矩陣方法與統計應用

陳俊成
樓文達　編著

中央圖書出版社出版

矩陣方法
與統計應用

陳俊成
樓文達 編著

中央圖書出版社出版

行政院新聞局出版事業登記證
局版台業字第〇九二〇號

矩陣方法與統計應用

實價新台幣壹佰伍拾元整

編著者：陳俊成
樓文達

出版者：中央圖書出版社
台北市重慶南路一段一四一號

發行人：林在高

發行所：中央圖書供應社
台北市重慶南路一段一四一號
電話：三三一五七二六
三七一九八九三
郵政劃撥帳戶：九一四號

印刷所：聯和印製廠有限公司
台北市寶興街二十一號

中華民國六十九年九月初版

編號：2632

序

統計學的演變已從簡單的描述進展到大量數據的分析，然後在蒐集數據後加以探討，以了解欲討論的問題能得到什麼結果和知識，這些基本上是與“量”有關的，有時更必須對所得到的數據作更複雜的計算。因此，統計家們必須再學習一些數學知識，去了解一些數學上的工具。而矩陣以及其代數就是這些工具中的一種。矩陣常用來組織已得到的數據，使得我們能用簡易的數學處理問題，所以矩陣對於統計學的數據分析有極大助益。

本書以通俗爲主是要讀者能解、會做。因此，其內容較著重於實際解決問題的方法，而對理論的探討，稍有偏廢。但這並不表示本書全無理論可言，舉凡能幫助讀者了解或爲讀者所必須知道之定理定則，亦無不具備。

本書的前八章介紹統計上常用的線性代數方法，內容自成體系，亦可獨立成爲線性代數之入門教科書。講述方式是以例題說明方法，對解題步驟有極詳盡的說明。第九、十章分別討論一些統計問題，在此，可發現對前八章所述線性代數方法之大量引用，讀者可前後對照，更加深印像。

線性代數與統計是數學中的兩個重要科目，此二者之間到底存在著怎麼一個關係呢？本書將提供您適當之解答。

本書謄寫工作，承劉美玉小姐協助良多，特此敬申謝意。

編著於中正嶺

中華民國六十九年八月十六日

目 錄

第一章

1. 緒　論

今日統計學之演變，已從一般的描述進展到大量數據的分析。以往只是作數據的蒐集和紀錄是沒有什麼作用的。必須於蒐集數據後加以探討，以了解欲討論的這個問題，能得到什麼樣的結果和知識。如此作探討，在性質上是和"量"有關的，即使僅僅是百分比或平均數的計算，亦需具有某些數學觀念的，通常科學家們必須對他們所得之數據做更複雜的計算，這些計算，他們往往需要一些超過他們經驗上所知的數學知識。這種情形下，統計學家們只有從新學習，或者至少學習一些，能幫助他與數學家們互相溝通的"數學語言"。

不管是何種情形，許多數學上的工具，還是值得我們去瞭解的。**矩陣**（Matrices）和其**代數**（Algebra）是這些"工具"中的一種。

何謂矩陣，簡單的說，就是將數的集合表爲**列**（Rows）和**行**（Columns）的**長方陣列**（Rectangular array）。矩陣常被用來組織已得到的數據，使得我們能用簡易的數學處理問題。矩陣之價值即在於能將繁雜的數學運算濃縮爲少許的符號，所以矩陣對統計學的數據分析有極大的助益。當然，在統計工作上，有做數學分析的需要時，我們將會發現，矩陣在計算方法的系統化和觀念之闡明方面，都很有用

本書將舉出許多用矩陣代數的方法來分析數據的例子。例如：人口動力學是一門研究有生命力體群的科學。現在依據其年齡大小來討論其個體的分配。假設 n_t 表示在時間 t 時描述年齡分配的一組數值，那麼前後兩個年齡分配的關係可以記爲 $n_t = Mn_{t-1}$ 式中 M 爲一適當的矩陣。我們將發現像這樣的方程式，於矩陣代數的內容中是極爲簡易的一種。然而其已經在穩定性年齡分配和後動學的成長方面做了很大的貢獻。

若已得到許多結果，如這些結果不借用矩陣代數之技巧，那將很難加以分析，這些技巧中的一部份將於第七章提到。另一討論矩陣性質的簡明例子是在統計學上常見的廻歸分析（Regression analysis）的方法，這種方法常應用於生物，物理，化學，工程等的實驗數據分析上。它主要是求出下列方程式

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_k x_k$$

中的 b_0，b_1，$\cdots b_k$ 之值。在上式中，變數 y 和 k 個變數 x_1，x_2，$\cdots$ x_k 中的每一個變數都有一組給予的觀測值。利用定義，b 的值可由方程式 $X'Xb = X'Y$ 化爲 $b = (X'X)^{-1}X'Y$ 求得，式中矩陣 X 和 Y 分別表示變數 x 和 y 的全部觀測值。這種表示式的簡明是顯而易見的，不管有多少個變數 x，亦不管有多少個觀測值，這種表示仍然不變，第九章將詳細的闡明這個論題，而於第十章中將做更進一步的探討。

2. 矩陣的一般性說明

矩陣在組織數據方面提供了很大的便利和助益，這是我們要描述它的起碼觀念。先從一個例子開始，然後才對它下一個正式的定義。（此將於第 6 節述及。）

例如某人對幾個不同區域的居民，調查其代與代間文化差異的百分比，而其發現若將調查結果，用表格的形式記錄下來是很方便的，現摘要其結果於表一。

表一：不同區域的居民代與代間文化差異的百分比。

代	居民		
	1	2	3
1	18	17	11
2	19	13	6
3	6	14	9
4	9	11	4

現在假設表格中數的陣列被提出來寫爲

$$\begin{bmatrix} 18 & 17 & 11 \\ 19 & 13 & 6 \\ 6 & 14 & 9 \\ 9 & 11 & 4 \end{bmatrix}$$

則其中元素（個體）在陣列中的位置，決定了它的意義。

例如，第2列第3行的元素是6，代表第3區居民在第2代的文化差異百分比之觀測值。於是**列**（Row）就代表不同區的居民在同一代的文化差異百分比；而行（Column）就代表同一區的居民在不同代的文化差異百分比，所以，第一列表示這3區的居民在第一代的文化差異百分比之觀測值，而第一行表示第一區的居民在不同的四代裡其文化差異百分比的觀測值。像這樣由數形成的陣列稱爲**矩陣**（Matrix）。

對任一矩陣首先要注意的是，其爲一方形的陣列，將所有的元素依行與列一一置入。同一行的元素通常都具有某種共通的特性，列也是一樣。陣列中的個體，稱爲矩陣的**元素**（Elements）；一般而言，矩陣的元素可爲任一類的數（實數，複數，有理數及無理數等），甚至單一變數或多變數函數亦可。

矩陣代數（Matrix algebra）即是我們已經描述過的**陣列的代數**（Algebra of arrays），在給予矩陣的正式定義以前，我們先提供一些在矩陣代數中將廣泛使用的數學符號。

3. 下標符號

用字母來表示數字，則它們之間的算術就稱爲**代數**（Algebra）。於是前述矩陣的前二列，即

$$\begin{bmatrix} 18 & 17 & 11 \\ 19 & 13 & 6 \end{bmatrix}$$

可以寫爲

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{bmatrix}$$

上式中 a，b，c，d，e，f 分別表示對應數字 18，17，11，19，13 和 6 。我們可將這個矩陣命名爲“ A ”也就是說

$$A=\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{bmatrix}$$

更廣義的來說，在這情況下的A代表任意二列和三行的矩陣 。以這樣的方法來描述矩陣，只有a到 z 26 個字母可用，所以我們需要一種限制較少的符號表示法。這種方法就是用一個字母接上一組由整數構成的**下標**（Subscript）在適當的對應下來表示一組的數字，於是矩陣A能寫成

$$A=\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{bmatrix}$$

式中的整數 1 ， 2 和 3 稱爲下標，這個例子裏，下標代表每一元素所屬的行，而在同一行的所有元素都具有相同的下標，例如第二行元素的下標爲2 。

方才所述的原則，能同時地應用於一個矩陣內的列和行，也就是說，對所有的元素都用同一個字母表示每個字母都有兩個下標。一個接一個；第一個下標代表列而第 2 個下標代表行。於是A就寫爲

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}$$

而每一個元素的下標，固定了它在矩陣中的位置，我們常用 i 來代表“第 i 列”的下標，故 i 如果爲 4 ，就表示矩陣中的第四列，同樣的用 j 代表“第 j 行”的下標，故 $j=3$就表示第三行。所以矩陣中的第 i 列和第 j 行元素可以記爲 a_{ij}，因此 a_{12} 就是指第一列和第二行的元素。除了避免混淆外，二個下標間不需要逗號“ ，”分開；但是

有一個 12 行的矩陣，其第一列，第 12 行的元素應記為 $a_{1,12}$ 以區別 $a_{11,2}$ ，即第 11 列和第 2 行的元素。這是一個用逗號“ ，”分開兩個下標的例子。

對於一整列，一整行或甚至於整個矩陣，這個符號提供了一個“精簡的機會”，所以 A 的第一列，a_{11} ，a_{12} ，a_{13} 能精簡為

$$a_{1j} \quad j = 1 \ , \ 2 \ , \ 3$$

同理，行也能用這種方法記述之，至於整個矩陣可用大括號｛ ｝括上 a_{ij} 表示之，記為 $A = \{a_{ij}\}$ ，對 $i = 1$ ，2 與 $j = 1$ ，2 ，3 ；這個符號完全決定了矩陣中每一個元素的名稱和大小。以後的章節將用 $A = \{a_{ij}\}$ ，對 $i = 1$ ，2 ，$\cdots$ r 與 $j = 1$ ，2 ，$\cdots$ c ，以表示一般的 r 列和 c 行的矩陣。

4．求和的符號

最常用的算術運算是把數字相加到一起。下標的符號以非常簡明的方式對這種運算的描述提供了一個方法。假設欲求 a_1 ，a_2 ，a_3 ，a_4 和 a_5 五個數之和，很顯然的是

$$a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5$$

以文字加以說明則為“對於 $i = 1$ ，2 ，$\cdots$ 5 的 a_i 值求和。”這句“對於…值求和”習慣上是由希臘的大寫字母“$\sum$”（Sigma）表之。

於是這些 a 的和就寫為

$$\sum a_i \quad \text{對} \ i = 1 \ , \ 2 \ , \ \cdots \ 5$$

更進一步的縮寫是 $\sum_{i=1}^{i=5} a_i$ ，式中 $\sum$ 符號其上面下面的“ $i = 1$ ”和“ $i = 5$ ”已經替代了這句“對於 $i = 1$ ，2 ，$\cdots$ 5 ”這是表示總和是對從 1 到 5 的所有 i 之整數值求得。所以

$$\sum_{i=1}^{i=5} a_i = a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5$$

以下將對於求和符號的許多變化予以說明。$\sum$上面的“ $i=5$”經常簡化為只有“5”，所以通常熟悉的形式是

$$\sum_{i=1}^{5} a_i = a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5$$

同理

$$\sum_{i=1}^{3} x_i = x_1 + x_2 + x_3$$

而

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = x_1 + x_2 + x_3 + \cdots\cdots + x_{n-1} + x_n$$

表示 n 個 x 的和，有時在上下文中沒有混淆之虞的話，$\sum$符號上，下面的“標示項目”將予以省略，這符號的另一個變化是 i 的下限不需要硬性為 1，用 $i=3$ 表為$\sum$號的下限，我們得到

$$\sum_{i=3}^{7} y_i = y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7$$

還有，求和的下標，雖然常為連續的整數，但其中的幾個整數，依然可以省略，由下式可以說明之：

$$\sum_{\substack{i=3\\ i\neq 4}}^{7} y_i = y_3 + y_5 + y_6 + y_7$$

直到現在求和的符號只說明**簡單和**(Simple sums)的用法，但是它還包括**平方和**(Sums of squares)，**乘積和**(Sums of products)以及能用下標符號表示的任意組式子的和之用法。故 $c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2$ 的和能寫為

$$\sum_{i=1}^{4} c_i^2 = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2$$

同理，如果我們有 p_1，p_2，p_3 和 q_1，q_2，q_3二組數字，其逐項的乘積和 $p_1q_1 + p_2q_2 + p_3q_3$ 可寫為

$$\sum_{i=1}^{3} p_i q_i = p_1 q_1 + p_2 q_2 + p_3 q_3$$

求和的符號，一樣可以應用到包括兩個下標的情況：在求和時先對其中的一個下標求和，而另一個下標仍保持不變。例如：

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{3} a_{ij} &= \sum_{i=1}^{2} (a_{i1} + a_{i2} + a_{i3}) \\ &= \sum_{i=1}^{2} a_{i1} + \sum_{i=1}^{2} a_{i2} + \sum_{i=1}^{2} a_{i3} \\ &= a_{11} + a_{21} + a_{12} + a_{22} + a_{13} + a_{23}\end{aligned}$$

同理

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{3} \sum_{i=1}^{2} a_{ij} &= \sum_{j=1}^{3} (a_{ij} + a_{2j}) \\ &= \sum_{j=1}^{3} a_{1j} + \sum_{j=1}^{3} a_{2j} \\ &= a_{11} + a_{12} + a_{13} + a_{21} + a_{22} + a_{23}\end{aligned}$$

我們可以發現這個結果和 $\sum_{i=1}^{2} (\sum_{j=1}^{3} a_{ij})$ 是相同的，將它們的括號去掉就得到下面重要的結果

$$\sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{3} a_{ij} = \sum_{j=1}^{3} \sum_{i=1}^{2} a_{ij}$$

所以在二重求和法中討論其求和的次序（ Order of summation ）是沒有意義的。上式結果的一般通式即為

$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} a_{ij}$$

平方和，乘積和也可以用同樣的方法來寫成：

$$\sum_{j=1}^{4} a_{ij}^2 = a_{i1}^2 + a_{i2}^2 + a_{i3}^2 + a_{i4}^2$$

$$\sum_{i=1}^{3} a_{ij}\, b_{ij} = a_{1j}\, b_{1j} + a_{2j}\, b_{2j} + a_{3j}\, b_{3j}$$

及

$$\sum_{j=1}^{3} a_{1j}\, b_{j1} = a_{11}\, b_{11} + a_{12}\, b_{21} + a_{13}\, b_{31}$$

上面最後一式的 j 在 b_{j1} 中的使用，也許有些讀者覺得有疑問，因爲到目前爲止我們都是用 i 代表第一個下標，其實對做下標的 i 與 j 而言，並沒有硬性規定，誰在前，何者在後，並且任意的字母都能被使用下標。例如：

$$\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{3} a_{ij} = \sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{3} a_{pq} = \sum_{k=1}^{2}\sum_{t=1}^{3} a_{kt}$$

$$= a_{11} + a_{12} + a_{13} + a_{21} + a_{22} + a_{23}$$

前述式子 $\sum_{j=1}^{3} a_{ij}\ b_{ij}$ 是下式

$$\sum_{j=1}^{m} a_{ij}\, b_{jk} = a_{i1}\, b_{1k} + a_{i2}\, b_{2k} + a_{i3}\, b_{3k} + \cdots\cdots + a_{in}\, b_{nk}$$

的特例。另一個求和運算的特性是我們會碰到對不含下標的項求其和，例如：

$$\sum_{i=1}^{4} x = x + x + x + x = 4\,x$$

及 $$\sum_{i=1}^{3} k\, y_i = k\ y_1 + k\ y_2 + k\ y_3 = k\left(\sum_{i=1}^{3} y_i\right)$$

以上式子，很容易就可導出其一般通式爲：

$$\sum_{i=1}^{n} x = n\,x \qquad \text{及} \qquad \sum_{i=1}^{n} k\, y_i = k\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)$$

現在我們提出類似求和符號$\sum$的求積過程，這個過程常用符號 Π（