備基本的結構，這個方法通常使用於問卷調查及心理測量所得的整組反應。

每一章結束之前，都對該章主題有進一步的探討，例如第三章論及不完全數據的問題及平均值移位之檢驗。本書之主要部分為多變量統計學的應用，對研究所一或二年級程度的學生講授這部分，需要一學期的時間，若要整本書從頭到尾的講解，則需要兩個學期。

目　錄

第一章　矩陣的基本知識

1.1　符號與定義

假設有pq個實數：$a_{11}, a_{12}, \cdots, a_{pq}$；將這些元素寫成一個長方形的陣列

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1q} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pq} \end{pmatrix},$$

包括p個橫列和q個直行，稱為一個$p\times q$矩陣，我們寫成$A=(a_{ij}):p\times q$，此處a_{ij}代表第i列第j行的元素。例如

$$A=\begin{pmatrix} 6 & 8 & 9 \\ 1 & 3 & 5 \end{pmatrix}$$

A是個2×3的矩陣，其中$a_{11}=6,\ a_{12}=8,\ a_{13}=9,\ a_{21}=1,\ a_{22}=3,\ a_{23}=5$。

現在我們就將本書稍後會使用到的一些特別的矩陣，加以定義。

零矩陣（Null Matrix）　若矩陣A的每一元素皆為0，則稱A為零矩陣，寫成0_{pq}，在不致混淆的情況下，可簡寫為0。例如

$$0_{32}=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

方陣（Square Matrix）　若$p=q$，則稱A為一個p階（*order*）方陣。

行向量（Column Vector） 若$q=1$，則稱A為p-行向量，或簡稱p-向量，該向量寫成

$$\mathbf{a}=\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix}.$$

例如，以2, 4, 6, 8為元素的4-列向量a'寫成

$$\mathbf{a}=\begin{pmatrix} 6 \\ 8 \\ 9 \end{pmatrix}.$$

列向量（Row Vector） 若$p=1$，則稱A為一個q-列向量，A可寫成 $\mathbf{a}'=(a_1,\ldots,a_q)$

例如，以6, 8, 9為元素的3-向量寫成

$$\mathbf{a}'=(2,4,6,8).$$

下三角形矩陣（Lower Triangular Matrix） 若一方陣之主對角線以上的元素皆為0，則稱該方陣為下三角形矩陣。

例如

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 8 & 4 & 0 \\ 10 & 9 & 6 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \end{pmatrix}.$$

上三角形矩陣（Upper Triangular Matrix） 若一方陣之主對角線以下的元素皆為0，則稱該方陣為上三角形矩陣。

對角方陣（Diagonal Matrix） 若一方陣A之對角線以外的元素皆為0，則稱該方陣為對角方陣。若對角線上的元素為$a_1,\ldots,a_p$，則A通常寫成Da或$Ddiag$（$a_1, \cdots, a_p$）。

例如，當$a_1=1$, $a_2=2$, $a_3=4$，則

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

單位方陣（Identity Matrix） 若A為$p\times p$之對角方陣，而對角線上的p個元素

皆為1，則A稱為單位方陣，以 I_p 表示

$$I_1=[1],\qquad I_2=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\qquad I_3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}.$$

轉置矩陣（Transpose Matrix）　將一個矩陣A的行和列互換，則所得的矩陣稱為A之轉置矩陣，以A'表示。因此，若 $A=(a_{ij}): p\times q$ ，則$A'=(a_{ji}): q\times p$.。
〔例如，若〕

$$A=\begin{pmatrix}1&2&3\\4&5&6\end{pmatrix}$$

則

$$A'=\begin{pmatrix}1&4\\2&5\\3&6\end{pmatrix}.$$

對稱方陣（Symmetric Matrix）　若一方陣$A=A'$，則稱A為對稱方陣。
對稱方陣的例子如下

$$\begin{pmatrix}1&3\\3&2\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}1&0\\0&2\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}1&2&3\\2&4&5\\3&5&6\end{pmatrix}.$$

反對稱方陣（Skew Symmetric Matrixs）　若矩陣$A=-A'$，則稱A為反對稱方陣。若A為反對稱方陣，則其對角線上之元素皆為0。
例如

$$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&2\\-1&-2&0\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}0&-1&-2\\1&0&3\\2&-3&0\end{pmatrix}.$$

1.2　矩陣運算

〔例如〕

為了方便起見，我們通常將矩陣表成

$$A=\left(\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right),$$

此處A_{ij}為A之$m_i\times m_j$子矩陣（$i, j=1, 2$）。將矩陣A的某些列和某些行刪除掉，所得到的矩陣就是A的一個子矩陣。將A表成上面的形式，稱為分塊矩陣（*partitioned matrix*）。如果矩陣A可以分割成兩列（或兩行）以上，則寫成 $A=(A_{ij})$ ，此處A_{ij}表矩陣A的子矩陣，位於第i列第j行的分塊上。例如，若

$$A_{11}=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix},\qquad A_{12}=\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix},\qquad A_{21}=(6,7),\qquad A_{22}=(8),$$

則

$$A=\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 2 \\ 3 & 4 & 3 \\ \hline 6 & 7 & 8 \end{array}\right).$$

另外一種類型的分塊矩陣可寫成

$$A=\left(\begin{array}{c|c} A_{11} & \\ \cline{1-1} A_{21} & \raisebox{1.5ex}{A_2} \end{array}\right).$$

例如，若

$$A_{11}=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix},\qquad A_{21}=(6,7),\qquad A_2=\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 8 \end{pmatrix},$$

則

$$A=\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 2 \\ 3 & 4 & 3 \\ \cline{1-2} 6 & 7 & 8 \end{array}\right).$$

令A：$m\times n$和B：$p\times q$為二矩陣，唯有當兩個矩陣同階的時候，我們才可以定義矩陣的一般加法。因此，若$A=(a_{ij})$：$p\times q$且$B=(b_{ij})$：$p\times q$，則此二矩陣之和定義為

$$A+B=(a_{ij}+b_{ij}):p\times q.$$

唯有當矩陣A之行數等於矩陣B之列數時，我們才可以定義A乘以B之一般乘法。因此，若$A=(a_{ij})$：$m\times n$且$B=(b_{ij})$：$n\times q$，則A乘以B之積（以AB表之）為一$p\times q$矩陣，其定義為 $AB=C=(c_{ij})$，此處

$$c_{ij}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj},\qquad i=1,2,\ldots,m,\quad j=1,2,\ldots,q.$$

由上面的定義可以導出下面的結果：

(1)$(A+B)'=A'+B'$, $(A+B+C)'=A'+B'+C'$；

(2)$(AB)'=B'A'$, $(ABC)'=C'B'A'$；

(3)$A(B_1+B_2)=AB_1+AB_2$；

(4) $\sum_{\alpha=1}^{k}AB_\alpha=A(\sum_{\alpha=1}^{k}B_\alpha)$。

例 *1.3.1*　令

$$A=\begin{pmatrix}1&2&3\\4&5&6\end{pmatrix},\qquad B=\begin{pmatrix}&8&9\\10&11&12\end{pmatrix},\qquad C=\begin{pmatrix}3&1\\1&2\end{pmatrix}.$$

則

$$1.\ A'=\begin{pmatrix}1&4\\2&5\\3&6\end{pmatrix},B'=\begin{pmatrix}7&10\\8&11\\9&12\end{pmatrix};$$

$$2.\ A+B=\begin{pmatrix}8&10&12\\14&16&18\end{pmatrix};$$

$$3.\ (A+B)'=A'+B'=\begin{pmatrix}8&14\\10&16\\12&18\end{pmatrix};$$

$$4.\ CA=\begin{pmatrix}3&1\\1&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\4&5&6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}7&11&15\\9&12&15\end{pmatrix}.$$

注意此處AC無法定義。

　　現在我們再定義一些矩陣。

半單正矩陣（Semiorthogonal Matrix）　矩陣A：$p\times q$若符合$AA'=I_p\ (q\geq p)$，則稱為半單正矩陣。

例如

$$(0.5,0.5,0.5,0.5),\quad \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}0&0&-1\\1&0&0\end{pmatrix}.$$

單正方陣（Orthogonal Matrix） 方陣A若符合$AA'=I_p$，則稱為單正方陣。

□等方陣（Idempotent Matrix） 方陣A若符合$A=A^2$，則稱為冪等方陣。

例如

$$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}.$$

Kronecker積（Kronecker Product） 令A：$m\times n$和B：$p\times q$為二矩陣，則A與B之*Kronecker*積或直積（direct product）定義為$mp\times nq$之矩陣$A\otimes B=(a_{ij}B)$，此處$A=(a_{ij})$。

例如，令

$$A=\begin{pmatrix}4&2\\3&1\end{pmatrix}\quad 且\quad B=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

則

$$A\otimes B=\left(\begin{array}{cc|cc}4&0&2&0\\0&4&0&2\\\hline 3&0&1&0\\0&3&0&1\end{array}\right).$$

1.3 行列式

方陣$A=(a_{ij})$：$n\times n$之行列式定義如下

$$|A|\equiv\sum_{\alpha}(-1)^{N(\alpha)}\prod_{j=1}^{n}a_{\alpha_j,j},$$

此處 Σ_α 表示我們需考慮數字$1,2,\cdots\cdots,n$的所有不同排列方式α，而對所有的α來求和。N(α)表示某一排列α之反演（inversions）的總數，而所謂某一排列$\alpha=(\alpha_1,\alpha_2\cdots,\alpha_n)$的反演是指調整兩個指標的位置，使得較小的數字在前，

較大的數字在後。例如，$N(2,1,4,3)=1\times N(1,2,4,3)=2\times N(1,2,3,4)=2$，因為$N(1,2,3,4)=0$。同理可得$N(4,3,1,2)=1+N(3,4,1,2)=3+N(3,1,2,4)=5$。上面的行列式以$|A|$或$\det A$表示，若$|A|$為實數，則以$|A|_+$表示$|A|$之正值。注意

$$|A'|=\sum_\alpha(-1)^{N(\alpha)}\prod a_{j,\alpha_j}=\sum_\alpha(-1)^{N(\alpha)}\prod a_{\alpha_j,j}=|A|.$$

例1.3.1

1. $\begin{vmatrix}2 & 1\\ 1 & 5\end{vmatrix}=2\times5-1\times1=9,$
2. $\begin{vmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{vmatrix}=4-1=3.$

由$|A|$之定義可直接導出下面的結果。

(1)將第i列（或行）乘以常數C，所得之行列式值為原來的值乘以C，由此可知，當A為$n\times n$矩陣，則$|cA|=C^n|A|$。

(2)將矩陣的某兩列（或行）位置互調，所得之行列式的正負號會改變。由此可知，若矩陣的某兩列（或行）元素相同，則其行列式值必為0。

(3)將矩陣之第j列（或行）乘以c加入第i列（或行），則所得之行列式值不變。由此可知，若矩陣之某一列（或行）為其他列（或行）之線性組合，則行列式值為0。

(4) $|I_n|=1$，$|D_a|=\prod a_i.$

(5)若$A=p\times p$且$B=p\times p$，則$|AB|=|A|\ |B|$

(6) $|AA'|\geq 0$。

(7)
$$\begin{vmatrix}I & 0\\ C & A\end{vmatrix}=|A|,\qquad \begin{vmatrix}A & C\\ 0 & I\end{vmatrix}=|A|,\qquad \begin{vmatrix}A & C\\ 0 & B\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}A & 0\\ C & B\end{vmatrix}=|A||B|,$$

此處之A和B為方陣。

(8) $|I_p+AB|=|I_q+BA|$，此處之A和B各為$p\times q$與$q\times p$矩陣。

1.3.1 方陣之餘因子

假設我們將矩陣A：$n\times n$之第i列的第j行刪除掉而得到一個子矩陣 A_j^i，令 $m_{ij}=|A_j^i|$，則$c_{ij}(A)=(-1)^{i+j}|A_j^i|=(-1)^{i+j}m_{ij}$稱為$a_{ij}$的餘因子，注意

$$|A|=\sum_{j=1}^{n}c_{ij}(A)a_{ij}=\sum_{i=1}^{n}c_{ij}(A)a_{ij},$$

$$0=\sum_{j=1}^{n}c_{ij}a_{kj},\quad k\neq i,\qquad 0=\sum_{i=1}^{n}c_{ij}a_{ik},\quad j\neq k.$$

例*1.3.2*

令

$$A=\begin{pmatrix}1&6&5&7\\6&9&10&12\\3&7&8&10\\2&5&9&11\end{pmatrix},$$

又令i=2且j=3，則

$$A_3^2=\begin{pmatrix}1&6&7\\3&7&10\\2&5&11\end{pmatrix},$$

而 $c_{23}(A)=(-1)^{2+3}|A_3^2|$

1.3.2. 矩陣之子式，主子式，和跡數

假設 $A_{(j_1,\cdots,j_t)}^{(i_1,\cdots,i_t)}$ 是由矩陣A：$m\times n$之第$i_1,i_2,\cdots,i_t$列及第$j_1,j_2,\cdots,j_t$所形成的一個子矩陣，則此子矩陣必為A的一個子方陣，我們稱 $|A_{(j_1,\cdots,j_t)}^{(i_1,\cdots,i_t)}|$ 為一個t階的子式。若$i_1=j_1,i_2=j_2,\cdots,i_t=j_t$，則稱之為$t$階的主子式（principal minor）。

對任何方陣而言，它的所有t階主子式的和就稱為該方陣A之第t個跡數，以符號表示為 $\mathrm{tr}_t(A)=\sum_\alpha|A_{(i_1,\cdots,i_t)}^{(i_1,\cdots,i_t)}|$。因此，當$t=1$，則可得 $\mathrm{tr}_1A\equiv\mathrm{tr}\,A=\sum_{i=1}^{n}a_{ii}$

例*1.3.3* 令A為第1.3.1節中所給的4×4矩陣，又令$i_1=2,i_2=3$，$j_1=2,j_2=3$，則