

王天行 张 泽 编著

多元生物统计学

*Duoyuang Shengwu
Tongjixue*

成都科技大学出版社

生物统计学

多元生物统计学

David J. Nelder & R. H. Wedderburn
Theory & Practice

生物统计学

还

多元生物统计学

王天行 张 泽 编著

(川) 新登字 015 号

内 容 简 介

本书系统论述多元生物统计学的基本理论和方法, 注重理论与实际应用相结合, 并突出其实用性。只要具有普通生物统计的知识就可阅读本书。

本书主要内容是: 多元正态分布和抽样分布、多元统计推断、多元方差分析、多元回归分析、多元相关分析、主成分分析、因子分析、判别分析、聚类分析。附录中列出了常用的统计分布表。

读者对象是从事农业、林业、生物学和医学等学科的高校教师、研究生、高年级学生; 科研单位的科技工作者。本书也可作为农业技术推广工作者的参考书。

多 元 生 物 统 计 学

王天行 张 泽 编著

成都科技大学出版社出版发行

内江市东兴印刷厂 印 刷

开本: 787×1092 1/16 印张: 15 字数: 347 千字 插页: 2

版次: 1992 年 4 月第 1 版

印次: 1992 年 4 月第 1 次印刷

印数: 1-1000 册

ISBN 7-5616-1117-X / O · 79

定价: 6.90 元

S11
32

前 言

多元分析是数理统计学中近三十年来迅速发展的一个分枝。由于电子计算机使用的日益普及、统计计算机软件的开发,多元分析的方法在生物学和农林科学研究中的应用愈来愈广泛,并在剖析多变量数据规律方面显示了其独特的效力。愈来愈多的研究工作者逐渐地认识到多元分析在研究方法上给他们带来的好处,因此迫切地需要掌握多元分析知识。

已出版的多元分析书籍在全世界已有几十种之多。但这些书籍几乎都是出自数学家或专业统计学家之手,理论阐述偏多。要将多元分析很好地应用到实际研究中去,对于非数学专业的人来说,这些书籍过于高深。况且多元分析的计算有一套巧妙的方法,即使理论原理弄懂了,如不掌握其计算方法之技巧,也只能是“望洋兴叹”。作者从近十年来的教学科研工作中深深地体会到,就应用者来说,他们需要的是一本既有一定理论原理,更主要是方法学类型的多元分析书籍。

另一方面,多元分析与生物学和农林科学研究的结合又逐渐形成了自身的系统。该系统有与“普通生物统计学”相平行的结构。但迄今为止还不曾有人以此为题作过专门论述。

基于上述原因,作者从实用的角度出发论述了多元生物统计学的理论、方法及其应用。旨在为从事生物学和农林科学研究的人提供一本高级生物统计学书籍。我们假定读者已具备“普通生物统计学”的基础知识。

为了与“普通生物统计学”比较,我们采用了与之相平行的系统结构,对于偏离该系统较远的内容没有列入我们的取材范围。读者可以参阅书末所列文献中的有关多元分析书籍。

本书的绝大部分内容曾向四川农业大学研究生,西南农业大学农学系高年级学生和四川省农科院“多元生物统计”讲习班学员讲授过。这些教学活动使本书的初稿有许多改进和修改。

最后,我们感谢在本书写作、修改过程中给予过我们帮助、支持的所有同志。为了举例的典型性,书中的部分数值例子取自书末的参考文献,在此向有关的作者表示歉意和感谢。

由于水平有限,书中肯定有很多缺点和错误,请读者批评指正。

四川农业大学 王天行
西南农业大学 张 泽

1991年12月

目 录

前 言	
第一章 向量和矩阵	(1)
§ 1.1 向量	(1)
1.1.1 向量的一般概念	(1)
1.1.2 向量的运算法则	(1)
1.1.3 向量的线性相关与线性无关	(2)
§ 1.2 矩阵	(2)
1.2.1 矩阵的概念及运算	(2)
1.2.2 二次型和正定矩阵	(7)
§ 1.3 特征根与特征向量	(8)
1.3.1 定义	(8)
1.3.2 实对称矩阵的特征根与特征向量	(8)
§ 1.4 分块矩阵	(9)
第二章 多元正态分布及抽样分布	(10)
§ 2.1 二元及多元正态分布	(10)
2.1.1 二元正态分布的定义	(10)
2.1.2 m 元正态分布的定义和性质	(11)
2.1.3 多元正态分布的参数估计	(13)
§ 2.2 Wishart 分布及其性质	(15)
§ 2.3 Hotelling T^2 分布	(17)
§ 2.4 Wilks Λ 统计量分布	(18)
第三章 多元统计推断	(22)
§ 3.1 均值向量的假设测验	(22)
3.1.1 单个总体均值向量的假设测验	(22)
3.1.2 两个总体均值向量差异比较的假设测验	(25)
§ 3.2 方差矩阵的齐性假设测验	(33)
§ 3.3 纵观分析	(35)
第四章 多元方差分析	(42)
§ 4.1 单因素试验资料的多元方差分析	(42)
4.1.1 一元方差分析	(42)
4.1.2 多元方差分析	(43)
§ 4.2 多元方差分析中显著变量子集的筛选	(50)
4.2.1 基本原理	(50)
4.2.2 (k, k) 变换	(52)

4.2.3 筛选显著变量的逐步方法	(55)
§ 4.3 无重复二因素交叉试验资料的多元方差分析	(63)
4.3.1 无重复二因素交叉试验的一元方差分析	(63)
4.3.2 无重复二因素交叉试验的多元方差分析	(64)
§ 4.4 等重复二因素试验资料的多元方差分析	(70)
第五章 多元回归分析	(77)
§ 5.1 回归的概念	(77)
§ 5.2 多元线性回归	(79)
5.2.1 最小二乘估计	(79)
5.2.2 假设测验	(82)
§ 5.3 双向筛选的逐步方法	(85)
第六章 多元相关分析	(97)
§ 6.1 多元相关的概念	(97)
§ 6.2 广义相关分析	(98)
6.2.1 广义复相关与广义偏相关的概念和基本性质	(98)
6.2.2 广义相关分析	(107)
6.2.3 二随机向量间的最优相关子集分析	(111)
§ 6.3 典型相关分析	(114)
6.3.1 典型相关系数与典型相关变量	(115)
6.3.2 样本典型相关系数及典型相关变量	(116)
6.3.3 样本典型相关系数显著性测验	(119)
6.3.4 典型相关分析计算方法及应用	(120)
第七章 主成分分析	(126)
§ 7.1 主成分分析的原理	(126)
7.1.1 主成分分析的基本思想及几何意义	(126)
7.1.2 主成分的导出及性质	(128)
7.1.3 R 型分析与 Q 型分析	(131)
7.1.4 距离分析与排序	(133)
§ 7.2 主成分分析的计算步骤及应用	(134)
§ 7.3 对应分析	(139)
7.3.1 数据的变换方法	(140)
7.3.2 R 型与 Q 型分析的关系	(141)
7.3.3 负荷矩阵	(142)
7.3.4 对应分析的计算步骤及应用	(144)
第八章 因子分析	(149)
§ 8.1 因子分析的数学模型	(149)
§ 8.2 因子分析的统计方法	(152)
§ 8.3 因子旋转	(156)
§ 8.4 应用实例	(158)

✓第九章 判别分析	(167)
§ 9.1 距离判别	(167)
9.1.1 距离判别的基本思想	(167)
9.1.2 距离判别分析方法及应用	(169)
§ 9.2 贝叶斯(Bayes)判别	(175)
9.2.1 判别准则	(175)
9.2.2 正态总体下的判别	(176)
§ 9.3 逐步判别	(179)
§ 9.4 费歇(Fisher)判别	(186)
9.4.1 基本原理	(186)
9.4.2 费歇(Fisher)判别的计算步骤与方法	(190)
9.4.3 应用及数字实例	(194)
✓第十章 聚类分析	(199)
§ 10.1 相似性与相异性指标	(199)
10.1.1 样品间的距离	(200)
10.1.2 相似系数	(201)
§ 10.2 类和类的特征	(201)
§ 10.3 系统聚类法	(204)
10.3.1 最短距离法与最长距离法	(205)
10.3.2 类平均法与重心法	(206)
10.3.3 离差平方和法(或称 Ward 方法)	(207)
10.3.4 系统聚类法的性质	(211)
10.3.5 Q 型与 R 型聚类分析	(213)
10.3.6 结束语	(214)
参考文献	(215)
附录	(216)

第一章 向量和矩阵

向量和矩阵是进行多元统计分析必不可少的基础，在本章中我们把向量和矩阵的有关基础知识介绍给读者。由于本书主要侧重于介绍具体的多元生物统计方法，而不过多地纠缠某些数学原理。因此本章在介绍向量和矩阵时，我们只介绍那些重要的、基本的和常用的知识，想进一步了解有关知识的读者可参阅线性代数专著。

§ 1.1 向 量

1.1.1 向量的一般概念

具有一定方向和一定数值的一组有顺序的量称为向量，并记为：

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix}$$

或者具体地称 X 为 p 维向量。

对于 p 维向量，其中数值 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 称为这个向量的分量。一个 p 维横向量称为 X 的转置向量，并记为：

$$X' = (x_1, x_2, \dots, x_p)$$

如果一个向量的各个分量都为 0，称为零向量。

一个向量 X 的长度称为向量的模，并记为 $|X|$

$$|X| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_p^2}$$

1.1.2 向量的运算法则

1. 向量的加法：

任意两个向量 $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)'$ 和 $Y = (y_1, y_2, \dots, y_p)'$ 对应的分量相加仍为一个向量，称为二向量之和。

$$X+Y = (x_1+y_1, x_2+y_2, \dots, x_p+y_p)'$$

显然，向量的加法满足交换律与结合律，即

$$(1) X+Y = Y+X$$

$$(2) (X+Y)+Z = X+(Y+Z), \quad (Z = (z_1, z_2, \dots, z_p)')$$

2. 数和向量相乘

一个常数 a 与一个向量 X 的各分量相乘得到的向量称为数与向量相乘 (简称数乘)。

$$aX = (ax_1, ax_2, \dots, ax_p)$$

1.1.3 向量的线性相关与线性无关

称 m 个 p 维向量 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ 是线性相关的, 如果存在不全为 0 的常数 $c_1, c_2, \dots, c_m$, 使

$$c_1\alpha_1 + c_2\alpha_2 + \dots + c_m\alpha_m = 0 \quad \dots\dots\dots (1.1.1)$$

显然, 非零向量组线性相关的充要条件是其中的一个可表示为其余的线性组合。反之, 如果只有当 $c_1 = c_2 = \dots = c_m = 0$ 时才能使 (1.1.1) 成立, 则称这 m 个向量是线性无关的。

§ 1.2 矩 阵

1.2.1 矩阵的概念及运算

设有 $p \times q$ 个数 a_{ij} , $i = 1, 2, \dots, p$, $j = 1, 2, \dots, q$, 把它们排成 p 行 q 列的有序阵表 A 即

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1q} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2q} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{p1} & a_{p2} & \dots & a_{pq} \end{bmatrix}$$

就称为矩阵, 通常, 矩阵用大写英文字母 A, B 等表示, 这个矩阵有 p 行 q 列, 也叫做 $p \times q$ (阶) 矩阵, 第 i 行第 j 列上的数 a_{ij} 叫做矩阵的元素, 一般, 可以把矩阵简写为

$$A = (a_{ij}) \quad \text{或} \quad A_{p \times q} = (a_{ij})$$

当 $p = q$ 时, 这个矩阵是方的, 这时称之为 p 阶方阵, p 阶方阵从左上角到右下角的元素 $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{pp}$ 称为主对角线元素。 p 维向量可以看成是一个 $p \times 1$ 矩阵; 同样阶数的两个矩阵 $A_{p \times q}, B_{p \times q}$ 如果它们对应的元素都相等, 即 $a_{ij} = b_{ij}$, $i = 1, 2, \dots, p$; $j = 1, 2, \dots, q$, 则称它们是相等的, 记作 $A = B$; 如果矩阵 $A = (a_{ij})$ 的元素全部为零, 则称 A 为零矩阵, 记为粗体的 0 。

1. 矩阵的加法

行数和列数都相等的两个矩阵可以相加, 其和是一个矩阵, 它的元素等于两个矩阵对应元素之和, 即

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

显然, 矩阵 $A-B$ 看作与 $A+B$ 意义相同, 只是在用“+”号的地方改用“-”号。

2. 矩阵与数的乘法

一个矩阵 A 与一个数 λ 相乘等于 A 的所有元素都乘以 λ , 即

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

容易验证, 上述运算具有下列性质:

- (1) $A+B = B+A$
- (2) $(A+B)+C = A+(B+C)$
- (3) $A+(-A) = 0$
- (4) $(\lambda+\mu)A = \lambda A + \mu A$
- (5) $\lambda(A+B) = \lambda A + \lambda B$
- (6) $\lambda(\mu A) = (\lambda\mu) A$

3. 矩阵的乘法

两个矩阵 A 、 B , 在 A 的列数等于 B 的行数时可以相乘, 其积是一个矩阵; 即矩阵 $A_{p \times q} = (a_{ij})$ 与 $B_{q \times r} = (b_{jk})$ 的乘积为

$$A_{p \times q} B_{q \times r} = C_{p \times r} = (c_{ik})$$

其中, $c_{ik} = \sum_{j=1}^q a_{ij} b_{jk}$, ($i=1, 2, \dots, p$; $k=1, 2, \dots, r$)

矩阵的乘法一般不满足交换律, 即一般来讲, $AB \neq BA$, 但矩阵的乘积有意义时满足结合律与分配律, 即

- (1) $(AB)C = A(BC)$
- (2) $A(B+C) = AB+AC$
- (3) $(A+B)C = AC+BC$

4. 转置矩阵

将一个矩阵 A 的行与列的元素互换位置所得的矩阵叫做 A 的转置矩阵, 记为 A' , 即当

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1q} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2q} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pq} \end{bmatrix}, \quad \text{则 } A' = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{p1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{p2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{1q} & a_{2q} & \cdots & a_{pq} \end{bmatrix}$$

显然, 列矩阵的转置矩阵是行矩阵 (反之亦然), 即

$$\begin{bmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \cdots \\ a_{pi} \end{bmatrix} = (a_{1i}, a_{2i}, \cdots, a_{pi})$$

容易验证转置运算满足下列性质:

$$(1) (A')' = A$$

$$(2) (A+B)' = A' + B'$$

$$(3) (AB)' = B'A'$$

5. 对称矩阵

一个 p 阶方阵 A , 如果与主对角线对称的对应元素相等, 即 $a_{ij} = a_{ji}$, 则称 A 为对称方阵, 显然, 对于对称方阵, $A = A'$.

6. 对角矩阵

如果一个 p 阶方阵的主对角线以外的元素全为零, 则称这个方阵为对角阵, 特记为 $\text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{pp})$ 其中 $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{pp}$ 是主对角线元素.

7. 三角阵

如果一个方阵 A 主对角线以下的元素全部为零 (即当 $j < i$ 时 $a_{ij} = 0$) 则称 A 为上三角阵: 反之, 当 $j > i$ 时, $a_{ij} = 0$, 则称 A 为下三角阵.

8. 单位阵

主对角线元素全部为 1 的对角阵称为单位阵, 记为 I , 即

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

单位矩阵满足关系式:

$$IA = AI = A$$

9. 正交阵

一个方阵 A , 如果满足 $AA' = A'A = I$, 则称 A 为正交阵.

10. 行列式

对应于任意 $p \times p$ 方阵 A , 都有一个数量 $|A|$, 或 $\det A$. 称为 A 的行列式, 行列式可按下列规则求出:

如果 A 是一阶方阵 $A = (a)$, 则 $|A| = a$.

如果 A 是二阶方阵, 则

$$|A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

如果 A 是三阶方阵, 则

$$|A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix}$$

一般, 对于 $A_{p \times p} = (a_{ij})$ 则可按如下递推公式计算 $|A|$

$$|A| = \sum_{j=1}^p (-1)^{1+j} a_{1j} |A_{1j}|, \quad \dots\dots\dots (1.2.1)$$

其中 A_{1j} 是在 A 中去掉第一行和第 j 列而形成的 $p-1$ 阶方阵。这是按第一行展开的 A 的行列式的算式。相仿, 按任何一行展开都有类似的算式, 其结果都是一样的, 即对任意 $i=1, 2, \dots, p$.

$$|A| = \sum_{j=1}^p (-1)^{i+j} a_{ij} |A_{ij}|, \quad \dots\dots\dots (1.2.2)$$

其中 A_{ij} 是在 A 中去掉第 i 行和第 j 列而形成的 $p-1$ 阶方阵, 称 $(-1)^{i+j} |A_{ij}|$ 为 a_{ij} 的代数余子式, 记为 A_{ij} , 则 (1.2.2) 可写成

$$|A| = \sum_{j=1}^p a_{ij} A_{ij} \quad \dots\dots\dots (1.2.3)$$

特别, 若 A 为对称阵, 则对一切 i, j , $A_{ij} = A_{ji}$ 成立; 若 A 是一个 $p \times p$ 的对角阵或三角阵则

$$|A| = \prod_{i=1}^p a_{ii}$$

利用行列式的性质和矩阵乘法规则我们可以证明, 对于任意实数 λ 和任意两个 p 阶方阵 A, B , 有

- (1) $|A| = |A'|$
- (2) $|AB| = |A||B| = |BA|$
- (3) $|\lambda A| = \lambda^p |A|$

但是一般来说: $|A+B| \neq |A| + |B|$

11. 子矩阵和子式

所谓 A 的子矩阵, 就是由 A 中取消某些行或列形成的矩阵, 所谓子式, 就是 A 的子矩阵的行列式; 特别, 其对角线元素也是 A 的对角线元素的 A 的 $i \times i$ 子矩阵的行列式称为 i 阶主子式。其中 i 阶主子式的矩阵是 $i+1$ 阶主子式的子矩阵, $i=1, 2, \dots, p-1$.

12. 非奇异阵

若一个方阵 A 的行列式 $|A| \neq 0$, 则称 A 是非奇异阵; 若 $|A| = 0$ 则称 A 为奇异阵。

显然, 任两个非奇异阵 A 、 B 的积 AB 仍然是一个非奇异阵; 而两个非奇异阵的和不一定是非奇异阵。例如, A 、 B 是非奇异阵, $A = -B$, 而 $A+B$ 为奇异阵, 显然, 一个非奇异阵的列与行都是线性无关的。

13. 逆矩阵

对于一个 p 阶非奇异方阵 A , 唯一地存在矩阵 A^{-1} , 使 $A^{-1}A = AA^{-1} = I$ 。则 A^{-1} 称为方阵 A 的逆矩阵。

设 A_{ij} 是 A 的元素 a_{ij} 的代数余子式, 且

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pp} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{A_{11}}{|A|} & \frac{A_{21}}{|A|} & \cdots & \frac{A_{p1}}{|A|} \\ \frac{A_{12}}{|A|} & \frac{A_{22}}{|A|} & \cdots & \frac{A_{p2}}{|A|} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{A_{1p}}{|A|} & \frac{A_{2p}}{|A|} & \cdots & \frac{A_{pp}}{|A|} \end{bmatrix} = C = (c_{ij})$$

当 $i=j$,

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^p a_{ik} \frac{A_{ik}}{|A|} = \frac{1}{|A|} \cdot \sum_{k=1}^p a_{ik} A_{ik} = 1$$

$i=1, 2, \dots, p$

(由 (1.2.3) 的 $|A| = \sum_{j=1}^p a_{ij} A_{ij}$)

当 $i \neq j$,

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^p a_{ik} \frac{A_{jk}}{|A|} = \frac{1}{|A|} \cdot \sum_{k=1}^p a_{ik} A_{jk} = 0$$

(由行列式的性质: 任一列的元素与另一列的对应元素的代数余子式的乘积之和等于零, 即 $a_{11}A_{j1} + a_{12}A_{j2} + \cdots + a_{1p}A_{jp} = 0$)

所以, $C=I$, 即

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{A_{11}}{|A|} & \frac{A_{21}}{|A|} & \cdots & \frac{A_{p1}}{|A|} \\ \frac{A_{12}}{|A|} & \frac{A_{22}}{|A|} & \cdots & \frac{A_{p2}}{|A|} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{A_{1p}}{|A|} & \frac{A_{2p}}{|A|} & \cdots & \frac{A_{pp}}{|A|} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (1.2.4)$$

逆矩阵的运算满足下列关系式:

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

因为: $(AB)(B^{-1}A^{-1}) = A(BB^{-1})A^{-1} = AIA^{-1} = I$

$$(2) (A^{-1})' = (A')^{-1}$$

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

从而 $(A^{-1})' = (A')^{-1}$

(3) 若 A 是对称阵, 则 A^{-1} 也是对称阵

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

$$(4) |A^{-1}| = (|A|)^{-1}$$

14. 矩阵的秩

一个矩阵 $A_{p \times q}$ 的最大的线性无关的列数即为矩阵的秩, 记为 $R(A)$. 若 $R(A) = r$, 则 A 的第 $r+1$ 阶的子式必定等于零, 而至少有一个 r 阶的子式不等于零, 那么至少有一组 (或者 r 个行) 是线性无关的. 如果所有 $r+1$ 阶子式都等于零, 则任何一组 $r+1$ 列 (或 $r+1$ 行) 都不能是线性无关的, 因为如果有 $r+1$ 列 (行) 是线性无关的话, 那就会找到一个不等于零的 $r+1$ 阶子式, 这是与假设相矛盾的. 因之, 矩阵 A 的秩有下列等价定义: 它等于矩阵的最大线性无关的列数, 或等于线性无关的行数, 或者等于不为零的子式的最大阶数.

15. 矩阵的迹

一个 p 阶方阵 $A = (a_{ij})$ 的主对角线元素之和称为矩阵 A 的迹, 记为

$$\text{tr} A = \sum_{i=1}^p a_{ii},$$

对于矩阵的迹可直接验证下列性质:

$$(1) \text{tr} A = \text{tr} A',$$

$$(2) \text{tr}(A+B) = \text{tr} A + \text{tr} B,$$

$$(3) \text{tr} AB = \text{tr} BA,$$

$$(4) \text{tr}(ABC) = \text{tr}(CAB) = \text{tr}(BCA);$$

因此, 对任何正交阵 θ , $\text{tr} \theta' A \theta = \text{tr} \theta \theta' A = \text{tr} A$.

1.2.2 二次型和正定矩阵

1. 二次型

二次型是指含有 p 个实变量 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 的一个型如

$$\theta = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p a_{ij} x_i x_j$$

的表示式. 其中 a_{ij} 是实常数, 并且 $a_{ij} = a_{ji}$. 如果记 $A = (a_{ij})$, $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)'$ 则

$$\theta = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p a_{ij} x_i x_j = X' A X$$

2. 正定阵

若一个对称阵 A , 对于一切 $X \neq 0$, 都有 $X'AX > 0$ 则称 A 为正定的, 记为 $A > 0$; 如果对一切 X , 都有 $X'AX \geq 0$, 则称 A 为半正定的记为 $A \geq 0$.

§ 1.3 特征根与特征向量

1.3.1 定义

一个 $p \times p$ 方阵 $A = (a_{ij})$ 的特征根, 就是指特征方程

$$|A - \lambda I| = 0 \quad \dots\dots\dots (1.3.1)$$

的根。显然, (1.3.1) 是 λ 的 p 次方程 (这个方程的次数恰好等于方阵 A 的阶数)。故恰好有 p 个根。特别, 如果 A 是对角阵, 则其对角线元素就是 A 的特征根。一般地, 可将 (1.3.1) 写成

$$(-\lambda)^p + (-\lambda)^{p-1}S_1 + (-\lambda)^{p-2}S_2 + \dots + (-\lambda)S_{p-1} + |A| = 0$$

其中 S_i 是 A 的一切 i 阶主子式的和, 特别有 $S_1 = \text{tr}A$, 于是利用根与系数的关系可知, A 的特征根的积等于 $|A|$, A 的特征根的和等于 $\text{tr}A$.

例如, 令 $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}$, 则

$$\begin{aligned} |A - \lambda I| &= \begin{vmatrix} 3-\lambda & 2 \\ 2 & 3-\lambda \end{vmatrix} \\ &= (-\lambda)^2 + (-\lambda)(3+3) + 5 = \lambda^2 - 6\lambda + 5 = 0 \end{aligned}$$

则有 $\lambda_1 = 5, \lambda_2 = 1$,

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 = |A| = 5, \quad \lambda_1 + \lambda_2 = \text{tr}A = 6$$

满足方程:

$$(A - \lambda I)X = 0$$

的非零向量 $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)'$ 称为矩阵 A 关于特征根 λ 的特征向量。

显然, λ 关于矩阵 A 的特征向量不是唯一的, 若 X 是 λ 关于 A 的特征向量, 则任一数乘 cX ($c \neq 0$) 也是 λ 关于 A 的特征向量; 另外, 矩阵 A 的特征根关于变换: $A \rightarrow CAC'$ 是保持不变的。其中 C 为 $p \times p$ 正交矩阵, 因为

$$|CAC' - \lambda I| = |CAC' - \lambda CC'| = |A - \lambda I|$$

1.3.2 实对称矩阵的特征根与特征向量

在多元统计分析中, 牵涉到的矩阵如方差阵 Σ , 和相关矩阵 R 大多是实对称矩阵。在这一小节里我们把有关实对称矩阵的定理罗列于此, 不作证明。

定理 1.3.1: 若 A 是 $p \times p$ 实对称矩阵, 则它的特征根都是实数。

定理 1.3.2: 实对称矩阵不同特征根所对应的特征向量是正交的。

定理 1.3.3: 正定实对称矩阵的特征根是正实数.

定理 1.3.4: 对于任一实数对称矩阵 A , 必存在一个正交矩阵 C , 使得

$$C'AC = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p), \quad \dots\dots\dots (1.3.2)$$

$$\text{或 } A = C\Lambda C'$$

其中, Λ 为对角阵, 其对角线元素事实上是 A 的 p 个特征根; $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$; C 的第 i 列向量 u_i 是 λ_i 对应的特征向量.

定理 1.3.5: 设 A 、 B 分别是 $p \times q$ 和 $q \times p$ 矩阵, 则 AB 与 BA 的非零特征根相同.

§ 1.4 分块矩阵

对于一个 $r \times q$ 矩阵 $A = (a_{ij})$, 能够被剖分成

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (1.4.1)$$

其中; $A_{11} = (a_{ij})$, ($i = 1, 2, \dots, m$; $j = 1, 2, \dots, n$)

$A_{12} = (a_{ij})$, ($i = 1, 2, \dots, m$; $j = n+1, \dots, q$)

$A_{21} = (a_{ij})$, ($i = m+1, \dots, p$; $j = 1, 2, \dots, n$)

$A_{22} = (a_{ij})$, ($i = m+1, \dots, p$; $j = n+1, \dots, q$)

称为被剖分的子块矩阵, 假设将同样阶数的矩阵 $B_{p \times q}$ 用类似方法剖分为子块矩阵 B_{ij} ($i, j = 1, 2$). 则

$$A + B = \begin{bmatrix} A_{11} + B_{11} & A_{12} + B_{12} \\ A_{21} + B_{21} & A_{22} + B_{22} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (1.4.2)$$

如果对 $A_{p \times q}$ 矩阵进行如上剖分; 且对 $C_{q \times r}$ 矩阵剖分成子矩阵 C_{ij} , ($i, j = 1, 2$), 其中 C_{11} , C_{12} 具有 n 行, 则

$$A \cdot C = \begin{bmatrix} A_{11}C_{11} + A_{12}C_{21} & A_{11}C_{12} + A_{12}C_{22} \\ A_{21}C_{11} + A_{22}C_{21} & A_{21}C_{12} + A_{22}C_{22} \end{bmatrix}$$

定理 1.4.1: 假设将 A 按照 (1.4.1) 剖分, 使得 A_{11} , A_{22} 是方阵, 并且 A_{11} , A_{22} 是非奇异阵, 则

$$|A| = |A_{11}| |A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}|$$

$$= |A_{22}| |A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}| \quad \dots\dots\dots (1.4.3)$$