

統計學

沈威宇

2025 年 1 月 7 日

目錄

第一章 統計學 (Statistics)	1
第一節 一維數據分析	1
一、眾數 (Mode, Mo)	1
二、中位數 (Median, Me)	1
三、算術平均數 (Arithmetic mean)	1
四、加權平均數	1
五、幾何平均數	1
六、百分位數 (Percentile, Percentile score)	1
七、四分位數 (Quantile)	3
八、百分位排名 (等級) (Percentile rank)	4
九、全距	4
十、四分位距	4
十一、母體變異數 (Population variance) 和母體標準差 (Population standard deviation)	4
十二、樣本變異數 (Sample variance) 和樣本標準差 (Sample standard deviation)	4
十三、線性變換	5
十四、標準化	5
第二節 二維數據分析	5
一、散布圖	5
二、皮爾森積動差相關係數 (Pearson product-moment correlation coefficient, PPMCC, PCCs) / 相關係數	6
三、(線性) 迴歸直線/最適直線	6
第三節 多維資料分析	7
一、迴歸直線	7
第四節 參考文獻	9

第一章 統計學 (Statistics)

第一節 一維數據分析

今有一由小到大排列的實數序列 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 。

一、眾數 (Mode, Mo)

出現次數最多者。

二、中位數 (Median, Me)

$$\begin{cases} x_{\frac{n+1}{2}}, & n \text{ is odd.} \\ \frac{x_{\frac{n}{2}} + x_{\frac{n}{2}+1}}{2}, & n \text{ is even.} \end{cases}$$

三、算術平均數 (Arithmetic mean)

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

四、加權平均數

令 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 對應的權數為 $\{w_1, w_2, \dots, w_n\}$ 。加權平均數為：

$$\frac{\sum_{i=1}^n x_i w_i}{\sum_{i=1}^n w_i}$$

五、幾何平均數

$$\sqrt[n]{\prod_{i=1}^n x_i}$$

六、百分位數 (Percentile, Percentile score)

令：第 k 百分位數為 P_k ， $m = n \frac{k}{100}$ ， $i = [m]$ ， $j = i + 1$ ， $g = m - i$ ， $h = \frac{k}{100}(n - \alpha - \beta + 1) + \alpha$ ， $r = (n - 1) \frac{k}{100}$ ， $s = [r] + 1$ ， $t = s + 1$ 。

令：

$$\text{RoundHalfToEven}(x) = \begin{cases} \lfloor x \rfloor, & \text{if } x - \lfloor x \rfloor < 0.5 \\ \lceil x \rceil, & \text{if } x - \lfloor x \rfloor > 0.5 \\ 2 \left\lfloor \frac{x}{2} \right\rfloor, & \text{if } x - \lfloor x \rfloor = 0.5 \text{ and } \lfloor x \rfloor \text{ is even} \\ 2 \left\lfloor \frac{x}{2} \right\rfloor + 1, & \text{if } x - \lfloor x \rfloor = 0.5 \text{ and } \lfloor x \rfloor \text{ is odd} \end{cases}$$

$$x_h = x_{\lfloor h \rfloor} + (h - \lfloor h \rfloor)(x_{\lceil h \rceil} - x_{\lfloor h \rfloor}).$$

各種百分位數定義主要分為兩類：

- 包含性定義 (Inclusive definition)：較常用。至少有 $k\%$ 的項 $\leq P_k$ ，且至少有 $(100 - k)\%$ 的項 $\geq P_k$ 。
- 排除性定義 (Exclusive definition)：較少用。至少有 $k\%$ 的項 $< P_k$ ，且至少有 $(100 - k)\%$ 的項 $> P_k$ 。

各種百分位數定義：

- inverted_cdf (method 1 of H& F):

$$P_k = \begin{cases} x_j, & g > 0 \\ x_i, & g = 0 \end{cases}$$

- averaged_inverted_cdf (method 2 of H& F): 離散定義中最常用。

$$P_k = \begin{cases} x_j, & g > 0 \\ \frac{x_i + x_j}{2}, & g = 0 \end{cases}$$

- closest_observation (method 3 of H& F):

$$P_k = x_{\text{RoundHalfToEven}(m)}$$

- interpolated_inverted_cdf (method 4 of H& F):

$$\alpha = 0$$

$$\beta = 1$$

$$P_k = x_h$$

- hazen (method 5 of H& F):

$$\alpha = \frac{1}{2}$$

$$\beta = \frac{1}{2}$$

$$P_k = x_h$$

- weibull (method 6 of H& F): Excel PERCENTILE.EXC 使用其乘以% 為值。

$$\alpha = 0$$

$$\beta = 0$$

$$P_k = x_h$$

- linear (method 7 of H& F): Excel PERCENTILE.INC 使用其乘以% 為值。連續定義中最常用。

$$\alpha = 1$$

$$\beta = 1$$

$$P_k = x_h$$

- median_unbiased (method 8 of H& F):

$$\alpha = \frac{1}{3}$$

$$\beta = \frac{1}{3}$$

$$P_k = x_h$$

- normal_unbiased (method 9 of H& F):

$$\alpha = \frac{3}{8}$$

$$\beta = \frac{3}{8}$$

$$P_k = x_h$$

- lower (NumPy old method):

$$P_k = x_s$$

- higher (NumPy old method):

$$P_k = x_t$$

- nearest (NumPy old method):

$$P_k = x_{\text{RoundHalfToEven}(r)+1}$$

- midpoint (NumPy old method):

$$P_k = \frac{x_s + x_t}{2}$$

七、 四分位數 (Quantile)

與百分位數同有該等各種定義，僅將其中之 100 均改為 4、第 k 四分位數稱 Q_k 、PERCENTILE.INC 改為 QUANTILE.INC、PERCENTILE.EXC 改為 QUANTILE.EXC，並另有下列其他定義方法。

- TI-83 calculator boxplot and 1-Var Stats：先取中位數為 Q_2 ，將序列以中位數為界分為兩半，若 n 為奇數則中位數不包含在兩半，分別取兩半之中位數為 Q_1 、 Q_3 。
- Tukey's hinges：先取中位數為 Q_2 ，將序列以中位數為界分為兩半，若 n 為奇數則中位數包含在兩半，分別取兩半之中位數為 Q_1 、 Q_3 。
- 英文維基百科方法 3：先取中位數為 Q_2 ，若 n 為偶數則將序列以中位數為界分為兩半，分別取兩半之中位數為 Q_1 、 Q_3 ；若 n 除以 4 的商為 q 且餘數為 1，則 $Q_1 = 0.25x_q + 0.75x_{q+1}$ ； $Q_3 = 0.75x_{3q+1} + 0.25x_{3q+2}$ ；若 n 除以 4 的商為 q 且餘數為 3，則 $Q_1 = 0.75x_{q+1} + 0.25x_{q+2}$ ； $Q_3 = 0.25x_{3q+2} + 0.75x_{3q+3}$ 。

八、 百分位排名（等級）（Percentile rank）

令百分位等級 PR，累積次數 CF 為小於等於感興趣值的項數，次數 F 為於等於感興趣值的項數，CF' 為小於感興趣值的項數。定義：

$$PR = 100 \frac{CF - 0.5F}{n} = 100 \frac{CF' + 0.5F}{n}$$

Excel PERCENTRANK.INC 定義：

$$PR = \frac{CF'}{n - 1} 100\%$$

Excel PERCENTRANK.EXC 定義：

$$PR = \frac{CF' + 1}{n + 1} 100\%$$

九、 全距

$$R = \max(\mathbf{X}) - \min(\mathbf{X})$$

十、 四分位距

$$Q_3 - Q_1$$

十一、 母體變異數（Population variance）和母體標準差（Population standard deviation）

稱 $x_i - \mu$ 為離均差， $i = 1, 2, \dots, n$ 。母體變異數 σ^2 ，母體標準差 σ ：

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}{n} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n} - \mu^2 \\ \sigma &= \sqrt{\sigma^2}\end{aligned}$$

十二、 樣本變異數（Sample variance）和樣本標準差（Sample standard deviation）

稱 $x_i - \mu$ 為離均差， $i = 1, 2, \dots, n$ 。樣本變異數 s^2 ，樣本標準差 s ：

$$\begin{aligned}s^2 &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}{n - 1} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\mu^2}{n - 1} \\ s &= \sqrt{s^2}\end{aligned}$$

十三、 線性變換

\mathbf{X} 的線性變換 $\mathbf{Y} = \{y_i \mid y_i = ax_i + b, i = 1, 2, \dots, n\}$ ，記作 $\mathbf{Y} = a\mathbf{X} + b$ 。

性質：

$$\mu_{\mathbf{Y}} = a\mu_{\mathbf{X}} + b$$

$$\sigma_{\mathbf{Y}} = |a|\sigma_{\mathbf{X}}$$

$$s_{\mathbf{Y}} = |a|s_{\mathbf{X}}$$

十四、 標準化

標準分數/Z 分數 \mathbf{Z} ：即標準化後的數據

$$\mathbf{Z} = \{z_i \mid z_i = \frac{x_i - \mu}{\sigma}, i = 1, 2, \dots, n\}.$$

性質：

$$\mu_{\mathbf{Z}} = 0, \quad \sigma_{\mathbf{Z}} = 1$$

$$\sum_{i=1}^n z_i^2 = n$$

第二節 二維數據分析

今有由小到大排列的實數序列 $\mathbf{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 與 $\mathbf{Y} = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ ，標準差分別為 $\sigma_{\mathbf{X}}, \sigma_{\mathbf{Y}}$ ，算術平均數分別為 $\mu_{\mathbf{X}}, \mu_{\mathbf{Y}}$ ，標準化後的數據 $\mathbf{X}' = \{x'_i \mid x'_i = \frac{x_i - \mu_{\mathbf{X}}}{\sigma_{\mathbf{X}}}, i = 1, 2, \dots, n\}$ 與 $\mathbf{Y}' = \{y'_i \mid y'_i = \frac{y_i - \mu_{\mathbf{Y}}}{\sigma_{\mathbf{Y}}}, i = 1, 2, \dots, n\}$ 。

一、 散布圖

將數據點每個 $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, n$ 描繪在 xy 平面直角座標平面。

二、 皮爾森積動差相關係數 (Pearson product-moment correlation coefficient, PPMCC, PCCs) / 相關係數

X 與 Y 的相關係數記作 r_{XY} 。定義：

$$\begin{aligned}r_{XY} &= \frac{\sum_{i=1}^n x'_i y'_i}{n} \quad (\text{標準化積和除以項數}) \\S_{XX} &= \sum_{i=1}^n (x_i - \mu_X)^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\mu_X^2 = n\sigma_X^2 \\S_{YY} &= \sum_{i=1}^n (y_i - \mu_Y)^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - n\mu_Y^2 = n\sigma_Y^2 \\S_{XY} &= \sum_{i=1}^n (x_i - \mu_X)(y_i - \mu_Y) = \sum_{i=1}^n x_i y_i - n\mu_X \mu_Y \\r_{XY} &= \frac{S_{XY}}{\sqrt{S_{XX} S_{YY}}} \quad (\text{離均差積和除以根號離均差平方和積})\end{aligned}$$

判定係數 (Coefficient of determination) 為皮爾森積動差相關係數的平方。

性質：

$$-1 \leq r \leq 1, \quad 0 \leq r^2 \leq 1$$

$$r_{XY} = r_{YX}$$

相關程度：

- $r = 1$ 稱完全正相關； $r = -1$ 稱完全負相關。
- $r > 0$ 稱正相關； $r < 0$ 稱負相關； $r = 0$ 稱無相關。

線性變換：

令 $X' = aX + b$ 、 $Y' = aY + b$ 。

$$r_{X'Y'} = \frac{ac}{|ac|} r_{XY}$$

三、 (線性) 迴歸直線/最適直線

令平方和：

$$D = \sum_{i=1}^n (y_i - (mx_i + k))^2$$

解出使 D 最小 (即 D 為最小平方和) 的 m, k 即得 L (即最小平方方法)。

X' 與 Y' 的最適直線 L ： $mx + k$ 為：

$$y' = r_{X'Y'} x'$$

X 與 Y 的最適直線為：

$$y - \mu_Y = m(x - \mu_X)$$

其中：

$$m = r_{XY} \cdot \frac{\sigma_Y}{\sigma_X} = \frac{S_{XY}}{S_{XX}}$$

第三節 多維資料分析

一、迴歸直線

設有 n 個樣本，每個樣本有 m 個特徵。

令矩陣 \mathbf{X} 是 $n \times (m+1)$ 的矩陣，第一 column 是全為 1 的 column（對應截距項），其餘 column 是特徵 x_1, x_2, \dots, x_m 。

令 \mathbf{y} 是 $n \times 1$ 的 column 向量，表示目標變數。

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

迴歸係數 \mathbf{a} 可以用以下公式計算：

$$\mathbf{a} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

得到迴歸方程式：

$$y = (1, x_1, x_2, \dots, x_m) \mathbf{a}$$

Proof. 最小平方法的目標是找到一組係數 \mathbf{a} ，使得實際值 \mathbf{y} 與預測值 \mathbf{Xa} 之間的平方差和最小，即最小化以下目標函數：

$$J(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{X}_i \mathbf{a})^2$$

其中， \mathbf{X}_i 是 \mathbf{X} 的第 i row。寫成矩陣形式：

$$J(\mathbf{a}) = (\mathbf{y} - \mathbf{Xa})^T (\mathbf{y} - \mathbf{Xa})$$

展開：

$$J(\mathbf{a}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{Xa} - \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Xa}$$

因純量的轉置為其自身，所以：

$$\mathbf{y}^T \mathbf{Xa} = \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

即：

$$J(\mathbf{a}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{Xa} + \mathbf{a}^T \mathbf{X}^T \mathbf{Xa}$$

要最小化 $J(\mathbf{a})$ ，我們對 \mathbf{a} 求導數並令其為零：

$$\frac{\partial J(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -2\mathbf{y}^T \mathbf{X} + \mathbf{X}^T \mathbf{Xa} = 0$$

整理後得到：

$$\mathbf{X}^T \mathbf{Xa} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

假設 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 是可逆的，我們可以兩邊同時乘以 $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ ：

$$\mathbf{a} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

□

第四節 參考文獻

- R. J. Hyndman and Y. Fan, “Sample quantiles in statistical packages,” The American Statistician, 50(4), pp. 361-365, 1996.
- Numpy. numpy.percentile. <https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.percentile.html>.