# 统计建模与R软件

## （下册）

薛　毅　陈立萍　编著

清华大学出版社

## 内 容 简 介

R 既是一种统计软件，也是一种数学计算的环境，因为 R 并不是仅仅提供若干统计程序，使用者只需指定数据库和若干参数便可进行一个统计分析，而且还可以提供一些集成的统计工具，以及可提供各种数学计算、统计计算的函数，从而使用户能灵活机动的进行数据分析，甚至创造出符合需要的新的统计计算方法. 通过 R 语言的许多内嵌统计函数，读者可以很容易学习和掌握 R 语言的语法，也可以编制自己的函数来扩展现有的 R 语言.

本书既深入浅出、通俗易懂，又从数理统计的角度对 R 软件进行科学、准确和全面的介绍，不仅介绍其基本用法，而且简要介绍一些必须的专业知识背景，以便使读者能深刻理解该软件的精髓和灵活、高级的使用技巧. 此外，我们还将介绍在工程技术、经济管理、社会生活等各方面的丰富的统计问题及其统计建模方法，通过该软件进行求解，使读者获得从实际问题建模入手、到利用软件进行解答和分析的全面训练.

本教材以统计理论为基础，按照数理统计教材的章节顺序，在讲明统计的基本概念的同时，以 R 软件为辅助计算手段，重点介绍统计计算的方法，从而有效地解决统计中的计算问题.

本书可作为为理工、经济、管理、生物等专业学生数理统计课程的辅导教材或教学参考书，也作为统计计算课程的教材，和数学建模竞赛的辅导教材.

# 前　　言

本书既不是一本关于数理统计或统计计算的教科书，也不是一本关于 R 软件使用手册的教材，而是一本将两者相结合的教材或教科书.

关于数理统计的教材或教科书已非常多，这类教材主要是以数理统计的理论为基础，讲清其理论、方法与应用背景，但对于计算，讲的较少，基本是以手工计算为主，目的是为了帮助读者理解相应的统计方法，可操作性不强.

关于统计计算的书也有不少，目前，统计计算的教材一般是讲算法 ( 这一点与数值分析或计算方法差不多 )，而没有相应的软件做支撑，有些内容是数值分析内容的重复，统计味不足.

结合软件讲统计的书，目前最多的是结合 SAS 软件、 SPSS 软件. 这类书籍基本上相当于软件使用说明书，虽然谈到一些统计概念，但讲的很少.

本书的特点是结合 R 软件来讲数理统计的基本概论与计算方法. R 软件 — 即是一种统计软件，也是一种数学计算的环境. 因为 R 并不是仅仅提供若干统计程序，使用者只需指定数据库和若干参数便可进行一个统计分析，而且还可以提供一些集成的统计工具，以及可提供各种数学计算、统计计算的函数，从而使用户能灵活机动的进行数据分析，甚至创造出符合需要的新的统计计算方法. 通过 R 语言的许多内嵌统计函数，读者可以很容易学习和掌握 R 语言的语法，也可以编制自己的函数来扩展现有的 R 语言.

本教材的编写风格是： (1) 以目前常见的数理统计教材的内容为基准，首先对数理统计的基本概念、基本方法作一个简单、清晰的介绍，在注重基础的同时，侧重统计思想和统计方法的介绍. (2) 以 R 语言为主，编写相应的计算程序. 这部分内容的目的有两个，第一是学习 R 软件的编程方法，掌握 R 软件的基本技巧. 第二是通过编程加深对统计方法的了解与掌握，同时，还可以通过编程，加深对 R 软件中相关函数的了解. (3) 介绍相关的计算函数. 针对许多统计方法， R 软件提供了大量的相关计算函数，使用者只需输入数据，就可得到相应的结果. 这一部分的写作重点是放在对计算结果的统计解释，如何通过结果来分析已有的数据，着重掌握相应的统计方法. 这些是本教材最主要的特色，也是不同于其他与软件有关的教材. 本书着重强调统计建模，以及如何使用 R 软件得到其计算结果和相应的结果解释.

本书的主要内容：第一章，概率统计的基本知识. 主要目的是复习统计的基

本知识, 便于对后面各章内容的理解. 第二章, R 软件的使用. 主要介绍 R 软件的基本使用方法. 第三章, 数据描述性分析. 从数据描述开始分析数据, 主要介绍数据的基本特征, 如均值、方差, 还有与数据有关的各种图形, 如直方图、散点图等. 第四章, 参数估计. 介绍参数估计的基本方法, 如点估计和区间估计. 着重介绍 R 软件中与估计有关的函数. 第五章, 假设检验. 介绍假设检验的基本方法, 一类是参数检验; 另一类是非参数检验. 非参数检验是该章的主要内容, 重点介绍 R 软件中与非参数检验的各类函数和使用方法. 第六章, 回归分析. 介绍回归分析的基本方法, 着重介绍回归分析的过程与方法和如何使用 R 软件作回归分析. 重点介绍其他教科书很少讲到的逐步回归、非线性回归的内容. 第七章, 方差分析. 介绍单因素方差分析、双因素方差分析, 以及正交试验设计与方差分析之间的关系. 第八章, 应用多元分析 ( I ). 介绍判别分析和聚类分析, 这些内容与判别和分类有关. 第九章, 应用多元分析 ( II ). 介绍主成分分析、主因子分析和典型相关分析, 它是应用多元分析中降维计算的内容. 第十章, 计算机模拟. 介绍与计算机模拟的 Monte Carlo 方法, 以及系统模拟方法, 最后介绍模拟方法在排队论中的应用.

在学习本书的内容之后, 你会发现, 尽管有些内容的计算是相当复杂的, 但使用了 R 软件之后, 这些问题可以很轻松地得到解决.

本书所编写的 R 函数, 以及所介绍的 R 函数均以 R-2.1.1 版为基础 (目前的版本是 R-2.3.1, 而且大约每 3 至 4 个月版本更新一次), 而且全部程序均运行通过, 读者如果需要作者自编的 R 程序, 可以发电子邮件向作者索取, 邮件地址: xueyi@bjut.edu.cn.

本书是为理工、经济、管理、生物等专业学生或专业人员为解决统计计算问题而编写, 可以作为上述专业学生数理统计课程的辅导教材或教学参考书, 也作为统计计算课程的教材, 和数学建模竞赛的辅导教材.

由于受编者水平所限, 书中一定存在不足甚至错误之处, 欢迎读者不吝指正, 我们电子邮件地址是: xueyi@bjut.edu.cn (薛毅); chenliping@bjut.edu.cn (陈立萍).

编 者

2006 年 7 月

于北京工业大学

# 目　录

# 第六章　回归分析

在许多实际问题中，经常会遇到需要同时考虑几个变量情况．例如，在电路中会遇到电压、电流和电阻之间的关系；在炼钢过程中会遇到钢水中的碳含量和钢材的物理性能（如强度、延伸率等）之间的关系．在医学上经常测量人的身高、体重，研究人的血压与年龄的关系等，这些变量之间是相互制约的．

通常，变量间的关系有两大类：

一类是变量间有完全确定的关系，可用函数关系式来表示．如电路中的欧姆定律

$$I = U/R,$$

其中 $I$ 表示电流，$U$ 表示电压，$R$ 表示电阻．在前面各章中研究的确定性模型就属于这种情况．

另一类是变量间有一定的关系，但由于情况错综复杂无法精确研究，或由于存在不可避免的误差等原因，以致它们的关系无法用函数形式表示出来．为研究这类变量之间的关系就需要通过大量试验或观测获得数据，用统计方法去寻找它们间的关系，这种关系反映了变量间的统计规律．研究这类统计规律的方法之一便是回归分析．

在回归分析中，把变量分成两类．一是因变量，它们通常是实际问题中所关心的一些指标，通常用 $Y$ 表示，而影响因变量取值的另一些变量称为自变量，它们用 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 来表示．

在回归分析中研究的主要问题是：

(1) 确定 $Y$ 与 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 间的定量关系表达式．这种表达式称为回归方程．

(2) 对求得的回归方程的可信度进行检验．

(3) 判断自变量 $X_j (j = 1, 2, \cdots, p)$ 对 $Y$ 有无影响．

(4) 利用所求得的回归方程进行预测和控制．

## 6.1　一元线性回归

先从最简单的情况开始讨论，只考虑一个因变量 $Y$ 与一个自变量 $X$ 之间的关系．

### 6.1.1 数学模型

通过一个例子来说明如何寻找 $Y$ 与 $X$ 间的定量关系表达式.

**例 6.1** 由专业知识知道, 合金的强度 $Y(\mathrm{kg/mm^2})$ 与合金中碳含量 $X(\%)$ 有关. 为了了解它们间的关系, 从生产中收集了一批数据 $(x_i, y_i)$, $i = 1, 2, \cdots, n$, 具体数据见表 *6.1.*

**表 6.1: 合金的强度与合金中碳含量数据表**

| 序号 | 碳含量 $X$ | 强度 $Y$ | 序号 | 碳含量 $X$ | 强度 $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.10 | 42.0 | 7 | 0.16 | 49.0 |
| 2 | 0.11 | 43.5 | 8 | 0.17 | 53.0 |
| 3 | 0.12 | 45.0 | 9 | 0.18 | 50.0 |
| 4 | 0.13 | 45.5 | 10 | 0.20 | 55.0 |
| 5 | 0.14 | 45.0 | 11 | 0.21 | 55.0 |
| 6 | 0.15 | 47.5 | 12 | 0.23 | 60.0 |

为了直观起见, 可画一张 "散点图", 以 $X$ 为横坐标, $Y$ 为纵坐标, 每一数据对 $(x_i, y_i)$ 为 $X - Y$ 坐标第中的一个点, $i = 1, 2, \cdots, n$, 如图 6.1 所示.

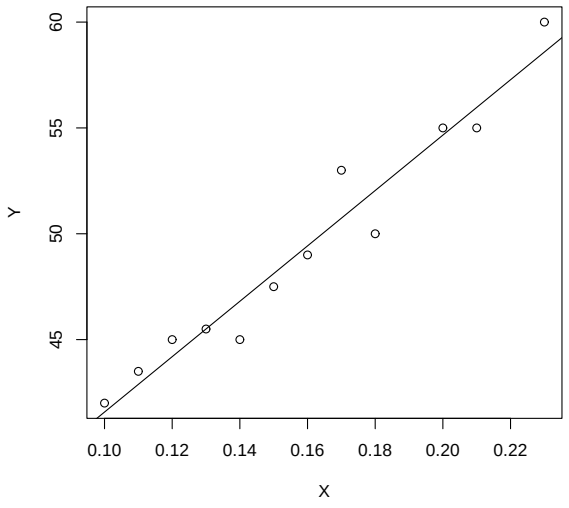



图 6.1: 数据的散点图与拟合直线

在本例中, 从散点图上发现, $n$ 个点基本在一条直线附近, 从而可以认为 $Y$ 与 $X$ 的关系基本上是线性的, 而这些点与直线的偏离是由其它一切不确定因素的影响造成的. 为此可以作如下假定:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon, \tag{6.1}$$

其中, $\beta_0 + \beta_1 X$ 表示 $Y$ 随 $X$ 的变化而线性变化的部分; $\varepsilon$ 是随机误差, 它是其他一切不确定因素影响的总和, 其值不可观测. 通常假定 $\varepsilon \sim N(0,\ \sigma^2)$; 称函数 $f(X) = \beta_0 + \beta_1 X$ 为一元线性回归函数, $\beta_0$ 为回归常数, $\beta_1$ 为回归系数, 统称回归参数. 称 $X$ 为回归自变量 ( 或回归因子 ). 称 $Y$ 为回归因变量 ( 或响应变量 ).

若 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots (x_n, y_n)$ 是 $(X, Y)$ 的一组观测值。则一元线性回归模型 (the simple linear regression) 可表示为

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \ldots n, \tag{6.2}$$

其中 $E(\varepsilon_i) = 0, \mathrm{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2,\ i = 1, 2, \ldots n.$

### 6.1.2 回归参数的估计

求出未知参数 $\beta_0,\ \beta_1$ 的估计 $\hat{\beta}_0,\ \hat{\beta}_1$ 的一种直观想法是要求图 6.1 中的点 $(x_i, y_i)$ 与直线上的点 $(x_i, \hat{y}_i)$ 的偏离越小越好, 这里 $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$, 称为回归值或拟合值.

令

$$Q(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2, \tag{6.3}$$

则 $\beta_0,\ \beta_1$ 的最小二乘估计是指使

$$Q(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \min_{\beta_0, \beta_1} Q(\beta_0, \beta_1)$$

成立。经计算可得

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum\limits_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}}, \quad \hat{\beta}_0 = \overline{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}, \tag{6.4}$$

其中

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i, \quad S_{xx} = \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2, \\ \bar{y} &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y}). \end{aligned}$$

称 $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ 分别为 $\beta_0$ 与 $\beta_1$ 的最小二乘估计，称方程

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X,$$

为一元回归方程为（或称经验回归方程）.

通常取

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i\right)^2}{n-2} \tag{6.5}$$

为参数 $\sigma^2$ 的估计量，（也称为 $\sigma^2$ 的最小二乘估计）. 可以证明 $\hat{\sigma}^2$ 是 $\sigma^2$ 的无偏估计，即 $E\hat{\sigma}^2 = \sigma^2$.

关于 $\beta_0$ 与 $\beta_1$ 估计的方差为

$$\mathrm{Var}(\beta_0) = \sigma^2\left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}\right), \quad \mathrm{Var}(\beta_1) = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}. \tag{6.6}$$

如果 $\sigma^2$ 未知，则用 $\widehat{\sigma}$ 替换 $\sigma$, 得到

$$\mathrm{sd}(\widehat{\beta}_0) = \widehat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}, \quad \mathrm{sd}(\widehat{\beta}_1) = \frac{\widehat{\sigma}}{\sqrt{S_{xx}}}. \tag{6.7}$$

称 $\mathrm{sd}(\widehat{\beta}_0), \mathrm{sd}(\widehat{\beta}_1)$ 分别为 $\beta_0$ 与 $\beta_1$ 的标准差.

### 6.1.3 回归方程的显著性检验

从回归参数的估计公式 (6.4) 可知，在计算过程中并不一定要知道 $Y$ 与 $X$ 是否有线性相关的关系，但如果不存在这种关系，那么求得的回妇方程毫无意义. 因此，需要对回归方程进行检验. 从统计上讲，$\beta_1$ 是 $E(Y)$ 随 $X$ 线性变化的变化率，若 $\beta_1 = 0$, 则 $E(Y)$ 实际上并不随 $X$ 作线性变化，仅当 $\beta_1 \neq 0$ 时，$E(Y)$ 才随 $X$ 作线性变化，也仅在这时一元线性回归方程才有意义. 因此假设检验为：

$$H_0: \ \beta_1 = 0, \quad H_1: \ \beta_1 \neq 0.$$

通常采用三种方法：

(1) $t$ 检验法. 当 $H_0$ 成立时，统计量

$$T = \frac{\hat{\beta}_1}{\mathrm{sd}(\hat{\beta}_1)} = \frac{\hat{\beta}_1\sqrt{S_{xx}}}{\hat{\sigma}} \quad \sim \quad t(n-2), \tag{6.8}$$

对于给定的显著性水平 $\alpha$, 检验的拒绝域为

$$|T| \geq t_{\alpha/2}(n-2).$$

(2) $F$ 检验法。当 $H_0$ 成立时，统计量

$$F = \frac{\hat{\beta}_1^2 S_{xx}}{\hat{\sigma}^2} \quad \sim \quad F(1, n-2), \tag{6.9}$$

对于给定的显著性水平 $\alpha$, 检验的拒绝域为

$$F \geq F_\alpha(1, n-2).$$

(3) 相关系数检验法. 记 $R = \dfrac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}S_{yy}}}$, 称 $R$ 为样本相关系数，对于给定的显著性水平 $\alpha$, 查相关系数临界值表可得 $r_\alpha(n-2)$, 则检验的拒绝域为

$$|R| > r_\alpha(n-2). \tag{6.10}$$

当拒绝 $H_0$ 时，认为线性回归方程是显著的.

在 R 软件中, 与线性模型有关的函数有： `lm()` 、 `summary()` 、 `anova()` 和 `predict()` 等. 我们先用例子简单介绍其使用方法，最后再给出详细的介绍.

**例 6.2** *求例 6.1 的回归方程，并对相应的方程作检验.*

**解**：利用 R 软件中的 `lm()` 可以非常方便求出回归参数 $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ 和作相应的检验.

相应的 R 软件计算过程如下：

```
> x<-c(0.10, 0.11, 0.12, 0.13, 0.14, 0.15,
       0.16, 0.17, 0.18, 0.20, 0.21, 0.23)
> y<-c(42.0, 43.5, 45.0, 45.5, 45.0, 47.5,
       49.0, 53.0, 50.0, 55.0, 55.0, 60.0)
```

```
> lm.sol<-lm(y ~ 1+x)
> summary(lm.sol)
Call:
lm(formula = y ~ 1 + x)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-2.0431 -0.7056  0.1694  0.6633  2.2653

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   28.493      1.580   18.04 5.88e-09 ***
x            130.835      9.683   13.51 9.50e-08 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 1.319 on 10 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9481,     Adjusted R-squared: 0.9429
F-statistic: 182.6 on 1 and 10 DF,  p-value: 9.505e-08
```

在上述操作中，第一行是输入自变量 $x$, 第二行是输入因变量 $y$, 第三行函数 `lm()` 表示作线性模型，其模型公式 `y ~ 1+x` 表示的是 $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$, 第四行函数 `summary()` 提取模型的计算结果.

在计算结果的第一部分 (`call`) 列出了相应的回归模型的公式. 第二部分 (`Residuals:`) 列出的是残差的最小值点、 $1/4$ 分位点，中位数点、 $3/$ 分 $4$ 位点和最大值点.

在计算结果的第三部分 (`Coefficients:`) 中， `Estimate` 表示回归方程参数的估计，即 $\widehat{\beta}_0$, $\widehat{\beta}_1$. `Std. Error` [1] 表示回归参数的标准差，即 $\mathrm{sd}(\hat{\beta}_0)$, $\mathrm{sd}(\hat{\beta}_1)$. `t value` 为 $t$ 值，即

$$T_0 = \frac{\hat{\beta}_0}{\mathrm{sd}(\hat{\beta}_0)} = \frac{\hat{\beta}_0}{\widehat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}}, \quad T_1 = \frac{\hat{\beta}_1}{\mathrm{sd}(\hat{\beta}_1)} = \frac{\hat{\beta}_1\sqrt{S_{xx}}}{\hat{\sigma}}.$$

[1]这里 Std. Error 表示的是标准差，不是标准误，下同

`Pr(>|t|)` 表示 P– 值，即概率值 $P\{t > |T|\}$. 还有显著性标记，其中 `***` 说明极为显著，`**` 说明高度显著，`*` 说明显著，· 说明不太显著，没有记号为不显著.

在计算结果的第四部分中，`Residual standard error` 表示残差的标准差，即式 (6.5) 中的 $\widehat{\sigma}$，其自由度为 $n-2$. `Multiple R-Squared` 为相关系数的平方，即

$$R^2 = \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}S_{yy}}.$$

`F-statistic` 表示 F 统计量，即

$$F = \frac{\hat{\beta}_1^2 S_{xx}}{\hat{\sigma}^2},$$

其自由度为 $(1, n-2)$. `p-value` 为 P– 值，即概率值 $P\{f > |F|\}$.

从计算结果可以看出回归方程通过了回归参数的检验与回归方程的检验，因此得到的回归方程

$$\hat{Y} = 28.493 + 130.835X.$$

### 6.1.4 参数 $\beta_0$ 与 $\beta_1$ 的区间估计

在得到 $\beta_0$ 与 $\beta_1$ 的估计 $\hat{\beta}_0$ 与 $\hat{\beta}_1$ 后，有时还需要它们的区间估计，由 $\beta_0$ 与 $\beta_1$ 的统计性质可知，

$$T_i = \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)} \quad \sim \quad t(n-2), \qquad i = 0, 1, \tag{6.11}$$

对给定的置信水平 $1-\alpha$, 则有

$$P\left\{\left|\frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)}\right| \le t_{\alpha/2(n-2)}\right\} = \alpha, \qquad i = 0, 1. \tag{6.12}$$

因此，$\beta_i$ $(i = 0, 1)$ 的区间估计为

$$\left[\hat{\beta}_i - \mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)\, t_{\alpha/2}(n-2), \quad \hat{\beta}_i + \mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)\, t_{\alpha/2}(n-2)\right]. \tag{6.13}$$

注意到，在 R 程序中，线性回归模型函数 `lm()` 和 `summary()` 为我们提供了所需要的值，如参数的估计值和相应的标准差，因此，可以很容易地计算出式 (6.13) 给出的区间估计值.

编写相应的计算程序 (程序名： `beta.int.R`), 并假设变量 `fm` 是相应的拟合模型.

```
beta.int<-function(fm,alpha=0.05){
   A<-summary(fm)$coefficients
   df<-fm$df.residual
   left<-A[,1]-A[,2]*qt(1-alpha/2, df)
   right<-A[,1]+A[,2]*qt(1-alpha/2, df)
   rowname<-dimnames(A)[[1]]
   colname<-c("Estimate", "Left", "Right")
   matrix(c(A[,1], left, right), ncol=3,
       dimnames = list(rowname, colname ))
}
```

在程序中, summary 是提取模型信息, 返回值为一列表, 其中 $coefficients 是由回归系数、标准差、 t 值和 P– 值构成的矩阵. 若 fm 是由 lm 计算得到回归模型, 其中 $df.residual 为模型的自由度. left 和 right 是按式 (6.13) 计算区间的左右端点.

函数的返回值是一矩阵, 其元素有 $\beta$ 的估计值和相应的区间估计. 下面看一个例子.

**例 6.3** *求例 6.2 中参数 $\beta_0$ 和 $\beta_1$ 的区间估计 ($\alpha = 0.05$).*

**解:** 在计算回归模型后 (lm.sol), 调用自编函数 beta.int.R, 就可以得到相应的区间估计.

```
> source("beta.int.R")
> beta.int(lm.sol)
             Estimate      Left     Right
(Intercept)  28.49282  24.97279  32.01285
x           130.83483 109.25892 152.41074
```

其中 Left 是估计的左区间端点, Right 是估计的右区间端点.

从这个例子可以看出, 我们不但可以利用 R 函数进行计算, 还可以通过 R 函数的返回值再计算, 得到我们所需要全部信息.

### 6.1.5 预测

当经过检验, 回归方程是有意义时, 可用它作预测. 这里讲的预测可以有两方面的意义, 一是当给定 $X = x_0$ 时, 求相应平均值 $E(y_0)$ 的点估计与其置信水

平为 $1-\alpha$ 的区间估计，二是对给定 $X=x_0$ 求 $y_0=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1x_0$ 的预测值及它的概率为 $1-\alpha$ 的预测区间.

对于 $X=x_0$, $Y=y_0$ 的置信度为 $1-\alpha$ 的预测区间为

$$[\hat{y}_0-l,\ \ \hat{y}_0+l], \tag{6.14}$$

其中

$$l=t_{\alpha/2}(n-2)\hat{\sigma}\sqrt{1+\frac{1}{n}+\frac{(\bar{x}-x_0)^2}{S_{xx}}}. \tag{6.15}$$

即

$$P\{\hat{y}_0-l<y_0<\hat{y}_0+l\}=1-\alpha.$$

在实际问题中，当样本容量 $n$ 很大时，对于在 $\bar{x}$ 附近的 $x_0$, 可以得到简化的预测区间，此时 (6.15) 式中的根式近似等于 1. 且 $t_{\alpha/2}(n-2)\approx Z_{\alpha/2}$, 于是 $y_0$ 的置信度为 $1-\alpha$ 的预测区间近似地等于

$$[\hat{y}_0-\hat{\sigma}Z_{\alpha/2},\ \hat{y}_0+\hat{\sigma}Z_{\alpha/2}]. \tag{6.16}$$

**例 6.4** *求例 6.1 中 $X=x_0=0.16$ 时相应 $Y$ 的概率为 0.95 的预测区间.*

**解**：利用 R 软件中的 `predict()` 可以非常方便求出预测值与预测区间.

下面是 R 软件的计算过程：

```
> new <- data.frame(x = 0.16)
> lm.pred<-predict(lm.sol, new, interval="prediction", level=0.95)
> lm.pred
          fit      lwr      upr
[1,] 49.42639 46.36621 52.48657
```

第一行表示输入新的点 $x_0=0.16$, 注意，即使就一个点，也要采用数据框结构. 第二行的函数 `predict()` 给出相应的预测值，参数 `interval="prediction"` 表示同时要给出相应的预测区间，参数 `level=0.95` 表示相应的概率为 0.95. 这个参数也可以不写，因为它的省缺值就是 0.95.

由计算结果得到预测值与相应的预测区间

$$\hat{Y}(0.16)=49.43,\quad [46.37,\ 52.49].$$

### 6.1.6 控制

回归方程还可用于控制. 设某质量指标 $Y$ 与某一自变量 $X$ 间有线性相关关系，且已求得了线性回归方程 $\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X$. 此外，当 $Y \in (y_l, y_u)$ 为质量合格，那么 $X$ 应控制在什么范围内才能以概率 $1-\alpha$ 保证质量合格？这便是一个控制问题，其中 $y_l, y_u$ 是某种标准给出的定值.

控制可以看成预测的反问题，即要求观察值 $Y$ 在某一区间 $(y_l, y_u)$ 内取值时，问应将 $X$ 控制在什么范围内.

由式 (6.16), 构造不等式

$$\begin{cases} \hat{y} - \hat{\sigma} Z_{\alpha/2} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x - \hat{\sigma} Z_{\alpha/2} & \geq & y_l \\ \hat{y} + \hat{\sigma} Z_{\alpha/2} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x + \hat{\sigma} Z_{\alpha/2} & \leq & y_u \end{cases} \tag{6.17}$$

由不等式 (6.17) 得到 $x$ 的取值范围作为控制 $X$ 的上下限. 为了保证得到的控制范围有意义， $y_u$ 和 $y_l$ 满足 $y_u - y_l \geq 2\hat{\sigma} Z_{\alpha/2}$.

### 6.1.7 计算实例

这里用 Forbes 数据为例，全面展示一元回归模型的计算过程.

**例 6.5 Forbes 数据**

*在十九世纪四、五十年代，苏格兰物理学家 James D. Forbes,* 试图通过水的沸点来估计海拔高度. 他知道通过气压计测得的大气压可用于得到海拔高度，高度越高，气压越低. 在这里讨论的实验中，他研究了气压和沸点之间的关系. 由于在当时，运输精密的气压计相当困难，这引起了他研究此问题的兴趣. 测量沸点将给旅行者提供一个快速估计高度的方法.

*Forbes* 在阿尔卑斯山及苏格兰收集数据. 选定地点后，他装起仪器，测量气压及沸点. 气压单位采用水银柱高度，并根据测量时周围气温与标准气温之间的差异校准气压. 沸点用华氏温度表示. 我们从他 *1857* 年的论文中选取了 $n = 17$ 个地方的数据，见表 *6.2* 所示. 在研究这些数据时，有若干可能引起兴趣的问题，气压及沸点是如何联系的？这种关系是强是弱？我们能否根据温度预测气压？如果能，有效性如何？

**分析过程:**

Forbes 的理论认为，在观测值范围内，沸点和气压值的对数成一直线. 由此，取 10 作为对数的底数. 事实上，统计分析与对数的底是没有关系的. 由于气

**表 6.2: 在阿尔卑斯山及苏格兰的 17 个地方沸点 ($^oF$) 及大气压 (英寸汞柱) 的 Forbes 数据**

| 案例号 | 沸点 ($^oF$) | 气压 (英寸汞柱) | log (气压) | $100 \times \log$ (气压) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 194.5 | 20.79 | 1.3179 | 131.79 |
| 2 | 194.3 | 20.79 | 1.3179 | 131.79 |
| 3 | 197.9 | 22.40 | 1.3502 | 135.02 |
| 4 | 198.4 | 22.67 | 1.3555 | 135.55 |
| 5 | 199.4 | 23.15 | 1.3646 | 136.46 |
| 6 | 199.9 | 23.35 | 1.3683 | 136.83 |
| 7 | 200.9 | 23.89 | 1.3782 | 137.82 |
| 8 | 201.1 | 23.99 | 1.3800 | 138.00 |
| 9 | 201.4 | 24.02 | 1.3806 | 138.06 |
| 10 | 201.3 | 24.01 | 1.3805 | 138.05 |
| 11 | 203.6 | 25.14 | 1.4004 | 140.04 |
| 12 | 204.6 | 26.57 | 1.4244 | 142.44 |
| 13 | 209.5 | 28.49 | 1.4547 | 145.47 |
| 14 | 208.6 | 27.76 | 1.4434 | 144.34 |
| 15 | 210.7 | 29.04 | 1.4630 | 146.30 |
| 16 | 211.9 | 29.88 | 1.4754 | 147.54 |
| 17 | 212.2 | 30.06 | 1.4780 | 147.80 |

压的对数据值变化不大，最小值为 1.318, 而最大的为 1.478, 因此将所有气压的对数值乘以 100, 如表 6.2 中第 5 列所示. 这将不改变分析的主要性质的同时，避免研究非常小的数字.

**求解过程:**

着手进行回归分析的一个有效途径是，画一个变量对另一变量的散点图，它既能用于提示某种关系，也能用于说明这种关系可能是不适当的. 在散点图中， $X$ 轴为自变量，这里是 Forbes 数据中的沸点， $Y$ 轴为响应变量，这里为 $100 \times \log$(气压).

输入数据，画出散点图 (程序名： exam0804.R).

```
X <- matrix(c(
    194.5, 20.79, 1.3179, 131.79,
    194.3, 20.79, 1.3179, 131.79,
    197.9, 22.40, 1.3502, 135.02,
    198.4, 22.67, 1.3555, 135.55,
    199.4, 23.15, 1.3646, 136.46,
    199.9, 23.35, 1.3683, 136.83,
    200.9, 23.89, 1.3782, 137.82,
    201.1, 23.99, 1.3800, 138.00,
    201.4, 24.02, 1.3806, 138.06,
    201.3, 24.01, 1.3805, 138.05,
    203.6, 25.14, 1.4004, 140.04,
    204.6, 26.57, 1.4244, 142.44,
    209.5, 28.49, 1.4547, 145.47,
    208.6, 27.76, 1.4434, 144.34,
    210.7, 29.04, 1.4630, 146.30,
    211.9, 29.88, 1.4754, 147.54,
    212.2, 30.06, 1.4780, 147.80),
ncol=4, byrow=T,
dimnames = list(1:17, c("F", "h", "log", "log100")))

forbes<-as.data.frame(X)
plot(forbes$F, forbes$log100)
```

Forbes 数据的散点图的总的印象是，这些点基本上，但并不精确地，落在一条直线上. 作回归分析.

```
> lm.sol <- lm(log100 ~ F, data=forbes)
> summary(lm.sol)
```

得到

```
Call:
lm(formula = log100 ~ F, data = forbes)
```

```
Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.32261 -0.14530 -0.06750  0.02111  1.35924

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -42.13087    3.33895  -12.62 2.17e-09 ***
F             0.89546    0.01645   54.45  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3789 on 15 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.995,      Adjusted R-squared: 0.9946
F-statistic:  2965 on 1 and 15 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

由计算结果得到：

$$\hat{\beta}_0 = -42.13087,\ \ \hat{\beta}_1 = 0.89546,\ \ \mathrm{sd}(\hat{\beta}_0) = 3.33895,\ \ \mathrm{sd}(\hat{\beta}_1) = 0.01645.$$

对应于两个系数的 P– 值均 $< 2.17 \times 10^{-9}$, 是非常显著的.

关于方程的检验, 残差的标准差, $\hat{\sigma} = 0.3789$. 相关系数的平方, $R^2 = 0.995$, 关于 F– 分布的 P– 值 $< 2.2 \times 10^{-16}$, 也是非常显著的.

该模型能过 $t$ 检验和 $F$ 检验. 因此, 回当方程为

$$\hat{y} = -42.13087 + 0.89546x.$$

我们将得到的直线方程画在散点图上.

```
> abline(lm.sol)
```

得到散点图和相应的回归直线, 如图 6.2 所示.

下面分析残差. 称

$$\hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i,\ \ i = 1, 2, \cdots, n$$

为回归方程的残差.

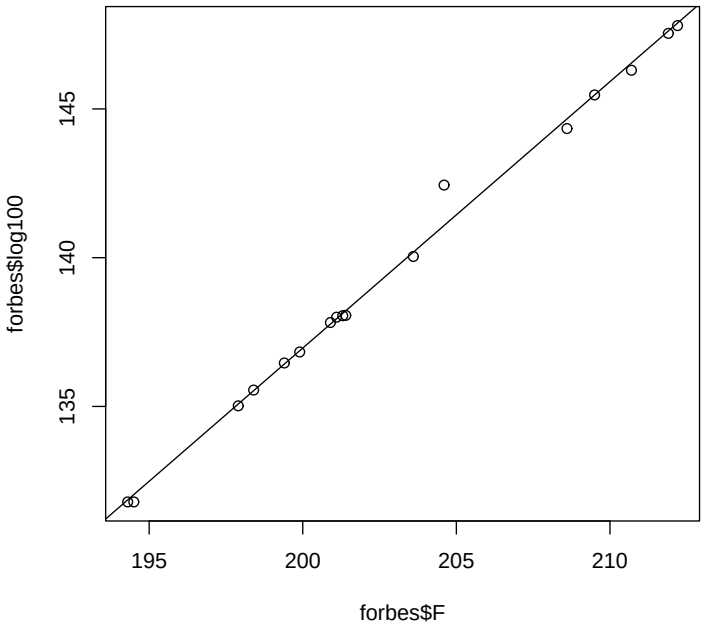



图 6.2: Forbes 数据的散点图与回归直线

在 R 软件中，函数 residuals() 计算回归方程的残差. 计算残差，并画出关于残差的散点图. 如图 6.3 所示.

```
> y.res<-residuals(lm.sol);plot(y.res)
> text(12,y.res[12], labels=12,adj=1.2)
```

其中 text(12,y.res[12], labels=12,adj=1.2) 是将第 12 号残差点标出.

从图 6.3 可以看到, 第 12 个样本点可能会有问题, 它比其他的样本点的残差大得多，因为其他点的残差的绝对值都小于 0.35, 而此点残差的绝对值约为 1.3, 因此，这个点可能不正确，或者模型的差假设不正确，或者是 $\sigma^2$ 不是常数，等等. 总之，需要对这个问题进行分析 (在后面的回归诊断中会详细介绍分析的方法).

这里作简单的处理，在数据中，去掉第 12 号样本点.

```
> i<-1:17; forbes12<-as.data.frame(X[i!=12, ])
> lm12<-lm(log100~F, data=forbes12)
> summary(lm12)
Call:
```

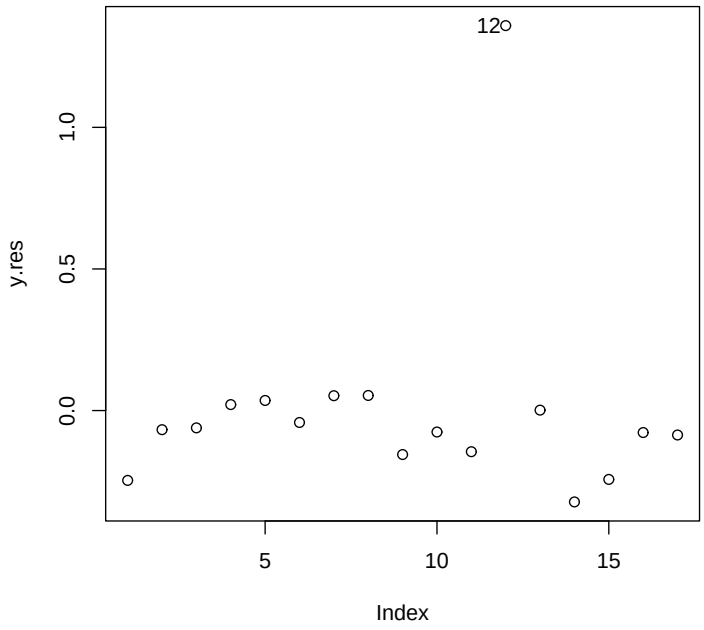



图 6.3: Forbes 数据残差的散点图

```
lm(formula = log100 ~ F, data = forbes12)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.21175 -0.06194  0.01590  0.09077  0.13042

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -41.30180    1.00038  -41.29 5.01e-16 ***
F             0.89096    0.00493  180.73  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.1133 on 14 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9996,     Adjusted R-squared: 0.9995
F-statistic: 3.266e+04 on 1 and 14 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

在去掉第 12 号样本后，回归方程的系数没有太大的变化，但系数的标准差和残差的标准差有很大的变化，减少了约 3 倍左右，相关系数 $R^2$ 也有提高.

## 6.2 R 软件中与线性模型有关的函数

上面讲了一元回归方程的方法，在介绍多元回归方程之前，先简单的介绍 R 软件中，与线性模型有关的函数，这些函数的大部分在前面已经用到过，在后面的多元线性回归中，也经常会遇到.

### 6.2.1 基本函数

适应于多元线性模型的基本函数是 lm()，其调用形式是

```
fitted.model <- lm(formula, data = data.frame)
```

其中 formula 为模型公式. data.frame 为数据框. 返回值为线性模型结果的对象存放在 fitted.model 中. 例如

```
fm2 <- lm(y ~ x1 + x2, data = production)
```

适应于 $y$ 关于 $x1$ 和 $x2$ 的多元回归模型（隐含着截距项）。

更一般的形式为

```
lm(formula, data, subset, weights, na.action,
   method = "qr", model = TRUE, x = FALSE,
   y = FALSE, qr = TRUE, singular.ok = TRUE,
   contrasts = NULL, offset, ...)
```

其中 formula 为模型公式. data 为数据框. subset 为可选择向量，表示观察值的子集. weights 为可选择向量，数据拟合的权重. 其余见在线帮助.

### 6.2.2 提取模型信息的通用函数

lm() 函数的返回值称为拟合结果的对象，本质上是一个具有类属性值 lm 的列表，有 model 、coeffcients 、residuals 等成员. lm() 的结果非常简单，为了获得更多的信息，可以使用对 lm() 类对象有特殊操作的通用函数，这些函数包括

```
add1   coef      effects  kappa   predict  residuals
```

```
alias   deviance   family   labels   print     step
anova   drop1      formula  plot     proj      summary
```

下面简单地介绍函数的使用方法.

(1) anova() 函数. anova() 函数的使用格式为

```
anova(object,...)
```

其中 object 是由 lm 或 glm 得到的对象. 其返回值是模型的方差分析表.

(2) coefficients() 函数 (简写形式为 coef()). coefficients() 函数 (或 coef() 函数) 的使用格式为

```
coefficients(object, ...)
coef(object, ...)
```

其中 object 是由模型构成的对象. 其返回值是模型的系数.

(3) deviance() 函数. deviance() 函数的使用格式为

```
deviance(object, ...)
```

其中 object 是由模型构成的对象. 其返回值是模型的残差平方和.

(4) formula() 函数. formula() 函数的使用格式为

```
formula(object, ...)
```

其中 object 是由模型构成的对象. 其返回值是模型公式.

(5) plot() 函数. plot() 函数的使用格式为

```
plot(object, ...)
```

其中 object 是由 lm 构成的对象. 绘制模型诊断的几种图形, 显示残差、拟合值和一些诊断情况.

(6) predict() 函数. predict() 函数的使用格式为

```
predict(object, newdata=data.frame)
```

其中 object 是由 lm 构成的对象. newdata 是预测点的数据, 它由数据框形式输入. 其返回值是预测值和预测区间.

(7) print() 函数. print() 函数的使用格式为

```
print(object, ...)
```

其中 object 是由模型构成的对象. 其返回值是显示模型拟合的结果. 一般不用 print() 而直接用键入对象的名称来显示.

(8) residuals() 函数. residuals() 函数的使用格式为

```
residuals(object,
          type = c("working", "response", "deviance",
                   "pearson", "partial"),
```

其中 object 是由 lm 或 aov 构成的对象. type 是返回值的类型. 其返回值是模型的残差. 简单的命令形式为 resid(object).

(9) step() 函数. step() 函数的使用格式为

```
step(object, ...)
```

其中 object 是由 lm 或 glm 构成的对象. 其返回值是逐步回归, 根据 AIC (Akaike's An Information Criterion) 的最小值选择模型.

(10) summary() 函数. summary() 函数的使用格式为

```
summary(object, ...)
```

其中 object 是由 lm 构成的对象. 其返回值是显示较为详细的模型拟合结果.

## 6.3 多元线性回归分析

在许多实际问题中影响因变量 $Y$ 的自变量往往不止一个, 通常设为 $p$ 个. 由于此时无法借助于图形的帮助来确定模型, 所以仅讨论一种最简单但又普遍的模型 — 多元线性回归模型.

### 6.3.1 数学模型

设变量 $Y$ 与变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 间有线性关系

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p + \varepsilon, \tag{6.18}$$

其中 $\varepsilon \sim N(0,\ \sigma^2)$, $\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_p$ 和 $\sigma^2$ 是未知参数, $p \geq 2$, 称模型 (6.18) 为多元线性回归模型.

设 $(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip}, y_i),\ i = 1, 2, \cdots, n$ 是 $(X_1, X_2, \cdots, X_p, Y)$ 的 $n$ 次独立观测值, 则多元线性模型 (6.18) 可表示为

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_p x_{ip} + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{6.19}$$

其中 $\varepsilon_i \in N(0, \sigma^2)$, 且独立同分布.

为书写方便，常采用矩阵形式，令

$$y=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix},\ \beta=\begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix},\ X=\begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{2n} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix},\ \varepsilon=\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}.$$

则多元线性模型 (6.19) 可表示为

$$Y=X\beta+\varepsilon, \tag{6.20}$$

其中 $Y$ 是由响应变量构成的 $n$ 维向量， $X$ 是 $n\times(p+1)$ 阶设计矩阵， $\beta$ 是 $p+1$ 维向量， $\varepsilon$ 是 $n$ 维差向量，并且满足

$$E(\varepsilon)=0,\quad \mathrm{Var}(\varepsilon)=\sigma^2 I_n.$$

### 6.3.2 回归系数的估计

类似于一元线性回归，求参数 $\beta$ 的估计值 $\hat{\beta}$, 就是求最小二乘函数

$$Q(\beta)=(y-X\beta)^T(y-X\beta), \tag{6.21}$$

达到最小的 $\beta$ 值.

可以证明 $\beta$ 的最小二乘估计

$$\hat{\beta}=\left(X^TX\right)^{-1}X^Ty. \tag{6.22}$$

从而可得经验回归方程为

$$\hat{Y}=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1X_1+\cdots+\hat{\beta}_pX_p.$$

称 $\hat{\varepsilon}=y-X\hat{\beta}$ 为残差向量. 通常取

$$\hat{\sigma}^2=\hat{\varepsilon}^T\hat{\varepsilon}/(n-p-1) \tag{6.23}$$

为 $\sigma^2$ 的估计，也称为 $\sigma^2$ 的最小二乘估计. 可以证明：

$$E\hat{\sigma}^2=\sigma^2.$$

可以证明 $\beta$ 的方差估计为

$$\mathrm{Var}(\beta) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}.$$

相应的 $\hat{\beta}$ 的标准差为

$$\mathrm{sd}(\hat{\beta}_i) = \hat{\sigma}\sqrt{c_{ii}}, \quad i = 0, 1, \cdots, p, \tag{6.24}$$

其中 $c_{ii}$ 是 $C = \left(X^T X\right)^{-1}$ 对角线上第 $i$ 个元素 [2].

### 6.3.3 显著性检验

由于在多元线性回归中无法用图形帮助判断 $E(Y)$ 是否随 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 作线性变化，因而显著性检验就显然得尤其重要. 检验有两种，一种是回归系数的显著性检验，粗略地说，就是检验某个变量 $X_j$ 的系数是否为 0. 另一个检验是回归方程的显著性检验，简单地说，就是检验该组数据是否适用于线性方程作回归.

#### 1. 回归系数的显著性检验

$$H_{j0}: \ \beta_j = 0, \qquad H_{j1}: \ \beta_j \neq 0, \qquad j = 0, 1, \cdots, p.^{3}$$

当 $H_{j0}$ 成立时，统计量

$$T_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\hat{\sigma}\sqrt{c_{jj}}} \quad \sim \quad t(n-p-1), \qquad j = 0, 1, \cdots, p.$$

其中 $c_{jj}$ 是 $C = (X^T X)^{-1}$ 的对角线上第 $j$ 个元素. 对于给定的显著性水平 $\alpha$, 检验的拒绝域为

$$|T_j| \geq t_{\alpha/2}(n-p-1), \qquad j = 0, 1, \cdots, p.$$

#### 2. 回归方程的显著性检验

$$H_0: \ \beta_0 = \beta_1 = \cdots = \beta_p = 0, \qquad H_1: \ \beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_p \text{ 不全为 } 0.$$

[2]为方便起见，认为 $\beta_0$ 是 $\beta$ 的第 0 个元素，下标比从 0 开始，下同

[3]通常的教科书不考虑 $\beta_0$ 的检验，但由于 R 软件可以提供 $\beta_0$ 的检验情况，所以这里 $j$ 从 0 开始，下同

当 $H_0$ 成立时，统计量

$$F = \frac{SS_R/p}{SS_E/(n-p-1)} \quad \sim \quad F(p, n-p-1),$$

其中

$$\begin{aligned} SS_R &= \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2, \quad SS_E = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2, \\ \bar{y} &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i, \qquad\qquad \hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \cdots + \hat{\beta}_p x_{ip}. \end{aligned}$$

通常称 $SS_R$ 为回归平方和，称 $SS_E$ 为残差的平方和.

对于给定的显著性水平 $\alpha$, 检验的拒绝域为

$$F > F_\alpha(p,\ n-p-1).$$

相关系数的平方定义为

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T},$$

用它来衡量 $Y$ 与 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 之间相关的密切程度，其中 $SS_T$ 为总体离差平方和，即 $SS_T = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$. 并且满足

$$SS_T = SS_E + SS_R.$$

**例 6.6** 根据经验，在人的身高相等的情况下，血压的收缩压 $Y$ 与体重 $X_1$(千克)，年龄 $X_2$ （岁数）有关. 现收集了 13 个男子的数据，见表 6.3. 试建立 $Y$ 关于 $X_1$, $X_2$ 的线性回归方程.

**解**: R 软件中的 `lm()` 同样可以求出回归系数，并作相应的检验.

下面是 R 软件的计算过程

```
> blood<-data.frame(
    X1=c(76.0, 91.5, 85.5, 82.5, 79.0, 80.5, 74.5,
         79.0, 85.0, 76.5, 82.0, 95.0, 92.5),
    X2=c(50, 20, 20, 30, 30, 50, 60, 50, 40, 55,
         40, 40, 20),
    Y= c(120, 141, 124, 126, 117, 125, 123, 125,
```

**表 6.3: 数据表**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $Y$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 76.0 | 50 | 120 | 8 | 79.0 | 50 | 125 |
| 2 | 91.5 | 20 | 141 | 9 | 85.0 | 40 | 132 |
| 3 | 85.5 | 20 | 124 | 10 | 76.5 | 55 | 123 |
| 4 | 82.5 | 30 | 126 | 11 | 82.0 | 40 | 132 |
| 5 | 79.0 | 30 | 117 | 12 | 95.0 | 40 | 155 |
| 6 | 80.5 | 50 | 125 | 13 | 92.5 | 20 | 147 |
| 7 | 74.5 | 60 | 123 | | | | |

```
          132, 123, 132, 155, 147)
  )
> lm.sol<-lm(Y ~ X1+X2, data=blood)
> summary(lm.sol)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2, data = blood)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.0404 -1.0183  0.4640  0.6908  4.3274

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -62.96336   16.99976  -3.704 0.004083 **
X1            2.13656    0.17534  12.185 2.53e-07 ***
X2            0.40022    0.08321   4.810 0.000713 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.854 on 10 degrees of freedom
```

```
Multiple R-Squared: 0.9461,     Adjusted R-squared: 0.9354
F-statistic: 87.84 on 2 and 10 DF,  p-value: 4.531e-07
```

从计算结果可以得到，回归系数与回归方程的检验都是显著的，因此，回归方程为

$$\hat{Y} = -62.96 + 2.136X_1 + 0.4002X_2.$$

### 6.3.4 参数 $\beta$ 的区间估计

与一元回归模型一样，这里讨论多元回归模型参数区间估计.

由 $\beta$ 的统计性质可知,

$$T_i = \frac{\hat{\beta}_i - \beta_i}{\mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)} \sim t(n-p-1), \quad i = 0, 1, \cdots, p, \tag{6.25}$$

因此, $\beta_i$ $(i = 0, 1, \cdots, p)$ 的区间估计为

$$\left[\hat{\beta}_i - \mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)\, t_{\alpha/2}(n-p-1),\ \ \hat{\beta}_i + \mathrm{sd}(\hat{\beta}_i)\, t_{\alpha/2}(n-p-1)\right]. \tag{6.26}$$

这里就不必于编写相应的求区间估计的程序,因为前面编的程序 `beta.int.R` 是一通用程序，在这里仍然可以使用.

**例 6.7** *求例 6.6 中参数 $\beta$ 的区间估计 $(\alpha = 0.05)$.*

**解:** 调入程序 `beta.int.R`, 然后求解.

```
> source("beta.int.R")
> beta.int(lm.sol)
                Estimate         Left       Right
(Intercept) -62.9633591 -100.8411862 -25.0855320
x1            2.1365581    1.7458709   2.5272454
x2            0.4002162    0.2148077   0.5856246
```

### 6.3.5 预测

当多元线性回归方程经过检验是显著的，且其中每一个系数均显著不为 0 时，可用此方程作预测.

给定 $X = x_0 = (x_{01}, x_{02}, \cdots, x_{0p})^T$, 将其代入回归方程，得到

$$\hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{01} + \cdots + \hat{\beta}_p x_{0p}.$$

对于 $X = x_0, Y = \hat{y}_0$ 的置信度为 $1-\alpha$ 的预测区间为

$$(\hat{y}_0 - l, \quad \hat{y}_0 + l), \tag{6.27}$$

其中

$$l = t_{\alpha/2}(n-p-1)\hat{\sigma}\sqrt{1 + x_0^T (X^T X)^{-1} x_0}. \tag{6.28}$$

**例 6.8** *求例 6.6 中 $X = x_0 = (80, 40)^T$ 时相应 $Y$ 的概率为 0.95 的预测区间.*

**解**: 与一元回归一样, R 软件中的 predict() 函数求多元回归预测也是很方便的.

下面是 R 软件的命令

```
> new <- data.frame(x1 = 80, x2 = 40)
> lm.pred<-predict(lm.sol, new, interval="prediction", level=0.95)
> lm.pred
          fit      lwr      upr
[1,] 123.9699 117.2889 130.6509
```

由软件求得, $\hat{y}_0 = 123.97$, 相应的 $Y$ 的概率为 0.95 的预测区间为 $[117.29,\ 130.65]$.

### 6.3.6 修正拟合模型

在完成模型的计算后, 有时还需要根据实际问题的背景, 对模型进行适当的修正, 如增加新的自变量, 或对响应变量 $Y$ 取对数或开方运算等.

在 R 软件中, 函数 update() 是一个非常方便修正模型的函数, 该函数可以在原模型的基础上, 通过加入或去掉某些项来得到新模型. 它是形式是

```
new.model <- update(old.model, new.formula)
```

在 new.formula 中, 其相应的名字由点 '.' 组成, 可以被用作表示 "旧模型公式中相应的部分". 例如,

```
fm5 <- lm(y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5, data = production)
fm6 <- update(fm5, . ~ . + x6)
smf6 <- update(fm6, sqrt(.) ~ .)
```

表示五个变量的多元回归, 数据的框架是 production, 拟合一个附加的模型, 这个模型中包含第六个变量, 拟合不同的模型, 在模型中响应变量使用了平方根变换.

特别注意，如果 data= argument 是一种关于原调用模型拟合函数，这个信息是通过拟合模型对象到 update() 和它的同类传递的.

模型中的 '.' 可能用在其它的函数中，但它有稍微不同的意思. 例如

```
fmfull <- lm(y ~ . , data = production)
```

拟合一个模型，其响应变量 $y$ 和回归因子变量和在数据结构预测中其它变量.

其它函数，如探索逐渐增长序列模型是 add1() 、 drop1() 和 step(). 它们的名字已很好地表明这些函数的目的，对于更详细的资料可以看在线帮助.

### 6.3.7 计算实例

**例 6.9** 某大型牙膏制造企业为了更好地拓展产品市场，有效地管理库存，公司董事会要求销售部门根据市场调查，找出公司生产的牙膏销售量与销售价格、广告投入等之间的关系，从而预测出在不同价格和广告费用下销售量. 为此，销售部研的研究人员收集了过去 *30* 个销售周期 *(*每个销售周期为 *4* 周*)* 公司生产的牙膏的销售量、销售价格、投入的广告费用，以及周期其他厂家生产同类牙膏的市场平均销售价格，如表 *6.4* 所示. 试根据这些数据建立一个数学模型，分析牙膏销售量与其他因素的关系，为制订价格策略和广告投入策略提供数量依据.

**表 6.4: 牙膏销售量与销售价格、广告费用等数据**

| 销售周期 | 公司销售价格 (元) | 其他厂家平均价格 (元) | 价格差 (元) | 广告费用 (百万元) | 销售量 (百万支) |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 3.85 | 3.80 | −0.05 | 5.50 | 7.38 |
| 2 | 3.75 | 4.00 | 0.25 | 6.75 | 8.51 |
| 3 | 3.70 | 4.30 | 0.60 | 7.25 | 9.52 |
| 4 | 3.70 | 3.70 | 0.00 | 5.50 | 7.50 |
| 5 | 3.60 | 3.85 | 0.25 | 7.00 | 9.33 |
| 6 | 3.60 | 3.80 | 0.20 | 6.50 | 8.28 |
| 7 | 3.60 | 3.75 | 0.15 | 6.75 | 8.75 |
| 8 | 3.80 | 3.85 | 0.05 | 5.25 | 7.87 |
| 9 | 3.80 | 3.65 | −0.15 | 5.25 | 7.10 |
| 10 | 3.85 | 4.00 | 0.15 | 6.00 | 8.00 |

**表 6.4(续) ： 牙膏销售量与销售价格、广告费用等数据**

| 销售周期 | 公司销售价格 (元) | 其他厂家平均价格 (元) | 价格差 (元) | 广告费用 (百万元) | 销售量 (百万支) |
|---|---|---|---|---|---|
| 11 | 3.90 | 4.10 | 0.20 | 6.50 | 7.89 |
| 12 | 3.90 | 4.00 | 0.10 | 6.25 | 8.15 |
| 13 | 3.70 | 4.10 | 0.40 | 7.00 | 9.10 |
| 14 | 3.75 | 4.20 | 0.45 | 6.90 | 8.86 |
| 15 | 3.75 | 4.10 | 0.35 | 6.80 | 8.90 |
| 16 | 3.80 | 4.10 | 0.30 | 6.80 | 8.87 |
| 17 | 3.70 | 4.20 | 0.50 | 7.10 | 9.26 |
| 18 | 3.80 | 4.30 | 0.50 | 7.00 | 9.00 |
| 19 | 3.70 | 4.10 | 0.40 | 6.80 | 8.75 |
| 20 | 3.80 | 3.75 | −0.05 | 6.50 | 7.95 |
| 21 | 3.80 | 3.75 | −0.05 | 6.25 | 7.65 |
| 22 | 3.75 | 3.65 | −0.10 | 6.00 | 7.27 |
| 23 | 3.70 | 3.90 | 0.20 | 6.50 | 8.00 |
| 24 | 3.55 | 3.65 | 0.10 | 7.00 | 8.50 |
| 25 | 3.60 | 4.10 | 0.50 | 6.80 | 8.75 |
| 26 | 3.65 | 4.25 | 0.60 | 6.80 | 9.21 |
| 27 | 3.70 | 3.65 | -0.05 | 6.50 | 8.27 |
| 28 | 3.75 | 3.75 | 0.00 | 5.75 | 7.67 |
| 29 | 3.80 | 3.85 | 0.05 | 5.80 | 7.93 |
| 30 | 3.70 | 4.25 | 0.55 | 6.80 | 9.26 |

**分析**

由于牙膏是生活必需品，对于大多数顾客来说，在购买同类产品的牙膏时，更多地会关心不同品牌之间的价格差，而不是它们的价格本身. 因此，在研究各个因素对销售量的影响时，用价格差代替公司销售价格和其他厂家平均价格更为合适.

**模型的建立与求解**

记牙膏销售量为 $Y$, 价格差为 $X_1$, 公司的广告费为 $X_2$, 假设基本模型为线性模型

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \varepsilon.$$

输入数据, 调用 R 软件中的 lm() 函数求解, 并用 summary() 显示计算结果 (程序名: exam0609.R).

```
> toothpaste<-data.frame(
     X1=c(-0.05, 0.25,0.60,0,   0.25,0.20, 0.15,0.05,-0.15, 0.15,
           0.20, 0.10,0.40,0.45,0.35,0.30, 0.50,0.50, 0.40,-0.05,
          -0.05,-0.10,0.20,0.10,0.50,0.60,-0.05,0,    0.05, 0.55),
     X2=c( 5.50,6.75,7.25,5.50,7.00,6.50,6.75,5.25,5.25,6.00,
           6.50,6.25,7.00,6.90,6.80,6.80,7.10,7.00,6.80,6.50,
           6.25,6.00,6.50,7.00,6.80,6.80,6.50,5.75,5.80,6.80),
     Y =c( 7.38,8.51,9.52,7.50,9.33,8.28,8.75,7.87,7.10,8.00,
           7.89,8.15,9.10,8.86,8.90,8.87,9.26,9.00,8.75,7.95,
           7.65,7.27,8.00,8.50,8.75,9.21,8.27,7.67,7.93,9.26)
  )

> lm.sol<-lm(Y~X1+X2, data=toothpaste)
> summary(lm.sol)

Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2)

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.497785 -0.120312 -0.008672  0.110844  0.581059

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   4.4075     0.7223   6.102 1.62e-06 ***
X1            1.5883     0.2994   5.304 1.35e-05 ***
```

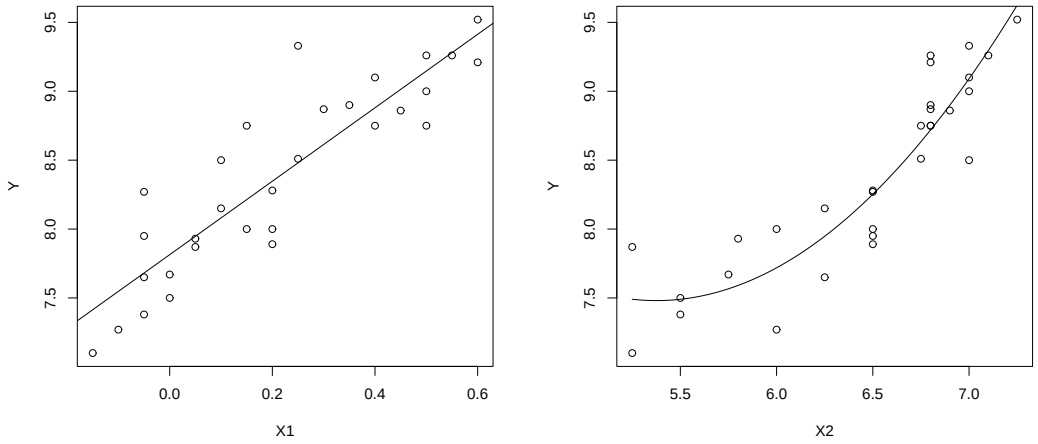
```
X2            0.5635     0.1191   4.733 6.25e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.2383 on 27 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.886,      Adjusted R-squared: 0.8776
F-statistic:   105 on 2 and 27 DF,  p-value: 1.845e-13
```

计算结果通过回归系数检验和回归方程检验, 由此得到销售量与价格差与广告费之间的关系为

$$Y = 4.4075 + 1.5883X_1 + 0.5635X_2.$$

**模型的进一步分析**

为进一步分析回归模型，我们画出 $y$ 与 $x_1$ 和 $y$ 与 $x_2$ 散点图. 从散点图上可以看出，对于 $y$ 与 $x_1$, 用直线拟合较好. 而对于 $y$ 与 $x_2$, 则用二次曲线拟合较好，如图 6.4 所示.




(a) $x_1 \sim y$ (b) $x_2 \sim y$

图 6.4: $x_1, x_2$ 和 $y$ 的散点图和拟合曲线

绘出图 6.4 的 R 命令如下：

```
#### 绘 x1 与 y 的散点图和回归直线
```

```
> attach(toothpaste)
> plot(Y~X1); abline(lm(Y~X1))
#### 绘 x2 与 y 的散点图和回归曲线
> lm2.sol<-lm(Y~X2+I(X2^2))
> x<-seq(min(X2), max(X2), len=200)
> y<-predict(lm2.sol, data.frame(X2=x))
> plot(Y~X2); lines(x,y)
```

其中 I(X2^2) 表示模型中 $X_2$ 的平方项，即 $X_2^2$.

从图 6.4 看出，将销售量模型改为

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_2^2 + \varepsilon$$

似乎更合理. 我们作相应的回归分析,

```
> lm.new<-update(lm.sol, .~.+I(X2^2))
> summary(lm.new)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2 + I(X2^2), data = toothpaste)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.40330 -0.14509 -0.03035  0.15488  0.46602

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  17.3244     5.6415   3.071 0.004951 **
X1            1.3070     0.3036   4.305 0.000210 ***
X2           -3.6956     1.8503  -1.997 0.056355 .
I(X2^2)       0.3486     0.1512   2.306 0.029341 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.2213 on 26 degrees of freedom
```

```
Multiple R-Squared: 0.9054,     Adjusted R-squared: 0.8945
F-statistic: 82.94 on 3 and 26 DF,  p-value: 1.944e-13
```

此时，我们发现，模型残差的标准差 $\hat{\sigma}$ 有所下降，相关系数的平方 $R^2$ 有所上升，这说明模型修正是合理的. 但这也出现一个问题，就是对应于 $\beta_2$ 的 P– 值 $> 0.05$. 为进一步分析，作 $\beta$ 的区间估计.

```
> source("beta.int.R")
> beta.int(lm.new)
              Estimate        Left      Right
(Intercept) 17.3243685  5.72818421 28.9205529
X1           1.3069887  0.68290927  1.9310682
X2          -3.6955867 -7.49886317  0.1076898
I(X2^2)      0.3486117  0.03786354  0.6593598
```

$\beta_2$ 的区间估计是 $[-7.49886317,\ 0.1076898]$, 它包含了 $0$, 也就是说， $\beta_2$ 的值可能会为 $0$.

去掉 $X_2$ 的一次项，再进行分析.

```
> lm2.new<-update(lm.new, .~.-X2)
> summary(lm2.new)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + I(X2^2), data = toothpaste)

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.485943 -0.114094 -0.004604  0.105342  0.559195

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  6.07667    0.35531  17.102 5.17e-16 ***
X1           1.52498    0.29859   5.107 2.28e-05 ***
I(X2^2)      0.04720    0.00952   4.958 3.41e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 0.2332 on 27 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.8909,     Adjusted R-squared: 0.8828
F-statistic: 110.2 on 2 and 27 DF,  p-value: 1.028e-13
```

此模型虽然通过了 F 检验和 T 检验, 但与上一模型对比来看, $\hat{\sigma}$ 上升, $R^2$ 下降. 这又是此模型的不足之处.

再作进一步的修正, 考虑 $x_1$ 与 $x_2$ 交互作用, 即模型为

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_2^2 + \beta_4 X_1 X_2 + \varepsilon.$$

```
> lm3.new<-update(lm.new, .~.+X1*X2)
> summary(lm3.new)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2 + I(X2^2) + X1:X2, data = toothpaste)

Residuals:
      Min        1Q    Median        3Q       Max
-0.437250 -0.117540  0.004895  0.122634  0.384097

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  29.1133     7.4832   3.890 0.000656 ***
X1           11.1342     4.4459   2.504 0.019153 *
X2           -7.6080     2.4691  -3.081 0.004963 **
I(X2^2)       0.6712     0.2027   3.312 0.002824 **
X1:X2        -1.4777     0.6672  -2.215 0.036105 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.2063 on 25 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9209,     Adjusted R-squared: 0.9083
F-statistic: 72.78 on 4 and 25 DF,  p-value: 2.107e-13
```

模型通过 t 检验和 F 检验，并且 $\hat{\sigma}$ 减少， $R^2$ 增加. 因此，最终模型选为

$$Y = 29.1133 + 11.1342X_1 - 7.6080X_2 + 0.6712X_2^2 - 1.4777X_1X_2 + \varepsilon.$$

## 6.4 逐步回归

### 6.4.1 “最优”回归方程的选择

在实际问题中，影响因变量 $y$ 的因素很多，人们可以从中挑选若干个变量建立回归方程，这便涉及变量选择的问题.

一般来讲，如果在一个回归方程中忽略了对 $Y$ 有显著影响的自变量，那么所建立的方程必与实际有较大的偏离，但变量选得过多，使用就不方便，特别当方程中含有对 $Y$ 影响不大的变量时，可能因为 $SS_E$ 的自由度的减小而使 $\sigma^2$ 的估计增大，从而影响使用回归方程作预测的精度. 因此适当地选择变量以建立一个“最优”的回归方程是十分重要的.

什么是“最优”回归方程呢？对于这个问题有许多不同的准则，在不同的准则下“最优”回归方程也可能不同. 这里讲的“最优”是指从可供选择的所有变量中选出对 $Y$ 有显著影响的变量建立方程，且在方程中不含对 $Y$ 无显著影响的变量.

在上述意义下，可以有多种方法来获得“最优”回归方程，如“一切子集回归法”、“前进法”、“后退法”、“逐步回归法”等. 其中“逐步回归法”由于计算机程序简便，因而使用较为普遍.

### 6.4.2 逐步回归的计算

R 软件提供了较为方便的“逐步回归”计算函数 `step()`, 它是以 AIC 信息统计量为准则，通过选择最小的 AIC 信息统计量，来达到删除或增加变量的目的.

`step()` 函数的使用格式为

```
step(object, scope, scale = 0,
     direction = c("both", "backward", "forward"),
     trace = 1, keep = NULL, steps = 1000, k = 2, ...)
```

其中 object 是回归模型. scope 是确定逐步搜索的区域. scale 用于 AIC 统计量. direction 确定逐步搜索的方向, 缺省值为 "both" 是 “一切子集回归法”, "backward" 是后退法”, "forward" 是 “前进法”. 其他参数见在线帮助.

在这里不具体介绍通常概率统计教科书上的逐步回归计算公式, 而是通过一个简单的例子, 介绍如何使用 R 软件来完成逐步回归的过程, 从而达到选择 “最优” 方程的目的.

**例 6.10** 某种水泥在凝固时放出的热量 $Y$ (卡 / 克) 与水泥中四种化学成分 $X_1$, $X_2$, $X_3$, $X_4$ 有关, 现测得 *13* 组数据, 如表 *6.5* 所示. 希望从中选出主要的变量, 建立 $Y$ 关于它们的线性回归方程.

**表 6.5: 数据表**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $Y$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 7 | 26 | 6 | 60 | 78.5 | 8 | 1 | 31 | 22 | 44 | 72.5 |
| 2 | 1 | 29 | 15 | 52 | 74.3 | 9 | 2 | 54 | 18 | 22 | 93.1 |
| 3 | 11 | 56 | 8 | 20 | 104.3 | 10 | 21 | 47 | 4 | 26 | 115.9 |
| 4 | 11 | 31 | 8 | 47 | 87.6 | 11 | 1 | 40 | 23 | 34 | 83.8 |
| 5 | 7 | 52 | 6 | 33 | 95.9 | 12 | 11 | 66 | 9 | 12 | 113.3 |
| 6 | 11 | 55 | 9 | 22 | 109.2 | 13 | 10 | 68 | 8 | 12 | 109.4 |
| 7 | 3 | 71 | 17 | 6 | 102.7 | | | | | | |

**解**: 首先作多元线性回归方程

```
> cement<-data.frame(
    X1=c( 7,  1, 11, 11,  7, 11,  3,  1,  2, 21,  1, 11, 10),
    X2=c(26, 29, 56, 31, 52, 55, 71, 31, 54, 47, 40, 66, 68),
    X3=c( 6, 15,  8,  8,  6,  9, 17, 22, 18,  4, 23,  9,  8),
    X4=c(60, 52, 20, 47, 33, 22,  6, 44, 22, 26, 34, 12, 12),
    Y =c(78.5, 74.3, 104.3,  87.6,  95.9, 109.2, 102.7, 72.5,
         93.1,115.9,  83.8, 113.3, 109.4)
  )
> lm.sol<-lm(Y ~ X1+X2+X3+X4, data=cement)
```

```
> summary(lm.sol)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2 + X3 + X4, data = cement)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-3.1750 -1.6709  0.2508  1.3783  3.9254

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  62.4054    70.0710   0.891   0.3991
X1            1.5511     0.7448   2.083   0.0708 .
X2            0.5102     0.7238   0.705   0.5009
X3            0.1019     0.7547   0.135   0.8959
X4           -0.1441     0.7091  -0.203   0.8441
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.446 on 8 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9824,     Adjusted R-squared: 0.9736
F-statistic: 111.5 on 4 and 8 DF,  p-value: 4.756e-07
```

从上述计算中可以看到, 如果选择全部变量作回归方程, 效果是不好的. 因为回归方程的系数全部都没有通过检验.

下面用函数 step() 作逐步回归.

```
> lm.step<-step(lm.sol)
Start:  AIC= 26.94
 Y ~ X1 + X2 + X3 + X4

       Df Sum of Sq    RSS    AIC
- X3    1     0.109 47.973 24.974
- X4    1     0.247 48.111 25.011
```

```
- X2    1     2.972 50.836 25.728
<none>              47.864 26.944
- X1    1    25.951 73.815 30.576

Step:  AIC= 24.97
 Y ~ X1 + X2 + X4

       Df Sum of Sq    RSS    AIC
<none>               47.97  24.97
- X4    1      9.93  57.90  25.42
- X2    1     26.79  74.76  28.74
- X1    1    820.91 868.88  60.63
```

从程序运行结果可以看到，用全部变量作回归方程时， AIC 值为 26.94. 接下来显示的数据表告诉你，如果去掉变量 $X_3$, 得到回归方程的 AIC 值为 24.974. 如果去掉变量 $X_4$, 得到回归方程的 AIC 值为 25.011. 后面的类推. 由于去掉变量 $X_3$ 可以使 AIC 达到最小，因此， R 软件自动去掉变量 $X_3$, 进行下一轮计算.

在下一轮计算中，无论去掉哪一个变量， AIC 值均会升高，因此 R 软件终止计算，得到“最优”的回归方程.

下面分析一下计算结果. 用函数 summary() 提取相关信息.

```
> summary(lm.step)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2 + X4, data = cement)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-3.0919 -1.8016  0.2562  1.2818  3.8982

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  71.6483    14.1424   5.066 0.000675 ***
X1            1.4519     0.1170  12.410 5.78e-07 ***
```

```
X2            0.4161     0.1856   2.242 0.051687 .
X4           -0.2365     0.1733  -1.365 0.205395
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.309 on 9 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9823,     Adjusted R-squared: 0.9764
F-statistic: 166.8 on 3 and 9 DF,  p-value: 3.323e-08
```

由显示结果看到：回归系数检验的显著性水平有很大提高，但变量 $X_2, X_4$ 系数检验的显著性水平仍不理想. 下面如何处理呢？

在 R 软件中，还有两个函数可以用来作逐步回归. 这两个函数是 add1() 和 drop1(). 它们的使用格式为

```
add1(object, scope, ...)
drop1(object, scope, ...)

add1(object, scope, scale=0, test=c("none", "Chisq"),
     k=2, trace=FALSE, ...)
drop1(object, scope, scale=0, test=c("none", "Chisq"),
      k=2, trace=FALSE, ...)

add1(object, scope, scale=0, test=c("none", "Chisq", "F"),
     x=NULL, k=2, ...)
drop1(object, scope, scale=0, all.cols=TRUE,
      test=c("none", "Chisq", "F"), k=2, ...)
```

其中 object 是由拟合模型构成的对象. scope 是模型考虑增加或去掉项构成的公式. scale 是用于计算 $C_p$ 的残差的均方估计值，缺省值为 0 或 NULL. 其他见在线帮助.

下面用 drop1() 计算.

```
> drop1(lm.step)
Single term deletions
```

```
Model:
Y ~ X1 + X2 + X4
       Df Sum of Sq    RSS    AIC
<none>               47.97  24.97
X1      1    820.91 868.88  60.63
X2      1     26.79  74.76  28.74
X4      1      9.93  57.90  25.42
```

从运算结果来看，如果去掉变量 $x_4$, AIC 值会从 24.97 增加的 25.42, 是增加的最少的. 另外, 除 AIC 准则外, 残差的平方和也是逐步回归的重要指标之一, 从直观来看, 拟合越好的方程, 残差的平方和应越小. 去掉变量 $X_4$, 残差的平方和上升 9.93, 也是最少的. 因此, 从这两项指标来看, 应该再去掉变量 $X_4$.

```
> lm.opt<-lm(Y ~ X1+X2, data=cement); summary(lm.opt)
Call:
lm(formula = Y ~ X1 + X2, data = cement)

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-2.893 -1.574 -1.302  1.362  4.048

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 52.57735    2.28617   23.00 5.46e-10 ***
X1           1.46831    0.12130   12.11 2.69e-07 ***
X2           0.66225    0.04585   14.44 5.03e-08 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.406 on 10 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9787,     Adjusted R-squared: 0.9744
F-statistic: 229.5 on 2 and 10 DF,  p-value: 4.407e-09
```

这个结果应该还是满意的, 因为所有的检验均是显著的. 最后得到 “最优”

的回归方程为

$$\hat{Y} = 52.58 + 1.468X_1 + 0.6622X_2.$$

## 6.5 回归诊断

### 6.5.1 什么是回归诊断

在前面，我们给出了利用逐步回归来选择对因变量 $Y$ 影响最显著的自变量进入回归方程的方法，并且还可以利用 AIC 准则或其他准则来选择最佳回归模型. 但是这些只是从选择自变量上来研究，而没有对回归模型的一些特性做更进一步的研究，并且没有研究一引起异常样品问题，异常样品的存在往往会给回归模型带来不稳定. 为此，人们提出所谓回归诊断的问题 (regression diagnostics)，其主要内容有：

(1) 关于误差项是否满足
   (a) 独立性;
   (b) 等方差性;
   (c) 正态性.
(2) 选择线性模型是否合适？
(3) 是否存在异常样本？
(4) 回归分析的结果是否对某些样本的依赖过重？也就是说，回归模型是否具备稳定性？
(5) 自变量之间是否存在高度相关？即是否有多重共线性问题存在？

下面的例子充分说明了回归诊断的重要性.

**例 6.11 图的有用性 (Anscomber, 1973)**

表 *6.6* 给出的四组人造数据，每组数据集由 *11* 对点 $(x_i, y_i)$ 组成，拟合于简单线性模型

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i.$$

试分析四组数据是否通过回归方程的检验，并用图形分析每组数据的基本情况.

**解**：输入数据，作回归分析 (程序名： `exam0611.R`).

```
Anscombe<-data.frame(
  X=c(10.0, 8.0, 13.0, 9.0, 11.0, 14.0, 6.0, 4.0, 12.0, 7.0, 5.0),
```

**表 6.6: Anscomber 数据**

| 数据号 | 数据组号 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | 1–3 | 1 | 2 | 3 | 4 | 4 |
| | $X$ | $Y$ | $Y$ | $Y$ | $X$ | $Y$ |
| 1 | 10.0 | 8.04 | 9.14 | 7.46 | 8.0 | 6.58 |
| 2 | 8.0 | 6.95 | 8.14 | 6.77 | 8.0 | 5.76 |
| 3 | 13.0 | 7.58 | 8.74 | 12.74 | 8.0 | 7.71 |
| 4 | 9.0 | 8.81 | 8.77 | 7.11 | 8.0 | 8.84 |
| 5 | 11.0 | 8.33 | 9.26 | 7.81 | 8.0 | 8.47 |
| 6 | 14.0 | 9.96 | 8.10 | 8.84 | 8.0 | 7.04 |
| 7 | 6.0 | 7.24 | 6.13 | 6.08 | 8.0 | 5.25 |
| 8 | 4.0 | 4.26 | 3.10 | 5.39 | 19.0 | 12.50 |
| 9 | 12.0 | 10.84 | 9.13 | 8.15 | 8.0 | 5.56 |
| 10 | 7.0 | 4.82 | 7.26 | 6.44 | 8.0 | 7.91 |
| 11 | 5.0 | 5.68 | 4.74 | 5.73 | 8.0 | 6.89 |

```
  Y1=c(8.04,6.95, 7.58,8.81,8.33,9.96,7.24,4.26,10.84,4.82,5.68),
  Y2=c(9.14,8.14, 8.74,8.77,9.26,8.10,6.13,3.10, 9.13,7.26,4.74),
  Y3=c(7.46,6.77,12.74,7.11,7.81,8.84,6.08,5.39, 8.15,6.44,5.73),
  X4=c(rep(8,7), 19, rep(8,3)),
  Y4=c(6.58,5.76,7.71,8.84,8.47,7.04,5.25,12.50, 5.56,7.91,6.89)
)
summary(lm(Y1~X, data=Anscombe))
summary(lm(Y2~X, data=Anscombe))
summary(lm(Y3~X, data=Anscombe))
summary(lm(Y4~X4,data=Anscombe))
```

这四组数据的计算结果由表 6.7 所示 (最多有 0.01 的误差). 从表 6.7 所列结果, 可以说明, 这四组数据全部能通过模型检验和方程的系数检验. 由于每个数据集得到的各种统计量的值是相同的, 因此, 可能会认为每个数据集合对于线性模型会同等的适用, 但事实确非如此.

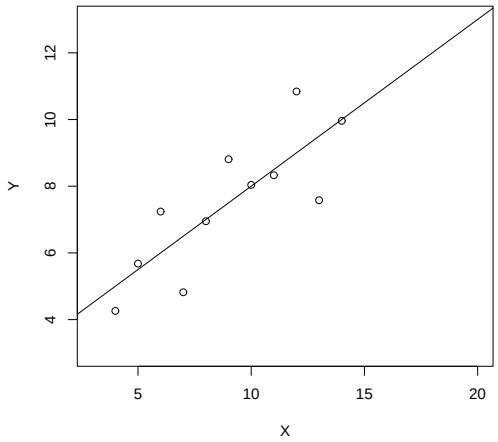
**表 6.7: 四组数据的计算结果**

| 系数 | 估计值 | 标准差 | t– 值 | P– 值 |
|---|---|---|---|---|
| $\beta_0$ | 3.0 | 1.125 | 2.67 | 0.026 |
| $\beta_1$ | 0.5 | 0.118 | 4.24 | 0.0022 |
| 方程 | $\hat{\sigma} = 1.24,$ | $R^2 = 0.667,$ | $F = 17.99,$ | $P = 0.002$ |

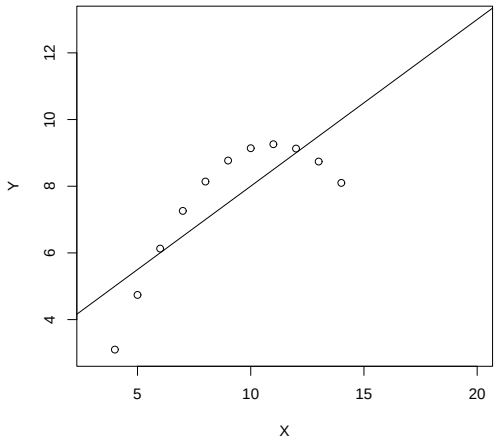
我们画出四组数据的散点图和相应的回归直线，如图 6.5 所示. 从图形来看，这四组数据是完全不同的.

第一个数据集合, 见图 6.5(a). 如果简单线性回归模型合适的话, 这就是我们期望看到的数据集合. 图 6.5(b) 给出第二个数据集合，它给出一个不同的结论，即基于简单线性回归分析是不正确的，而一条光滑曲线，可能是二次多项式，可以以较小的剩余变异拟合数据.

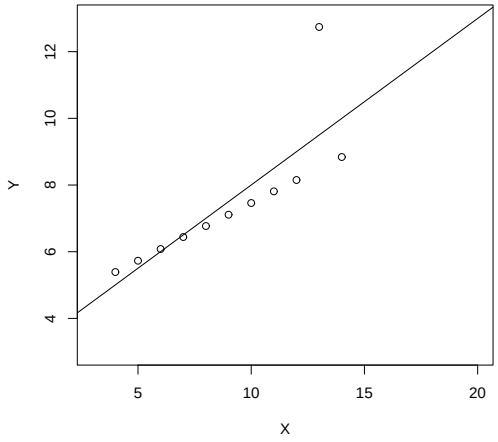
```
> lm2.sol<-lm(Y2~X+I(X^2), data=Anscombe); summary(lm2.sol)
Call:
lm(formula = Y2 ~ X + I(X^2), data = Anscombe)

Residuals:
       Min         1Q     Median         3Q        Max
-0.0013287 -0.0011888 -0.0006294  0.0008741  0.0023776

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -5.9957343  0.0043299   -1385   <2e-16 ***
X            2.7808392  0.0010401    2674   <2e-16 ***
I(X^2)      -0.1267133  0.0000571   -2219   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.001672 on 8 degrees of freedom
Multiple R-Squared:     1,      Adjusted R-squared:     1
F-statistic: 7.378e+06 on 2 and 8 DF,  p-value: < 2.2e-16
```



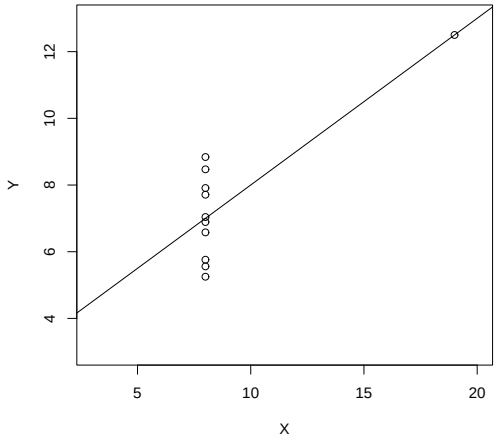

(a) 数据 1




(b) 数据 2




(c) 数据 3




(d) 数据 4

图 6.5: Anscombe 数据的散点图

因此，回归方程为

$$y = -5.9957343 + 2.7808392x - 0.1267133x^2$$

更合理 (见图 6.6(a)).

图 6.5(c) 表示，简单回归的描述对于大部分数据是正确的，但一个样本距离拟合回归直线太远．这称为异常值问题．很可能需要从数据集合中删除那个与其

他数据不匹配的数据样本. 回归需要根据剩下的 10 个样本重新拟合.

```
> i<-1:11; Y31<-Anscombe$Y3[i!=3]; X3<-Anscombe$X[i!=3]
> lm3.sol<-lm(Y31~X3); summary(lm3.sol)
Call:
lm(formula = Y31 ~ X3)

Residuals:
       Min         1Q     Median         3Q        Max
-0.0060173 -0.0012121 -0.0010173 -0.0008225  0.0140693

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 4.0106277  0.0057115   702.2   <2e-16 ***
X3          0.3450433  0.0006262   551.0   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.006019 on 8 degrees of freedom
Multiple R-Squared:     1,      Adjusted R-squared:     1
F-statistic: 3.036e+05 on 1 and 8 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

得到的线性回归方程为

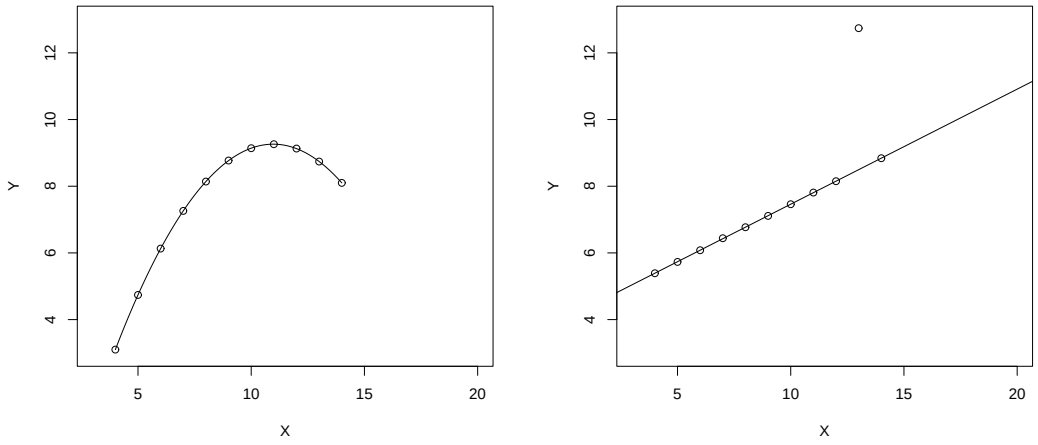
$$y = 4.0106277 + 0.3450433x.$$

图 6.6(b) 绘出修正后的直线方程.

最后一个数据集合 (见 6.5(d)). 它与上述三个不同, 没有足够的信息来对拟合模型作出判断. 斜率参数的估计值 $\hat{\beta}_1$ 很大程度上由 $y_8$ 的值决定. 如果第 8 号样本被删除, 则不能估计 $\beta_1$. 因此, 我们无法相信这个一个综合分析, 它对单个样本如此依赖.

在 R 软件中, 下列函数

```
influence.measures   rstandard   rstudent   dffits
cooks.distance       dfbeta       dfbetas    covratio
hatvalues            hat
```




(a) 数据 2, 采用二次拟合　　(b) 数据 3, 去掉一个样本

图 6.6: Anscombe 数据修正后的回归曲线

与回归诊断有关，关于函数的使用方法，在讲到相关内容时，再具体的介绍.

### 6.5.2 残差

在利用最小二乘原理求回归模型时，对残差实际上是做了独立性、等方差性和正态性的假设. 但对实际上的 $p+1$ 个变量的 $n$ 组样本数据所求得的回归模型的残差，是否满足这三个性质还应该进行讨论. 在讨论残差的检验问题之前，首先讨论残差.

**1. 普通残差**

设线性回归模型为

$$Y = X\beta + \varepsilon, \tag{6.29}$$

其中 $Y$ 是由响应变量构成的 $n$ 维向量， $X$ 是 $n \times (p+1)$ 阶设计矩阵， $\beta$ 是 $p+1$ 维向量， $\varepsilon$ 是 $n$ 维误差向量.

回归系数的估计值

$$\hat{\beta} = \left(X^T X\right)^{-1} X^T Y, \tag{6.30}$$

拟合值 $\widehat{Y}$ 为

$$\widehat{Y} = X\hat{\beta} = X\left(X^T X\right)^{-1} X^T Y = HY, \tag{6.31}$$

其中

$$H = X\left(X^TX\right)^{-1}X^T. \tag{6.32}$$

称 $H$ 为帽子矩阵 [4]. 残差为

$$\hat{\varepsilon} = Y - \widehat{Y} = (I - H)Y. \tag{6.33}$$

R 软件中的 residuals() 函数 (或 resid() 函数) 提供了模型残差的计算，其使用方式为

```
residuals(object, ...)
    resid(object, ...)
```

其中 object 为回归模型.

在得到残差后，可以对残差进行检验，如正态性检验等.

**例 6.12** *对例 6.5(Forbes 数据) 得到回归模型得到的残差作 $W$ 正态性检验.*

**解**: 在计算完例 6.5 的回归模型后，计算其残差，并用 shapiro.test() 函数 (见第三章 3.2 节) 作残差的正态性检验.

```
> y.res<-residuals(lm.sol)
> shapiro.test(y.res)
        Shapiro-Wilk normality test
data:  y.res
W = 0.5465, p-value = 3.302e-06
```

因此，残差不满足正态性假设.

在去掉第 12 号样本后，再对所得到回归模型的残差进行正态性检验.

```
> y12.res<-residuals(lm12)
> shapiro.test(y12.res)
        Shapiro-Wilk normality test
data:  y12.res
W = 0.9222, p-value = 0.1827
```

能通过正态性检验，因此，去掉第 12 号样本点还是合理的.

**2. 标准化 (内学生化) 残差**

[4]因为向量 $Y$ 被 $H$ 左乘后，变成 $\widehat{Y}$, 由此得名

由差向量 $\varepsilon$ 的性质，得到

$$E(\hat{\varepsilon}) = 0, \quad \mathrm{Var}(\hat{\varepsilon}) = \sigma^2(I - H). \tag{6.34}$$

因此，对每个 $\hat{\varepsilon}_i$, 有

$$\frac{\hat{\varepsilon}_i}{\sigma\sqrt{1-h_{ii}}} \sim N(0,1), \tag{6.35}$$

其中 $h_{ii}$ 是矩阵 $H$ 对角线上的元素.

用 $\hat{\sigma}^2$(见式 (6.23)) 作为 $\sigma^2$ 的估计值，称

$$r_i = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{\hat{\sigma}\sqrt{1-h_{ii}}} \tag{6.36}$$

为标准化残差 (standardized residual), 或者称为内学生化残差 (internally studentized residual). 这因为 $\sigma^2$ 的估计中用了包括第 $i$ 个样本在内的全部数据. 由式 (6.35) 可知，标准化残差 $r_i$ 近似服从标准正态分布.

R 软件中，函数 `rstandard()` 计算回归模型的标准化 (内学生化) 残差，其使用格式为

```
rstandard(model, infl = lm.influence(model, do.coef = FALSE),
          sd = sqrt(deviance(model)/df.residual(model)), ...)
```

其中 `model` 是由 `lm` 或 `glm` 生成的对象. `infl` 是由 `lm.influence` 返回值得到的影响结构. `sd` 是模型的标准差.

**3. 外学生化残差**

若记删除第 $i$ 个样本数据后，由余下的 $n-1$ 个样本数据求得的回归系数为 $\hat{\beta}_{(i)}$, 做 $\sigma^2$ 的估计值，有

$$\hat{\sigma}^2_{(i)} = \frac{1}{n-p-2}\sum_{j\neq i}\left(Y_i - \widetilde{X}_j\hat{\beta}_{(i)}\right)^2, \tag{6.37}$$

其中 $\widetilde{X}_j$ 为设计矩阵 $X$ 的第 $j$ 行. 称

$$\hat{\varepsilon}_i(\hat{\sigma}_{(i)}) = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{\hat{\sigma}_{(i)}\sqrt{1-h_{ii}}} \tag{6.38}$$

为学生化残差 (studentized residual), 或者称为外学生化残差 (externally studentized residual).

R 软件中，函数 `rstudent()` 计算回归模型的 (外) 学生化残差，其使用格式为

```
rstudent(model, infl = lm.influence(model, do.coef = FALSE),
         res = infl$wt.res, ...)
```

其中 model 是由 lm 或 glm 生成的对象. infl 是由 lm.influence 返回值得到的影响结构. res 是模型残差.

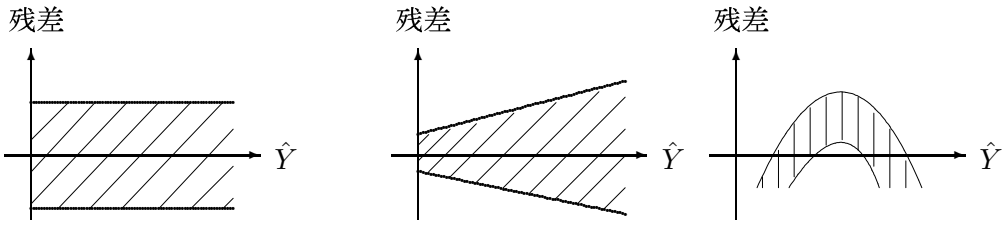
下面介绍用残差图检验残差的方法.

### 6.5.3 残差图

以残差 $\hat{\varepsilon}_i$ 为纵坐标, 以拟合值 $\hat{y}_i$ 或对应的数据观测序号 $i$ 或数据观测时间为横坐标的散点图统自然数为残差图. 残差图是进行模型诊断的重要工具.

**1. 回归值 $\hat{Y}$ 与残差的残差图**

为检验建立的多元线性回归模型是否合适, 可以通过回归值 $\hat{Y}$ 与残差的散点图来检验. 其方法是画出回归值 $\hat{Y}$ 与普通残差的散点图 $((\hat{Y}_i, \hat{\varepsilon}_i),\ i = 1, 2, \cdots, n)$, 或者画出回归值 $\hat{Y}$ 与标准残差的散点图 $((\hat{Y}_i, r_i),\ i = 1, 2, \cdots, n)$, 其图形可能会出现下面三种情况 (如图 6.7 所示).




(a) 正常情况 (b) 异方差情况 (c) 非线性情况

图 6.7: 回归值 $\hat{Y}$ 与残差的散点图

对于图 6.7(a) 的情况, 不论回归值 $\hat{Y}$ 的大小, 而残差 $\hat{\varepsilon}_i$ (或 $r_i$) 具有相同的分布, 并满足模型的各假设条件; 对于图 6.7(b) 的情况, 表示回归值 $\hat{Y}$ 的大小与残差的波动大小有关系, 即等方差性的假设有问题; 对于图 6.7(c), 表示线性模型不合适, 应考虑非线性模型.

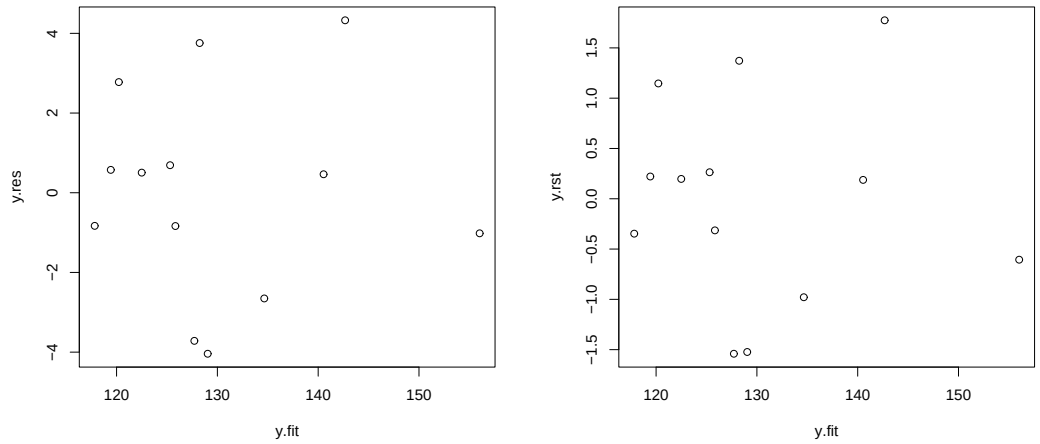
对于图 6.7(a), 如果大部分点都落在中间部分, 而只有少数几个点落在外边, 则这些点对应的样本, 可能有异常值存在.

**例 6.13** *画例 6.6 普通残差的散点图和标准化残差的散点图.*

**解**：在计算出例 6.6 的回归模型后，计算普通残差和标准化残差，并画出相应的散点图． R 的命令如下：

```
#### 画残差图
> y.res<-resid(lm.sol); y.fit<-predict(lm.sol)
> plot(y.res~y.fit)
#### 画标准化残差图
> y.rst<-rstandard(lm.sol)
> plot(y.rst~y.fit)
```

绘出的图形如图 6.8(a) 、 (b) 所示.




(a) 残差图　　(b) 标准化残差图

图 6.8: 例 6.6 的残差图

从图 6.8 可以看出，残差具有相同的分布且满足模型的各假设条件.

再仔细分析，当残差服从正态分布的假设成立时，标准化残差应近似在服从标准正态分布．根据正态分布的性质，若随机变量 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 则有

$$P\{\mu - 2\sigma < X < \mu + 2\sigma\} = 0.954.$$

也就是说，对于标准化残差，应该有 95% 的样本点落在区间 $[-2, 2]$ 中．另外，可以证明，拟合值 $\hat{Y}$ 与残差 $\hat{\varepsilon}$ 相互独立，因而与标准化残差 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 也独立．所以，如果以拟合值 $\hat{Y}_i$ 为横坐标， $r_i$ 为纵坐标，那么平面上的点 $(\hat{Y}_i, r_i)$, $i = 1, 2, \cdots, n$ 大致应落在宽度为 4 的水平带 $|r_i| \leq 2$ 的区域内，且不呈现任何趋势．从这种角度看，通过标准化残差图，更容易诊断出回归模型是否出现问题.

回过来，再看图 6.8(b), 所有点均在宽度为 4 的水平带 $|r_i| \leq 2$ 中，且不呈现任何趋势，因此，例 6.6 的模型应该是合适的.

**例 6.14** 某公司为了研究产品的营销策略，对产品的销售情况进行了调查. 设 $Y$ 为某地区该产品的家庭人均购买量 (单位：元), $X$ 为家庭人均收入 (单位：元). 表 6.8 给出了 53 个家庭的数据. 试通过这些数据建立 $Y$ 与 $X$ 的关系式.

**表 6.8: 某地区家庭人均收入与人均购买量数据**

| 序号 | $X$(元) | $Y$(元) | 序号 | $X$(元) | $Y$(元) | 序号 | $X$(元) | $Y$(元) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 679 | 0.79 | 19 | 745 | 0.77 | 37 | 770 | 1.74 |
| 2 | 292 | 0.44 | 20 | 435 | 1.39 | 38 | 724 | 4.10 |
| 3 | 1012 | 0.56 | 21 | 540 | 0.56 | 39 | 808 | 3.94 |
| 4 | 493 | 0.79 | 22 | 874 | 1.56 | 40 | 790 | 0.96 |
| 5 | 582 | 2.70 | 23 | 1543 | 5.28 | 41 | 783 | 3.29 |
| 6 | 1156 | 3.64 | 24 | 1029 | 0.64 | 42 | 406 | 0.44 |
| 7 | 997 | 4.73 | 25 | 710 | 4.00 | 43 | 1242 | 3.24 |
| 8 | 2189 | 9.50 | 26 | 1434 | 0.31 | 44 | 658 | 2.14 |
| 9 | 1097 | 5.34 | 27 | 837 | 4.20 | 45 | 1746 | 5.71 |
| 10 | 2078 | 6.85 | 28 | 1748 | 4.88 | 46 | 468 | 0.64 |
| 11 | 1818 | 5.84 | 29 | 1381 | 3.48 | 47 | 1114 | 1.90 |
| 12 | 1700 | 5.21 | 30 | 1428 | 7.58 | 48 | 413 | 0.51 |
| 13 | 747 | 3.25 | 31 | 1255 | 2.63 | 49 | 1787 | 8.33 |
| 14 | 2030 | 4.43 | 32 | 1777 | 4.99 | 50 | 3560 | 14.94 |
| 15 | 1643 | 3.16 | 33 | 370 | 0.59 | 51 | 1495 | 5.11 |
| 16 | 414 | 0.50 | 34 | 2316 | 8.19 | 52 | 2221 | 3.85 |
| 17 | 354 | 0.17 | 35 | 1130 | 4.79 | 53 | 1526 | 3.93 |
| 18 | 1276 | 1.88 | 36 | 463 | 0.51 | | | |

**解**: 输入数据，作线性回归模型 (程序名： exam0614.R)

```
X<-scan()
 679  292 1012  493  582 1156  997 2189 1097 2078
1818 1700  747 2030 1643  414  354 1276  745  435
```

```
 540  874 1543 1029  710 1434  837 1748 1381 1428
1255 1777  370 2316 1130  463  770  724  808  790
 783  406 1242  658 1746  468 1114  413 1787 3560
1495 2221 1526

Y<-scan()
0.79 0.44 0.56 0.79 2.70 3.64 4.73 9.50 5.34 6.85
5.84 5.21 3.25 4.43 3.16 0.50 0.17 1.88 0.77 1.39
0.56 1.56 5.28 0.64 4.00 0.31 4.20 4.88 3.48 7.58
2.63 4.99 0.59 8.19 4.79 0.51 1.74 4.10 3.94 0.96
3.29 0.44 3.24 2.14 5.71 0.64 1.90 0.51 8.33 14.94
5.11 3.85 3.93

lm.sol<-lm(Y~X); summary(lm.sol)
```

得到

```
Call:
lm(formula = Y ~ X)
Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-4.1399 -0.8275 -0.1934  1.2376  3.1522
Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -0.8313037  0.4416121  -1.882   0.0655 .
X            0.0036828  0.0003339  11.030 4.11e-15 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.577 on 51 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.7046,     Adjusted R-squared: 0.6988
F-statistic: 121.7 on 1 and 51 DF,  p-value: 4.106e-15
```

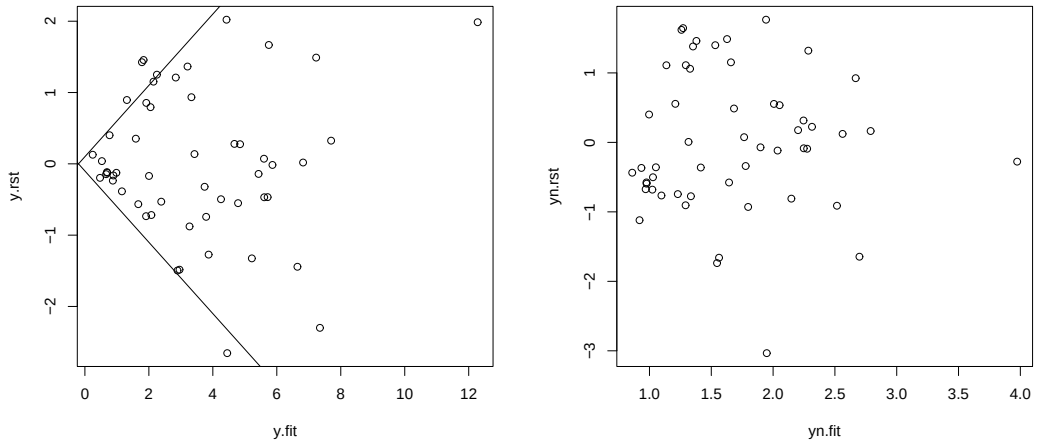
回归方程通过 t 检验和 F 检验，所以 $Y$ 对 $X$ 的一元经验回归方程为

$$\widehat{Y} = -0.8313 + 0.003683X.$$

再作回归诊断，画出标准化残差散点图

```
y.rst<-rstandard(lm.sol); y.fit<-predict(lm.sol)
plot(y.rst~y.fit)
abline(0.1,0.5);abline(-0.1,-0.5)
```

其图形由图 6.9(a) 所示.




(a) 异方差情况　　(b) 变换后的情况

图 6.9: 例 6.6 的标准化残差图

直观上容易看出，残差图从左向右逐渐散开呈漏斗状，这是残差的方差不相等的一个征兆. 考虑对响应变量 $Y$ 作变换，作开方运算. 相应的 R 程序为

```
lm.new<-update(lm.sol, sqrt(.)~.); coef(lm.new)
```

其中 `update` 是模型修正函数. `coef` 是提取回归系数. 计算结果为

```
(Intercept)           X
0.582225917 0.000952859
```

由此得到经验方程

$$\sqrt{\hat{Y}} = 0.582225917 + 0.000952859X,$$

即

$$\begin{aligned}\widehat{Y} &= (0.582225917 + 0.000952859X)^2 \\ &= 0.338987 + 0.001109558X + 9.079403 \times 10^{-7}X^2.\end{aligned}$$

再画出变换后的标准化残差散点图

```
yn.rst<-rstandard(lm.new); yn.fit<-predict(lm.new)
plot(yn.rst~yn.fit)
```

其图形由图 6.9(b) 所示. 散点图的趋势有较大改善.

**2. 残差的 Q-Q 图**

在第三章介绍了检验正态分布的方法 —Q-Q 图. 这里可以用 Q-Q 图的方法检验残差的正态性.

设 $\hat{\varepsilon}_{(i)}$ 是残差 $\hat{\varepsilon}_i$ 的次序统计量, $i = 1, 2, \cdots, n$, 令

$$q_{(i)} = \Phi^{-1}\left(\frac{i - 0.375}{n + 0.25}\right), \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

其中 $\Phi(x)$ 为标准正态分布 $N(0, 1)$ 的分布函数, $\Phi^{-1}(x)$ 为反函数. 称 $q_{(i)}$ 为 $\hat{\varepsilon}_{(i)}$ 的期望值.

可以证明, 若 $\hat{\varepsilon}_i (i = 1, 2, \cdots, n)$ 是来自正态分布总体的样本, 则点 $(q_{(i)}, \hat{\varepsilon}_{(i)})$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 应在一条直线上. 因此, 若残差的正 Q-Q 图中的点的大致趋势明显地不在一条直线上, 则有理由怀疑对误差的正态性假设的合理性; 否则可认为误差的正态性假设是合理的.

用 R 软件画正态 Q-Q 残差图非常简单, 只需一个命令

```
plot(model, 2)
```

其中 `model` 是由 `lm` 生成的对象.

**3. 以自变量为横坐标的残差图**

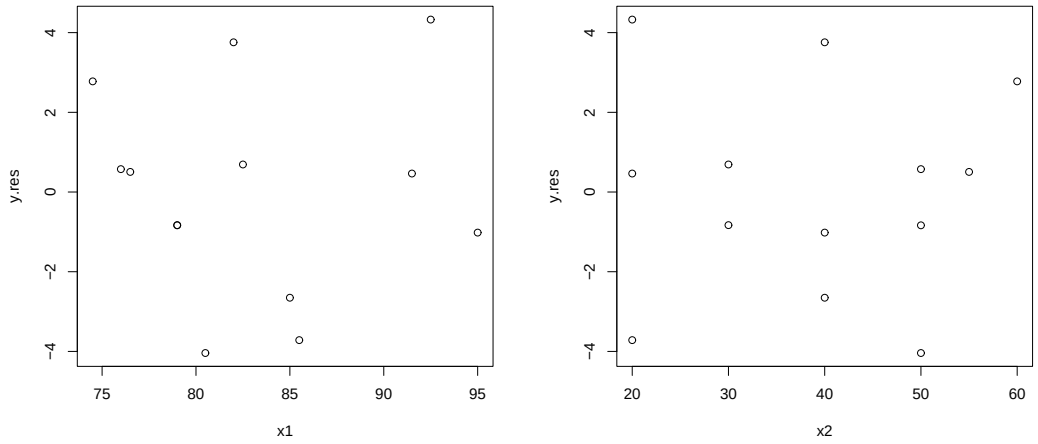
以每个 $X_j (1 \le j \le p)$ 的各个观测值 $x_{ij} (1 \le i \le n)$ 为点的横坐标, 即以自变量为横坐标的残差图. 与拟合值 $\hat{Y}$ 为横坐标的残差图一样, 满意的残差图呈现图 6.7(a) 的水平带状. 如果图形呈现图 6.7(b) 的形状, 则说明误差是等方差的假设不合适. 若呈现图 6.7(c) 的形状, 则需要在模型中添加 $X_j$ 的高次项, 或者对 $Y$ 做变换.

**例 6.15** *画出例 6.6 关于自变量为横坐标的残差图.*

**解**: 在作完成回归模型后，计算残差，并画出图形.

```
> y.res<-resid(lm.sol)
> plot(y.res~x1); plot(y.res~x2)
```

图形如图 6.10 所示.




(a) 以 $X_1$ 为横坐标　　(b) 以 $X_2$ 为横坐标

图 6.10: 例 6.6 的以 $X_1$ 、 $X_2$ 为横坐标的残差图

从图 6.10 可以看出，回归模型效果是好的.

在 R 软件中， `plot()` 函数可以画出回归模型的残差图，其使用格式为

```
plot(x, which = 1:4,
   caption = c("Residuals vs Fitted", "Normal Q-Q plot",
               "Scale-Location plot", "Cook's distance plot"),
   panel = points,
   sub.caption = deparse(x$call), main = "",
   ask = prod(par("mfcol"))<length(which)&&dev.interactive(),
   ...,
   id.n = 3, labels.id = names(residuals(x)), cex.id = 0.75)
```

其中 `x` 是线性回归模型， `which` 是 1 至 4 的全部或某个子集， 1 表示画普通残差与拟合值的残差图； 2 表示画正态 Q-Q 的残差图； 3 表示画标准化残差的开

方与拟合值的残差图；4 表示画 Cook 统计量 (在后面介绍) 的残差图. `caption` 是图题的内容. 其余见在在线帮助.

### 6.5.4 影响分析

所谓影响分析就是探查对估计或有异常大影响的数据. 在回归分析中的一个重要假设是, 使用的模型对所有数据是适当的. 在应用中, 有一个或多个样本其观测值似乎与模型不相符, 但模型拟合于大多数数据, 这种情况并不罕见, 例如例 6.11 第三组数据的情况.

如果一个样本不遵从某个模型, 但其余数据遵从这个模型, 则称该样本点为强影响点 (也称为异常值点). 影响分析的一个重要功能是区分这样的样本数据.

**1. 帽子矩阵 $H$ 的对角元素**

由式 (6.31) 得到, $\hat{Y} = HY$. 从几何上讲, $\hat{Y}$ 是 $Y$ 在 $X$ 的列向量张成子空间内的投影 [5], 并且满足

$$\frac{\partial \hat{Y}_i}{\partial Y_i} = h_{ii},$$

因此, $h_{ii}$ 的大小可以表示第 $i$ 个样本值对 $\hat{Y}_i$ 影响的大小. 再考虑 $\hat{Y}_i$ 的方差

$$\mathrm{Var}(\hat{Y}_i) = h_{ii}\sigma^2,$$

因此, $h_{ii}$ 双反映了回归值 $\hat{Y}_i$ 的波动情况.

由投影矩阵 $H$ 的性质得到,

$$0 \le h_{ii} \le 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \qquad \sum_{i=1}^{n} h_{ii} = p + 1.$$

所以, Hoaglin 和 Welsch(1978) 给出一种判断异常值点的方法, 如果当

$$h_{i_0 i_0} \ge \frac{2(p+1)}{n}, \tag{6.39}$$

则可认为第 $i_0$ 组的样本影响较大, 可以结合其他准则, 考虑是否将其剔除.

由于帽子矩阵 (投影矩阵)$H$ 的对角线上的元素 $h_{ii}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 是很重要的统计信息量, 因此 R 软件也给出计算函数 `hatvalues()` 和 `hat()`, 其使用格式为

[5] 由于 $H^T = H$, $H^2 = H$, 所以称 $H$ 为投影矩阵

```
hatvalues(model,infl=lm.influence(model,do.coef=FALSE),...)
hat(x,intercept=TRUE)
```

其中 model 是回归模型， x 是设计矩阵 $X$.

**2. DFFITS 准则**

Belsley, Kuh 和 Welsch (1980) 给出另一种准则. 计算统计量

$$D_i(\sigma)=\sqrt{\frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}}\cdot\frac{\hat{\varepsilon}_i}{\sigma\sqrt{1-h_{ii}}},\tag{6.40}$$

其中 $\sigma$ 的估计量用 $\hat{\sigma}_{(i)}$ 来代替. 对于第 $i$ 个样本，如果有

$$|D_i(\sigma)|>2\sqrt{\frac{p+1}{n}},\tag{6.41}$$

则认为第 $i$ 个样本的影响比较大，应引起注意.

R 软件给出了 DFFITS 准则的计算函数 dffits(), 其使用格式为

```
dffits(model, infl = , res = )
```

其中 model 是回归模型.

**例 6.16** 用 *DFFITS 准则判断例 6.2 中的异常值样本点.*

**解**: 在计算出回归模型后，利用 dffits() 函数作判断.

```
> p<-1; n<-nrow(forbes); d<-dffits(lm.sol)
> cf<-1:n; cf[d>2*sqrt((p+1)/n)]
[1] 12
```

因此，第 12 号样本点可能是异常值点.

**3. Cook 统计量**

Cook 在 1977 年提出了 Cook 统计量， Cook 统计量定义为

$$D_i=\frac{(\hat{\beta}-\hat{\beta}_{(i)})^TX^TX(\hat{\beta}-\hat{\beta}_{(i)})}{(p+1)\hat{\sigma}^2},\quad i=1,2,\cdots,n,\tag{6.42}$$

其中 $\hat{\beta}_{(i)}$ 为删除第 $i$ 个样本数据后的估计值，由余下的 $n-1$ 个样本数据求得的回归系数. 经过推导， Cook 统计量可以改写为

$$D_i=\frac{1}{p+1}\left(\frac{h_{ii}}{1-h_{ii}}\right)r_i^2,\quad i=1,2,\cdots,n,\tag{6.43}$$

其中 $r_i$ 是标准化残差.

R 软件给出了计算 Cook 统计量的计算函数 `cooks.distance()`, 其使用格式为

```
cooks.distance(model,infl=lm.influence(model,do.coef=FALSE),
               res=weighted.residuals(model),
               sd=sqrt(deviance(model)/df.residual(model)),
               hat=infl$hat, ...)
```

其中 `model` 是回归模型.

直观上讲, Cook 统计量 $D_i$ 越大的点, 越可能是异常值点, 但要给 Cook 统计量一个用以判定异常值点的临界值是很困难的, 在应用上要视具体问题的实际情况而定.

**4. COVRATIO 准则**

利用全部样本回归系数估计值的协方差阵和去掉第 $i$ 个样本回归系数估计值的协方差阵分别为

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 \left(X^T X\right)^{-1}, \quad \mathrm{Var}(\hat{\beta}_{(i)}) = \sigma^2 \left(X_{(i)}^T X_{(i)}\right)^{-1},$$

其中 $X_{(i)}$ 是 $X$ 剔除第 $i$ 行得到的矩阵. 分别用 $\hat{\sigma}$ 和 $\hat{\sigma}_{(i)}$ 替代上式中的 $\sigma$. 为了比较其对应的回归系数的精度, 考虑其协方差的比

$$\mathrm{COVRATIO} = \frac{\det\left(\hat{\sigma}_{(i)}^2 (X_{(i)}^T X_{(i)})^{-1}\right)}{\det\left(\hat{\sigma}^2 \left(X^T X\right)^{-1}\right)} = \frac{(\hat{\sigma}_{(i)}^2)^{p+1}}{(\hat{\sigma}^2)^{p+1}} \cdot \frac{1}{1-h_{ii}}, \quad i = 1, 2, \cdots, n. \tag{6.44}$$

如果有一个样本所对应的 COVRATIO 值离开 1 越远, 则越认为那个样本影响越大.

R 软件给出了计算 COVRATIO 值的计算函数 `covratio()`, 其使用格式为

```
covratio(model, infl = lm.influence(model, do.coef = FALSE),
         res = weighted.residuals(model))
```

其中 `model` 是回归模型.

**5. 小结**

上面介绍了四种分析强影响点 (异常值点) 的方法，每种方法找到的点是否是强影响点还需要根据具体情况进行分析. 这里为了方便计算，将各种方法编写成一个函数.

编写回归诊断函数 —Reg_Diag(). 在给定回归模型后，计算回归模型的普通残差、标准化 (内学生化) 残差、外学生化残差、帽子矩阵对角线上的元素、DFFITS 统计量、 Cook 距离和 COVRATIO 统计量，并根据各种指标的特征，对可能是强影响点的样本给予标记，便于对这些点进行分析研究.

下面是相应的 R 程序 (程序名： Reg_Diag.R)

```
Reg_Diag<-function(fm){
   n<-nrow(fm$model); df<-fm$df.residual
   p<-n-df-1; s<-rep(" ", n);
   res<-residuals(fm); s1<-s; s1[abs(res)==max(abs(res))]<-"*"
   sta<-rstandard(fm); s2<-s; s2[abs(sta)>2]<-"*"
   stu<-rstudent(fm); s3<-s; s3[abs(sta)>2]<-"*"
   h<-hatvalues(fm); s4<-s; s4[h>2*(p+1)/n]<-"*"
   d<-dffits(fm); s5<-s; s5[abs(d)>2*sqrt((p+1)/n)]<-"*"
   c<-cooks.distance(fm); s6<-s; s6[c==max(c)]<-"*"
   co<-covratio(fm);   abs_co<-abs(co-1)
   s7<-s; s7[abs_co==max(abs_co)]<-"*"
   data.frame(residual=res, s1, standard=sta, s2,
              student=stu, s3,  hat_matrix=h, s4,
              DFFITS=d, s5,cooks_distance=c, s6,
              COVRATIO=co, s7)
}
```

在程序中，对最大残差绝对值的样本做标记；对标准化残差和外学生化残差绝对值大于 2 的样本作标记; 对于 $h_{ii} > 2(p+1)/n$ 的样本作标记; 对 $|\text{DFFITS}|_i > 2\sqrt{(p+1)/n}$ 的样本作标记；对最大的 Cooks 距离的样本作标记；对距 1 最远的 COVRATIO 统计量的样本作标记.

**例 6.17** 智力测试数据

*表 6.9 是教育学家测试的 21 个儿童的记录，其中 $X$ 是儿童的年龄 (以月为单位), $Y$ 表示某种智力指标，通过这些数据，我们要建立智力随年龄变化的关*

系.

**表 6.9: 儿童智力测试数据**

| 序号 | $X$ | $Y$ | 序号 | $X$ | $Y$ | 序号 | $X$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 15 | 95 | 8 | 11 | 100 | 15 | 11 | 102 |
| 2 | 26 | 71 | 9 | 8 | 104 | 16 | 10 | 100 |
| 3 | 10 | 83 | 10 | 20 | 94 | 17 | 12 | 105 |
| 4 | 9 | 91 | 11 | 7 | 113 | 18 | 42 | 57 |
| 5 | 15 | 102 | 12 | 9 | 96 | 19 | 17 | 121 |
| 6 | 20 | 87 | 13 | 10 | 83 | 20 | 11 | 86 |
| 7 | 18 | 93 | 14 | 11 | 84 | 21 | 10 | 100 |

**解**: 输入数据 (数据框), 调用函数 `lm()` 进行求解 (程序名: `exam0617.R`).

```
intellect<-data.frame(
   x=c(15, 26, 10,  9, 15, 20, 18, 11,  8, 20, 7,
        9, 10, 11, 11, 10, 12, 42, 17, 11, 10),
   y=c(95, 71, 83,  91, 102,  87, 93, 100, 104, 94, 113,
       96, 83, 84, 102, 100, 105, 57, 121,  86, 100)
)
lm.sol<-lm(y~x, data=intellect)
summary(lm.sol)
```

其计算结果如下

```
Call:
lm(formula = y ~ x, data = intellect)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-15.604  -8.731   1.396   4.523  30.285

Coefficients:
```

```
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 109.8738     5.0678  21.681 7.31e-15 ***
x            -1.1270     0.3102  -3.633  0.00177 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 11.02 on 19 degrees of freedom
Multiple R-Squared:  0.41,      Adjusted R-squared: 0.3789
F-statistic:  13.2 on 1 and 19 DF,  p-value: 0.001769
```

模型通过 T 检验和 F 检验，因此，回归方程为

$$\hat{Y} = 109.8738 - 1.1270X.$$

下面作回归诊断. 调用回归诊断函数 Reg_Diag()

```
> source("Reg_Diag.R"); Reg_Diag(lm.sol)
      residual s1    standard s2     student s3 hat_matrix s4
1    2.0309931     0.18883222     0.18396849    0.04792248
2   -9.5721288    -0.94440639    -0.94158335    0.15451323
3  -15.6039514    -1.46226437    -1.51081192    0.06281578
4   -8.7309404    -0.82158155    -0.81426336    0.07054521
5    9.0309931     0.83965939     0.83286292    0.04792248
6   -0.3340623    -0.03147039    -0.03063183    0.07261896
7    3.4119599     0.31891861     0.31124676    0.05798959
8    2.5230375     0.23566531     0.22971575    0.05666993
9    3.1420707     0.29716139     0.28991014    0.07985823
10   6.6659377     0.62796572     0.61766026    0.07261896
11  11.0150818     1.04797524     1.05084716    0.09075485
12  -3.7309404    -0.35108151    -0.34283148    0.07054521
13 -15.6039514    -1.46226437    -1.51081192    0.06281578
14 -13.4769625    -1.25882099    -1.27977575    0.05666993
15   4.5230375     0.42247610     0.41315320    0.05666993
16   1.3960486     0.13082533     0.12739342    0.06281578
17   8.6500264     0.80601240     0.79828114    0.05210768
```

```
18  -5.5403062    -0.85153932    -0.84511086    0.65160998  *
19  30.2849710  *  2.82336807  *  3.60697972  * 0.05305030
20 -11.4769625    -1.07201020    -1.07648108    0.05666993
21   1.3960486     0.13082533     0.12739342    0.06281578

         DFFITS s5 cooks_distance s6  COVRATIO s7
1   0.041274036      8.974064e-04    1.1658918
2  -0.402520687      8.149796e-02    1.1969990
3  -0.391140045      7.165814e-02    0.9363474
4  -0.224328534      2.561596e-02    1.1151027
5   0.186855984      1.774366e-02    1.0850411
6  -0.008571736      3.877627e-05    1.2013200
7   0.077223953      3.130575e-03    1.1701576
8   0.056303487      1.668209e-03    1.1742373
9   0.085407473      3.831949e-03    1.1996682
10  0.172840518      1.543952e-02    1.1520913
11  0.331996854      5.481014e-02    1.0878396
12 -0.094449643      4.677623e-03    1.1832616
13 -0.391140045      7.165814e-02    0.9363474
14 -0.313673908      4.759781e-02    0.9923313
15  0.101264129      5.361216e-03    1.1590453
16  0.032981383      5.735845e-04    1.1867369
17  0.187166128      1.785650e-02    1.0964388
18 -1.155778731  *   6.781120e-01  * 2.9586827  *
19  0.853737107  *   2.232883e-01    0.3964316
20 -0.263846244      3.451889e-02    1.0425728
21  0.032981383      5.735845e-04    1.1867369
```

从上述结果来看，第 19 号样本点残差达到最大，且标准化残差和外学生化残差的绝对值超过 2, DFFITS 统计量超过规定指标；第 18 号样本点的 $h_{18,18}$, DFFITS 统计量和 COVRATIO 统计量超过规定指标，并且对应的 Cook 统计量达到最大. 因此，这些结果可以分析出，第 19 号样本点对响应变量影响较大，第 18 号样本点对自变量的影响较大.

为了能够说明问题，我们从残差图和回归散点来作进一步的说明. 为了便于分析，将四幅画在一张图上. 画出图形的 R 命令如下，得到的图形如图 6.11 所示.

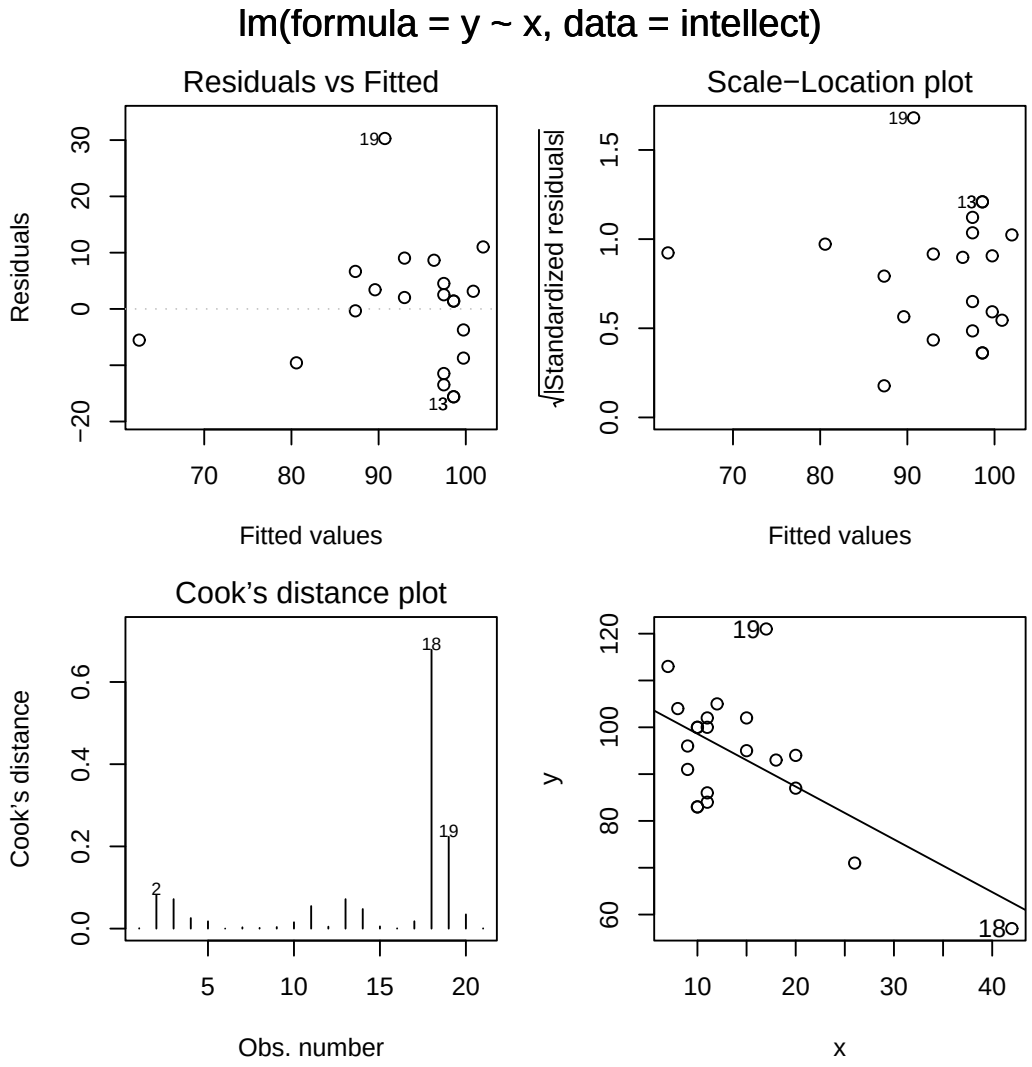



图 6.11: 智力测试数据的残差图和回归图

```
opar <- par(mfrow = c(2, 2), oma = c(0, 0, 1.1, 0),
            mar = c(4.1, 4.1, 2.1, 1.1))
plot(lm.sol, 1); plot(lm.sol, 3); plot(lm.sol, 4)
attach(intellect)
plot(x, y); X<-x[18:19]; Y<-y[18:19]
```

```
text(X, Y, labels=18:19, adj=1.2); abline(lm.sol)
par(opar)
```

在上述程序中，使用了 par() 函数，该函数图形参数设置函数，其具体的使用方法请见在线帮助.

图 6.11 的第一张图是残差散点图，从图形看出，第 19 号样本点明显远离其他的样本点. 图 6.11 的第二张图是标准化残差绝对值的开方的残差图，第 19 号样本点标准化残差的开方大于 1.5, 说明第 19 号样本点在 95% 的范围以外. 图 6.11 的第三张图表示的是 Cook 距离，这里是第 18 号样本点的值最大，因此，第 18 号样本点可能是强影响点 (异常值点). 为了显示分析的结果，图 6.11 的第四张图给出了回归直线和样本点的散点图，第 18 号样本点明显偏右，第 19 号样本点明显偏上.

对于多元回归模型，虽然我们无法画出回归方程与数据的的图形，但通过回归诊断，我们还是能够分析出数据的问题所在，例如，对于智力测试数据，第 18 号样本的年龄是否有问题，而第 19 号样本的测试结果是否有问题，这些需要作进一步的研究.

在 R 软件中，函数 influence.measures() 可以作回归诊断的总括，它的使用格式为

```
influence.measures(model)
```

其中 model 是由 lm 或 glm 构成的对象. 其返回值是一个列表，列表中包括 DFFITS 统计量， COVRATIO 统计量， Cooks 距离等.

### 6.5.5 多重共线性

当自变量彼此相关时，回归模型可能非常令人糊涂. 估计的效应会由于模型中的其他自变量而改变数值，甚至是符号. 故在分析时，了解自变量间的关系的影响是很重要的. 这一复杂问题常称为共线性或多重共线性.

#### 1. 什么是多重共线性

如果存在某些常数 $c_0, c_1$ 和 $c_2$, 使得线性等式

$$c_1X_1 + c_2X_2 = c_0 \tag{6.45}$$

对于数据中所有数据中的样本都成立, 则两个自变量 $X_1$ 和 $X_2$ 为精确共线性的.

在实际中，精确共线性是偶然发生的，因此，如果等式 (6.45) 近似地对测量数据成立，则有近似共线性. 一个常用但不是完全合适的 $X_1$ 与 $X_2$ 间的共线性程度的度量，是它们样本相关系数的平方 $r_{12}^2$. 精确共线性对应于 $r_{12}^2 = 1$; 非共线性对应于 $r_{12}^2 = 0$. 当 $r_{12}^2$ 越接近于 1, 近似共线性越强. 通常，我们去掉形容词 “近似”, 当 $r_{12}^2$ 较大时，我们说 $X_1$ 和 $X_2$ 是共线性的.

对于 $p(>2)$ 个自变量，如果存在常数 $c_0, c_1, \cdots, c_p$, 使得

$$c_1X_1 + c_2X_2 + \cdots + c_pX_p = c_0 \tag{6.46}$$

近似成立，则表示这 $p$ 个变量存在多重共线性.

**2. 多重共线性的发现**

将 $x_{(1)}, x_{(2)}, \cdots, x_{(p)}$ 是自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 经过中心化和标准化得到的向量[6], 记 $X = (x_{(1)}, x_{(2)}, \cdots, x_{(p)})$, 设 $\lambda$ 为 $X^TX$ 的一个特征值， $\varphi$ 为对应的特征向量，其长度为 1, 即 $\varphi^T\varphi = 1$. 若 $\lambda \approx 0$, 则

$$X^TX\varphi = \lambda\varphi \approx 0.$$

用 $\varphi^T$ 左乘上式，得到

$$\varphi^TX^TX\varphi = \lambda\varphi^T\varphi = \lambda \approx 0,$$

所以有

$$X\varphi \approx 0,$$

即

$$\varphi_1x_{(1)} + \varphi_2x_{(2)} + \cdots + \varphi_px_{(p)} \approx 0, \tag{6.47}$$

其中 $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_p)^T$. 式 (6.47) 表明, 向量 $x_{(1)}$, $x_{(2)}$, $\cdots$, $x_{(p)}$ 之间有近似的线性关系，也是说，对于自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$, 存在 $c_0, c_1, \cdots, c_p$, 使得式 (6.46) 近似成立，即自变量之间存在多重共线性.

度量多重共线性严重程度的一个重要指标是方矩 $X^TX$ 的条件数，即

$$\kappa(X^TX) = \|X^TX\| \cdot \|(X^TX)^{-1}\| = \frac{\lambda_{\max}(X^TX)}{\lambda_{\min}(X^TX)},$$

[6]关于数据中心化与标准化的方法将在 8.2.1 节作详细介绍

其中 $\lambda_{\max}(X^TX)$, $\lambda_{\min}(X^TX)$ 表示方矩 $X^TX$ 的最大、最小特征值.

直观上，条件数刻画了 $X^TX$ 的特征值差异的大小. 从实际应用的经验角度，一般若 $\kappa < 100$, 则认为多重共线性的程度很小；若 $100 \leq \kappa \leq 1000$, 则认为存在中等程度或较强的多重共线性；若 $\kappa > 1000$, 则认为存在严重的多重共线性.

在 R 软件中，函数 `kappa()` 计算矩阵的条件数，其使用方法为

```
kappa(z, exact = FALSE, ...)
```

其中 `z` 是矩阵， `exact` 是逻辑变量，当 `exact=TRUE` 时，精确计算条件数；否则近似计算条件数.

**例 6.18** 考虑一个有六个回归自变量的线性回归问题, 原始数据列在表 *6.10* 中. 这里共有 *12* 组数据，除第一组外，自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_6$ 的其余 *11* 组数据满

**表 6.10: 原始数据**

| 序号 | $Y$ | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $X_5$ | $X_6$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 10.006 | 8.000 | 1.000 | 1.000 | 1.000 | 0.541 | −0.099 |
| 2 | 9.737 | 8.000 | 1.000 | 1.000 | 0.000 | 0.130 | 0.070 |
| 3 | 15.087 | 8.000 | 1.000 | 1.000 | 0.000 | 2.116 | 0.115 |
| 4 | 8.422 | 0.000 | 0.000 | 9.000 | 1.000 | −2.397 | 0.252 |
| 5 | 8.625 | 0.000 | 0.000 | 9.000 | 1.000 | −0.046 | 0.017 |
| 6 | 16.289 | 0.000 | 0.000 | 9.000 | 1.000 | 0.365 | 1.504 |
| 7 | 5.958 | 2.000 | 7.000 | 0.000 | 1.000 | 1.996 | −0.865 |
| 8 | 9.313 | 2.000 | 7.000 | 0.000 | 1.000 | 0.228 | −0.055 |
| 9 | 12.960 | 2.000 | 7.000 | 0.000 | 1.000 | 1.380 | 0.502 |
| 10 | 5.541 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 10.000 | −0.798 | −0.399 |
| 11 | 8.756 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 10.000 | 0.257 | 0.101 |
| 12 | 10.937 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 10.000 | 0.440 | 0.432 |

足线性关系

$$X_1 + X_2 + X_3 + X_4 = 10,$$

试用求矩阵条件数的方法，分析出自变量间存在多重共线性.

**解**: 用数据框的方法输入数据, 由自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_6$ 中心化和标准化得到的矩阵 $X^TX$ 本质上就由这些自变量生成的相关矩阵, 再用 kappa() 函数求出矩阵 $X^TX$ 的条件数, 用 eigen() 函数求出矩阵 $X^TX$ 的最小特征值和相应的特征向量. 求解问题的 R 程序如下 (程序名: exam0618.R).

```
collinear<-data.frame(
   Y=c(10.006, 9.737, 15.087, 8.422, 8.625, 16.289,
        5.958, 9.313, 12.960, 5.541, 8.756, 10.937),
   X1=rep(c(8, 0, 2, 0), c(3, 3, 3, 3)),
   X2=rep(c(1, 0, 7, 0), c(3, 3, 3, 3)),
   X3=rep(c(1, 9, 0), c(3, 3, 6)),
   X4=rep(c(1, 0, 1, 10), c(1, 2, 6, 3)),
   X5=c(0.541, 0.130, 2.116, -2.397, -0.046, 0.365,
        1.996, 0.228, 1.38, -0.798, 0.257, 0.440),
   X6=c(-0.099, 0.070, 0.115, 0.252, 0.017, 1.504,
        -0.865, -0.055, 0.502, -0.399, 0.101, 0.432)
)
XX<-cor(collinear[2:7])
kappa(XX,exact=TRUE)
```

得到条件数是 $\kappa = 2195.908 > 1000$, 认为有严重的多重共线性.

进一步, 找出哪些变量是多重共线性的. 计算矩阵的特征值和相应的特征向量

```
> eigen(XX)
```

得到

$$\lambda_{\min} = 0.001106, \quad \varphi = (0.4476, 0.4211, 0.5417, 0.5734, 0.006052, 0.002167)^T.$$

即

$$\begin{aligned} 0.4476x_{(1)} \ + \ 0.4211x_{(2)} \ + \ 0.5417x_{(3)} \ + \ 0.5734x_{(4)} \\ + \ 0.006052x_{(5)} \ + \ 0.002167x_{(6)} \ \approx \ 0. \end{aligned}$$

由于 $x_{(5)}, x_{(6)}$ 前的系数近似为 0, 因此, 有

$$0.4476x_{(1)} \ + \ 0.4211x_{(2)} \ + \ 0.5417x_{(3)} \ + \ 0.5734x_{(4)} \ \approx \ 0, \tag{6.48}$$

所以存在着 $c_0, c_1, c_2, c_3, c_4$ 使得

$$c_1X_1 + c_2X_2 + c_3X_3 + c_4X_4 \approx c_0.$$

这说明变量 $X_1, X_2, X_3, X_4$ 存在着多重共线性，与题目中给的变量是相同的.

注意： `kappa()` 函数也可以求线性模型的条件数，但实际上是计算由自变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p, Y$ 构成矩阵的条件数，即

$$\texttt{kappa(lm.model)} = \kappa([X_1X_2\cdots X_pY]).$$

## 6.6 广义线性回归模型

广义线性模型 (GLM) 是常见正态线性模型的直接推广，它可以适用于连续数据和离散数据，特别是后者，如属性数据、计数数据. 这在应用上，尤其是生物、医学、经济和社会数据的统计分析上，有着重要意义.

广义线性模型首先由 Nelder 和 Wedderburn (1972) 提出. 这些模型要求响应变量只能通过线性形式依赖于处变量，从而保持了线性自变量的思想. 它们对线性模型进行了两个方面的推广：通过设定一个连接函数，将响应变量的期望与线性自变量相联系，以及对误差的分布给出一个误差函数. 这些推广允许许多线性模型的方法能被用于一般的问题. 在线性回归中，我们的目标是将响应变量 $y_i$ 作为 $p$ 个自变量 $x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{pi}$, $i = 1, 2, \cdots, n$ 的函数建立模型.

对于广义线性模型应有以下三个概念：第一是线性自变量，它表明第 $i$ 个响应变量的期望值 $E(y_i)$ 只是能过线性自变量 $\beta^T x_i$ 而依赖于 $x_i$, 其中如通常一样， $\beta$ 是未知参数的 $(p+1)\times 1$ 向量，可能包含截距. 第二是连接函数，它说明线性自变量和 $E(y_i)$ 的关系，给出了线性模型的推广. 第三是误差函数，它说明广义线性模型的最后一部分随机成份. 我们保留样本为相互独立的假设，但去掉可加和正态误差的假设. 可以从指数型分布族中作选一个作为误差函数.

表 6.11 给出了广义线性模型中常见的连接函数和误差函数， 例如，对于正态线性模型，假设 $y_i$ 是正态分布，均值为 $x_i^T\beta$, 未知方差 $\sigma^2$. 如果我们假设 $y_i$ 是 Poisson 随机变量，均值为 $\exp(x_i^T\beta)$, 我们得到 Poisson 回归模型.

### 6.6.1 与广义线性模型有关的 R 函数

R 软件提供了拟合计算广义线性模型的函数 `glm()`, 其命令格式如下

**表 6.11: 常见的连接函数和误差函数**

| | 连接函数 | 逆连接函数 (回归模型) | 典型误差函数 |
|---|---|---|---|
| 恒等 | $x^T\beta = E(y)$ | $E(y) = x^T\beta$ | 正态分布 |
| 对数 | $x^T\beta = \ln E(y)$ | $E(y) = \exp(x^T\beta)$ | Poisson 分布 |
| Logit | $x^T\beta = \text{Logit}E(y)$ | $E(y) = \frac{\exp(x^T\beta)}{1+\exp(x^T\beta)}$ | 二项分布 |
| 逆 | $x^T\beta = \frac{1}{E(y)}$ | $E(y) = \frac{1}{x^T\beta}$ | Gamma 分布 |

```
fitted.model <- glm(formula, family=family.generator,
                    data=data.frame)
```

其中 `formula` 是拟合公式，这里的意义与线性模型相同， `family` 是分布族，即前面讲到的广义线性模型的种类，如正态分布、 Poisson 分布、二项分布等. `data` 是数据框，这里的意义与线性模型相同.

对于每个分布族 (family), 提供了相应的连接函数，如表 6.12 所示.

**表 6.12: 族与相关的连接函数**

| 分布族 (family) | 连 接 函 数 |
|---|---|
| `binomial` | `logit, probit, cloglog` |
| `gaussian` | `identity` |
| `Gamma` | `identity, inverse, log` |
| `inverse.gaussian` | `1/mu^2` |
| `poisson` | `identity, log, sqrt` |
| `quasi` | `logit, probit, cloglog, identity, inverse, log, 1/mu^2, sqrt` |

有了这些分布族和连接函数，我们就可完成相应的广义线性模型的似合问题. 下面就各种不同的分布族进行分析.

### 6.6.2 正态分布族

正态分布族的使用方法是

```
fm <- glm(formula, family = gaussian(link = identity),
          data = data.frame)
```

式中 `link = identity` 可以不写，因为正态分布族的连接函数缺省值是恒等 (identity). 事实上, 整个参数 `family = gaussian` 也可以不写, 因为分布族的缺省值就是正态分布.

从表 6.11 可以看出，正态分布族的广义线性模型实际上与线性模型是相同的. 也就是说,

```
fm <- glm(formula, family = gaussian, data = data.frame)
```

与线性模型

```
fm <- lm(formula, data = data.frame)
```

有完全相同的计算结果，但效率确低得多.

### 6.6.3 二项分布族

在二项分布族中， logistic 回归模型是最重要的模型. 在某些回归问题中, 响应变量是分类的，经常是或者成功，或者失败. 对于这些问题，正态线性模型显然是不合适的，因为正态误差不对应一个 0–1 响应. 在这种情况下，可用一种重要的方法称为 logistic 回归.

对于响应变量 $Y$ 有 $p$ 个自变量 (或称为解释变量), 记为 $X_1, X_2, \cdots, X_p$. 在 $p$ 个自变量的作用下出现成功的条件概率记为 $P = P\{Y = 1|X_1, X_2, \cdots, X_p\}$, 那么 logistic 回归模型为

$$P = \frac{\exp(\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 + \cdots + \beta_p X_p)}{1 + \exp(\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 + \cdots + \beta_p X_p)}, \tag{6.49}$$

其中称 $\beta_0$ 为常数项或截距，称 $\beta_1\beta_2, \cdots, \beta_p$ 为 logistic 模型回归系数.

从公式 (6.49) 可以看出， logistic 回归模型是一个非线性回归模型，自变量 $X_j (j = 1, 2, \cdots, p)$ 可以是连续变量，也可以是分类变量，或哑变量 (dummy variable) 对自变量 $X_j$ 任意取值， $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_p X_p$ 在 $-\infty$ 到 $+\infty$ 变化时，公式 (6.49) 的比值总在 0 到 1 之间变化，这正是概率 $P$ 的取值区间.

对公式 (6.49) 作 logit 变换， logistic 回归模型可以变成下列线性形式:

$$\text{logit}(P) = \ln\left(\frac{P}{1-P}\right) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_p X_p. \tag{6.50}$$

从式 (6.50) 可以看出，我们能够使用线性回归模型对参数进行估计. 这就是 logistic 回归模型属于广义线性模型的原因.

用 R 软件计算 logistic 回归模型的公式为

```
fm <- glm(formula, family = binomial(link = logit),
          data=data.frame)
```

式中 `link = logit` 中以不写，因为 `logit` 是二项分布族连接函数是省缺状态.

在用 `glm()` 函数作 logistic 回归模型时，对于公式 `formula` 有两种输入方法，一种方法是输入成功和失败的次数，另一种象线性模型通常数据的输入方法，这里用两个例子说明其数据的输入和 `glm()` 函数的使用方法.

**例 6.19** R. Norell 实验

*为研究高压电线对牲畜的影响，R. Norell 研究小的电流对农场动物的影响. 他在实验中，选择了 7 头，6 种电击强度，0,1,2,3,4,5 毫安. 每头牛被电击 30 下，每种强度 5 下，按随机的次序进行. 然后重复整个实验，每头牛总共被电击 60 下. 对每次电击，响应变量 — 嘴巴运动，或者出现，或者未出现. 表 6.13 中的数据给出每种电击强度 70 次试验中响应的总次数. 试分析电击对牛的影响.*

**表 6.13: 7 头牛对 6 种不同强度的非常小的电击的响应**

| 电流 (毫安) | 试验次数 | 响应次数 | 响应的比例 |
|---|---|---|---|
| 0 | 70 | 0 | 0.000 |
| 1 | 70 | 9 | 0.129 |
| 2 | 70 | 21 | 0.300 |
| 3 | 70 | 47 | 0.671 |
| 4 | 70 | 60 | 0.857 |
| 5 | 70 | 63 | 0.900 |

**解**：用数据框形式输入数据，再构造矩阵，一列是成功 (响应) 的次数，另一列是失败 (不响应) 的次数，然后再作 logistic 回归. 其程序如下 (程序名：`exam0619.R`)

```
norell<-data.frame(
```

```
    x=0:5, n=rep(70,6), success=c(0,9,21,47,60,63)
)
norell$Ymat<-cbind(norell$success, norell$n-norell$success)
glm.sol<-glm(Ymat~x, family=binomial, data=norell)
summary(glm.sol)
```

其计算结果为

```
Call:
glm(formula = Ymat ~ x, family = binomial, data = norell)

Deviance Residuals:
      1        2        3        4        5        6
-2.2507   0.3892  -0.1466   1.1080   0.3234  -1.6679

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  -3.3010     0.3238  -10.20   <2e-16 ***
x             1.2459     0.1119   11.13   <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 250.4866  on 5  degrees of freedom
Residual deviance:   9.3526  on 4  degrees of freedom
AIC: 34.093

Number of Fisher Scoring iterations: 4
```

即 $\beta_0 = -3.3010, \beta_1 = 1.2459$. 并且回归方程通过了检验，因此，回归模型为

$$P = \frac{\exp(-3.3010 + 1.2459X)}{1 + \exp(-3.3010 + 1.2459X)},$$

其中 $X$ 是电流强度 (单位：毫安).

与线性回归模型相同，在得到回归模型后，可以作预测，例如，当电流强度为 3.5 毫安时，有响应的牛的概率为多少？

```
> pre<-predict(glm.sol, data.frame(x=3.5))
> p<-exp(pre)/(1+exp(pre)); p
[1] 0.742642
```

即 74.26%.

可以作控制，如有 50% 的牛有响应，其电流强度为多少？当 $P = 0.5$ 时，$\ln \frac{P}{1-P} = 0$, 所以， $X = -\beta_0/\beta_1$.

```
> X<- - glm.sol$coefficients[[1]]/glm.sol$coefficients[[2]]
> X
   2.649439
```

即 2.65 毫安的电流强度，可以使 50% 的牛有响应.

最后画出响应的比例与 logistic 回归曲线画. R 软件的绘图命令如下，得到的图形由图 6.12 所示.

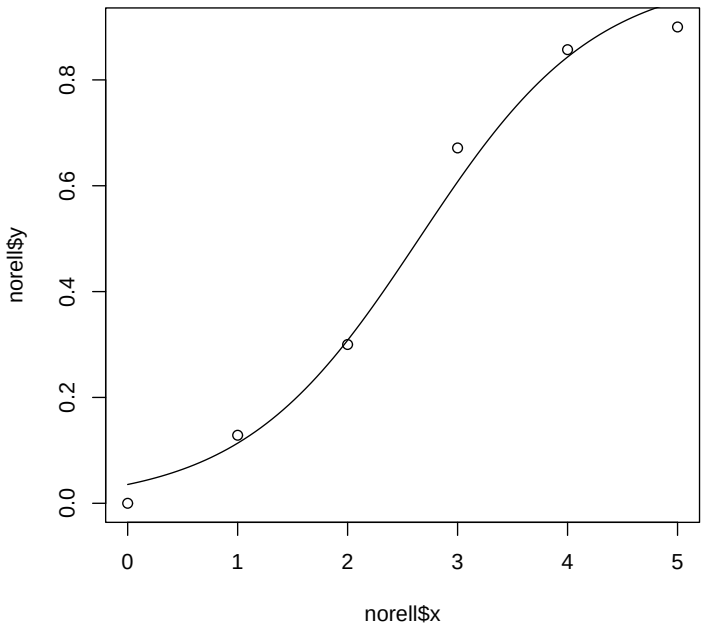



图 6.12: 响应比例关于强度的拟全 logistic 回归曲线

```
d<-seq(0, 5, len=100)
```

```
pre<-predict(glm.sol, data.frame(x = d))
p<-exp(pre)/(1+exp(pre))
norell$y<-norell$success/norell$n
plot(norell$x, norell$y); lines(d, p)
```

在程序中， d 是给出曲线横坐标的点， pre 是计算预测值， p 是相应的预测概率. 用 plot 函数和 lines 给出散点图和对应的预测曲线.

**例 6.20** *50* 位急性淋巴细胞性白血病病人，在入院治疗时取得了外辕血中的细胞数 $X_1$*(*千个 */*$mm^3$*);* 淋巴结浸润等级 $X_2$*(*分为 *0, 1, 2, 3* 级*);* 出院后有无巩固治疗 $X_3$*(“1”* 表示有巩固治疗， *“0”* 表示无巩固治疗*).* 通过随访取得病人的生存时间，并以变量 $Y = 0$ 表示生存时间在 *1* 年以内， $Y = 1$ 表示生存时间在 *1* 年或 *1* 年以上. 关于 $X_1, X_2, X_3$ 和 $Y$ 的观测数据，如表 *6.14* 所示. 试用 *Logistic* 回归模型分析病人生存时间长短的概率与 $X_1, X_2, X_3$ 的关系.

**解**： 输入数据，用 glm() 函数计算 (程序名： exam0620.R).

```
life<-data.frame(
   X1=c(2.5, 173, 119, 10, 502, 4, 14.4, 2, 40, 6.6,
        21.4, 2.8, 2.5, 6, 3.5, 62.2, 10.8, 21.6, 2, 3.4,
        5.1, 2.4, 1.7, 1.1, 12.8, 1.2, 3.5, 39.7, 62.4, 2.4,
        34.7, 28.4, 0.9, 30.6, 5.8, 6.1, 2.7, 4.7, 128, 35,
        2, 8.5, 2, 2, 4.3, 244.8, 4, 5.1, 32, 1.4),
   X2=rep(c(0, 2, 0, 2, 0, 2, 0, 2, 0, 2, 0, 2, 0, 2, 0, 2,
            0, 2, 0, 2, 0, 2, 0),
          c(1, 4, 2, 2, 1, 1, 8, 1, 5, 1, 5, 1, 1, 1, 2, 1,
            1, 1, 3, 1, 2, 1, 4)),
   X3=rep(c(0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1),
          c(6, 1, 3, 1, 3, 1, 1, 5, 1, 3, 7, 1, 1, 3, 1, 1, 2, 9)),
   Y=rep(c(0,  1,   0,  1), c(15, 10, 15, 10))
)
glm.sol<-glm(Y~X1+X2+X3, family=binomial, data=life)
summary(glm.sol)
```

计算结果如下：

```
Call:
```

**表 6.14: 50 位急性淋巴细胞性白血病病人生存数据**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2.5 | 0 | 0 | 0 | 26 | 1.2 | 2 | 0 | 0 |
| 2 | 173.0 | 2 | 0 | 0 | 27 | 3.5 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 119.0 | 2 | 0 | 0 | 28 | 39.7 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 10.0 | 2 | 0 | 0 | 29 | 62.4 | 0 | 0 | 0 |
| 5 | 502.0 | 2 | 0 | 0 | 30 | 2.4 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 4.0 | 0 | 0 | 0 | 31 | 34.7 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | 14.4 | 0 | 1 | 0 | 32 | 28.4 | 2 | 0 | 0 |
| 8 | 2.0 | 2 | 0 | 0 | 33 | 0.9 | 0 | 1 | 0 |
| 9 | 40.0 | 2 | 0 | 0 | 34 | 30.6 | 2 | 0 | 0 |
| 10 | 6.6 | 0 | 0 | 0 | 35 | 5.8 | 0 | 1 | 0 |
| 11 | 21.4 | 2 | 1 | 0 | 36 | 6.1 | 0 | 1 | 0 |
| 12 | 2.8 | 0 | 0 | 0 | 37 | 2.7 | 2 | 1 | 0 |
| 13 | 2.5 | 0 | 0 | 0 | 38 | 4.7 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 6.0 | 0 | 0 | 0 | 39 | 128.0 | 2 | 1 | 0 |
| 15 | 3.5 | 0 | 1 | 0 | 40 | 35.0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 62.2 | 0 | 0 | 1 | 41 | 2.0 | 0 | 0 | 1 |
| 17 | 10.8 | 0 | 1 | 1 | 42 | 8.5 | 0 | 1 | 1 |
| 18 | 21.6 | 0 | 1 | 1 | 43 | 2.0 | 2 | 1 | 1 |
| 19 | 2.0 | 0 | 1 | 1 | 44 | 2.0 | 0 | 1 | 1 |
| 20 | 3.4 | 2 | 1 | 1 | 45 | 4.3 | 0 | 1 | 1 |
| 21 | 5.1 | 0 | 1 | 1 | 46 | 244.8 | 2 | 1 | 1 |
| 22 | 2.4 | 0 | 0 | 1 | 47 | 4.0 | 0 | 1 | 1 |
| 23 | 1.7 | 0 | 1 | 1 | 48 | 5.1 | 0 | 1 | 1 |
| 24 | 1.1 | 0 | 1 | 1 | 49 | 32.0 | 0 | 1 | 1 |
| 25 | 12.8 | 0 | 1 | 1 | 50 | 1.4 | 0 | 1 | 1 |

```
glm(formula = Y ~ X1 + X2 + X3, family = binomial, data = life)

Deviance Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-1.6960  -0.5842  -0.2829   0.7436   1.9292

Coefficients:
             Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept) -1.696538   0.658635  -2.576 0.010000 **
X1           0.002326   0.005683   0.409 0.682308
X2          -0.792177   0.487262  -1.626 0.103998
X3           2.830373   0.793406   3.567 0.000361 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 67.301  on 49  degrees of freedom
Residual deviance: 46.567  on 46  degrees of freedom
AIC: 54.567

Number of Fisher Scoring iterations: 5
```

即回归模型为

$$P=\frac{\exp(-1.696538+0.002326X_1-0.792177X_2+2.830373X_3)}{1+\exp(1.696538+0.002326X_1-0.792177X_2+2.830373X_3)}.$$

用上述回归模型作观测, 若一个病人的前两项的指标观测值为 $x_1=5, x_2=2$, 若无巩固治疗 $(x_3=0)$, 则 1 年以上的存活概率

```
> pre<-predict(glm.sol, data.frame(X1=5,X2=2,X3=0))
> p<-exp(pre)/(1+exp(pre)); p
[1] 0.03664087
```

为 3.66%. 若进行了巩固性治疗 $(x_3=1)$, 则 1 年以上的存活概率

```
> pre<-predict(glm.sol, data.frame(X1=5,X2=2,X3=1))
> p<-exp(pre)/(1+exp(pre)); p
[1] 0.3920057
```

为 39.20%. 比没有巩固治疗提高了 10.699 倍.

实际上, 用上述回归方程作预测还存在一些问题, 这是因为在得到 logistic 回归模型时, 参数 $\beta_1$ 没有通过检验, 其 P– 值为 0.6823. 可以类似于线性模型, 用 step() 作变量筛选.

```
> glm.new<-step(glm.sol)
Start:  AIC= 54.57
 Y ~ X1 + X2 + X3

       Df Deviance    AIC
- X1    1   46.718 52.718
<none>      46.567 54.567
- X2    1   49.502 55.502
- X3    1   63.475 69.475

Step:  AIC= 52.72
 Y ~ X2 + X3

       Df Deviance    AIC
<none>      46.718 52.718
- X2    1   49.690 53.690
- X3    1   63.504 67.504

Call:  glm(formula = Y ~ X2 + X3, family = binomial, data = life)

Coefficients:
(Intercept)           X2           X3
     -1.642       -0.707        2.784
```

```
Degrees of Freedom: 49 Total (i.e. Null);  47 Residual
Null Deviance:      67.3
Residual Deviance: 46.72        AIC: 52.72
```

再用 summary() 函数显示模型的细节.

```
> summary(glm.new)
Call:
glm(formula = Y ~ X2 + X3, family = binomial, data = life)

Deviance Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-1.6849  -0.5950  -0.3033   0.7442   1.9073

Coefficients:
            Estimate Std. Error z value Pr(>|z|)
(Intercept)  -1.6419     0.6381  -2.573 0.010082 *
X2           -0.7070     0.4282  -1.651 0.098750 .
X3            2.7844     0.7797   3.571 0.000355 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for binomial family taken to be 1)

    Null deviance: 67.301  on 49  degrees of freedom
Residual deviance: 46.718  on 47  degrees of freedom
AIC: 52.718
```

从计算结果可以看出，所有参数通过了检验 ($\alpha = 0.1$). 此时的回归模型为

$$P = \frac{\exp(-1.6419 - 0.7070X_2 + 2.7844X_3)}{1 + \exp(-1.6419 - 0.7070X_2 + 2.7844X_3)}.$$

再作预测分析

```
> pre<-predict(glm.new, data.frame(X2=2,X3=0))
> p<-exp(pre)/(1+exp(pre)); p
```

```
[1] 0.04496518
> pre<-predict(glm.new, data.frame(X2=2,X3=1))
> p<-exp(pre)/(1+exp(pre)); p
[1] 0.4325522
```

因此巩固治疗比没有巩固治疗提高了 9.619 倍.

从上述例子可以看出, 对于广义线性模型 GLM, 同样可以作变量筛选, 模型修正等工作. 当然, 我们同样可作回归诊断.

```
> source("Reg_Diag.R"); Reg_Diag(glm.sol)
```

诊断的结果 (详细结果略) 还需要对第 5 号、 11 号、 20 号、 43 号、 46 号样本作进一步的研究.

大家还可以用 `influence.measures()` 作回归诊断, 其格式如下:

```
> influence.measures(glm.sol)
```

其诊断的结果是: 5 号、 46 号样本可能有问题.

### 6.6.4 其他分布族

对于广义线性模型, 除了上面讲到的 logistic 回归模型外, 还有其他的模型, 如 Poisson 模型等, 这里就不详细介绍了, 只简单介绍 R 软件中, `glm()` 关于这些模型的使用方法.

**1. Poisson 分布族和拟 Poisson 分布族**

Poisson 分布族模型和拟 Poisson 分布族模型的使用方法是

```
fm <- glm(formula, family = poisson(link = log),
          data = data.frame)
fm <- glm(formula, family = quasipoisson(link = log),
          data = data.frame)
```

其直观概念是:

$$\ln(E(Y)) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p.$$

也就是,

$$E(Y) = \exp\left(\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p\right).$$

Poisson 分布族模型和拟 Poisson 分布族模型唯一的差别就是, Poisson 分布族模型要求响应变量 $Y$ 是整数, 而拟 Poisson 分布族模型则没有这一要求.

看一个简单的例子,

```
> x <- rnorm(100)
> y <- rpois(100, exp(1+x))
> glm(y ~x, family=poisson)

Call:  glm(formula = y ~ x, family = poisson)

Coefficients:
(Intercept)            x
      0.997        1.010

Degrees of Freedom: 99 Total (i.e. Null);  98 Residual
Null Deviance:      535.7
Residual Deviance: 106.2        AIC: 366.2
```

第一句是生成 100 个标准正态分布的随机数, 并赋值给变量 $x$; 第二句是生成 100 个 Poisson 的随机数, 其中参数 $\lambda = \exp(1+x)$; 第四句是作广义线性回归模型, 其分布族是 Poisson, 连接函数为 `link=log`, 因为它是缺省值, 并不需要写在公式中.

关于 Poisson 分布族模型和拟 Poisson 分布族模型的连接函数还有 `identity`, `sqrt`.

**2. Gamma 分布族**

Poisson 分布族模型的使用方法是

```
fm <- glm(formula, family = gamma(link = inverse),
          data = data.frame)
```

其直观概念是:

$$\frac{1}{E(Y)} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p.$$

也就是,

$$E(Y) = \frac{1}{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p}.$$

例如，考虑拟合非线性回归

$$y = \frac{\theta_1 z_1}{z_2 - \theta_2} + \varepsilon,$$

将它写成另一种形式

$$y = \frac{1}{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2} + \varepsilon,$$

其中 $x_1 = z_2/z_1$, $x_2 = -1/x_1$, $\beta_1 = 1/\theta_1$ 和 $\beta_2 = \theta_2/\theta_1$. 假设我们已有适当的数据结构，我们可以用如下的方法作非线性回归

```
nlfit<-glm(y ~ x1 + x2 - 1,
       family = quasi(link=Gamma, data = data.frame)
```

**3. quasi 分布族**

quasi 分布族模型的使用方法是

```
fm <- glm(formula,
      family = quasi(link = link.fun, variance=var.val),
      data = data.frame)
```

其中 link.fun 表示连接函数, 有如下函数：logit, probit, cloglog, identity, inverse, log, 1/mu^2, sqrt, 而 var.val 表示方差值，有 constant, mu, mu^2, mu^3 等.

下面是 quasi 分布族模型的简单例子，有些方法的计算结果与前面介绍分布族的计算结果是相同的. 例如,

```
nlfit <- glm(y ~ x1 + x2 - 1,
         family = quasi(link=inverse, variance=constant),
             data = data.frame)
```

与 Gamma 分布族中介绍的例子是相同的.

```
x <- rnorm(100)
y <- rpois(100, exp(1+x))
glm(y ~x, family=quasi(var="mu", link="log"))
```

与 Poisson 分布族中介绍的例子是相同的. 当然， quasi 分布族模型还有其他的方式

```
glm(y ~x, family=quasi(var="mu^2", link="log"))
```

```
y <- rbinom(100, 1, plogis(x))
glm(y ~x, family=quasi(var="mu(1-mu)", link="logit"),
    start=c(0,1))
```

除上述分布族外，还有 quasibinomial 分布族、inverse.gaussian 族等. 这些分布族需要大家在使用中加深对它们的了解，这里就不一一介绍了.

## 6.7 非线性回归模型

前面各节讲到的模型主要是线性模型，它具有如下的形式

$$Y = \beta_0 + \beta_1 Z_1 + \beta_2 Z_2 + \cdots + \beta_k Z_k + \varepsilon, \tag{6.51}$$

其中 $Z_i$ 可以表示基本变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的任意函数. 虽然式 (6.51) 可以表示变量之间很广泛的关系 (如广义线性模型), 但在许多实际情况下，这种形式的模型是不合适的. 例如，当我们获得了关于响应和自变量之间的有用信息，而这种信息提供了真实模型的形式或提供了模型必须满足某种方程时，套用式 (6.51) 就不合适了. 一般地，当实际情况要求用非线性模型时，就应该尽可能地拟合这样的模型，而不拟合可能脱离实际的线性模型.

下面列举两个非线性模型的例子：

$$Y = \exp(\theta_1 + \theta_2 t^2 + \varepsilon), \tag{6.52}$$

$$Y = \frac{\theta_1}{\theta_1 - \theta_2}\left(\mathrm{e}^{-\theta_2 t} - \mathrm{e}^{-\theta_1 t}\right) + \varepsilon. \tag{6.53}$$

模型 (6.52) 和 (6.53) 都是以非线性的形式包含参数 $\theta_1$ 和 $\theta_2$, 在这种意义下，它们都是非线性模型，但它们有本质上的区别. 一个可以化成线性模型，如对于模型 (6.52) 两边取对数，得到

$$\ln Y = \theta_1 + \theta_2 t^2 + \varepsilon, \tag{6.54}$$

它具有模型 (6.51) 的形式，即参于参数是线性的. 类似于模型模 (6.52) 那样，可以通过适当的变换转达化为线性模型的非线性模型称为内在线性的. 然而，要想将模型 (6.53) 转化成关于参数是线性形式是不可能的. 这样的模型称为内在非线性的. 虽然很多时候可以变换这种模型使它容易拟合，但无论如何变换，它仍然是非线性的.

对内在线性模型，本节主要介绍多项式回归模型，而对于其他的内在线性模型就不作介绍了．本节的重点还是放在内在非线性模型上，尽管有些例子可能还是内在线性的，但我们还是用这些例子说明如何求解内在非线性的模型．

### 6.7.1 多项式回归模型

#### 1. 多项式回归

这里只介绍一元多项回归模型．设已收集到 $n$ 组样本 $(x_i, y_i)$, $i = 1, 2, \cdots, n$, 假定响应变量是自变量的 $k$ 次多项式，即

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_k x_i^k + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{6.55}$$

其中 $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$. 令

$$z_{i1} = x_i,\ z_{i2} = x_i^2,\ \cdots,\ z_{ik} = x_i^k,$$

则多项式回归模型 (6.55) 就可化成 $k$ 元线性回归

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 z_{i1} + \beta_2 z_{i2} + \cdots + \beta_k z_{ik} + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{6.56}$$

其中 $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

对于回归模型 (6.56) 可用前面讲过的线性回归模型进行计算．

**例 6.21** 某种合金钢中的主要成分是金属 $A$ 与 $B$, 经过试验和分析，发现这两种金属成分之和 $x$ 与膨胀系数 $y$ 之间有一定的数量关系，表 *6.15* 记录了一组试验数据，试用多项式回归来分析 $x$ 与 $y$ 之间的关系．

**表 6.15: 金属之和与膨胀系数的关系数据**

| $i$ | $x_i$ | $y_i$ | $i$ | $x_i$ | $y_i$ | $i$ | $x_i$ | $y_i$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 37.0 | 3.40 | 6 | 39.5 | 1.83 | 11 | 42.0 | 2.35 |
| 2 | 37.5 | 3.00 | 7 | 40.0 | 1.53 | 12 | 42.5 | 2.54 |
| 3 | 38.0 | 3.00 | 8 | 40.5 | 1.70 | 13 | 43.0 | 2.90 |
| 4 | 38.5 | 3.27 | 9 | 41.0 | 1.80 | | | |
| 5 | 39.0 | 2.10 | 10 | 41.5 | 1.90 | | | |

**解**: 先画出数据的散点图，如图 6.13 所示. 从图可见， $y$ 开始时随着 $x$ 的增加而降低，而当 $x$ 超过一定值后， $y$ 又随 $x$ 的增加而上升，因而可以假定 $y$ 与 $x$ 之间是二次多项式回归模型， 并假设各次试验误差是独立同分布的，并服

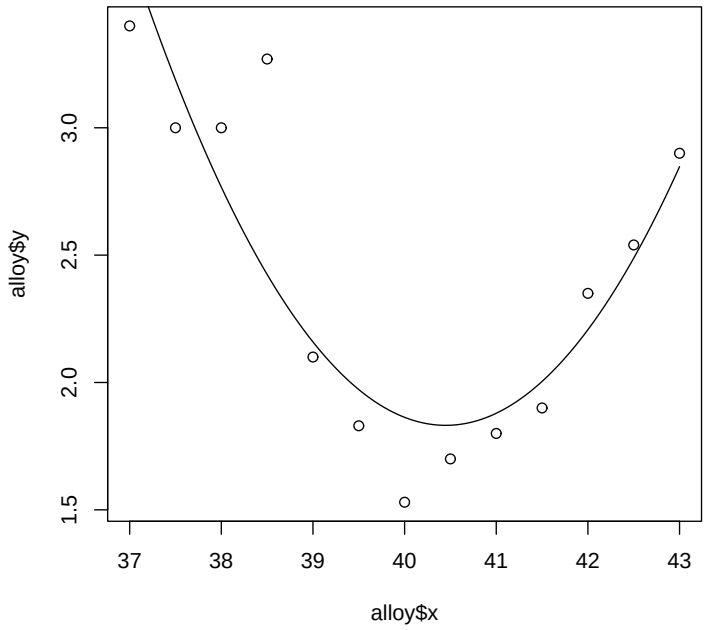



图 6.13: 金属之和与膨胀系数的散点图与拟合曲线

从正态分布 $N(0, \sigma^2)$.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n.$$

用 R 软件求解多项式回归 (程序名： exam0621.R)

```
> alloy<-data.frame(
     x=c(37.0, 37.5, 38.0, 38.5, 39.0, 39.5, 40.0,
         40.5, 41.0, 41.5, 42.0, 42.5, 43.0),
     y=c(3.40, 3.00, 3.00, 3.27, 2.10, 1.83, 1.53,
         1.70, 1.80, 1.90, 2.35, 2.54, 2.90)
  )
> lm.sol<-lm(y~1+x+I(x^2),data=alloy)
> summary(lm.sol)
```

```
Call:
lm(formula = y ~ 1 + x + I(x^2), data = alloy)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.33322 -0.14222 -0.07922  0.05275  0.84577

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 257.06961   47.00295   5.469 0.000273 ***
x           -12.62032    2.35377  -5.362 0.000318 ***
I(x^2)        0.15600    0.02942   5.303 0.000346 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.329 on 10 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.7843,     Adjusted R-squared: 0.7412
F-statistic: 18.18 on 2 and 10 DF,  p-value: 0.0004668
```

因此，得到 $y$ 关于 $x$ 的二次回归方程：

$$\hat{y} = 257.06961 - 12.62032x + 0.15600x^2.$$

并且方程通过 T 检验和 F 检验. 其拟合曲线见图 6.13 所示. 相应的绘图命令如下：

```
> xfit<-seq(37,43,len=200)
> yfit<-predict(lm.sol, data.frame(x=xfit))
> plot(alloy$x,alloy$y)
> lines(xfit, yfit)
```

**2. 正交多项式回归**

从前面的讨论可知，多项式回归本质上并不存在困难，但它存在的缺点是：当多项式的次数 $k$ 较大时， $x, x^2, \cdots, x^k$ 接近线性相关. 从计算角度讲，这样会给正则方程的求解带来困难，产生较大的计算误差. 从统计角度讲，由 $x, x^2,$

$\cdots$, $x^k$ 构成的设计矩阵 $X$ 的各列接近相关，矩阵 $(X^TX)^{-1}$ 的值会变得很大，使得系数 $\beta$ 的估计值的方差会变得很大. 因此，为克服这些缺点，应采用正交多项式回归.

多项式回归模型 (6.55), 考虑正交多项式模型

$$y_i = \beta_0 + \beta_1\varphi_1(x_i) + \beta_2\varphi_2(x_i) + \cdots + \beta_k\varphi_k(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{6.57}$$

其中 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_k(x)$ 是正交的，即满足

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} \varphi_j(x_i) = 0, & j = 1, 2, \cdots, k, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} \varphi_j(x_i)\varphi_q(x_i) = 0, & j \neq q = 1, 2, \cdots, k. \end{cases} \tag{6.58}$$

关于正交多项式的计算公式这里就不推导了，这里只给出 R 软件的计算正交多项函数 `poly()` 的使用方法，其使用格式为

```
poly(x, ..., degree = 1, coefs = NULL)
```

其中 `x` 是数值向量，`degree` 是正交多项式的阶数, 并且要求 `degree<length(x)`. 该函数的返回值是一矩阵，矩阵的各列是满足式 (6.58) 的正交向量.

对于例 6.21 的数据作二次正交式

```
> poly(alloy$x, degree = 2)
                   1           2
 [1,] -4.447496e-01  0.49168917
 [2,] -3.706247e-01  0.24584459
 [3,] -2.964997e-01  0.04469902
 [4,] -2.223748e-01 -0.11174754
 [5,] -1.482499e-01 -0.22349508
 [6,] -7.412493e-02 -0.29054360
 [7,] -1.645904e-17 -0.31289311
 [8,]  7.412493e-02 -0.29054360
 [9,]  1.482499e-01 -0.22349508
[10,]  2.223748e-01 -0.11174754
[11,]  2.964997e-01  0.04469902
[12,]  3.706247e-01  0.24584459
[13,]  4.447496e-01  0.49168917
```

其中第一列是 $\varphi_1$, 第二列是 $\varphi_2$, 且满足式 (6.58). 进一步，它们还是单位向量.

**例 6.22** *用正交多项式回归计算例 6.21 中的数据.*

**解:**

```
> lm.pol<-lm(y~1+poly(x,2),data=alloy)
> summary(lm.pol)
Call:
lm(formula = y ~ 1 + poly(x, 2), data = alloy)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.33322 -0.14222 -0.07922  0.05275  0.84577

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  2.40923    0.09126  26.400 1.40e-10 ***
poly(x, 2)1 -0.94435    0.32904  -2.870 0.016669 *
poly(x, 2)2  1.74505    0.32904   5.303 0.000346 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.329 on 10 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.7843,     Adjusted R-squared: 0.7412
F-statistic: 18.18 on 2 and 10 DF,  p-value: 0.0004668
```

因此，得到 $y$ 关于 $x$ 的二次回归方程:

$$\hat{y} = 2.40923 - 0.94435\varphi_1 + 1.74505\varphi_2.$$

相应的预测计算函数为

```
> xfit<-seq(37,43,len=200)
> yfit<-predict(lm.pol, data.frame(x=xfit))
```

### 6.7.2 (内在) 非线性回归模型

#### 1. 非线性最小二乘与极大似然模型

设非线性回归模型具有如下形式

$$Y = f(X_1, X_2, \cdots, X_p, \theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_k) + \varepsilon, \tag{6.59}$$

其中 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

设 $(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip}, y_i),\ i = 1, 2, \cdots, n$ 是 $(X_1, X_2, \cdots, X_p, Y)$ 的 $n$ 次独立观测值，则多元线性模型 (6.59) 可表示为

$$y_i = f(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip}, \theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_k) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \tag{6.60}$$

其中 $\varepsilon_i \in N(0, \sigma^2)$, 且独立同分布.

为方便起见，将式 (6.60) 简写成

$$y_i = f(X^{(i)}, \theta) + \varepsilon_i, \tag{6.61}$$

其中 $X^{(i)} = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})^T$, $\theta = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_k)^T$.

为求参数 $\theta$ 的估计值，求解最小二乘问题

$$\min \quad Q(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f(X^{(i)}, \theta)\right)^2. \tag{6.62}$$

其解 $\widehat{\theta}$ 作为参数 $\theta$ 的估计值.

可以证明，如果 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I)$, 则 $\theta$ 的最小二乘估计也是 $\theta$ 的极大似然估计. 这是由于该问题的似然函数可写成

$$L(\theta, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}\,\sigma^n} \exp\left(-Q(\theta)/2\sigma^2\right).$$

因而，如果 $\sigma^2$ 已知，关于 $\theta$ 极大似然估计等价于求解问题 (6.62).

**2. 非线性模型的参数估计 —nls() 函数的使用**

关于参数 $\theta$ 的估计值 $\widehat{\theta}$ 的计算，实质上涉及无约束问题的求解问题，此类问题这里就不作介绍了，其原因有二. 其一，求解问题 (6.62) 属于最优化方法，与统计问题相差较远；其二， R 软件提供了非常方便的求解优化问题的函数，使我们可以方便地得到其估计值.

R 软件中的 `nls()` 函数可以求解非线性最小二乘问题 (6.62), 其使用格式为

```
nls(formula, data = parent.frame(), start,
    control = nls.control(),
    algorithm = "default", trace = FALSE, subset,
    weights, na.action, model = FALSE)
```

其中 formula 是包括变量和参数的非线性拟合公式. data 是可选择的数据框. start 是初始点, 用列表 (list) 形式给出. 其他参数见在线帮助.

**例 6.23** 在化学工业的可靠性研究中, 对象是某种产品 $A$. 在制造时单位产品中必须含有 0.50 的有效氯气. 已知产品中的氯气随着时间增加而减少. 在产品到达用户之前的最初 *8* 周内, 氯气含量衰减到 0.49. 但由于随后出现了许多无法控制的因素 *(*如库房环境、处理设备等*)*, 因而在后 *8* 周理论的计算对有效氯气的进一步预报是不可靠的. 为了有利于管理需要决定 *(1)* 库存产品何时应该报废? *(2)* 何时应该更换存货? 在一段时间中观测若干盒产品得到的数据如表 *6.16* 所示. 假定非线性模型

$$Y = \alpha + (0.49 - \alpha)\exp(-\beta(X - 8)) + \varepsilon \tag{6.63}$$

能解释当 $X \geq 8$ 时数据中出现的变差. 试用非线性最小二乘方法分析.

**解**: 输入数据, 用 nls() 求解 (程序名: exam0623.R)

```
> cl<-data.frame(
    X=c(rep(2*4:21, c(2, 4, 4, 3, 3, 2, 3, 3, 3, 3, 2,
        3, 2, 1, 2, 2, 1, 1))),
    Y=c(0.49, 0.49, 0.48, 0.47, 0.48, 0.47, 0.46, 0.46,
        0.45, 0.43, 0.45, 0.43, 0.43, 0.44, 0.43, 0.43,
        0.46, 0.45, 0.42, 0.42, 0.43, 0.41, 0.41, 0.40,
        0.42, 0.40, 0.40, 0.41, 0.40, 0.41, 0.41, 0.40,
        0.40, 0.40, 0.38, 0.41, 0.40, 0.40, 0.41, 0.38,
        0.40, 0.40, 0.39, 0.39)
  )
> nls.sol<-nls(Y~a+(0.49-a)*exp(-b*(X-8)), data=cl,
               start = list( a= 0.1, b = 0.01 ))
> nls.sum<-summary(nls.sol); nls.sum
Formula: Y ~ a + (0.49 - a) * exp(-b * (X - 8))
```

**表 6.16: 单位产品中有效氯气的百分数**

| 序号 | 生产后的时间 | 有效氯气 | 序号 | 生产后的时间 | 有效氯气 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 8 | 0.49 | 23 | 22 | 0.41 |
| 2 | 8 | 0.49 | 24 | 22 | 0.40 |
| 3 | 10 | 0.48 | 25 | 24 | 0.42 |
| 4 | 10 | 0.47 | 26 | 24 | 0.40 |
| 5 | 10 | 0.48 | 27 | 24 | 0.40 |
| 6 | 10 | 0.47 | 28 | 26 | 0.41 |
| 7 | 12 | 0.46 | 29 | 26 | 0.40 |
| 8 | 12 | 0.46 | 30 | 26 | 0.41 |
| 9 | 12 | 0.45 | 31 | 28 | 0.41 |
| 10 | 12 | 0.43 | 32 | 28 | 0.40 |
| 11 | 14 | 0.45 | 33 | 30 | 0.40 |
| 12 | 14 | 0.43 | 34 | 30 | 0.40 |
| 13 | 14 | 0.43 | 35 | 30 | 0.38 |
| 14 | 16 | 0.44 | 36 | 32 | 0.41 |
| 15 | 16 | 0.43 | 37 | 32 | 0.40 |
| 16 | 16 | 0.43 | 38 | 34 | 0.40 |
| 17 | 18 | 0.46 | 39 | 36 | 0.41 |
| 18 | 18 | 0.45 | 40 | 36 | 0.38 |
| 19 | 20 | 0.42 | 41 | 38 | 0.40 |
| 20 | 20 | 0.42 | 42 | 38 | 0.40 |
| 21 | 20 | 0.43 | 43 | 40 | 0.39 |
| 22 | 22 | 0.41 | 44 | 42 | 0.39 |

```
Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
a 0.390140   0.005045  77.333  < 2e-16 ***
b 0.101633   0.013360   7.607 1.99e-09 ***
```

```
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.01091 on 42 degrees of freedom

Correlation of Parameter Estimates:
       a
b 0.8879
```

因此，模型为

$$\hat{Y} = 0.39 + (0.49 - 0.39)\exp(-0.10(X - 8)).$$

下面画出数据的散点图和相应的拟合曲线， R 软件命令如下，其图形如图 6.14 所示.

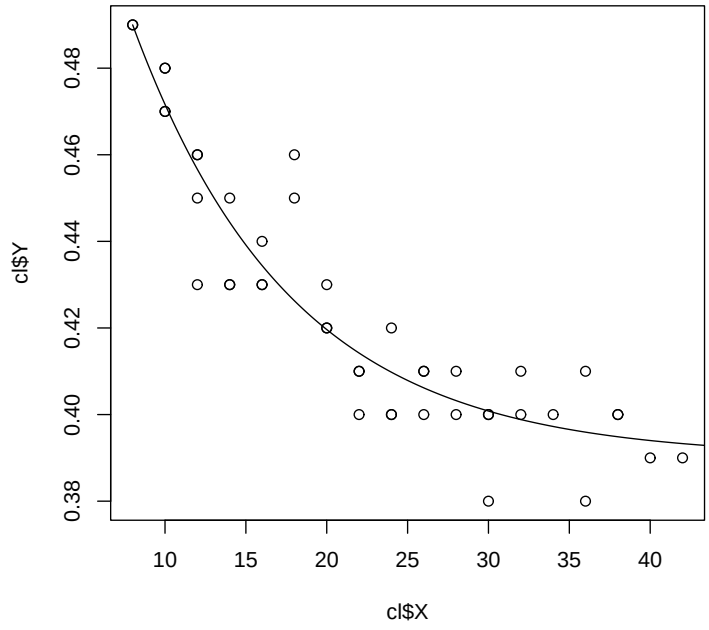



图 6.14: 氯气数据的拟合曲线与观测点

```
> xfit<-seq(8,44,len=200)
> yfit<-predict(nls.sol, data.frame(X=xfit))
> plot(cl$X, cl$Y); lines(xfit,yfit)
```

下面讨论对于非线性回归模型其他参数估计的计算.

非线性回归参数的推断要求对误差项方差 $\sigma^2$ 作出估计，这个估计值与线性回归是一样的

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n-k} = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - f(X^{(i)}, \hat{\theta})\right)^2}{n-k} = \frac{Q(\hat{\theta})}{n-k}. \tag{6.64}$$

其中 $\hat{\theta}$ 是参数 $\theta$ 估计值. 对非线性回归来说， $\hat{\sigma}^2$ 不是 $\sigma^2$ 的无偏估计量，但是当样本量很大时，它的偏差很小.

在 R 软件中，不必用式 (6.64) 计算 $\sigma$ 的估计值 $\hat{\sigma}$, 因为 R 已经提供了它的值 (`summary()$sigma`), 例如，对于例 6.23,

```
> nls.sum$sigma
[1] 0.01091273
```

给出了 $\hat{\sigma} = 0.01091273$.

当模型的误差项满足 $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, 而样本量 $n$ 也充分大时，则 $\hat{\theta}$ 的样本分布近似正态，且

$$E(\hat{\theta}) \approx \theta. \tag{6.65}$$

这样，当样本量充分大时，非线性回归的最小二乘估计量 $\hat{\theta}$ 是近似正态分布的，而且是无偏的. 回归系数近似协方差矩阵的估计值是

$$\mathrm{Var}(\hat{\theta}) = \hat{\sigma}^2 (D^T D)^{-1}. \tag{6.66}$$

其中 $D$ 是根据最后最小二乘估计值 $\hat{\theta}$ 计算得到的 Jacobi 矩阵. 与线性回归的估计协方差矩阵具有完全相同的形式， $D$ 充当了 $X$ 矩阵的角色.

例如，对于例 6.23,

$$f(X, \alpha, \beta) = \alpha + (0.49 - \alpha)\exp(-\beta(X - 8)),$$

求偏导数得到

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha} = 1 - \exp(-\beta(X-8)), \tag{6.67}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \beta} = -(0.49 - \alpha)(X-8)\exp(-\beta(X-8)). \tag{6.68}$$

下面是计算回归系数近似协方差矩阵的过程.

(1) 按照公式 (6.67)–(6.68), 编写计算偏导数函数

```
> fn<-function(a, b, X){
    f1 <- 1-exp(-b*(X-8))
    f2 <- -(0.49-a)*(X-8)*exp(-b*(X-8))
    cbind(f1,f2)
  }
```

函数的返回值是矩阵.

(2) 代入参数和变量数据 $X$, 计算偏导数在 $X$ 处的值

```
> D<-fn(nls.sum$parameters[1,1],
        nls.sum$parameters[2,1], cl$X)
```

得到的数据是由偏导数构成的矩阵.

(3) 按照式 (6.66) 计算出 $\mathrm{Var}(\hat{\theta})$

```
> theta.var<-nls.sum$sigma^2*solve(t(D)%*%D)
```

(4) 得到相应的计算结果

```
> theta.var
              f1           f2
f1 2.545130e-05 5.984318e-05
f2 5.984318e-05 1.784969e-04
```

有了回归系数的协方差矩阵, 就可以计算参数 $\alpha, \beta$ 估计值 $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ 的标准差

$$\begin{aligned} \mathrm{sd}(\hat{\alpha}) &= \texttt{sqrt(theta.var[1,1])} = 0.005044928, \\ \mathrm{sd}(\hat{\beta}) &= \texttt{sqrt(theta.var[2,2])} = 0.01336027. \end{aligned}$$

事实上, 我们不必计算参数的标准差, 在计算非线性回归时, 此参数已计算出来, 它们放在 `nls.sum$parameters[,2]` 中,

```
> nls.sum$parameters[,2]
          a           b
0.005044928 0.013360272
```

当非线性回归模型 (6.61) 的误差项是独立正态分布时, 如果样本量充分大, 则成立下述近似结果;

$$\frac{\hat{\theta}_j - \theta_j}{\mathrm{sd}(\hat{\theta}_j)} \sim t(n-k), \quad j = 1, 2, \cdots, k. \tag{6.69}$$

其中 $\mathrm{sd}(\hat{\theta}_j)$ 表示 $\hat{\theta}_j$ 的标准差. 因此, 对任意单个的 $\theta_j$, 近似 $1-\alpha$ 置信区间与通常是一样

$$[\theta_j - t_{\alpha/2}(n-k)\mathrm{sd}(\hat{\theta}_j),\ \theta_j + t_{\alpha/2}(n-k)\mathrm{sd}(\hat{\theta}_j)]. \tag{6.70}$$

下面给出计算参数区间估计的程序, 程序名: paramet.int.R.

```
paramet.int<-function(fm, alpha=0.05){
   paramet <- fm$parameters[,1]
   df <- nls.sum$df[2]
   left <- paramet-nls.sum$parameters[,2]
   right <- paramet+nls.sum$parameters[,2]
   rowname <- dimnames(nls.sum$parameters)[[1]]
   colname <- c("Estimate", "Left", "Right")
   matrix(c(paramet,left, right), ncol=3,
          dimnames = list(rowname, colname ))
}
```

其中 fm 是由 nls() 函数得到的计算结果. alpha 是显著性水平. 函数的返回值是一矩阵, 其值有参数的估计值和相应的区间估计.

用函数 paramet.int() 计算例 6.23 中参数的区间估计.

```
> source("paramet.int.R"); paramet.int(nls.sol)
   Estimate       Left     Right
a 0.3901401 0.38509514 0.3951850
b 0.1016328 0.08827257 0.1149931
```

**3. 非线性模型的参数估计 —nlm() 函数的使用**

在 R 软件中, 也可用函数 nlm() 求解非线性最小二乘问题 (6.62). nlm() 使用格式

```
nlm(f, p, hessian = FALSE,
    typsize=rep(1, length(p)), fscale=1,
    print.level = 0, ndigit=12, gradtol = 1e-6,
    stepmax = max(1000 * sqrt(sum((p/typsize)^2)), 1000),
    steptol = 1e-6, iterlim = 100,
    check.analyticals = TRUE, ...)
```

其中 f 是求极小的目标函数，如果 f 的属性包含梯度 ('gradient') 或梯度 ('gradient') 和 Hesse 矩阵 ('hessian'), 则在算法求极小时会直接用到梯度或 Hesse 矩阵；否则用数值的方法求导数. p 是参数 (即模型 (6.61) 中的 $\theta$) 的初值. hessian 是逻辑变量，当 hessian=TRUE 时，其结果给出相应的 Hesse 矩阵；否则 (FALSE 缺省值), 将不计算 Hesse 矩阵. 其余参数的意义见在线帮助.

这个函数采用 Newton 型算法求极小，函数的返回值是一个列表，包含极小值，极小点的估计值，极小点处的梯度、 Hesse 矩阵，以及求解所需的迭代次数等.

在第四章的 4.1.2 节介绍过 nlm() 函数的使用方法, 下面再进一步介绍 nlm() 的使用方法，在程序中给出目标函数的梯度.

**例 6.24** *用函数 nlm() 作例 6.23 的非线性最小二乘估计.*

**解**: 写出非线性最小二乘问题的目标函数, 其中函数包含梯度 ('gradient') 属性. 函数名： fn.R

```
fn<-function(p, X, Y){
    f <- Y-p[1]-(0.49-p[1])*exp(-p[2]*(X-8))
    res<-sum(f^2)
    f1<- -1+exp(-p[2]*(X-8))
    f2<- (0.49-p[1])*exp(-p[2]*(X-8))*(X-8)
    J<-cbind(f1,f2)
    attr(res, "gradient") <- 2*t(J)%*%f
    res
}
```

在函数中， f 是残差向量， res 是残差平方和. f1 是 f 对 $p_1$ 求导数得到的向量， f2 是 f 对 $p_2$ 求导数得到的向量. J 是 Jacobi 矩阵.

再用 nlm() 函数求解

```
> out<-nlm(fn, p=c(0.1, 0.01), X=cl$X, Y=cl$Y, hessian=TRUE); out
$minimum
[1] 0.00500168
$estimate
[1] 0.3901400 0.1016327
$gradient
```

```
[1]  7.954390e-07 -3.261297e-07
$hessian
          [,1]       [,2]
[1,]  44.20335 -14.799291
[2,] -14.79929   6.248565
$code
[1] 1
$iterations
[1] 33
```

在上述计算结果中， minimum 是目标函数在最优点处的最小值，也就是残差的平方和； estimate 是参数的估计值，即 $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$; gradient 是目标函数在最优点处的梯度值； hessian 是目标函数在最优点处的 Hesse 矩阵，它可以作为 $D^TD$ 的近似值； iterations 是迭代次数.

由上述结果可以很容易地计算 $\hat{\sigma}^2$, 和 $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ 方差阵

```
> n<-length(X); k<-2
> sigma2<-out$minimum/(n-k); sigma2
[1] 0.0001190876
> theta.var<-sigma2*solve(out$hessian); theta.var
              [,1]          [,2]
[1,] 1.301183e-05 3.081760e-05
[2,] 3.081760e-05 9.204775e-05
```

# 习题六

**6.1** 为估计山上积雪融化后对下游灌溉的影响，在山上建立一个观测站，测量最大积雪深度 $X$ 与当年灌溉面积 $Y$, 测得连续 *10* 年的数据如表 *6.17* 下所示.

*(1)* 试画相应的散点图，判断 $Y$ 与 $X$ 是否有线性关系；

*(2)* 求出 $Y$ 关于 $X$ 的一元线性回归方程；

*(3)* 对方程作显著性检验；

*(4)* 现测得今年的数据是 $X = 7$ 米，给出今年灌溉面积的预测值和相应的区间估计 $(\alpha = 0.05)$.

**表 6.17: 10 年中最大积雪深度与当年灌溉面积的数据**

| 序号 | $X$(米) | $Y$(公倾) | 序号 | $X$(米) | $Y$(公倾) |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 5.1 | 1907 | 6 | 7.8 | 3000 |
| 2 | 3.5 | 1287 | 7 | 4.5 | 1947 |
| 3 | 7.1 | 2700 | 8 | 5.6 | 2273 |
| 4 | 6.2 | 2373 | 9 | 8.0 | 3113 |
| 5 | 8.8 | 3260 | 10 | 6.4 | 2493 |

**6.2** 研究同一地区土壤所含可给态磷的情况，得到 *18* 组数据如表 *6.18* 所示. 表中 $X_1$ 为土壤内所含无机磷浓度， $X_2$ 为土壤内溶于 $K_2CO_3$ 溶液并受溴化物水解的有机磷， $X_3$ 为土壤内溶于 $K_2CO_3$ 溶液但不溶于溴化物水解的有机磷.

**表 6.18: 某地区土壤所含可给态磷的情况**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.4 | 52 | 158 | 64 | 10 | 12.6 | 58 | 112 | 51 |
| 2 | 0.4 | 23 | 163 | 60 | 11 | 10.9 | 37 | 111 | 76 |
| 3 | 3.1 | 19 | 37 | 71 | 12 | 23.1 | 46 | 114 | 96 |
| 4 | 0.6 | 34 | 157 | 61 | 13 | 23.1 | 50 | 134 | 77 |
| 5 | 4.7 | 24 | 59 | 54 | 14 | 21.6 | 44 | 73 | 93 |
| 6 | 1.7 | 65 | 123 | 77 | 15 | 23.1 | 56 | 168 | 95 |
| 7 | 9.4 | 44 | 46 | 81 | 16 | 1.9 | 36 | 143 | 54 |
| 8 | 10.1 | 31 | 117 | 93 | 17 | 26.8 | 58 | 202 | 168 |
| 9 | 11.6 | 29 | 173 | 93 | 18 | 29.9 | 51 | 124 | 99 |

*(1)* 求出 $Y$ 关于 $X$ 的多元线性回归方程;

*(2)* 对方程作显著性检验;

*(3)* 对变量作逐步回归分析。

**6.3** 已知如下数据，由表 *6.19* 所示.

*(1)* 画出数据的散点图，求回归直线 $y = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$, 同时将回归直线也画在散点图上;

*(2)* 分析 $T$ 检验和 $F$ 检验是否通过;

**表 6.19: 数据表**

| 序号 | $X$ | $Y$ | 序号 | $X$ | $Y$ | 序号 | $X$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1 | 0.6 | 11 | 4 | 3.5 | 21 | 8 | 17.5 |
| 2 | 1 | 1.6 | 12 | 4 | 4.1 | 22 | 8 | 13.4 |
| 3 | 1 | 0.5 | 13 | 4 | 5.1 | 23 | 8 | 4.5 |
| 4 | 1 | 1.2 | 14 | 5 | 5.7 | 24 | 9 | 30.4 |
| 5 | 2 | 2.0 | 15 | 6 | 3.4 | 25 | 11 | 12.4 |
| 6 | 2 | 1.3 | 16 | 6 | 9.7 | 26 | 12 | 13.4 |
| 7 | 2 | 2.5 | 17 | 6 | 8.6 | 27 | 12 | 26.2 |
| 8 | 3 | 2.2 | 18 | 7 | 4.0 | 28 | 12 | 7.4 |
| 9 | 3 | 2.4 | 19 | 7 | 5.5 | | | |
| 10 | 3 | 1.2 | 20 | 7 | 10.5 | | | |

*(3)* 画出残差 *(*普通残差和标准化残差*)* 与预测值的残差图，分析误差是否是等方差的；

*(4)* 修正模型. 对响应变量 $Y$ 作开方，再完成 *(1)–(3)* 的工作.

**6.4** 对牙膏销售数据 *(*数据表见例 *6.9)* 得到的线性模型作回归诊断，分析哪些样本点需要作进一步的研究？哪些样本点需要在回归计算中删去，如果有，删去再作线性回归模型的计算.

**6.5** 诊断水泥数据 *(*数据见例 *6.10)* 是否存在多重共线性, 分析例 *6.10* 中 `step()` 函数去掉的变量是否合理.

**6.6** 为研究一些因素 *(*如用抗生素、有无危险因子和事先是否有计划*)* 对 "剖腹产后是否有感染" 的影响，表 *6.20* 给出的是某医院剖腹产后的数据, 试用 *logistic*

**表 6.20: 某医院进行剖腹产后的数据**

| | | 事先有计划 | | 临时决定 | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | 有感染 | 无感染 | 有感染 | 无感染 |
| 用抗 | 有危险因子 | 1 | 17 | 11 | 87 |
| 生素 | 没　有 | 0 | 2 | 0 | 0 |
| 不 | 有危险因子 | 28 | 30 | 23 | 3 |
| 用 | 没　有 | 8 | 32 | 0 | 9 |

回归模型对这些数据数据进行研究，分析感染与这些因素的关系.

**6.7** 表 *6.21* 是 *40* 名肺癌病人的生存资料，其中 $X_1$ 表示生活行动能力评分

**表 6.21: 40 名肺癌病人的生存资料**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $X_5$ | $Y$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $X_5$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 70 | 64 | 5 | 1 | 1 | 1 | 21 | 60 | 37 | 13 | 1 | 1 | 0 |
| 2 | 60 | 63 | 9 | 1 | 1 | 0 | 22 | 90 | 54 | 12 | 1 | 0 | 1 |
| 3 | 70 | 65 | 11 | 1 | 1 | 0 | 23 | 50 | 52 | 8 | 1 | 0 | 1 |
| 4 | 40 | 69 | 10 | 1 | 1 | 0 | 24 | 70 | 50 | 7 | 1 | 0 | 1 |
| 5 | 40 | 63 | 58 | 1 | 1 | 0 | 25 | 20 | 65 | 21 | 1 | 0 | 0 |
| 6 | 70 | 48 | 9 | 1 | 1 | 0 | 26 | 80 | 52 | 28 | 1 | 0 | 1 |
| 7 | 70 | 48 | 11 | 1 | 1 | 0 | 27 | 60 | 70 | 13 | 1 | 0 | 0 |
| 8 | 80 | 63 | 4 | 2 | 1 | 0 | 28 | 50 | 40 | 13 | 1 | 0 | 0 |
| 9 | 60 | 63 | 14 | 2 | 1 | 0 | 29 | 70 | 36 | 22 | 2 | 0 | 0 |
| 10 | 30 | 53 | 4 | 2 | 1 | 0 | 30 | 40 | 44 | 36 | 2 | 0 | 0 |
| 11 | 80 | 43 | 12 | 2 | 1 | 0 | 31 | 30 | 54 | 9 | 2 | 0 | 0 |
| 12 | 40 | 55 | 2 | 2 | 1 | 0 | 32 | 30 | 59 | 87 | 2 | 0 | 0 |
| 13 | 60 | 66 | 25 | 2 | 1 | 1 | 33 | 40 | 69 | 5 | 3 | 0 | 0 |
| 14 | 40 | 67 | 23 | 2 | 1 | 0 | 34 | 60 | 50 | 22 | 3 | 0 | 0 |
| 15 | 20 | 61 | 19 | 3 | 1 | 0 | 35 | 80 | 62 | 4 | 3 | 0 | 0 |
| 16 | 50 | 63 | 4 | 3 | 1 | 0 | 36 | 70 | 68 | 15 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | 50 | 66 | 16 | 0 | 1 | 0 | 37 | 30 | 39 | 4 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 40 | 68 | 12 | 0 | 1 | 0 | 38 | 60 | 49 | 11 | 0 | 0 | 0 |
| 19 | 80 | 41 | 12 | 0 | 1 | 1 | 39 | 80 | 64 | 10 | 0 | 0 | 1 |
| 20 | 70 | 53 | 8 | 0 | 1 | 1 | 40 | 70 | 67 | 18 | 0 | 0 | 1 |

$(1 \sim 100)$*;* $X_2$ 表示病人的年龄； $X_3$ 表示由诊断到直入研究时间 *(*月*);* $X_4$ 表示肿瘤类型 *(“0”* 是磷癌， *“1”* 是小型细胞癌， *“2”* 是腺癌， *“3”* 是大型细胞癌*);* $X_5$ 表示两种化疗方法 *(“1”* 是常规， *“0”* 是试验新法*);* $Y$ 表示病人的生存时间 *(“0”* 是生存时间短，即生存时间小于 *200* 天； *“1”* 表示生存时间长，即生存时间大于或等于 *200* 天*).*

*(1)* 建立 $P(Y=1)$ 对 $X_1 \sim X_5$ 的 *logistic* 回归模型，$X_1 \sim X_5$ 对 $P(Y=1)$ 的综合影响是否显著？哪些变量是主要的影响因素，显著水平如何？计算各病人生存时间大于等 *200* 天的概率估计值.

*(2)* 用逐步回归法选取自变量，结果如何？在所选模型下，计算病人生存时间大于等于 *200* 天的概率估计值，并将计算结果与 *(1)* 中模型作比较，差异如何？哪一个模型更合理.

**6.8** 一位饮食公司的分析人员想调查自助餐馆中的自动咖啡售货机数量与咖啡销售量之间的关系，她选择了 *14* 家餐馆来进行实验. 这 *14* 家餐馆在营业额、顾客类型和地理位置方面都是相近的. 放在试验餐馆的自动售货机数量从 *0(*这里咖啡由服务员端来*)* 到 *6* 不等，并且是随机分配到每个餐馆的. 表 *6.22* 所示的是关于试验结果的数据.

**表 6.22: 自动咖啡售货机数量与咖啡销售量数据**

| 餐馆 | 售货机数量 | 咖啡销售量 | 餐馆 | 售货机数量 | 咖啡销售量 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0 | 508.1 | 8 | 3 | 697.5 |
| 2 | 0 | 498.4 | 9 | 4 | 755.3 |
| 3 | 1 | 568.2 | 10 | 4 | 758.9 |
| 4 | 1 | 577.3 | 11 | 5 | 787.6 |
| 5 | 2 | 651.7 | 12 | 5 | 792.1 |
| 6 | 2 | 657.0 | 13 | 6 | 841.4 |
| 7 | 3 | 713.4 | 14 | 6 | 831.8 |

*(1)* 作线性回归模型;

*(2)* 作多项式回归模型;

*(3)* 画出数据的散点图和拟合曲线.

**6.9** 一位医院管理人员想建立一个回归模型，对重伤病人出院后的长期恢复情况进行预测. 自变量是病人住院的天数 *(X),* 应变量是病人出院后长期恢复的预后指数 *(Y)*，指数的数值越大表示预后结局越好. 为此，研究了 *15* 个病人的数据，这些数据列在表 *6.23* 中. 根据经验表明，病人住院的天数 *(X)* 和预后指数 *(Y)* 服从非线性模型

$$Y_i = \theta_0 \exp(\theta_1 X_i) + \varepsilon_i, \qquad i = 1, 2, \cdots, 15.$$

*(1)* 用内在线性模型方法计算其各种参的估计值;

*(2)* 用非线性方法 *(*`nls()` *函数和* `nlm()` *函数)* 计算其各种参的估计值.

**表 6.23: 关于重伤病人的数据**

| 病号 | 住院天数 $(X)$ | 预后指数 $(Y)$ | 病号 | 住院天数 $(X)$ | 预后指数 $(Y)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 54 | 9 | 34 | 18 |
| 2 | 5 | 50 | 10 | 38 | 13 |
| 3 | 7 | 45 | 11 | 45 | 8 |
| 4 | 10 | 37 | 12 | 52 | 11 |
| 5 | 14 | 35 | 13 | 53 | 8 |
| 6 | 19 | 25 | 14 | 60 | 4 |
| 7 | 26 | 20 | 15 | 65 | 6 |
| 8 | 31 | 16 | | | |

# 第七章　方差分析

在实际工作中，影响一件事的因素是很多的，人们总是希望通过各种试验来观察各种因素对试验结果的影响. 例如：不同的生产厂家，不同的原材料，不同的操作规程，及不同的技术指标等对产品的质量、性能都会有影响，然而不同因素的影响大小不等. 方差分析是研究一种或多种因素的变化对试验结果的观测值是否有显著影响. 从而找出较优的试验条件或生产条件的一种常用数理统计方法.

人们在试验中所考察到的数量指标如产量、性能等称为观测值. 影响观测值的条件称为因素. 因素的不同状态称为水平，一个因素可以采用多个水平. 在一项试验中，可以得出一系列不同的观测值. 引起观测值不同的原因是多方面的，有的是处理方式不同或条件不同引起的，称作因素效应 (或处理效应、条件变异). 有的是试验过程中偶然性因素的干扰或观测误差所导致的，称作试验误差. 方差分析的主要工作是将测量数据的总变异按照变异原因的不同分解为因素效应和试验误差，并对其作出数量分析，比较各种原因在总变异中所占的重要程度，作为统计推断的依据，由此确定进一步的工作方向.

## 7.1　单因素方差分析

下面从一个实例出发说明单因素方差分析的基本思想.

**例 7.1** 利用四种不同配方的材料 $A_1$ 、 $A_2$ 、 $A_3$ 、 $A_4$ 生产出来的元件，测得其使用寿命如表 *7.1* 所示. 问：四种不同配方下元件的使用寿命有无显著的差异？

**表 7.1: 元件寿命数据**

| 材料 | 使用寿命 | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 1600 | 1610 | 1650 | 1680 | 1700 | 1700 | 1780 | |
| $A_2$ | 1500 | 1640 | 1400 | 1700 | 1750 | | | |
| $A_3$ | 1640 | 1550 | 1600 | 1620 | 1640 | 1600 | 1740 | 1800 |
| $A_4$ | 1510 | 1520 | 1530 | 1570 | 1640 | 1600 | | |

在此例中材料的配方是影响元件的使用寿命的因素，四种不同的配方表明因素处于四种状态，称为四种水平，这样的试验称为单因素四水平试验. 由表中数据可知，不仅不同配方的材料生产出的元件使用寿命不同，而且同一配方下元件的使用寿命也不一样. 分析数据波动的原因主要来自两方面.

其一，在同样的配方下做若干次寿命试验，试验条件大体相同，因此，数据的波动是由于其它随机因素的干扰所引起的. 设想在同一配方下元件的使用寿命应该有一个理论上的均值，而实测寿命数据与均值的偏离即为随机误差，此误差服从正态分布.

其二，在不同的配方下，使用寿命有不同的均值，它导致不同组的元件间寿命数据的不同.

对于一般情况，设试验只有一个因素 $A$ 在变化，其它因素都不变. $A$ 有 $r$ 个水平 $A_1, A_2, \cdots, A_r$, 在水平 $A_i$ 下进行 $n_i$ 次独立观测，得到试验指标列表中，如表 7.2 所示.

**表 7.2: 单因素方差分析数据**

| 水 平 | 观 测 值 | | | | 总 体 |
|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | $x_{11}$ | $x_{12}$ | $\cdots$ | $x_{1n_1}$ | $N(\mu_1, \sigma^2)$ |
| $A_2$ | $x_{21}$ | $x_{22}$ | $\cdots$ | $x_{2n_2}$ | $N(\mu_2, \sigma^2)$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |
| $A_r$ | $x_{r1}$ | $x_{r2}$ | $\cdots$ | $x_{rn_r}$ | $N(\mu_r, \sigma^2)$ |

其中 $x_{ij}$ 表示在因素 $A$ 的第 $i$ 个水平下的第 $j$ 次试验的试验结果.

### 7.1.1 数学模型

将水平 $A_i$ 下的试验结果 $x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{in_i}$ 看作来自第 $i$ 个正态总体 $X_i \sim N(\mu_i, \sigma^2)$ 的样本观测值，其中 $\mu_i, \sigma^2$ 均未知，且每个总体 $X_i$ 相互独立，考虑线性统计模型

$$\begin{cases} x_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij}, \quad i = 1, 2, \ldots, r, \quad j = 1, 2, \ldots, n_i, \\ \varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2) \quad \text{且相互独立}, \end{cases} \tag{7.1}$$

其中 $\mu_i$ 是第 $i$ 个总体的均值， $\varepsilon_{ij}$ 是相应的试验误差.

比较因素 $A$ 的 $r$ 个水平的差异归结为比较这 $r$ 个总体的均值. 即检验假设

$$H_0:\ \mu_1=\mu_2=\cdots=\mu_r,\qquad H_1:\ \mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_r\ \text{不全相等.} \tag{7.2}$$

记

$$\mu=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{r}n_i\mu_i,\quad n=\sum_{i=1}^{r}n_i,\quad \alpha_i=\mu_i-\mu,$$

这里 $\mu$ 表示总和的均值, $\alpha_i$ 为水平 $A_i$ 对指标的效应, 不难验证 $\sum\limits_{i=1}^{r}n_i\alpha_i=0$.

模型 (7.1) 又可以等价写成

$$\begin{cases} x_{ij}=\mu+\alpha_i+\varepsilon_{ij},\quad i=1,2,\ldots,r,\quad j=1,2,\ldots,n_i,\\ \varepsilon_{ij}\sim N(0,\sigma^2)\qquad\text{且相互独立},\\ \sum\limits_{i=1}^{r}n_i\alpha_i=0. \end{cases} \tag{7.3}$$

称模型 (7.3) 为单因素方差分析的数学模型, 它是一种线性模型.

### 7.1.2 方差分析

因此假设 (7.2) 等价于

$$H_0:\ \alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_r=0,\qquad H_1:\ \alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r\ \text{不全为零.} \tag{7.4}$$

如果 $H_0$ 被拒绝, 则说明因素 $A$ 的各水平的效应之间有显著的差异; 否则, 差异不明显.

为了导出 $H_0$ 的检验统计量. 方差分析法建立在平方和分解和自由度分解的基础上, 考虑统计量

$$S_T=\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{n_i}(x_{ij}-\bar{x})^2,\quad \bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{n_i}x_{ij}.$$

称 $S_T$ 为总离差平方和 (或称为总变差), 它是所有数据 $x_{ij}$ 与总平均值 $\bar{x}$ 差的平方和, 描绘了所有观测数据的离散程度. 经计算可以证明如下的平方和分解公式:

$$S_T=S_E+S_A, \tag{7.5}$$

其中

$$\begin{aligned} S_E &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{n_i}(x_{ij}-\overline{x}_{i\cdot})^2, \quad \overline{x}_{i\cdot} = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}x_{ij}, \\ S_A &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{n_i}(\overline{x}_{i\cdot}-\bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{r}n_i(\overline{x}_{i\cdot}-\bar{x})^2. \end{aligned}$$

这里 $S_E$ 表示了随机误差的影响. 这是因为对于固定的 $i$ 来讲, 观测值 $x_{i1}$, $x_{i2}$, $\cdots$, $x_{in_i}$ 是来自同一个正态总体 $N(\mu_i,\sigma^2)$ 的样本. 因此, 它们之间的差异是由随机误差所致. 而 $\sum\limits_{j=1}^{n_i}(x_{ij}-\bar{x}_{i\cdot})^2$ 是这 $n_i$ 个数据的变动平方和, 正是它们差异大小的度量. 将 $r$ 组这样的变动平方和相加, 就得到了 $S_E$, 通常称 $S_E$ 为误差平方和或组内平方和.

$S_A$ 表示在 $A_i$ 水平下的样本均值与总平均值之间的差异之和, 它反映了 $r$ 个总体均值之间的差异, 因为 $\bar{x}_{i\cdot}$ 是第 $i$ 个总体的样本均值, 是 $\mu_i$ 的估计, 因此 $r$ 个总体均值 $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_r$ 之间的差异越大, 这些样本均值 $\bar{x}_{1\cdot},\bar{x}_{2\cdot},\cdots,\bar{x}_{r\cdot}$ 之间的差异也就越大. 平方和 $\sum\limits_{i=1}^{r}n_i(\bar{x}_{i\cdot}-\bar{x})^2$ 正是这种差异大小的度量. 这里 $n_i$ 反映了第 $i$ 个总体样本大小在平方和 $S_A$ 中的作用. 称 $S_A$ 为因素 $A$ 的效应平方和或组间平方和.

公式 (7.5) 表明, 总平方和 $S_T$ 可按其来源分解成两部分, 一部分是误差平方和 $S_E$, 是由随机误差引起的. 另一部分是因素 $A$ 的平方和 $S_A$, 是由因素 $A$ 的各水平的差异引起的.

由模型假设 (7.2) 经过统计分析可以得到 $E(S_E)=(n-r)\sigma^2$, 即 $S_E/(n-r)$ 是 $\sigma^2$ 的一个无偏估计, 且

$$\frac{S_E}{\sigma^2}\sim\chi^2(n-r).$$

如果原假设 $H_0$ 成立, 则有 $E(S_A)=(r-1)\sigma^2$, 即此时 $S_A/(r-1)$ 也是 $\sigma^2$ 的无偏估计, 且

$$\frac{S_A}{\sigma^2}\sim\chi^2(r-1),$$

并且 $S_A$ 与 $S_E$ 相互独立, 因此当 $H_0$ 成立时,

$$F=\frac{S_A/(r-1)}{S_E/(n-r)}\sim F(r-1,n-r). \tag{7.6}$$

于是 $F$ (也称 $F$ 比) 可以作为 $H_0$ 的检验统计量. 对给定的显著性水平 $\alpha$, 用 $F_\alpha(r-1,n-r)$ 表示 $F$ 分布的上 $\alpha$ 分位点. 若 $F > F_\alpha(r-1,n-r)$, 则拒绝原假设, 认为因素 A 的 r 个水平有显著差异. 也可以通过计算 P– 值的方法来决定是接受还是拒绝原假设 $H_0$. $p$ 值为 $p = P\{F(r-1,n-r) > F\}$, 它表示的是服从自由度为 $(r-1,n-r)$ 的 F 分布的随机变量取值大于 $F$ 的概率. 显然, $p$值小于 $\alpha$ 等价于 $F > F_\alpha(r-1,n-r)$, 表示在显著性水平 $\alpha$ 下的小概率事件发生了, 这意味着应该拒绝原假设 $H_0$. 当 $p$值 大于 $\alpha$ 时, 则无法拒绝原假设, 所以应接受原假设 $H_0$.

通常将计算结果列成表 7.3 的形式, 称为方差分析表.

**表 7.3: 单因素方差分析表**

| 方差来源 | 自由度 | 平方和 | 均方 | F 比 | p 值 |
|---|---|---|---|---|---|
| 因素 A | $r-1$ | $S_A$ | $MS_A = \frac{S_A}{r-1}$ | $F = \frac{MS_A}{MS_E}$ | $p$ |
| 误 差 | $n-r$ | $S_E$ | $MS_E = \frac{S_E}{n-r}$ | | |
| 总 和 | $n-1$ | $S_T$ | | | |

### 7.1.3 方差分析表的计算

R 软件中的 aov() 函数提供了方差分析表的计算. aov() 函数的使用方法是

```
aov(formula, data = NULL, projections = FALSE, qr = TRUE,
    contrasts = NULL, ...)
```

其中 formula 是方差分析的公式. data 是数据框. 其他见在线帮助.

另外, 可用 summary() 列出方差分析表的详细信息.

**例 7.2** (续例 7.1) 用 *R 软件计算例 7.1.*

**解**: 用数据框的格式输入数据, 调用 aov() 函数计算方差分析, 用 summary() 提取方差分析的信息 (程序名: exam0702.R)

```
> lamp<-data.frame(
    X=c(1600, 1610, 1650, 1680, 1700, 1700, 1780, 1500, 1640,
        1400, 1700, 1750, 1640, 1550, 1600, 1620, 1640, 1600,
```

```
        1740, 1800, 1510, 1520, 1530, 1570, 1640, 1600),
    A=factor(c(rep(1,7),rep(2,5), rep(3,8), rep(4,6)))
  )
> lamp.aov<-aov(X ~ A, data=lamp)
> summary(lamp.aov)
            Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
A            3  49212   16404  2.1659 0.1208
Residuals   22 166622    7574
```

上述数据与方差分析表 7.3 中的内容相对应，其中 Df 表示自由度， Sum Sq 表示平方和， Mean Sq 表示均方， F value 表示 F 值，即 F 比． Pr(>F) 表示 P 值， A 就是因素 A, Residuals 是残差，即误差.

从上述计算结果可以看出, 如果直接用 summary(lamp.aov) 的话, 它没有列出方差分析表 7.3 的最后一行 (总和行), 这里编个小程序 (程序名：anova.tab.R), 作一点改进, 其计算方法是将 summary 函数得到表中的的第一行与第二行求和, 得到总和行的值.

```
anova.tab<-function(fm){
   tab<-summary(fm)
   k<-length(tab[[1]])-2
   temp<-c(sum(tab[[1]][,1]), sum(tab[[1]][,2]), rep(NA,k))
   tab[[1]]["Total",]<-temp
   tab
}
```

这个小程序的另一个目的是学会如何利用 R 软件的计算结果来得到我们需要的结果．用上述函数，就可以得到完整的方差分析表.

```
> source("anova.tab.R"); anova.tab(lamp.aov)
            Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
A            3  49212   16404  2.1659 0.1208
Residuals   22 166622    7574
Total       25 215835
```

并将结果填在方差分析表中，由表 7.4 所示.

**表 7.4: 元件寿命试验的方差分析表**

| 方差来源 | 自由度 | 平方和 | 均方 | F 比 | p 值 |
|---|---|---|---|---|---|
| 因素 A | 3 | 49212 | 16404 | 2.1658 | 0.1208 |
| 误 差 | 22 | 166622 | 7573 | | |
| 总 和 | 25 | 215835 | | | |

从 $p$ 值 $(0.1208 > 0.05)$ 可以看出，没有充分理由说明 $H_0$ 不正确，也就是说，接受 $H_0$. 说明四种材料生产出的元件的平均寿命无显著的差异.

通过 `plot()` 函数绘图来描述各因素的差异，其命令如下，所绘图形由图 7.1 所示.

```
> plot(lamp$X~lamp$A)
```

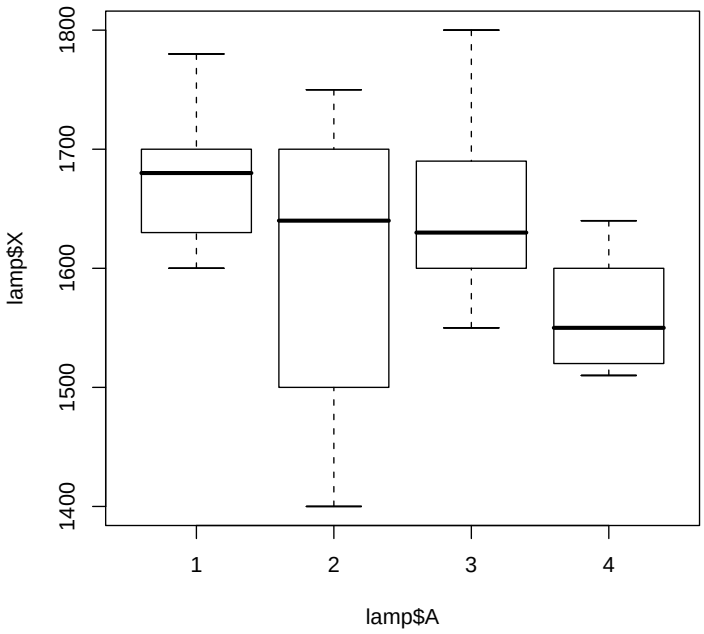



图 7.1: 元件寿命试验的箱线图

从图形上也可看出，四种材料生产出的元件的平均寿命是无显著差异的.

**例 7.3** *小白鼠在接种了 3 种不同菌型的伤寒杆菌后的存活天数如表 7.5 所示. 判断小白鼠被注射三种菌型后的平均存活天数有无显著差异？*

**表 7.5: 白鼠试验数据**

| 菌型 | 存 活 日 数 | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 4 | 3 | 2 | 4 | 7 | 7 | 2 | 2 | 5 | 4 | |
| 2 | 5 | 6 | 8 | 5 | 10 | 7 | 12 | 12 | 6 | 6 | | |
| 3 | 7 | 11 | 6 | 6 | 7 | 9 | 5 | 5 | 10 | 6 | 3 | 10 |

**解**: 设小白鼠被注射的伤寒杆菌为因素, 三种不同的菌型为三个水平, 接种后的存活天数视作来自三个正态分布总体 $N(\mu_i, \sigma^2)(i = 1, 2, 3)$ 的样本观测值. 问题归结为检验:

$$H_0: \ \mu_1 = \mu_2 = \mu_3; \quad H_1: \ \mu_1, \mu_2, \mu_3 \ \text{不全相等}.$$

R 软件计算过程与计算结果 (exam0703.R)

```
> mouse<-data.frame(
    X=c( 2, 4, 3, 2, 4,  7, 7, 2, 2, 5, 4, 5,  6, 8, 5, 10, 7,
       12, 12, 6, 6, 7, 11, 6, 6, 7, 9, 5, 5, 10, 6, 3, 10),
    A=factor(c(rep(1,11),rep(2,10), rep(3,12)))
  )
> mouse.aov<-aov(X ~ A, data=mouse)
> source("anova.tab.R"); anova.tab(mouse.aov)
            Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
A            2  94.256  47.128  8.4837 0.001202 **
Residuals   30 166.653   5.555
Total       32 260.909
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

$p$ 值远小于 0.01 应拒绝原假设, 即认为小白鼠在接种三种不同菌型的伤寒杆菌后的存活天数有显著的差异.

### 7.1.4 均值的多重比较

如果 $F$ 检验的结论是拒绝 $H_0$, 则说明因素 $A$ 的 $r$ 个水平效应有显著的差异, 也就是说 $r$ 个均值之间有显著差异. 但是这并不意味着所有均值间都存在差

异，这时我们还需要对每一对 $\mu_i$ 和 $\mu_j$ 作一对一的比较，即多重比较.

多重比较的方法很多，这里介绍几种常用的方法.

**1. 多重 t 检验方法**

这种方法本质上就是针对每组数据进行 t 检验，只不过估计方差时利用的是全体数据，因而自由度变大. 具体地说，要比较第 $i$ 组与第 $j$ 组平均数，即检验

$$H_0 : \mu_i = \mu_j, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \cdots, r.$$

方法采用两正态总体均值的 $t$ 检验，取检验统计量

$$t_{ij} = \frac{\bar{x}_{i\cdot} - \bar{x}_{j\cdot}}{\sqrt{MS_E(\frac{1}{n_i} + \frac{1}{n_j})}}, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \cdots, r. \tag{7.7}$$

当 $H_0$ 成立时， $t_{ij} \sim t(n-r)$. 所以当

$$|t_{ij}| > t_{\frac{\alpha}{2}}(n-r) \tag{7.8}$$

时，说明 $\mu_i$ 与 $\mu_j$ 差异显著. 定义相应的 P– 值

$$p_{ij} = P\{\ t(n-r) > |t_{ij}|\ \}, \tag{7.9}$$

即服从自由度为 $n-r$ 的 t 分布的随机变量大于 $|t_{ij}|$ 的概率. 上述方法等价于当 $p_{ij} < \frac{\alpha}{2}$ 时， $\mu_i$ 与 $\mu_j$ 差异显著.

多重 t 检验方法的优点是使用方便. 但在均值的多重检验中，如果因素的水平较多，而检验又是同时进行的，多次重复使用 $t$ 检验会增大犯第一类错误的概率，所得到的 “有显著差异” 的结论不一定可靠.

**2. P– 值的修正**

为了克服多重 t 检验方法的缺点，统计学家们提出了许多更有效的方法来调整 P– 值，由于这些方法涉及较深的统计知识，这里只作简单的说明. 具体调整方法的名称和参数见表 7.6.

R 软件 p– 值调整函数是 `p.adjust()`, 其使用方法如下：

```
p.adjust(p, method = p.adjust.methods, n = length(p))
p.adjust.methods
# c("holm", "hochberg", "hommel", "bonferroni",
      "BH", "BY", "fdr", "none")
```

**表 7.6: P– 值的调整方法**

| 调整方法 | R 软件中的参数 |
|---|---|
| Bonferroni | "bonferroni" |
| Holm (1979) | "holm" |
| Hochberg (1988) | "hochberg" |
| Hommel (1988) | "hommel" |
| Benjamini & Hochberg (1995) | "BH" |
| Benjamini & Yekutieli (2001) | "BY" |

其中 p 是由 P- 值构成的向量. method 是修正方法, 缺省值是 Holm 方法, 即参数 "holm". 关于其他方法的进一步解释, 请见 p.adjust() 函数的在线帮助.

**3. 均值的多重比较的计算**

R 软件中的 pairwise.t.test() 函数可以得到多重比较的 $p$ 值, 其使用方法如下:

```
pairwise.t.test(x, g, p.adjust.method = p.adjust.methods,
                pool.sd = TRUE, ...)
```

其中 x 是响应向量. g 是因子向量. p.adjust.method 是 p 值的调整方法, 其方法由函数 p.adjust() 给出, 参数值由表 7.6 所示. 如果 p.adjust.method="none" 表示 p– 值是由式 (7.7) 和式 (7.9) 计算出的, 不作任何调整, 缺省值按 Holm 方法 ("holm") 作调整.

**例 7.4** *(续例 7.3)* 由于在例 7.3 中 $F$ 检验的结论是拒绝 $H_0$, 请进一步检验

$$H_0 : \mu_i = \mu_j, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

**解**: 首先计算各个因子间的均值, 再用多重 t 检验方法作检验, 也就是说, p– 值不作任何调整. (程序名: exam0704.R)

```
#### 求数据在各水平下的均值
> attach(mouse)
> mu<-c(mean(X[A==1]), mean(X[A==2]), mean(X[A==3])); mu
[1] 3.818182 7.700000 7.083333
```

```
#### 作多重 t 检验
> pairwise.t.test(X, A, p.adjust.method = "none")
        Pairwise comparisons using t tests with pooled SD
data:  X and A
  1       2
2 0.00072 -
3 0.00238 0.54576
P value adjustment method: none
```

将计算结果列入表中，如表 7.7 所示.

**表 7.7: 均值多重检验 $p$ 值表**

| 水平 | 均值 | $p_{ij}$ | | |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 3.818 | 1.00000 | 0.00072 | 0.00238 |
| 2 | 7.700 | 0.00072 | 1.00000 | 0.54576 |
| 3 | 7.083 | 0.00238 | 0.54576 | 1.00000 |

观察两个作调整后 p– 值的情况，

```
> pairwise.t.test(X, A, p.adjust.method = "holm")
        Pairwise comparisons using t tests with pooled SD
data:  X and A
  1      2
2 0.0021 -
3 0.0048 0.5458
P value adjustment method: holm
> pairwise.t.test(X, A, p.adjust.method = "bonferroni")
        Pairwise comparisons using t tests with pooled SD
data:  X and A
  1      2
2 0.0021 -
3 0.0071 1.0000
P value adjustment method: bonferroni
```

从这两组数据可以看出，调整后的 p– 值会增大，在一定程度上会克服多重 t 检验方法的缺点.

从上述计算结果 (无论是调整后的 p– 值还未调整的 p– 值) 可见， $\mu_1$ 与 $\mu_2$, $\mu_1$ 与 $\mu_3$ 均有显著差异，而 $\mu_2$ 与 $\mu_3$ 没有显著差异. 即小白鼠所接种的三种不同菌型的伤寒杆菌中第一种与后两种使得小白鼠的平均存活天数有显著差异. 而后两种差异不显著.

从箱线图也能看出这种情况，见图 7.2 所示.

```
> plot(mouse$X~mouse$A)
```

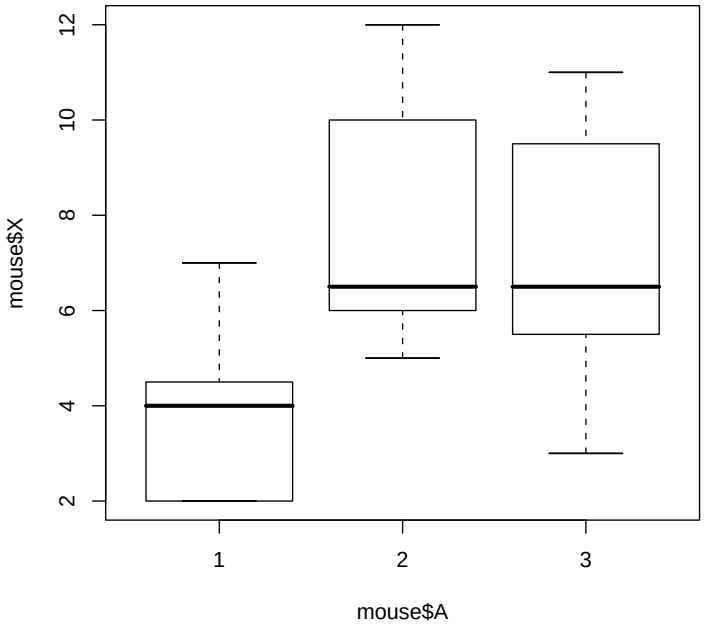



图 7.2: 小白鼠平均存活天数的箱线图

### 7.1.5 方差的齐次性检验

要进行方差分析，应当具备以下三个条件：

(1) 可加性. 假设模型是线性可加模型，每个处理效应与随机误差是可以叠加的，即

$$x_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}.$$

(2) 独立正态性. 试验误差应当服从正态分布、而且相互独立.

(3) 方差齐性. 不同处理间的方差是一致的, 即满足假设

$$H_0: \quad \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \cdots = \sigma_r^2. \tag{7.10}$$

对于常用的试验来说, 大都能满足以上三个条件. 对于有些不满足条件的试验, 可以先进行数据变换再进行方差分析.

面对试验结果, 如果对误差的正态性和方差齐性没有把握, 则应进行检验.

**1. 误差的正态性检验**

误差的正态性检验本质上就是数据的正态性检验. 可以用第三章介绍的 W 检验 (shapiro.test() 函数) 方法对数据作正态性检验.

**例 7.5** 对例 *7.1* 的数据作正态性检验.

**解**: 调用 shapiro.test() 函数.

```
> attach(lamp)
> shapiro.test(X[A==1])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  X[A == 1]
W = 0.9423, p-value = 0.6599

> shapiro.test(X[A==2])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  X[A == 2]
W = 0.9384, p-value = 0.6548

> shapiro.test(X[A==3])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  X[A == 3]
W = 0.8886, p-value = 0.2271

> shapiro.test(X[A==4])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  X[A == 4]
W = 0.9177, p-value = 0.4888
```

计算结果表明，例 7.1 中数据在四种水平下的均是正态的.

**2. 方差齐性检验**

方差齐性检验就是检验数据在不同水平下方差是否相同. 方差齐性检验最常用的方法是 Bartlett 检验. 当各处理组的数据较多时，令

$$\begin{aligned} S_i^2 &= \frac{1}{n_i-1}\sum_{j=1}^{n_i}(x_{ij}-\bar{x}_{i\cdot})^2, \\ S^2 &= \frac{1}{n-r}\sum_{i=1}^{r}(n_i-1)S_i^2, \\ c &= 1+\frac{1}{3(r-1)}\left[\sum_{i=1}^{r}(n_i-1)^{-1}-(n-r)^{-1}\right], \\ n &= n_1+n_2+\cdots+n_r. \end{aligned}$$

在假设 (7.10) 成立时，统计量

$$K^2=\frac{2.3026}{c}\left[(n-r)\ln S^2-\sum_{i=1}^{r}(n_i-1)\ln S_i^2\right] \tag{7.11}$$

近似服从自由度为 $r-1$ 的 $\chi^2$ 分布. 当

$$K^2>\chi_\alpha^2(r-1) \quad 或 \quad P\{\chi^2>K^2\}<\alpha$$

时，拒绝 $H_0$, 即认为至少有两个处理组数据的方差不等；否则，认为数据满足方差齐性的要求.

R 软件中， `bartlett.test()` 函数提供是 Bartlett 检验，其使用格式为

```
bartlett.test(x, g, ...)
bartlett.test(formula, data, subset, na.action, ...)
```

其中 `x` 是由数据构成的向量或列表. `g` 是由因子构成的向量，当 `x` 是列表时，此项无效. `formula` 是方差分析的公式， `data` 是数据框. 其余见在线帮助.

**例 7.6** *对例 7.1 的数据作 Bartlett 方差齐性检验.*

**解:**

```
> bartlett.test(X~A, data=lamp)

        Bartlett test of homogeneity of variances

data:  X by A
Bartlett's K-squared = 5.8056, df = 3, p-value = 0.1215
```

P– 值 (0.1215)> 0.05, 接受原假设 $H_0$, 认为各处理组的数据是等方差的.

另外，命令

```
bartlett.test(lamp$X, lamp$A)
```

具有相同的效果.

### 7.1.6 Kruskal-Wallis 秩和检验

方差分析过程需要若干条件， F 检验才能奏效. 可借有时候所采集的数据常常不能满足这些条件. 事实上, 即使有一个条件不满足都会令我们陷入尴尬之中. 象两样本比较时一样, 不妨尝试将数据转化为秩统计量, 因为秩统计量的分布与总体分布无关, 可以摆脱总体分布的束缚. 在比较两个以上的总体时, 广泛使用的 Kruskal-Wallis 秩和检验, 它是对两个以上样本进行比较的非参数检验方法. 实质上, 它是两样本的 Wilcoxon 方法在多于两个样本时的推广.

给定 $n$ 个个体用以 $s(s \geq 3)$ 种处理方法的效果比较, 将这 $n$ 个个体随机地分为 $s$ 组, 使第 $i$ 组有 $n_i$ 个, 并指定这 $n_i$ 个个体接受第 $i$ 种处理方法的试验 $(i = 1, 2, \cdots, s)$, 此时, $\sum_{i=1}^{s} n_i = n$. 当试验结束后, 将这 $n$ 个个体放在一起根据处理效果的优劣排序得到各自的秩. 记第 $i$ 组的 $n_i$ 个个体的秩为

$$R_{i1}, R_{i2}, \cdots, R_{in_i}, \quad i = 1, 2, \cdots, s.$$

并设观测值中无结点, 即 $R_{i1} < R_{i2} < \cdots < R_{in_i} (i = 1, 2, \cdots, s)$. 检验的目的是根据这些秩统计量检验假设

$$H_0 : \text{各处理方法的效果无显著差异}$$

能否接受.

为了构造合适的检验统计量, 只有原假设是不够的, 还应对相应的备择假设有足够的了解. Kruskal-Wallis 秩和检验考虑的是最常见的一种备择假设, 即各方法的处理效果若有差异, 其差异主要反映在各组个体的处理效果的度量值的分离上. 换句话说, 若各方法的处理效果有显著差异, 则接受各方法试验的个体的秩之间有一个排序, 其中某些方法中个体的秩趋于取较小值, 另一些方法中个体

的秩趋于取较大的值. 下面针对此类备择假设构造检验统计量. 令

$$R_{i\cdot} = \frac{R_{i1}+R_{i2}+\cdots+R_{in_i}}{n_i}, \quad i=1,2,\cdots,s, \tag{7.12}$$

$$R_{\cdot\cdot} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{n_i}R_{ij} = \frac{n+1}{2}, \tag{7.13}$$

其中 $R_{i\cdot}$ 是第 $i$ 组个体的秩的平均值 $(i=1,2,\cdots,s)$, $R_{\cdot\cdot}$ 是总的平均值. 若各方法处理效果之间有显著差异, 按上述备择假设, 则 $R_{i\cdot}(i=1,2,\cdots,s)$ 相互差异较大. 反之, 若 $H_0$ 为真, 由于分组是随机的, 则各 $R_{i\cdot}(i=1,2,\cdots,s)$ 差异应较小, 且均分散在 $R_{\cdot\cdot}$ 附近. 因此, 可以用 $(R_{i\cdot}-R_{\cdot\cdot})^2$ 的加权和来度量各 $R_{i\cdot}$ 与 $R_{\cdot\cdot}$ 的接近程度. 令

$$K = \frac{12}{n(n+1)}\sum_{i=1}^{s}n_i\left(R_{i\cdot}-\frac{n+1}{2}\right)^2, \tag{7.14}$$

称 $K$ 为 Kruskal-Wallis 统计量. 若 $H_0$ 不真, 则 $K$ 有偏大的趋势, 因此, 其拒绝域形式为

$$K \geq c.$$

或者计算出相应的 $P-$ 值, 当 $P-$ 值小于相应的显著性水平, 则拒绝原假设. 上述检验方法称为 Kruskal-Wallis 秩和检验.

R 软件提供了 Kruskal-Wallis 秩和检验, 其函数为 `kruskal.test()`, 使用方法如下

```
kruskal.test(x, g, ...)
kruskal.test(formula, data, subset, na.action, ...)
```

其中 `x` 是由数据构成的向量或列表. `g` 是由因子构成的向量, 当 `x` 是列表时, 此项无效. `formula` 是方差分析的公式, `data` 是数据框. 其余见在线帮助.

**例 7.7** 为了比较属同一类的四种不同食谱的营养效果, 将 *25* 只老鼠随机地分为 *4* 组, 每组分别是 *8* 只, *4* 只, *7* 只和 *6* 只, 各采用食谱甲、乙、丙、丁喂养. 假设其他条件均保持相同, *12* 周后测得体重增加量如表 *7.8* 所示. 对于 $\alpha=0.05$, 检验各食谱的营养效果是否有显著差异.

**解**: 根据题意, 原假设为

$H_0$ : 各的营食谱养效果无显著差异, $H_1$ : 各的营食谱养效果有显著差异.

输入数据, 调用 `kruskal.test()` 函数作检验 (程序名: `exam0707.R`).

**表 7.8: 12 周后 25 只老鼠的体重增加量 (单位：克)**

| 食谱 | 体重增加值 | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 甲 | 164 | 190 | 203 | 205 | 206 | 214 | 228 | 257 |
| 乙 | 185 | 197 | 201 | 231 | | | | |
| 丙 | 187 | 212 | 215 | 220 | 248 | 265 | 281 | |
| 丁 | 202 | 204 | 207 | 227 | 230 | 276 | | |

```
> food<-data.frame(
     x=c(164, 190, 203, 205, 206, 214, 228, 257,
         185, 197, 201, 231,
         187, 212, 215, 220, 248, 265, 281,
         202, 204, 207, 227, 230, 276),
     g=factor(rep(1:4, c(8,4,7,6)))
  )
> kruskal.test(x~g, data=food)
        Kruskal-Wallis rank sum test
data:  x by g
Kruskal-Wallis chi-squared = 4.213, df = 3, p-value = 0.2394
```

$P-$ 值 $= 0.2394 > 0.05$, 无法拒绝原假设，认为各的营食谱养效果无显著差异.

另两种写法,

```
kruskal.test(food$x, food$g)
```

和

```
A<-c(164, 190, 203, 205, 206, 214, 228, 257)
B<-c(185, 197, 201, 231)
C<-c(187, 212, 215, 220, 248, 265, 281)
D<-c(202, 204, 207, 227, 230, 276)
kruskal.test(list(A,B,C,D))
```

可以达到同样的效果.

对上述数据作正态检验和方差齐性检验

```
> attach(food)
```

```
> shapiro.test(x[g==1])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  x[g == 1]
W = 0.9619, p-value = 0.828

> shapiro.test(x[g==2])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  x[g == 2]
W = 0.9084, p-value = 0.4741

> shapiro.test(x[g==3])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  x[g == 3]
W = 0.9523, p-value = 0.7506

> shapiro.test(x[g==4])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  x[g == 4]
W = 0.8182, p-value = 0.08516

> bartlett.test(x~g, data=food)
        Bartlett test of homogeneity of variances
data:  x by g
Bartlett's K-squared = 0.9328, df = 3, p-value = 0.8175
```

全部通过检验，因此，上述数据也可以作方差分析.

```
> source("anova.tab.R")
> anova.tab(aov(x~g, data=food))
            Df  Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
g            3  3308.1  1102.7   1.378 0.2769
Residuals   21 16803.9   800.2
Total       24 20112.0
```

其结论是相同的，即认为各的营食谱养效果无显著差异.

### 7.1.7 Friedman 秩和检验

在配伍组设计中，多个样本的比较，如果它们的总体不能满足正态性和方差齐性的要求，可采用 Friedman 秩和检验.

Friedman 秩和检验的基本思想与前面介绍的方法类似. 但是配伍组设计的随机化是在配伍组内进行的，而配伍组间没有进行随机化. 因此在进行 Friedman 秩和检验时，是分别在每个配伍组内将数据从小到大编秩，如果相同的数据取平均秩次. 设有 $N$ 个配伍组，$s$ 个处理水平，则不同配伍组的秩和相等，均为 $\frac{s(s+1)}{2}$，且平均秩次与总平均秩次相等，都等于 $\frac{s(s+1)}{2}$，这正好对应于随机区组设计的方差分析. 由于配伍组间没有进行随机化，因此无须对配伍组因素进行检验.

Friedman 检验统计量 $Q$ 的计算为

$$Q=\frac{12N}{s(s+1)}\sum_{i=1}^{s}\left(R_{i\cdot}-\frac{1}{2}(s+1)\right)^2, \tag{7.15}$$

其中

$$R_{i\cdot}=\frac{1}{N}\left(R_{i1}+R_{i2}+\cdots+R_{iN}\right), \quad i=1,2,\cdots,s,$$

$R_{ij}$ 表示第 $i$ 个处理组第 $j$ 个数据的秩次.

Friedman 秩和检验的原假设为

$$H_0:\text{各方法的处理效果无显著差异.}$$

其备择假设主要考虑各方法的处理效果使各个体的效果度量趋于增加或减少. 若 $H_0$ 不真时，则 $Q$ 有偏大的趋势，因此拒绝域的形式为

$$Q\geq c.$$

或用相应的 $P-$ 值进行检验. 上述检验方法称为 Friedman 秩和检验.

令 $T_i$ 为第 $i$ 个处理组的秩和，即

$$T_i=NR_{i\cdot}=R_{i1}+R_{i2}+\cdots+R_{iN}, \quad i=1,2,\cdots,s,$$

则 $Q$ 又可以表示为

$$Q=\frac{12}{Ns(s+1)}\sum_{i=1}^{s}T_i^2-3N(s+1). \tag{7.16}$$

式 (7.16) 更便于实际计算.

R 软件中, 函数 friedman.test() 提供了 Friedman 秩和检验, 其使用方法是

```
friedman.test(y, ...)
friedman.test(y, groups, blocks, ...)
friedman.test(formula, data, subset, na.action, ...)
```

其中 y 是数据构成的向量或矩阵, groups 是与 y 有同样长度的向量, 其内容表示 y 的分组情况, blocks 与 y 有同样长度的向量, 其内容表示 y 的水平. 当 y 是矩阵时, groups 和 blocks 无效. 其他使用方法见在线帮助.

**例 7.8** *24 只小鼠按不同窝别分为 8 个区组, 再把每个区组中的观察单位随机分配到 3 种不同的饲料组, 喂养一定时间后, 测得小鼠肝中铁含量, 结果如表 7.9 所示. 试分析不同饲料的小鼠肝中的铁含量是否不同.*

**表 7.9: 不同饲料组小鼠肝脏中铁含量 (单位: $\mu$g/g)**

| 窝别 (配伍组) | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 饲料 A | 1.00 | 1.01 | 1.13 | 1.14 | 1.70 | 2.01 | 2.23 | 2.63 |
| 饲料 B | 0.96 | 1.23 | 1.54 | 1.96 | 2.94 | 3.68 | 5.59 | 6.96 |
| 饲料 C | 2.07 | 3.72 | 4.50 | 4.90 | 6.00 | 6.84 | 8.23 | 10.33 |

**解**: 输入数据, 调用 friedman.test() 函数 (程序名: exam0708.R).

```
> X<-matrix(
    c(1.00, 1.01, 1.13, 1.14, 1.70, 2.01, 2.23, 2.63,
      0.96, 1.23, 1.54, 1.96, 2.94, 3.68, 5.59, 6.96,
      2.07, 3.72, 4.50, 4.90, 6.00, 6.84, 8.23, 10.33),
    ncol=3, dimnames=list(1:8, c("A", "B", "C"))
  )
> friedman.test(X)

        Friedman rank sum test

data:  X
Friedman chi-squared = 14.25, df = 2, p-value = 0.0008047
```

$P-$ 值 $= 0.0008047 < 0.05$, 拒绝原假设, 认为不同饲料的小鼠肝中的铁含量有显著差异.

另两种写法,

```
x<-c(1.00, 1.01, 1.13, 1.14, 1.70, 2.01, 2.23, 2.63,
     0.96, 1.23, 1.54, 1.96, 2.94, 3.68, 5.59, 6.96,
     2.07, 3.72, 4.50, 4.90, 6.00, 6.84, 8.23, 10.33)
g<-gl(3,8)
b<-gl(8,1,24)
friedman.test(x,g,b)
```

和

```
mouse<-data.frame(
   x=c(1.00, 1.01, 1.13, 1.14, 1.70, 2.01, 2.23, 2.63,
       0.96, 1.23, 1.54, 1.96, 2.94, 3.68, 5.59, 6.96,
       2.07, 3.72, 4.50, 4.90, 6.00, 6.84, 8.23, 10.33),
   g=gl(3,8),
   b=gl(8,1,24)
)
friedman.test(x~g|b, data=mouse)
```

可以达到同样的效果.

## 7.2 双因素方差分析

在大量的实际问题中, 需要考虑影响试验数据的因素多于一个的情形. 例如在化学试验中, 几种原料的用量, 反应时间, 温度的控制等都可能影响试验结果, 这就构成多因素试验问题. 本节讨论双因素试验的方差分析.

**例 7.9** 在一个农业试验中, 考虑四种不同的种子品种 $A_1$, $A_2$, $A_3$, $A_4$ 和三种不同的施肥方法 $B_1$, $B_2$, $B_3$ 得到产量数据如表 7.10 所示 (单位: $kg$). 试分析种子与施肥对产量有无显著影响?

这是一个双因素试验, 因素 $A$(种子) 有四个水平, 因素 $B$(施肥) 有三个水平. 我们通过下面的双因素方差分析法来回答以上问题.

设有 $A, B$ 两个因素, 因素 $A$ 有 $r$ 个水平 $A_1, A_2, \cdots, A_r$ ; 因素 $B$ 有 $s$ 个水平 $B_1, B_2, \cdots, B_s$.

**表 7.10: 农业试验数据**

| | $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ |
|---|---|---|---|
| $A_1$ | 325 | 292 | 316 |
| $A_2$ | 317 | 310 | 318 |
| $A_3$ | 310 | 320 | 318 |
| $A_4$ | 330 | 370 | 365 |

### 7.2.1 不考虑交互作用

**1. 数学模型**

在因素 $A, B$ 的每一种水平组合 $(A_i, B_j)$ 下进行一次独立试验得到观测值 $x_{ij}$, $i = 1, 2, \cdots, r$; $j = 1, 2, \ldots, s$ 将观测数据列表，如表 7.11 所示.

**表 7.11: 无重复试验的双因素方差分析数据**

| | $B_1$ | $B_2$ | $\cdots$ | $B_s$ |
|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | $x_{11}$ | $x_{12}$ | $\cdots$ | $x_{1s}$ |
| $A_2$ | $x_{21}$ | $x_{22}$ | $\cdots$ | $x_{2s}$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |
| $A_r$ | $x_{r1}$ | $x_{r2}$ | $\cdots$ | $x_{rs}$ |

假定 $x_{ij} \sim N(\mu_{ij}, \sigma^2)$, $i = 1, 2, \cdots, r$, $j = 1, 2, \cdots s$. 且各 $x_{ij}$ 相互独立. 不考虑两因素间的交互作用，因此数据可以分解为

$$\begin{cases} x_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij}, \quad i = 1, 2, \cdots, r, \quad j = 1, 2, \cdots, s, \\ \varepsilon_{ij} \ \sim \ N(0, \sigma^2), \quad \text{且各 } \varepsilon_{ij} \text{ 相互独立}, \\ \sum\limits_{i=1}^{r} \alpha_i = 0, \ \sum\limits_{j=1}^{s} \beta_j = 0, \end{cases} \tag{7.17}$$

其中 $\mu = \dfrac{1}{rs} \sum\limits_{i=1}^{r} \sum\limits_{j=1}^{s} \mu_{ij}$ 为总平均， $\alpha_i$ 为因素 $A$ 的第 $i$ 个水平的效应， $\beta_j$ 为因素 $B$ 的第 $j$ 个水平的效应.

**2. 方差分析**

在线性模型 (7.17) 下，方差分析的主要任务是：系统分析因素 A 和因素 B 对试验指标影响的大小，因此，在给定显著性水平 $\alpha$ 下，提出如下统计假设：

对于因素 $A$, “因素 A 对试验指标不显著” 等价于

$$H_{01}: \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_r = 0.$$

对于因素 $B$, “因素 B 对试验指标不显著” 等价于

$$H_{02}: \quad \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_s = 0.$$

双因素方差分析与单因素方差分析的统计原理基本相同, 也是基于平方和分解公式

$$S_T = S_E + S_A + S_B,$$

其中

$$\begin{aligned}
S_T &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}(x_{ij}-\bar{x})^2, \quad \bar{x} = \frac{1}{rs}\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s} x_{ij},\\
S_A &= s\sum_{i=1}^{r}(\bar{x}_{i\cdot}-\bar{x})^2, \qquad \bar{x}_{i\cdot} = \frac{1}{s}\sum_{j=1}^{s} x_{ij}, \quad i=1,2,\cdots,r,\\
S_B &= r\sum_{j=1}^{s}(\bar{x}_{\cdot j}-\bar{x})^2, \qquad \bar{x}_{\cdot j} = \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r} x_{ij}, \quad j=1,2,\cdots,s,\\
S_E &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}(x_{ij}-\bar{x}_{i\cdot}-\bar{x}_{\cdot j}+\bar{x})^2,
\end{aligned}$$

其中 $S_T$ 为总离差平方和， $S_E$ 为误差平方和， $S_A$ 是由因素 $A$ 的不同水平所引起的离差平方和 (称为因素 $A$ 的平方和). 类似地， $S_B$ 称为因素 $B$ 的平方和. 可以证明当 $H_{01}$ 成立时,

$$S_A/\sigma^2 \sim \chi^2(r-1),$$

且与 $S_E$ 相互独立，而

$$S_E/\sigma^2 \sim \chi^2((r-1)(s-1)).$$

于是当 $H_{01}$ 成立时,

$$F_A = \frac{S_A/(r-1)}{S_E/[(r-1)(s-1)]} \sim F\ (\ r-1,(r-1)(s-1)\ ).$$

类似地，当 $H_{02}$ 成立时,

$$F_B = \frac{S_B/(s-1)}{S_E/[(r-1)(s-1)]} \sim F\ (\ s-1,(r-1)(s-1)\ ).$$

分别以 $F_A$, $F_B$ 作为 $H_{01}$, $H_{02}$ 的检验统计量，将计算结果列成方差分析表，如表 7.12 所示.

**表 7.12: 双因素方差分析表**

| 方差来源 | 自由度 | 平方和 | 均方 | F 比 | p 值 |
|---|---|---|---|---|---|
| 因素 A | $r-1$ | $S_A$ | $MS_A = \frac{S_A}{r-1}$ | $F_A = \frac{MS_A}{MS_E}$ | $p_A$ |
| 因素 B | $s-1$ | $S_B$ | $MS_B = \frac{S_B}{s-1}$ | $F_B = \frac{MS_B}{MS_E}$ | $p_B$ |
| 误 差 | $(r-1)(s-1)$ | $S_E$ | $MS_E = \frac{S_E}{(r-1)(s-1)}$ | | |
| 总 和 | $rs-1$ | $S_T$ | | | |

### 3. 方差分析表的计算

仍然用 aov() 函数计算双因素方差分析表 7.12 中的各种统计量.

**例 7.10** (续例 7.9) 对例 *7.9* 的数据作双因素方差分析，试确定种子与施肥对产量有无显著影响?

**解**：输入数据，用 aov() 函数求解. 与单因素方差分析相同， summary() 无法给出总和行，这里用自编的函数 anova.tab() 得到方差分析表 (程序名：exam0710.R).

```
#### 用数据框的形式输入数据
> agriculture<-data.frame(
     Y=c(325, 292, 316, 317, 310, 318,
         310, 320, 318, 330, 370, 365),
     A=gl(4,3),
     B=gl(3,1,12)
  )
```

```
#### 作双因素方差分析
> agriculture.aov <- aov(Y ~ A+B, data=agriculture)
#### 调用自编函数 anova.tab(), 显示计算结果
> source("anova.tab.R"); anova.tab(agriculture.aov)
            Df Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
A            3 3824.2  1274.7  5.2262 0.04126 *
B            2  162.5    81.2  0.3331 0.72915
Residuals    6 1463.5   243.9
Total       11 5450.3
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

根据 p 值说明不同品种对产量有显著影响，而没有充分理由说明施肥方法对产量有显著的影响.

事实上在应用模型 (7.17) 时，遵循着一种假定，即因素 $A, B$ 对指标的效应是可以叠加的. 而且认为因素 $A$ 的各水平效应的比较，与因素 $B$ 在什么水平无关. 这里并没有考虑因素 $A, B$ 的各种水平组合 $(A_i, B_j)$ 的不同给产量带来的影响. 而这种影响在许多实际工作中是应该给予足够的重视的，这种影响被称为交互效应. 这就导出下面所要讨论的问题.

### 7.2.2 考虑交互作用

**1. 数学模型**

设有两个因素 $A$ 和 $B$, 因素 $A$ 有 $r$ 个水平 $A_1, A_2, \cdots, A_r$; 因素 $B$ 有 $s$ 个水平 $B_1, B_2, \cdots, B_s$, 每种水平组合 $(A_i, B_j)$ 下重复试验 $t$ 次. 记第 $k$ 次的观测值为 $x_{ijk}$, 将观测数据列表，如表 7.13 所示.

假定

$$x_{ijk} \sim N(\mu_{ij}, \sigma^2), \quad i = 1, 2, \ldots, r;\ j = 1, 2, \ldots, s;\ k = 1, 2, \ldots, t,$$

各 $x_{ijk}$ 相互独立. 所以，数据可以分解为

$$\begin{cases} x_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \delta_{ij} + \varepsilon_{ijk}, \\ \varepsilon_{ijk} \sim N(0, \sigma^2), \text{且各 } \varepsilon_{ijk} \text{ 相互独立}, \\ i = 1, 2, \cdots, r, \quad j = 1, 2, \cdots, s, \quad k = 1, 2, \ldots, t, \end{cases} \tag{7.18}$$

**表 7.13: 双因素重复试验数据**

| | $B_1$ | $B_2$ | $\cdots$ | $B_s$ |
|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | $x_{111}x_{112}\cdots x_{11t}$ | $x_{121}x_{122}\cdots x_{12t}$ | $\cdots$ | $x_{1s1}x_{1s2}\cdots x_{1st}$ |
| $A_2$ | $x_{211}x_{212}\cdots x_{21t}$ | $x_{221}x_{222}\cdots x_{22t}$ | $\cdots$ | $x_{2s1}x_{2s2}\cdots x_{2st}$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ |
| $A_r$ | $x_{r11}x_{r12}\cdots x_{r1t}$ | $x_{r21}x_{r22}\cdots x_{r2t}$ | $\cdots$ | $x_{rs1}x_{rs2}\cdots x_{rst}$ |

其中 $\alpha_i$ 为因素 $A$ 的第 $i$ 个水平的效应，$\beta_j$ 为因素 $B$ 的第 $j$ 个水平的效应. $\delta_{ij}$ 表示 $A_i$ 和 $B_j$ 的交互效应，因此有

$$\mu=\frac{1}{rs}\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}\mu_{ij},\qquad \sum_{i=1}^{r}\alpha_i=0,\qquad \sum_{j=1}^{s}\beta_j=0,\qquad \sum_{i=1}^{r}\delta_{ij}=\sum_{j=1}^{s}\delta_{ij}=0.$$

**2. 方差分析**

此时判断因素 $A,B$ 及交互效应的影响是否显著等价于检验下列假设

$$\begin{aligned}
&H_{01}: \quad \alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_r=0,\\
&H_{02}: \quad \beta_1=\beta_2=\cdots=\beta_r=0,\\
&H_{03}: \quad \delta_{ij}=0,\quad i=1,2,\cdots,r,\quad j=1,2,\cdots s.
\end{aligned}$$

在这种情况下，方差分析法与前两节的方法类似，有下列计算公式：

$$S_T=S_E+S_A+S_B+S_{A\times B},$$

其中

$$\begin{aligned}
S_T &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{t}(x_{ijk}-\bar{x})^2,\quad \bar{x}=\frac{1}{rst}\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{t}x_{ijk},\\
S_E &= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{t}(x_{ijk}-\bar{x}_{ij.})^2,\\
\bar{x}_{ij.} &= \frac{1}{t}\sum_{k=1}^{t}x_{ijk},\quad i=1,2,\cdots,r,\quad j=1,2,\ldots,s,
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
S_A &= st\sum_{i=1}^{r}(\bar{x}_{i\cdot\cdot}-\bar{x})^2, \quad \bar{x}_{i\cdot\cdot} = \frac{1}{st}\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{t} x_{ijk}, \quad i=1,2,\cdots,r,\\
S_B &= rt\sum_{j=1}^{s}(\bar{x}_{\cdot j\cdot}-\bar{x})^2, \quad \bar{x}_{\cdot j\cdot} = \frac{1}{rt}\sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{t} x_{ijk}, \quad j=1,2,\cdots,s,\\
S_{A\times B} &= t\sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{s}(\bar{x}_{ij\cdot}-\bar{x}_{i\cdot\cdot}-\bar{x}_{\cdot j\cdot}+\bar{x})^2,
\end{aligned}
$$

其中 $S_T$ 为总离差平方和， $S_E$ 为误差平方和， $S_A$ 为因素 $A$ 的平方和， $S_B$ 为因素 $B$ 的平方和， $S_{A\times B}$ 为交互效应平方和. 可以证明：当 $H_{01}$ 成立时,

$$F_A = \frac{S_A/(r-1)}{S_E/[rs(t-1)]} \sim F(r-1, rs(t-1)).$$

当 $H_{02}$ 成立时,

$$F_B = \frac{S_B/(s-1)}{S_E/[rs(t-1)]} \sim F(s-1, rs(t-1)).$$

当 $H_{03}$ 成立时,

$$F_{A\times B} = \frac{S_{A\times B}/[(r-1)(s-1)]}{S_E/[rs(t-1)]} \sim F((r-1)(s-1), rs(t-1)).$$

分别以 $F_A$, $F_B$, $F_{A\times B}$ 作为 $H_{01}$, $H_{02}$, $H_{03}$ 的检验统计量， 将检验结果列成方差分析表，如表 7.14 所示.

**表 7.14: 有交互效应的双因素方差分析表**

| 方差来源 | 自由度 | 平方和 | 均方 | F 比 | P- 值 |
|---|---|---|---|---|---|
| 因素 A | $r-1$ | $S_A$ | $MS_A = \frac{S_A}{r-1}$ | $F_A = \frac{MS_A}{MS_E}$ | $p_A$ |
| 因素 B | $s-1$ | $S_B$ | $MS_B = \frac{S_B}{s-1}$ | $F_B = \frac{MS_B}{MS_E}$ | $p_B$ |
| 交互效应 $A\times B$ | $(r-1)(s-1)$ | $S_{A\times B}$ | $MS_{A\times B} = \frac{S_{A\times B}}{(r-1)(s-1)}$ | $F_{A\times B} = \frac{MS_{A\times B}}{MS_E}$ | $p_{A\times B}$ |
| 误 差 | $rs(t-1)$ | $S_E$ | $MS_E = \frac{S_E}{rs(t-1)}$ | | |
| 总 和 | $rst-1$ | $S_T$ | | | |

**例 7.11** 研究树种与地理位置对松树生长的影响, 对四个地区的三种同龄松树的直径进行测量得到数据如下表 *7.15* 所示 *(*单位： *cm)*. $A_1, A_2, A_3$ 表示三个不

**表 7.15: 三种同龄松树的直径测量数据**

| | $B_1$ | | | $B_2$ | | | $B_3$ | | | $B_4$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 23 | 25 | 21 | 20 | 17 | 11 | 16 | 19 | 13 | 20 | 21 | 18 |
| | 14 | 15 | | 26 | 21 | | 16 | 24 | | 27 | 24 | |
| $A_2$ | 28 | 30 | 19 | 26 | 24 | 21 | 19 | 18 | 19 | 26 | 26 | 28 |
| | 17 | 22 | | 25 | 26 | | 20 | 25 | | 29 | 23 | |
| $A_3$ | 18 | 15 | 23 | 21 | 25 | 12 | 19 | 23 | 22 | 22 | 13 | 12 |
| | 18 | 10 | | 12 | 22 | | 14 | 13 | | 22 | 19 | |

同树种， $B_1, B_2, B_3, B_4$ 表示四个不同地区. 对每一种水平组合, 进行了 *5* 次测量, 对此试验结果进行方差分析.

**解**: 用数据框的形式输入数据, 调用 `aov()` 函数计算, 再调用 `anova.tab()` 函数显示 (程序名： `exam0711.R`).

```
> tree<-data.frame(
    Y=c(23, 25, 21, 14, 15, 20, 17, 11, 26, 21,
        16, 19, 13, 16, 24, 20, 21, 18, 27, 24,
        28, 30, 19, 17, 22, 26, 24, 21, 25, 26,
        19, 18, 19, 20, 25, 26, 26, 28, 29, 23,
        18, 15, 23, 18, 10, 21, 25, 12, 12, 22,
        19, 23, 22, 14, 13, 22, 13, 12, 22, 19),
    A=gl(3,20,60),
    B=gl(4,5,60)
  )
> tree.aov <- aov(Y ~ A+B+A:B, data=tree)
> source("anova.tab.R"); anova.tab(tree.aov)
            Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
A            2  352.53  176.27  8.9589 0.000494 ***
```

```
B            3   87.52   29.17  1.4827 0.231077
A:B          6   71.73   11.96  0.6077 0.722890
Residuals   48  944.40   19.67
Total       59 1456.18
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

可见在显著性水平 $\alpha = 0.05$ 下，树种 (行) 效应是高度显著的，而位置 (列) 效应及交互效应并不显著.

### 7.2.3 方差齐性检验

与单因素方差分析相同，对于双因素方差分析，数据也应满足正态性和方差齐性的要求.

**例 7.12** *检验例 7.11 中的数据对于因素 $A$ 和因素 $B$ 是否是正态的？是否满足方差齐性的要求？*

**解**：仍然采用 W 正态检验检验数据的正态性，用 Bartlett 检验检验方差齐性 (程序名： exam0712.R).

```
> attach(tree)
> shapiro.test(Y[A==1])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[A == 1]
W = 0.9759, p-value = 0.8703

> shapiro.test(Y[A==2])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[A == 2]
W = 0.9439, p-value = 0.2837

> shapiro.test(Y[A==3])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[A == 3]
W = 0.9106, p-value = 0.06552
```

```
> shapiro.test(Y[B==1])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[B == 1]
W = 0.9835, p-value = 0.988

> shapiro.test(Y[B==2])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[B == 2]
W = 0.8537, p-value = 0.01963

> shapiro.test(Y[B==3])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[B == 3]
W = 0.9483, p-value = 0.4986

> shapiro.test(Y[B==4])
        Shapiro-Wilk normality test
data:  Y[B == 4]
W = 0.9452, p-value = 0.4521

> bartlett.test(Y~A, data=tree)
        Bartlett test of homogeneity of variances
data:  Y by A
Bartlett's K-squared = 0.59, df = 2, p-value = 0.7445

> bartlett.test(Y~B, data=tree)
        Bartlett test of homogeneity of variances
data:  Y by B
Bartlett's K-squared = 2.0436, df = 3, p-value = 0.5634
```

数据只对因素 B 的第二个水平不满足正态性要求，其余均满足；对于因素 A 和因素 B 均满足方差齐性要求.

## 7.3 正交试验设计与方差分析

前面介绍的是一个因素或两个因素的试验，由于因素较少，可以对不同因素的所有可能的水平组合做试验，这种称为全面试验．当因素较多时，虽然理论上仍可采用前面的方法进行全面试验后再做相应的方差分析，但是在实际中有时会遇到试验次数太多的问题．如三因素四水平的问题，所有不同水平的组合有 $4^3 = 64$ 种，在每一种组合只进行一次试验，也需要做 64 次．如果考虑更多的因素及水平，则全面试验的次数可能大得惊人．因此在实际应用中，对于多因素做全面试验是不现实的．于是可以考虑是否选择其中一部分组合进行试验，这就要用到试验设计方法选择合理的试验方案，使得试验次数不多，但也能得到比较满意的结果．

### 7.3.1 用正交表安排试验

正交表是一系列规格化的表格，每个表格都有一个记号，如 $L_8(2^7)$, $L_9(3^4)$ 等．表 7.16 表示的是正交表 $L_8(2^7)$ 和正交表 $L_9(3^4)$．以 $L_9(3^4)$ 为例， $L$ 表示正

**表 7.16: 正交表**

$L_8(2^7)$ 表

| 试验号 | 列号 | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 1 | 2 | 2 | 1 | 1 | 2 | 2 |
| 4 | 1 | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 |
| 5 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 |
| 6 | 2 | 1 | 2 | 2 | 1 | 2 | 1 |
| 7 | 2 | 2 | 1 | 1 | 2 | 2 | 1 |
| 8 | 2 | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 2 |

$L_9(3^4)$ 表

| 试验号 | 列号 | | | |
|---|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 1 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 1 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 2 | 1 | 2 | 3 |
| 5 | 2 | 2 | 3 | 1 |
| 6 | 2 | 3 | 1 | 2 |
| 7 | 3 | 1 | 3 | 2 |
| 8 | 3 | 2 | 1 | 3 |
| 9 | 3 | 3 | 2 | 1 |

交表， 9 表示正交表的行数，表示需要试验次数． 4 是正交表的列数，表示最多可以安排的因素的个数． 3 是因素水平数，表示此表可以安排三水平的试验．

从表 7.16 可见， $L_9(3^4)$ 有 9 行， 4 列，表中由数字 1, 2, 3 组成， $L_8(2^7)$ 有 8 行， 7 列，表中数字由 1, 2 组成.

用正交表安排试验时, 根据因素和水平个数的多少以及试验工作量的大小来考虑用哪张正交表，下面举例说明.

**例 7.13** 为提高某种化学产品的转化率 (%), 考虑三个有关因素: 反应温度 $A(^oC)$, 反应时间 $B(\min)$ 和用碱量 $C(\%)$. 各因素选取三个水平，如表 7.17 所示. 如

**表 7.17: 转化率试验因素水平表**

| 因 素 | 水 平 | | |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 |
| 反应温度 $A(^oC)$ | 80 | 85 | 90 |
| 反应时间 $B(\min)$ | 90 | 120 | 150 |
| 用碱量 $C(\%)$ | 5 | 6 | 7 |

何用正交表安排试验得到较好的生产方案？

**解**: 如果做全面试验，则需要 $3^3 = 27$ 次试验. 若用正交表 $L_9(3^4)$, 仅做 9 次试验. 将三个因素 A, B, C 分别放在 $L_9(3^4)$ 表的任意三列上，如将 A, B, C 分别放在第 1, 2, 3 列上. 将表中 A, B, C 所在的三列的数字 1, 2, 3 分别用相应的因素水平去代替，得 9 次试验方案. 以上工作称为表头设计. 再将 9 次试验结果转化率数据列于表上 (见表 7.18).

计算各种因素和水平下转化率的平均值 (尽管计算非常简单，但为了便于推广起见，还是用 R 软件进行计算).

用数据框形式输入转化率试验的正交表数据, 并计算各个因素水平下的平均值 (程序名： exam0713.R).

```
> rate<-data.frame(
     A=gl(3,3),
     B=gl(3,1,9),
     C=factor(c(1,2,3,2,3,1,3,1,2)),
     Y=c(31, 54, 38, 53, 49, 42, 57, 62, 64)
  )
> K<-matrix(0, nrow=3, ncol=3, dimnames=list(1:3, c("A","B","C")))
> for (j in 1:3)
```

**表 7.18: 转化率试验的正交表**

| 试验号 | 反应温度 $A$ | 反应时间 $B$ | 催化剂含量 $C$ | 转化率 |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 80 (1) | 90 (1) | 5 (1) | 31 |
| 2 | 80 (1) | 120 (2) | 6 (2) | 54 |
| 3 | 80 (1) | 150 (3) | 7 (3) | 38 |
| 4 | 85 (2) | 90 (1) | 6 (2) | 53 |
| 5 | 85 (2) | 120 (2) | 7 (3) | 49 |
| 6 | 85 (2) | 150 (3) | 5 (1) | 42 |
| 7 | 90 (3) | 90 (1) | 7 (3) | 57 |
| 8 | 90 (3) | 120 (2) | 5 (1) | 62 |
| 9 | 90 (3) | 150 (3) | 6 (2) | 64 |

```
    for (i in 1:3)
       K[i,j]<-mean(rate$Y[rate[j]==i])
> K
   A  B  C
1 41 47 45
2 48 55 57
3 61 48 48
```

用 A, B, C 三列的值 $K_1, K_2, K_3$ 作图，其命令如下：

```
> plot(as.vector(K), axes=F, xlab="Level", ylab="Rate")
> xmark<-c(NA,"A1","A2","A3","B1","B2","B3","C1","C2","C3",NA)
> axis(1,0:10,labels=xmark)
> axis(2,4*10:16)
> axis(3,0:10,labels=xmark)
> axis(4,4*10:16)
> lines(K[,"A"]); lines(4:6, K[,"B"]); lines(7:9,K[,"C"])
```

图形如图 7.3 所示.

从图 7.3 可以看出：

(1) 温度越高其转化率越高，以 $90^oC(A_3)$ 最好，还应探索更高温度的情况；

(2) 反应时间以 120 分钟 $(B_2)$ 转化率最高；

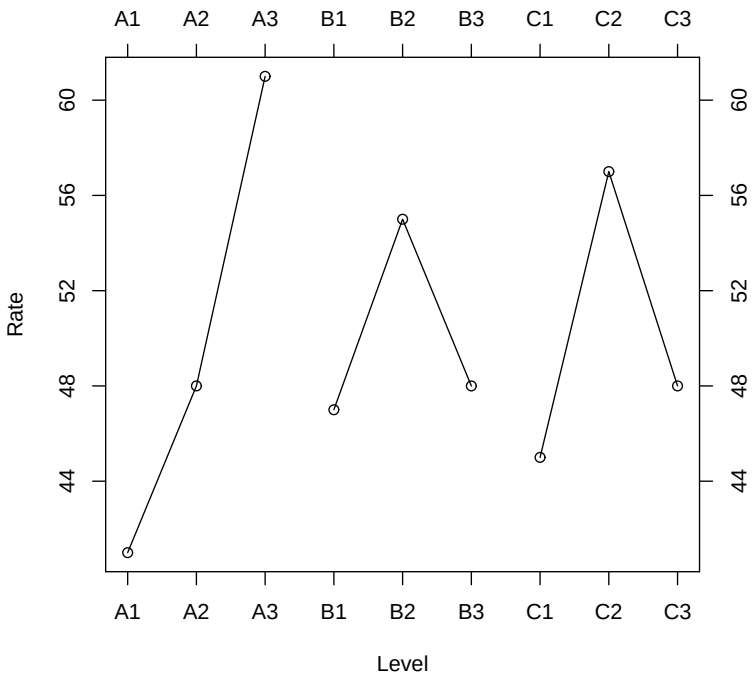



图 7.3: 三因素与指标关系数

(3) 用碱量以 $6\%(C_2)$ 转化率最高.

综合起来， $A_3B_2C_2$ 可能是较好的工艺条件. 但是，我们发现这个工艺条件并不在九次试验中，它是否好还要通过实践来检验. 因此需要对于 $A_3B_2C_2$ 再作一次试验，得到相应的转化率 $(74\%)$，并与最好的试验 (第 9 号试验， $A_3B_3C_2$) 进行比较，它的转化率为 $64\%$，所以可以说明选出的工艺是比较好的. 可以证明，当因素之间没有相互作用时，用这种方法选出的工艺条件就是全面试验中最好的.

### 7.3.2 正交试验的方差分析

对于例 7.13 的试验，如果用交叉分组全面试验需 27 次，而正交试验只用了 9 次，自然要问，这 9 次试验是否能大体上反映 27 次试验的结果？如果能反映又是为什么？

首先假定三个因素之间没有交互作用， 9 次试验的结果以 $y_1, y_2, \cdots, y_9$ 表示，根据一般线性模型的假定，数据可分解为

$$\begin{aligned} y_1 &= \mu + a_1 + b_1 + c_1 + \varepsilon_1, \\ y_2 &= \mu + a_1 + b_2 + c_2 + \varepsilon_2, \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
y_3 &= \mu + a_1 + b_3 + c_3 + \varepsilon_3,\\
y_4 &= \mu + a_2 + b_1 + c_2 + \varepsilon_4,\\
y_5 &= \mu + a_2 + b_2 + c_3 + \varepsilon_5,\\
y_6 &= \mu + a_2 + b_3 + c_1 + \varepsilon_6,\\
y_7 &= \mu + a_3 + b_1 + c_3 + \varepsilon_7,\\
y_8 &= \mu + a_3 + b_2 + c_1 + \varepsilon_8,\\
y_9 &= \mu + a_3 + b_3 + c_2 + \varepsilon_9,
\end{aligned}
$$

其中 $\sum\limits_{i=1}^{3} a_i = \sum\limits_{j=1}^{3} b_j = \sum\limits_{k=1}^{3} c_k = 0$, $\varepsilon_i \sim N(0,\sigma^2)$ $(i = 1, 2, \cdots, 9)$, 且相互独立.

对此模型考虑如下三种假设的检验问题:

$$
\begin{aligned}
H_{01}: &\quad a_1 = a_2 = a_3 = 0,\\
H_{02}: &\quad b_1 = b_2 = b_3 = 0,\\
H_{03}: &\quad c_1 = c_2 = c_3 = 0.
\end{aligned}
$$

若 $H_{01}$ 成立, 则说明因素 A 的三个水平对指标 $y$ 的影响无显著差异. 类似地, 若 $H_{02}$(或 $H_{03}$) 成立, 则表示因素 B(因素 C) 的三个水平对指标 $y$ 的影响无显著差异.

类似于单因素和双因素方法, 对于正交试验也可以导出相应的方差分析表 (具体过程可见其他的统计书籍), 其表格形式如表 7.19 所示.

**表 7.19: 正交试验设计的方差分析表**

| 方差来源 | 自由度 | 平方和 | 均方 | F 比 | P- 值 |
|---|---|---|---|---|---|
| 因素 1 | $a-1$ | $S_1$ | $MS_1 = \frac{S_1}{a-1}$ | $F_1 = \frac{MS_1}{MS_E}$ | $p_1$ |
| 因素 2 | $a-1$ | $S_2$ | $MS_2 = \frac{S_2}{a-1}$ | $F_2 = \frac{MS_2}{MS_E}$ | $p_2$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |
| 因素 $m$ | $a-1$ | $S_m$ | $MS_m = \frac{S_m}{a-1}$ | $F_m = \frac{MS_m}{MS_E}$ | $p_m$ |
| 误 差 | $n-m(a-1)-1$ | $S_E$ | $MS_E = \frac{S_E}{n-m(a-1)-1}$ | | |
| 总 和 | $n-1$ | $S_T$ | | | |

在表 7.19 中， $n$ 为试验总次数， $m$ 为因素个数， $a$ 为每个因素的试验水平， $r$ 为每个水平的试验次数，即 $n = ra$. P– 值与前面方差分析表中的意义是相同的，即当 $p_i < \alpha$, 则认为因素 $i$ 有显著差异.

**例 7.14** (续例 7.13) 对正交试验进行方差分析.

**解**: 直接用 R 软件求解.

```
> rate.aov<-aov(Y~A+B+C, data=rate)
> source("anova.tab.R"); anova.tab(rate.aov)
            Df Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
A            2    618     309 34.3333 0.02830 *
B            2    114      57  6.3333 0.13636
C            2    234     117 13.0000 0.07143 .
Residuals    2     18       9
Total        8    984
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

从计算结果可以看到，转化率对于因素 A 很显著，所以因素 A 水平的选取很重要；转化率对因素 C 的显著，因此，因素 C 水平的选取也重要，因素 B 不显著，所以为了节约能源，可以选择最短的反映时间，因此，工艺条件可以选择 $A_3B_1C_2$.

### 7.3.3 有交互作用的试验

在作双因素方差分析时，讲到因素之间有搭配作用，这个搭配作用被称为交互作用. 实际上，在正交试验设计中，也可以分析因素之间交互作用的影响.

还是用例子说明问题.

**例 7.15** 在梳棉机上纺粘锦混纺纱，为了提高质量，选了三个因素，每个因素两个水平. 如表 7.20 所示. 三个因素间可能有交互作用. 要设计一个试验方案.

**解**: 首先设计表头. 这是一个三因素两水平的试验，用正交表 $L_8(2^7)$ 比较合适 (见表 7.16). 对于 $L_8(2^7)$ 还有一个各列间的交互作用表，如表 7.21 所示.

如果将 A 放在第 1 列， B 放在第 2 列，查表 7.21 的第 “1” 行，第 “2” 列，对应的数是 3, 即第 3 列反映了 $A \times B$. 如果把 A 放在第 3 列， B 放在第 5 列，

**表 7.20: 纺粘锦混纺纱的试验因素水平表**

| 因　素 | 水　平 | |
|---|---|---|
| | 1 | 2 |
| 金属针布 ($A$) | 进口的 | 国产的 |
| 产量水平 ($B$) | 6 千克 | 10 千克 |
| 锡林速度 ($C$) | 238 转 / 分 | 320 转 / 分 |

**表 7.21: $L_8(2^7)$ 二列间的交互作用表**

| 列号 | 列　号 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 1 | 3 | 2 | 5 | 4 | 7 | 6 |
| 2 | | 1 | 6 | 7 | 4 | 5 |
| 3 | | | 7 | 6 | 5 | 4 |
| 4 | | | | 1 | 2 | 3 |
| 5 | | | | | 2 | 3 |
| 6 | | | | | | 1 |

查表 7.21 “3” 行 “5” 列，对应的数是 6, 即 $A \times B$ 在第 6 列. 这样一个表对于如何安排试验是很重要的.

通过分析，我们将 A 放在第 1 列， B 放在第 2 列，则第 3 列表示 $A \times B$, C 放在第 4 列，则第 5 列表示 $A \times C$, 第 6 列表示 $B \times C$, 第 7 列是空列. 然后再将 8 次试验结果棉结粒数放在第 8 列上 (见表 7.22).

做方差分析. 用数据框输入数据，用 aov() 函数做方差分析，用自编的函数 anova.tab() 列出方差分析表 (程序名： exam0715.R).

```
> cotton<-data.frame(
    Y=c(0.30, 0.35, 0.20, 0.30, 0.15, 0.50, 0.15, 0.40),
    A=gl(2,4), B=gl(2,2,8), C=gl(2,1,8)
  )
> cotton.aov<-aov(Y~A+B+C+A:B+A:C+B:C, data=cotton)
```

**表 7.22: 纺粘锦混纺纱试验的正交表**

| 列 号 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 棉结 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 试验号 | A | B | A×B | C | A×C | B×C | (空) | 粒数 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0.30 |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 2 | 2 | 2 | 2 | 0.35 |
| 3 | 1 | 2 | 2 | 1 | 1 | 2 | 2 | 0.20 |
| 4 | 1 | 2 | 2 | 2 | 2 | 1 | 1 | 0.30 |
| 5 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | 0.15 |
| 6 | 2 | 1 | 2 | 2 | 1 | 2 | 1 | 0.50 |
| 7 | 2 | 2 | 1 | 1 | 2 | 2 | 1 | 0.15 |
| 8 | 2 | 2 | 1 | 2 | 1 | 1 | 2 | 0.40 |

```
> source("anova.tab.R"); anova.tab(cotton.aov)
            Df   Sum Sq  Mean Sq F value Pr(>F)
A            1 0.000313 0.000313  0.1111 0.7952
B            1 0.007812 0.007812  2.7778 0.3440
C            1 0.070313 0.070313 25.0000 0.1257
A:B          1 0.000312 0.000312  0.1111 0.7952
A:C          1 0.025313 0.025313  9.0000 0.2048
B:C          1 0.000313 0.000313  0.1111 0.7952
Residuals    1 0.002812 0.002812
Total        7 0.107188
```

从计算结果可以看出，棉结粒数关于任何因素都不显著.

再作进一步的分析. 对于因素 A, 因素 A:B 和因素 B:C, 它们的 F 值很小，P 值很大，因此，它们影响棉结粒数更不显著 (也就是说，是次要因素). 所以在分析模型中，将这三个因素去掉.

```
> cotton.new<-aov(Y~B+C+A:C, data=cotton)
> anova.tab(cotton.new)
            Df   Sum Sq  Mean Sq F value   Pr(>F)
B            1 0.007812 0.007812  6.8182 0.079605 .
C            1 0.070313 0.070313 61.3636 0.004332 **
```

```
C:A          2 0.025625 0.012812 11.1818 0.040678 *
Residuals    3 0.003437 0.001146
Total        7 0.107187
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

从结果可以看出，最显著的是因素 C, 其次是交互效应 A×C, 最后是因素 B. 那么我们选择哪些因素作为最后的结果呢？还需要计算各个因素下的均值. 为方便起见，先编写一个函数，将各因素的交互情况计算出来.

```
> ab<-function(x,y){
     n<-length(x); z<-rep(0,n)
     for (i in 1:n)
        if (x[i]==y[i]){z[i]<-1} else{z[i]<-2}
     factor(z)
  }
> cotton$AC<-ab(cotton$A, cotton$C)
```

再计算各因素的均值.

```
> K<-matrix(0, nrow=2, ncol=4,
     dimnames=list(1:2, c("A", "B", "C", "AC")))
> for (j in 2:5)
    for (i in 1:2)
       K[i,j-1]<-mean(cotton$Y[cotton[j]==i])
> K
       A      B      C     AC
1 0.2875 0.3250 0.2000 0.3500
2 0.3000 0.2625 0.3875 0.2375
```

因为因素 C 最显著，所以先选择因素 C, 选因素 C 用第 1 个水平 (因为棉结粒数越少越好), 因素 A×C 次显著，所以再选择因素 AC, 应该是第 2 个水平. 由于因素 C 已选择第 1 个水平，所以因素 A 只能选择第 2 个水平 (注意，这与直接选择因素 A 是矛盾的，这是因为棉结粒数关于因素 AC 是显著的，而关于因素 A 是不显著的，所以要从因素 AC 来考虑问题). 最后，选择因素 B, 应是第 2 个水平. 最后结果为 $A_2B_2C_1$. 即较好的生产方案选择为：金属针布是国产的；

产量是 10 千克；锡林速度为 238 转 / 分.

### 7.3.4 有重复试验的方差分析

类似前面的分析，对于正交试验设计也可以考虑带有重复试验的数据. 这里仅用一个例子说明.

**例 7.16** 在研究四种药物对淡色库蚊的杀灭作用的试验中，每种药物取三水平，试验安排如表 7.20 所示. 试采取 $L_9(3^4)$ 正交表，在不考虑交互作用，相同试验条件下均做 4 次重复试验下，检验四种药物对淡色库蚊杀灭作用有无差别，试选择较好灭蚊方案.

**表 7.23: 对淡色库蚊杀灭作用试验的试验因素水平表**

| 因素 | 水平 | | |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 |
| A | 2% | 4% | 5% |
| B | 0% | 1% | 2% |
| C | 0% | 1% | 3% |
| D | 0% | 1% | 3% |

**解**: 用 $L_9(3^4)$ 正交表列出表头，并将试验结果填在表后的各列.

用数据框输入数据，再作方差分析. 然后计算各因素情况下对淡色库蚊的 50% 击倒时间平均值.

```
> mosquito<-data.frame(
    A=gl(3, 12), B=gl(3,4,36),
    C=factor(rep(c(1,2,3,2,3,1,3,1,2),rep(4,9))),
    D=factor(rep(c(1,2,3,3,1,2,2,3,1),rep(4,9))),
    Y=c( 9.41,  7.19, 10.73,  3.73, 11.91, 11.85, 11.00, 11.72,
        10.67, 10.70, 10.91, 10.18,  3.87,  3.18,  3.80,  4.85,
         4.20,  5.72,  4.58,  3.71,  4.29,  3.89,  3.88,  4.71,
         7.62,  7.01,  6.83,  7.41,  7.79,  7.38,  7.56,  6.28,
         8.09,  8.17,  8.14,  7.49)
  )
```

**表 7.24: 四种对淡色库蚊的 50% 击倒时间的正交试验表**

| 试验号 | A | B | C | D | 50% 击倒时间 /s | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 9.41 | 7.19 | 10.73 | 3.73 |
| 2 | 1 | 2 | 2 | 2 | 11.91 | 11.85 | 11.00 | 11.72 |
| 3 | 1 | 3 | 3 | 3 | 10.67 | 10.70 | 10.91 | 10.18 |
| 4 | 2 | 1 | 2 | 3 | 3.87 | 3.18 | 3.80 | 4.85 |
| 5 | 2 | 2 | 3 | 1 | 4.20 | 5.72 | 4.58 | 3.71 |
| 6 | 2 | 3 | 1 | 2 | 4.29 | 3.89 | 3.88 | 4.71 |
| 7 | 3 | 1 | 3 | 2 | 7.62 | 7.01 | 6.83 | 7.41 |
| 8 | 3 | 2 | 1 | 3 | 7.79 | 7.38 | 7.56 | 6.28 |
| 9 | 3 | 3 | 2 | 1 | 8.09 | 8.17 | 8.14 | 7.49 |

```
> mosquito.aov<-aov(Y~A+B+C+D, data=mosquito)
> source("anova.tab.R"); anova.tab(mosquito.aov)
            Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
A            2 201.310 100.655 77.4884 6.504e-12 ***
B            2  15.920   7.960  6.1280  0.006393 **
C            2  13.297   6.648  5.1182  0.013042 *
D            2   5.021   2.510  1.9326  0.164282
Residuals   27  35.072   1.299
Total       35 270.619
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
> K<-matrix(0, nrow=3, ncol=4,
     dimnames=list(1:3, c("A", "B", "C", "D")))
> for (j in 1:4)
    for (i in 1:3)
       K[i,j]<-mean(mosquito$Y[mosquito[j]==i])
> K
          A        B        C        D
1 10.000000 6.302500 6.403333 6.763333
```

```
2  4.223333 7.808333 7.839167 7.676667
3  7.480833 7.593333 7.461667 7.264167
```

灭蚊效果对因素的显著性依次是因素 A 、因素 B 、因素 C 和因素 D(因素 D 不显著). 从计算出的平均时间 (时间越短越好), 可以看出，选择较好的方案是:

$$A_2B_1C_1D_1.$$

# 习题七

**7.1** 三个工厂生产同一种零件. 现从各厂产品中分别抽取 *4* 件产品作检测，其检测强度如表 *7.25* 所示.

**表 7.25: 产品检测数据**

| 工厂 | 零 件 强 度 | | | |
|---|---|---|---|---|
| 甲 | 115 | 116 | 98 | 83 |
| 乙 | 103 | 107 | 118 | 116 |
| 丙 | 73 | 89 | 85 | 97 |

*(1)* 对数据作方差分析, 判断三个厂生产的产品的零件强度是否有显著差异;

*(2)* 求每个工厂生产产品零件强度的均值, 作出相应的区间估计 $(\alpha = 0.05)$;

*(3)* 对数据作多重检验。

**7.2** 有四种产品. $A_i, i = 1, 2, 3$ 分别为国内甲、乙、丙三个工厂生产的产品，$A_4$ 国外同类产品. 现从各厂分别取 *10, 6, 6* 和 *2* 个产品做 *300* 小时连续磨损老化试验，得变化率如表 *7.26* 所示. 假定各厂产品试验变化率服从等方差的正态

**表 7.26: 磨损老化试验数据**

| 产品 | 变 化 率 | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $A_1$ | 20 | 18 | 19 | 17 | 15 | 16 | 13 | 18 | 22 | 17 |
| $A_2$ | 26 | 19 | 26 | 28 | 23 | 25 | | | | |
| $A_3$ | 24 | 25 | 18 | 22 | 27 | 24 | | | | |
| $A_4$ | 12 | 14 | | | | | | | | |

分布.

*(1)* 试问四个厂生产的产品的变化率是否有显著差异？

*(2)* 若有差异，请做进一步的检验. *i)* 国内产品与国外产品有无显著差异？*ii)* 国内各厂家的产品有无显著差异？

**7.3** 某单位在大白鼠营养试验中，随机将大白鼠分为三组，测得每组 *12* 只大白鼠尿中氨氮的排出量 $X$*(mg/6 d)*, 数据由表 *7.27* 所示. 试对该资料作正态性检验和方差齐性检验.

**表 7.27: 白鼠尿中氨氮检测数据**

| 白鼠 | 大白鼠营养试验中各组大鼠尿中氨氮排出量 (mg/6 d) | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 第一组 | 30 | 27 | 35 | 35 | 29 | 33 | 32 | 36 | 26 | 41 | 33 | 31 |
| 第二组 | 43 | 45 | 53 | 44 | 51 | 53 | 54 | 37 | 47 | 57 | 48 | 42 |
| 第三组 | 82 | 66 | 66 | 86 | 56 | 52 | 76 | 83 | 72 | 73 | 59 | 53 |

**7.4** 以小白鼠为对象研究正常肝核糖核酸 *(RNA)* 对癌细胞的生物作用，试验分别为对照组 *(*生理盐水*)* 、水层 *RNA* 组和酚层 *RNA* 组，分别用此三种不同处理诱导肝癌细胞的果糖二磷酸酯酶 *(FDP* 酶*)* 活力，数据如表 *7.28* 所示. 问三种不同处理的诱导作用是否相同？

**表 7.28: 三种不同处理的诱导结果**

| 处理方法 | 诱 导 结 果 | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 对照组 | 2.79 | 2.69 | 3.11 | 3.47 | 1.77 | 2.44 | 2.83 | 2.52 |
| 水层 RNA 组 | 3.83 | 3.15 | 4.70 | 3.97 | 2.03 | 2.87 | 3.65 | 5.09 |
| 酚层 RNA 组 | 5.41 | 3.47 | 4.92 | 4.07 | 2.18 | 3.13 | 3.77 | 4.26 |

**7.5** 为研究人们在催眠状态下对各种情绪的反应国是否有差异，选取了 *8* 个受试者. 在催眠状态下，要求每人按任意次序做出恐惧、愉快、忧虑和平静 *4* 种反应. 表 *7.29* 给出了各受试者在处于这 *4* 种情绪状态下皮肤的电位变化值. 试在 $\alpha = 0.05$ 下，检验受试者在催眠状态下对这 *4* 种情绪的反应力是否有显著差异.

**表 7.29: 4 种情绪状态下皮肤的电位变化值 (单位： mV)**

| 情绪状态 | 受 试 者 | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| 恐惧 | 23.1 | 57.6 | 10.5 | 23.6 | 11.9 | 54.6 | 21.0 | 20.3 |
| 愉快 | 22.7 | 53.2 | 9.7 | 19.6 | 13.8 | 47.1 | 13.6 | 23.6 |
| 忧虑 | 22.5 | 53.7 | 10.8 | 21.1 | 13.7 | 39.2 | 13.7 | 16.3 |
| 平静 | 22.6 | 53.1 | 8.3 | 21.6 | 13.3 | 37.0 | 14.8 | 14.8 |

**7.6** 为了提高化工厂的产品质量，需要寻求最优反应温度与反应压力的配合，为此选择如下水平：

*A:* 反应温度（ $^0C$ ） *60 70 80*

*B:* 反应压力（公斤） *2 2.5 3*

在每个 $A_iB_j$ 条件下做两次试验，其产量如表 *7.30* 所示.

**表 7.30: 试验数据**

| | $A_1$ | | $A_2$ | | $A_3$ | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $B_1$ | 4.6 | 4.3 | 6.1 | 6.5 | 6.8 | 6.4 |
| $B_2$ | 6.3 | 6.7 | 3.4 | 3.8 | 4.0 | 3.8 |
| $B_3$ | 4.7 | 4.3 | 3.9 | 3.5 | 6.5 | 7.0 |

*(1)* 对数据作方差分析（应考虑交互作用）;

*(2)* 求最优条件下平均产量的点估计和区间估计;

*(3)* 对 $A_iB_j$ 条件下平均产量作多重比较。

**7.7** 某良种繁殖场为了提高水稻产量，制定试验的因素如表 *7.31* 所示. 试选择 $L_9(3^4)$ 正交表安排试验，假定相应的产量为 *(*单位： *kg/100m$^2$)*

62.925 57.075 51.6 55.05 58.05 56.55 63.225 50.7 54.45

试对试验结果进行方差分析，并给出一组较好的种殖条件.

**7.8** 某单位研究四种因素对钉螺产卵数 $(Y)$ 的影响，制定试验的因素如表 *7.32* 所示. 试选择 $L_8(2^7)$ 正交表安排试验，假定相应的钉螺产卵数为 *(*单位：个*)*

**表 7.31: 水稻的试验因素水平表**

| 因　素 | 水　平 | | |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 |
| 品种 | 窄叶青 8 号 | 南二矮 5 号 | 珍珠矮 11 号 |
| 密度 | 4.50 棵 /100m$^2$ | 3.75 棵 /100m$^2$ | 3.00 棵 /100m$^2$ |
| 施肥量 | 0.75 kg/100m$^2$ | 0.375 kg/100m$^2$ | 1.125 kg/100m$^2$ |

86　95　91　94　91　96　83　88

试对试验结果进行方差分析，并给出一组较好灭螺方案 *(考虑有交互作用).*

**表 7.32: 钉螺产卵影响试验因素的水平表**

| 因　素 | 水　平 | |
|---|---|---|
| | 1 | 2 |
| 温度 $(A)$ | $5^oC$ | $10^oC$ |
| 含氧量 $(B)$ | 0.5 | 5.0 |
| 含水量 $(C)$ | 10% | 30% |
| pH 值 $(D)$ | 6.0 | 8.0 |

**7.9** 某工厂为了提高零件内孔研磨工序质量进行工艺的参数选优试验，考察孔的锥度值，希望其越小越好. 在试验中考察因子的水平表 *7.33.* 试选择 $L_8(2^7)$ 正

**表 7.33: 因子水平表**

| 因　素 | 水　平 | |
|---|---|---|
| | 1 | 2 |
| 研孔工艺设备 $(A)$ | 通用夹具 | 专用夹具 |
| 生铁研圈材质 $(B)$ | 特殊铸铁 | 一般灰铸铁 |
| 留研量 (mm) $(C)$ | 0.01 | 0.015 |

交表安排试验，其表头设计如表 *7.34* 所示. 在每一条件下加工了四个零件，测量其锥度，试验结果如表 *7.35* 所示. 试对试验结果进行方差分析，并给出一组

**表 7.34: 试验结果**

| 表头设计 | A | B | | C | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 列号 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |

**表 7.35: 试验结果**

| 试验号 | 试 验 值 | | | |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 1.5 | 1.7 | 1.3 | 1.5 |
| 2 | 1.0 | 1.2 | 1.0 | 1.0 |
| 3 | 2.5 | 2.2 | 3.2 | 2.0 |
| 4 | 2.5 | 2.5 | 1.5 | 2.8 |
| 5 | 1.5 | 1.8 | 1.7 | 1.5 |
| 6 | 1.0 | 2.5 | 1.3 | 1.5 |
| 7 | 1.8 | 1.5 | 1.8 | 2.2 |
| 8 | 1.9 | 2.6 | 2.3 | 2.0 |

较好工艺参数指标.

# 第八章　应用多元分析 (I)

多元分析 (multivariate analysis) 是多变量的统计分析方法，是数理统计中应用广泛的一个重要分支，包含了丰富的理论成果与众多的应用方法，它主要包括回归分析、方差分析、判别分析、聚类分析、主成分分析、因子分析和典型相关分析等.

有关回归分析和方差分析的内容已在第六章、第七章作了介绍，本章介绍判别分析与聚类分析的内容. 这两部分内容有一个共同点，就是对样本进行分类. 但两者也有所不同，判别分析是在已知有多少类，并且在有训练样本的前题下，利用训练样本得到判别函数，对待测样本进行分类. 而聚类分析是预先不知道有多少类的情况下，根据某种规则将样本 (或指标) 进行分类.

本章简单介绍判别分析和聚类分析的基本原理与方法，着重介绍如何应用 R 软件对数据作判别分析和聚类分析.

在下章介绍多元分析的另一部分内容 — 主成分分析、因子分析和典型相关分析.

## 8.1　判别分析

判别分析是用以判别个体所属群体的一种统计方法，它产生于 20 世纪 30 年代，近年来，在许多现代自然科学的各个分支和技术部门中，得到广泛的应用.

例如，利用计算机对一个人是否有心脏病进行诊断时，可以取一批没有心脏病的人，测其 $p$ 个指标的数据，然后再取一批已知患有心胜病的人，同样也测得 $p$ 个相同指标的数据，利用这些数据建立一个判别函数，并求出相应的临界值，这时对于需要进行诊断的人，也同样测其 $p$ 个指标的数据，将其代入判别函数，求得判别得分，再依判别临界值，即可以判断此人是属于有心脏病的那一群体，还是属于没有心脏病的那一群体. 又如在考古学中，对化石及文物年代的判断；在地质学中，判断是有矿还是无矿；在质量管理中，判断某种产品是合格品，还是不合格品；在植物学中，对于新发现的一种植物，判断其属于那一科. 总之判别分析方法在很多学科中有着广泛的应用.

判别方法有多种，这里主要介绍的是最常用的判别方法，而且是两类群体的判别方法.

### 8.1.1 距离判别

所谓判别问题，就是将 $p$ 维 Euclid 空间 $R^p$ 划分成两个互不相交的区域 $R_1$, $R_2, \cdots, R_k$, 即 $\bigcap_{j=1}^{k} R_j = \emptyset$, $\bigcup_{j=1}^{k} R_j = R^p$. 当 $x \in R_i$, $i = 1, 2, \cdots, k$, 就判定 $x$ 属于总体 $X_i$, $i = 1, 2, \cdots, k$. 特别，当 $k = 2$ 时，就是两个总体的判别问题.

距离判别是最简单、直观的一种判别方法，该方法适用于连续型随机变量的判别类，对变量的概率分布没有限制.

**1. Mahalanobis 距离的概念**

通常我们定义的距离是 Euclid 距离 ( 简称欧氏距离 ). 若 $x$, $y$ 是 $R^p$ 中的两个点，则 $x$ 与 $y$ 的距离为

$$d(x, y) = \|x - y\|_2 = \sqrt{(x - y)^T (x - y)}.$$

但在统计分析与计算中，Euclid 距离就不适用了，看一下下面的例子 (见图 8.1).

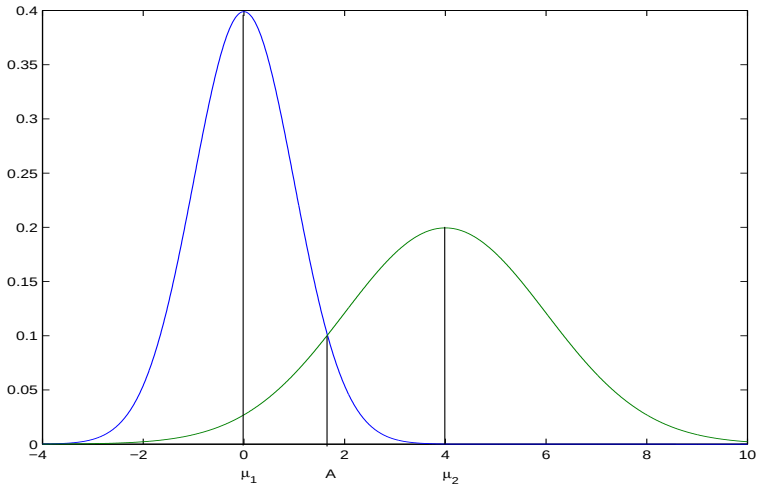



图 8.1: 不同方差的正态分布表

为简单起见，考虑 $p = 1$ 的情况. 设 $X \sim N(0, 1)$, $Y \sim N(4, 2^2)$, 绘出相应的概率密度曲线，如图 8.1 所示. 考虑图中的 $A$ 点， $A$ 点距 $X$ 的均值 $\mu_1 = 0$ 较近，距 $Y$ 的均值 $\mu_2 = 4$ 较远. 但从概率角度来分析问题，情况并非如此. 经计算， $A$ 点的 $x$ 值为 1.66, 也就是说， $A$ 点距 $\mu_1 = 0$ 是 $1.66\sigma_1$, 而 $A$ 点距 $\mu_2 = 4$

却只有 $1.17\sigma_2$, 因此，从概率分布的角度来讲，应该认为 $A$ 点距 $\mu_2$ 更近一点. 所以，在定义距离时，要考虑随机变量方差的信息.

**定义 8.1** 设 $x, y$ 是从均值为 $\mu$, 协方差阵为 $\Sigma$ 的总体 $X$ 中抽取的样本，则总体 $X$ 内两点 $x$ 与 $y$ 的 *Mahalanobis* 距离（简称马氏距离）定义为

$$d(x,y)=\sqrt{(x-y)^T\Sigma^{-1}(x-y)}. \tag{8.1}$$

定义样本 $x$ 与总体 $X$ 的 *Mahalanobis* 距离为

$$d(x,X)=\sqrt{(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)}. \tag{8.2}$$

**2. 判别准则与判别函数**

在这里，讨论两个总体的距离判别，分别讨论两总体协方差阵相同和协方差阵不同的情况.

设总体 $X_1$ 和 $X_2$ 的均值向量分别为 $\mu_1$ 和 $\mu_2$, 协方差阵分别为 $\Sigma_1$ 和 $\Sigma_2$, 今给一个样本 $x$, 要判断 $x$ 来自哪一个总体.

首先考虑两个总体 $X_1$ 和 $X_2$ 的协方差相同的情况，即

$$\mu_1\neq\mu_2,\quad \Sigma_1=\Sigma_2=\Sigma.$$

要判断 $x$ 是属于哪一个总体，需要计算 $x$ 到总体 $X_1$ 和 $X_2$ 的 Mahalanobis 距离的平方 $d^2(x,X_1)$ 和 $d^2(x,X_2)$, 然后进行比较，若 $d^2(x,X_1)\le d^2(x,X_2)$, 则判定 $x$ 属于 $X_1$; 否则判定 $x$ 来自 $X_2$. 由此得到如下判别准则：

$$R_1=\{x\mid d^2(x,X_1)\le d^2(x,X_2)\},\quad R_2=\{x\mid d^2(x,X_1)>d^2(x,X_2)\}. \tag{8.3}$$

现在引进判别函数的表达式，考虑 $d^2(x,X_1)$ 与 $d^2(x,X_2)$ 之间的关系，有

$$\begin{aligned}
d^2(x,X_2)-d^2(x,X_1) &= (x-\mu_2)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_2)-(x-\mu_1)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_1)\\
&= \left(x^T\Sigma^{-1}x-2x^T\Sigma^{-1}\mu_2+\mu_2^T\Sigma^{-1}\mu_2\right)\\
&\quad -\left(x^T\Sigma^{-1}x-2x^T\Sigma^{-1}\mu_1+\mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1\right)\\
&= 2x^T\Sigma^{-1}(\mu_1-\mu_2)+(\mu_1+\mu_2)^T\Sigma^{-1}(\mu_2-\mu_1)\\
&= 2\left(x-\frac{\mu_1+\mu_2}{2}\right)^T\Sigma^{-1}(\mu_1-\mu_2)\\
&= 2(x-\overline{\mu})^T\Sigma^{-1}(\mu_1-\mu_2),
\end{aligned} \tag{8.4}$$

其中 $\overline{\mu}=\dfrac{\mu_1+\mu_2}{2}$ 是两个总体的平均值.

令

$$w(x)=(x-\overline{\mu})^T\Sigma^{-1}(\mu_1-\mu_2), \tag{8.5}$$

称 $w(x)$ 为两总体距离的判别函数，因此判别准则 (8.3) 变为

$$R_1=\{x\mid w(x)\geq 0\},\quad R_2=\{x\mid w(x)<0\}. \tag{8.6}$$

在实际计算中，总体的均值与协方差阵是未知的，因此总体的均值与协方差阵需要用样本均值与协方差阵来代替. 设 $x_1^{(1)},x_2^{(1)},\cdots,x_{n_1}^{(1)}$ 是来自总体 $X_1$ 的 $n_1$ 个样本，$x_1^{(2)},x_2^{(2)},\cdots,x_{n_2}^{(2)}$ 是来自总体 $X_2$ 的 $n_2$ 个样本，则样本的均值与协方差阵为

$$\hat{\mu}_i = \overline{x^{(i)}}=\frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}x_j^{(i)},\quad i=1,2, \tag{8.7}$$

$$\begin{aligned}\widehat{\Sigma} &= \frac{1}{n_1+n_2-2}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{n_i}\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)^T\\ &= \frac{1}{n_1+n_2-2}(S_1+S_2),\end{aligned} \tag{8.8}$$

其中

$$S_i=\sum_{j=1}^{n_i}\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)^T,\quad i=1,2. \tag{8.9}$$

对于待测样本 $x$, 其判别函数定义为

$$\hat{w}(x)=(x-\overline{x})^T\widehat{\Sigma}^{-1}(\overline{x^{(1)}}-\overline{x^{(2)}}), \tag{8.10}$$

其中

$$\overline{x}=\frac{\overline{x^{(1)}}+\overline{x^{(2)}}}{2}.$$

其判别准则为

$$R_1=\{x\mid \hat{w}(x)\geq 0\},\quad R_2=\{x\mid \hat{w}(x)<0\}. \tag{8.11}$$

再考虑两个总体 $X_1$ 和 $X_2$ 协方差阵不同的情况，即

$$\mu_1\neq\mu_2,\quad \Sigma_1\neq\Sigma_2.$$

对于样本 $x$, 在协方差阵不同的情况下，判别函数为

$$w(x) = (x-\mu_2)^T\Sigma_2^{-1}(x-\mu_2) - (x-\mu_1)^T\Sigma_1^{-1}(x-\mu_1). \tag{8.12}$$

与前面讨论的情况相同，在实际计算中总体的均值与协方差阵是未知的，同样需要用样本的均值与样本协方差阵来代替. 因此，对于待测样本 $x$, 判别函数定义为

$$\hat{w}(x) = (x-\overline{x^{(2)}})^T\widehat{\Sigma}_2^{-1}(x-\overline{x^{(2)}}) - (x-\overline{x^{(1)}})^T\widehat{\Sigma}_1^{-1}(x-\overline{x^{(1)}}), \tag{8.13}$$

其中

$$\begin{aligned}\widehat{\Sigma}_i &= \frac{1}{n_i-1}\sum_{j=1}^{n_i}\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)^T \\ &= \frac{1}{n_i-1}S_i, \quad i=1,2.\end{aligned} \tag{8.14}$$

其判别准则仍为式 (8.11).

**3. R 程序**

将前面介绍的算法编写成 R 程序 (程序名： `discriminiant.distance.R`).

```
discriminiant.distance <- function
   (TrnX1, TrnX2, TstX = NULL, var.equal = FALSE){
   if (is.null(TstX) == TRUE) TstX <- rbind(TrnX1,TrnX2)
   if (is.vector(TstX) == TRUE)  TstX <- t(as.matrix(TstX))
   else if (is.matrix(TstX) != TRUE)
      TstX <- as.matrix(TstX)
   if (is.matrix(TrnX1) != TRUE) TrnX1 <- as.matrix(TrnX1)
   if (is.matrix(TrnX2) != TRUE) TrnX2 <- as.matrix(TrnX2)

   nx <- nrow(TstX)
   blong <- matrix(rep(0, nx), nrow=1, byrow=TRUE,
            dimnames=list("blong", 1:nx))
   mu1 <- colMeans(TrnX1); mu2 <- colMeans(TrnX2)
   if (var.equal == TRUE  || var.equal == T){
```

```
        S <- var(rbind(TrnX1,TrnX2))
        w <- mahalanobis(TstX, mu2, S)
             - mahalanobis(TstX, mu1, S)
    }
    else{
        S1 < -var(TrnX1); S2 <- var(TrnX2)
        w <- mahalanobis(TstX, mu2, S2)
             - mahalanobis(TstX, mu1, S1)
    }
    for (i in 1:nx){
        if (w[i] > 0)
            blong[i] <- 1
        else
            blong[i] <- 2
    }
    blong
}
```

在程序中，输入变量 TrnX1 、 TrnX2 表示 $X_1$ 类、 $X_2$ 类训练样本，其输入格式是数据框，或矩阵 (样本按行输入), 输入变量 TstX 是待测样本，其输入格式是数据框，或矩阵 (样本按行输入), 或向量 (一个待测样本). 如果不输入 TstX(缺省值), 则待测样本为两个训练样本之和，即计算训练样本的回代情况. 输入变量 var.equal 是逻辑变量， var.equal=TRUE 表示两个总体的协方差阵相同；否则 (缺省值) 为不同. 函数的输出是由 “1” 和 “2” 构成的的一维矩阵， “1” 表示待测样本属于 $X_1$ 类， “2” 表示待测样本属于 $X_2$ 类.

在上述程序中，用到 Mahalanobis 距离函数 mahalanobis(), 该函数的使用格式为

```
mahalanobis(x, center, cov, inverted=FALSE, ...)
```

其中 x 是由样本数据构成的向量或矩阵 ($p$ 维), center 为样本中心， cov 为样本的协方差阵. 其公式为

$$D^2 = (x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu).$$

**4. 判别实例**

**例 8.1** 在研究砂基液化问题中，选了七个因子. 今从已液化和未液化的地层中分别抽了 *12* 个和 *23* 个样本，数据列在表 *8.1* 中，其中 *I* 类表示已液化类， *II* 类表示未液化类. 试建立距离判别的判别准则，并按判别准则对原 *35* 个样本进行回报（即按判别准则进行分类），分析误判情况.

**表 8.1: 原始分类数据**

| 编号 | 类别 | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | I | 6.6 | 39 | 1.0 | 6.0 | 6 | 0.12 | 20 |
| 2 | I | 6.6 | 39 | 1.0 | 6.0 | 12 | 0.12 | 20 |
| 3 | I | 6.1 | 47 | 1.0 | 6.0 | 6 | 0.08 | 12 |
| 4 | I | 6.1 | 47 | 1.0 | 6.0 | 12 | 0.08 | 12 |
| 5 | I | 8.4 | 32 | 2.0 | 7.5 | 19 | 0.35 | 75 |
| 6 | I | 7.2 | 6 | 1.0 | 7.0 | 28 | 0.30 | 30 |
| 7 | I | 8.4 | 113 | 3.5 | 6.0 | 18 | 0.15 | 75 |
| 8 | I | 7.5 | 52 | 1.0 | 6.0 | 12 | 0.16 | 40 |
| 9 | I | 7.5 | 52 | 3.5 | 7.5 | 6 | 0.16 | 40 |
| 10 | I | 8.3 | 113 | 0.0 | 7.5 | 35 | 0.12 | 180 |
| 12 | I | 7.8 | 172 | 1.5 | 3.0 | 15 | 0.21 | 45 |
| 13 | II | 8.4 | 32 | 1.0 | 5.0 | 4 | 0.35 | 75 |
| 14 | II | 8.4 | 32 | 2.0 | 9.0 | 10 | 0.35 | 75 |
| 15 | II | 8.4 | 32 | 2.5 | 4.0 | 10 | 0.35 | 75 |
| 16 | II | 6.3 | 11 | 4.5 | 7.5 | 3 | 0.20 | 15 |
| 17 | II | 7.0 | 8 | 4.5 | 4.5 | 9 | 0.25 | 30 |
| 18 | II | 7.0 | 8 | 6.0 | 7.5 | 4 | 0.25 | 30 |
| 19 | II | 7.0 | 8 | 1.5 | 6.0 | 1 | 0.25 | 30 |
| 20 | II | 8.3 | 161 | 1.5 | 4.0 | 4 | 0.08 | 70 |
| 21 | II | 8.3 | 161 | 0.5 | 2.5 | 1 | 0.08 | 70 |
| 22 | II | 7.2 | 6 | 3.5 | 4.0 | 12 | 0.30 | 30 |

**表 8.1(续): 原始分类数据**

| 编号 | 类别 | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 23 | II | 7.2 | 6 | 1.0 | 3.0 | 3 | 0.30 | 30 |
| 24 | II | 7.2 | 6 | 1.0 | 6.0 | 5 | 0.30 | 30 |
| 25 | II | 5.5 | 6 | 2.5 | 3.0 | 7 | 0.18 | 18 |
| 26 | II | 8.4 | 113 | 3.5 | 4.5 | 6 | 0.15 | 75 |
| 27 | II | 8.4 | 113 | 3.5 | 4.5 | 8 | 0.15 | 75 |
| 28 | II | 7.5 | 52 | 1.0 | 6.0 | 6 | 0.16 | 40 |
| 29 | II | 7.5 | 52 | 1.0 | 7.5 | 8 | 0.16 | 40 |
| 30 | II | 8.3 | 97 | 0.0 | 6.0 | 5 | 0.15 | 180 |
| 31 | II | 8.3 | 97 | 2.5 | 6.0 | 5 | 0.15 | 180 |
| 32 | II | 8.3 | 89 | 0.0 | 6.0 | 10 | 0.16 | 180 |
| 33 | II | 8.3 | 56 | 1.5 | 6.0 | 13 | 0.25 | 180 |
| 34 | II | 7.8 | 172 | 1.0 | 3.5 | 6 | 0.21 | 45 |
| 35 | II | 7.8 | 283 | 1.0 | 4.5 | 6 | 0.18 | 45 |

**解**: 输入数据, 调用函数 `discriminiant.distance()` 进行判别, 分别考虑两总体协方差阵相同和协方差阵不同的情况.

```
> classX1<-data.frame(
      x1=c(6.60,  6.60,  6.10,  6.10,  8.40,  7.2,   8.40,  7.50,
           7.50,  8.30,  7.80,  7.80),
      x2=c(39.00,39.00, 47.00, 47.00, 32.00,  6.0, 113.00, 52.00,
           52.00,113.00,172.00,172.00),
      x3=c(1.00,  1.00,  1.00,  1.00,  2.00,  1.0,   3.50,  1.00,
           3.50,  0.00,  1.00,  1.50),
      x4=c(6.00,  6.00,  6.00,  6.00,  7.50,  7.0,   6.00,  6.00,
           7.50,  7.50,  3.50,  3.00),
      x5=c(6.00, 12.00,  6.00, 12.00, 19.00, 28.0,  18.00, 12.00,
           6.00, 35.00, 14.00, 15.00),
      x6=c(0.12,  0.12,  0.08,  0.08,  0.35,  0.3,   0.15,  0.16,
```

```
          0.16,  0.12,  0.21,  0.21),
      x7=c(20.00,20.00, 12.00, 12.00, 75.00, 30.0,  75.00, 40.00,
          40.00,180.00, 45.00, 45.00)
  )
> classX2<-data.frame(
      x1=c(8.40,  8.40,  8.40,  6.3, 7.00,  7.00,  7.00,  8.30,
          8.30,   7.2,   7.2,  7.2, 5.50,  8.40,  8.40,  7.50,
          7.50,  8.30,  8.30, 8.30, 8.30,  7.80,  7.80),
      x2=c(32.0 ,32.00, 32.00, 11.0, 8.00,  8.00,  8.00,161.00,
          161.0,   6.0,   6.0,  6.0, 6.00,113.00,113.00, 52.00,
          52.00, 97.00, 97.00,89.00,56.00,172.00,283.00),
      x3=c(1.00,  2.00,  2.50,  4.5, 4.50,  6.00,  1.50,  1.50,
          0.50,   3.5,   1.0,  1.0, 2.50,  3.50,  3.50,  1.00,
          1.00,  0.00,  2.50, 0.00, 1.50,  1.00,  1.00),
      x4=c(5.00,  9.00,  4.00,  7.5, 4.50,  7.50,  6.00,  4.00,
          2.50,   4.0,   3.0,  6.0, 3.00,  4.50,  4.50,  6.00,
          7.50,  6.00,  6.00, 6.00, 6.00,  3.50,  4.50),
      x5=c(4.00, 10.00, 10.00,  3.0, 9.00,  4.00,  1.00,  4.00,
          1.00,  12.0,   3.0,  5.0, 7.00,  6.00,  8.00,  6.00,
          8.00,  5.00,  5.00,10.00,13.00,  6.00,  6.00),
      x6=c(0.35,  0.35,  0.35,  0.2, 0.25,  0.25,  0.25,  0.08,
          0.08,  0.30,   0.3,  0.3, 0.18,  0.15,  0.15,  0.16,
          0.16,  0.15,  0.15, 0.16, 0.25,  0.21,  0.18),
      x7=c(75.00,75.00, 75.00, 15.0,30.00, 30.00, 30.00, 70.00,
          70.00, 30.0,  30.0, 30.0,18.00, 75.00, 75.00, 40.00,
          40.00,180.00,180.00,180.00,180.00,45.00,45.00)
  )
> source("discriminiant.distance.R")
> discriminiant.distance(classX1, classX2, var.equal=TRUE)
      1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23
blong 1 1 1 1 1 1 1 1 2  1  1  1  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35
```

```
blong  2  2  2  2  1  1  2  2  2  2  2  2
> discriminiant.distance(classX1, classX2)
      1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23
blong 1 1 1 1 1 1 1 1 2  1  1  1  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35
blong  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
```

在认为两总体协方差阵相同的情况下, 将训练样本回代进行判别, 有三个点判错, 分别是第 9 号样本、第 28 号样本和第 29 号样本.

在认为两总体协方差阵不同的情况下, 将训练样本回代进行判别, 只有一个点判错, 是第 9 号样本.

**5. 多分类问题的距离判别**

对于距离判别, 很容易将两分类判别方法推广到多分类问题. 事实上, 距离判别的本质就是计算 Mahalanobis 距离, 待测样本距哪个总体的距离近, 就认为它属于哪一类.

假设样本共有 $k$ 类, 分别是 $X_1, X_2, \cdots, X_k$. 若认为这 $k$ 类总体的方差是相同的, 即

$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = \cdots = \Sigma_k = \Sigma,$$

则用全部样本计算样本方差 $\widehat{\Sigma}$ 作为总体方差 $\Sigma$ 的估计值. 若认为 $k$ 类总体的方差不相同, 则用各自的样本计算样本方差 $\widehat{\Sigma}_j$ 作为总体方差 $\Sigma_j$ 的估计值.

相应的判别准则为

$$R_i = \{x \mid d(x, X_i) = \min_{1\le j\le k} d(x, X_j)\}, \quad i = 1, 2, \cdots, k,$$

其中 $d(x, X_j)$ 是由式 (8.2) 定义样本 $x$ 与总体 $X_j$ 的 Mahalanobis 距离. 若认为方差相同时, 式 (8.2) 中的 $\Sigma$ 由估计值 $\widehat{\Sigma}$ 代替, 若认为方差不同时, 式 (8.2) 中的 $\Sigma$ 由估计值 $\widehat{\Sigma}_j$ 代替.

用上述方法编写成 R 程序 (程序名: `distinguish.distance.R`).

```
distinguish.distance <- function
   (TrnX, TrnG, TstX = NULL, var.equal = FALSE){
   if ( is.factor(TrnG) == FALSE){
       mx <- nrow(TrnX); mg <- nrow(TrnG)
```

```
    TrnX <- rbind(TrnX, TrnG)
    TrnG <- factor(rep(1:2, c(mx, mg)))
}
if (is.null(TstX) == TRUE) TstX <- TrnX
if (is.vector(TstX) == TRUE)  TstX <- t(as.matrix(TstX))
else if (is.matrix(TstX) != TRUE)
   TstX <- as.matrix(TstX)
if (is.matrix(TrnX) != TRUE) TrnX <- as.matrix(TrnX)

nx <- nrow(TstX)
blong <- matrix(rep(0, nx), nrow=1,
         dimnames=list("blong", 1:nx))
g <- length(levels(TrnG))
mu <- matrix(0, nrow=g, ncol=ncol(TrnX))
for (i in 1:g)
   mu[i,] <- colMeans(TrnX[TrnG==i,])
D < -matrix(0, nrow=g, ncol=nx)
if (var.equal == TRUE  || var.equal == T){
   for (i in 1:g)
      D[i,] <- mahalanobis(TstX, mu[i,], var(TrnX))
}
else{
   for (i in 1:g)
      D[i,] <- mahalanobis(TstX, mu[i,], var(TrnX[TrnG==i,]))
}
for (j in 1:nx){
   dmin <- Inf
   for (i in 1:g)
       if (D[i,j] < dmin){
          dmin <- D[i,j]; blong[j] <- i
   }
}
```

```
   blong
}
```

程序分别考虑了总体协方差阵相同和总体协方差阵不同的两种情况. 输入变量 TrnX 表示训练样本, 其输入格式是矩阵 (样本按行输入), 或数据框. TrnG 是因子变量, 表示输入训练样本的分类情况. 输入变量 TstX 是待测样本, 其输入格式是矩阵 (样本按行输入), 或数据框, 或向量 (一个待测样本). 如果不输入 TstX(缺省值), 则待测样本为训练样本. 输入变量 var.equal 是逻辑变量, var.equal=TRUE 表示计算时认为总体协方差阵是相同的; 否则 (缺省值) 是不同的. 函数的输出是由数字构成的的一维矩阵, 数字表示相应的类. 为了与前一个程序兼容, 对于二分类问题, 也可以按照 discriminiant.distance 函数的输入格式输入.

**例 8.2** *Fisher Iris* 数据. *Iris* 数据有四个属性, 萼片的长度、萼片的宽度、花瓣长度和花瓣的宽度. 数据共 *150* 个样本, 分为三类, 前 *50* 个数据是第一类 —*Setosa,* 中间的 *50* 个数据是第二类 — *Versicolor,* 最后 *50* 个数据是第三类 — *Virginica.* 试用距离判别对 *Iris* 数据进行判别分析.

**解**: R 软件中提供了 Iris 数据, 数据的前四列是数据的四个属性, 第五列标明数据属于哪一类.

```
> X<-iris[,1:4]
> G<-gl(3,50)
> source("distinguish.distance.R")
> distinguish.distance(X,G)
      1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23
blong 1 1 1 1 1 1 1 1 1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1
      24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43
blong  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1
      44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63
blong  1  1  1  1  1  1  1  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83
blong  2  2  2  2  2  2  2  3  2  3  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100 101 102
blong  3  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2   2   3   3
      103 104 105 106 107 108 109 110 111 112 113 114 115 116 117
```

```
blong   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
      118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129 130 131 132
blong   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
      133 134 135 136 137 138 139 140 141 142 143 144 145 146 147
blong   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
      148 149 150
blong   3   3   3
```

从计算结果可以看出，只有第 71 号样本、第 73 号样本和第 84 号样本错判，回代的判别正确率为 $147/150 = 98\%$.

### 8.1.2 Bayes 判别

Bayes 判别是假定对研究对象已有一定的认识，这种认识常用先验概率来描述，当取得样本后，就可以用样本来修正已有的先验概率分布，得出后验概率分布，现通过后验概率分布进行各种统计推断.

**1. 误判概率与误判损失**

考虑两个总体的判别情况. 设 $X_1$ 与 $X_2$ 分别具有概率密度函数 $f_1(x)$ 与 $f_2(x)$, 其中 $x$ 是 $p$ 维向量. 记 $\Omega$ 为 $x$ 的所有可能观测值的全体，称为样本空间. $R_1$ 为根据某种规则要判为 $X_1$ 的那些 $x$ 的全体，而 $R_2 = \Omega - R_1$ 是要判为 $X_2$ 那些 $x$ 的全体. 某样本实际来自 $X_1$, 但被判为 $X_2$ 的概率为

$$P(2|1) = P\{x \in R_2|X_1\} = \int_{R_2} f_1(x)\mathrm{d}x, \tag{8.15}$$

来自 $X_2$, 但被判为 $X_1$ 的概率

$$P(1|2) = P\{x \in R_1|X_2\} = \int_{R_1} f_2(x)\mathrm{d}x. \tag{8.16}$$

类似地，来自 $X_1$ 也被判为 $X_1$, 来自 $X_2$ 也被判为 $X_2$ 的概率

$$P(1|1) = P\{x \in R_1|X_1\} = \int_{R_1} f_1(x)\mathrm{d}x, \tag{8.17}$$

$$P(2|2) = P\{x \in R_2|X_2\} = \int_{R_2} f_2(x)\mathrm{d}x, \tag{8.18}$$

又设 $p_1, p_2$ 分别表示总体 $X_1$ 和 $X_2$ 的先验概率，且 $p_1 + p_2 = 1$, 于是

$$\begin{aligned} P\{\text{正确地判为}X_1\} &= P\{\text{来自 } X_1, \text{被判为 } X_1\} \\ &= P\{x \in R_1 | X_1\} \cdot P(X_1) = P(1|1) \cdot p_1, \qquad (8.19) \\ P\{\text{误判到}X_1\} &= P\{\text{来自 } X_2, \text{被判为 } X_1\} \\ &= P\{x \in R_1 | X_2\} \cdot P(X_2) = P(1|2) \cdot p_2. \qquad (8.20) \end{aligned}$$

类似地有

$$\begin{aligned} P\{\text{正确地判为}X_2\} &= P(2|2) \cdot p_2, \qquad (8.21) \\ P\{\text{误判到}X_2\} &= P(2|1) \cdot p_1. \qquad (8.22) \end{aligned}$$

设 $L(1|2)$ 表示来自 $X_2$ 被误判为 $X_1$ 引起的损失， $L(2|1)$ 表示来自 $X_1$ 被误判为 $X_2$ 引起的损失，并规定 $L(1|1) = L(2|2|) = 0$.

将上述误判概率与误判损失结合起来，定义平均误判损失 (expected cost of misclassification, 简记为 ECM) 如下

$$\text{ECM}(R_1, R_2) = L(2|1)P(2|1)p_1 + L(1|2)P(1|2)p_2. \qquad (8.23)$$

一个合理的选择是使 ECM 达到极小.

**2. 两个总体的 Bayes 判别**

可以证明，极小化平均误判损失函数 (8.23) 的划分区域 $R_1$ 和 $R_2$ 为

$$R_1 = \left\{ x \;\middle|\; \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \geq \frac{L(1|2)}{L(2|1)} \cdot \frac{p_2}{p_1} \right\}, \quad R_2 = \left\{ x \;\middle|\; \frac{f_1(x)}{f_2(x)} < \frac{L(1|2)}{L(2|1)} \cdot \frac{p_2}{p_1} \right\}. \qquad (8.24)$$

因此，可以将式 (8.24) 作为 Bayes 判别的判别准则. 在这个准则中只需要计算：

(1) 样本点 $x$ 的概率密度函数比 $f_1(x)/f_2(x)$;

(2) 损失比 $L(1|2)/L(2|1)$;

(3) 先验概率比 $p_2/p_1$.

下面讨论正态分布情况下，样本点 $x$ 的概率密度函数比的计算. 设 $X_i \sim N(\mu_i, \Sigma_i)$ $(i = 1, 2)$, 分别考虑总体协方差阵相同和协方差阵不同的情况.

首先考虑总体协方差阵相同的情况，即 $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma$. 此时 $X_i$ 的密度为

$$f_i(x) = (2\pi)^{-\pi/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2}(x - \mu_i)^T \Sigma^{-1} (x - \mu_i) \right\}, \quad i = 1, 2 \qquad (8.25)$$

因此, $R_1$ 和 $R_2$ 划分区域 (8.24) 等价于

$$R_1 = \left\{ x \;\middle|\; W(x) \geq \beta \right\}, \quad R_2 = \left\{ x \;\middle|\; W(x) < \beta \right\}, \tag{8.26}$$

其中

$$\begin{aligned} W(x) &= \frac{1}{2}(x-\mu_2)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_2) - \frac{1}{2}(x-\mu_1)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_1) \\ &= \left[ x - \frac{1}{2}(\mu_1+\mu_2) \right]^T \Sigma^{-1}(\mu_1-\mu_2), \qquad (8.27) \\ \beta &= \ln \frac{L(1|2)\cdot p_2}{L(2|1)\cdot p_1}. \qquad (8.28) \end{aligned}$$

不难发现, 对于正态分布总体的 Bayes 判别, 其判别规则 (8.26)–(8.28) 可以看成距离判别的推广, 当 $p_1 = p_2$, $L(1|2) = L(2|1)$ 时, $\beta = 0$, 就是距离判别.

再考虑总体协方差阵不同的情况, 即 $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$. 此时 $R_1$ 和 $R_2$ 划分区域 (8.24) 等价于

$$R_1 = \left\{ x \;\middle|\; W(x) \geq \beta \right\}, \quad R_2 = \left\{ x \;\middle|\; W(x) < \beta \right\}, \tag{8.29}$$

其中

$$\begin{aligned} W(x) &= \frac{1}{2}(x-\mu_2)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_2) - \frac{1}{2}(x-\mu_1)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_1), \qquad (8.30) \\ \beta &= \ln \frac{L(1|2)\cdot p_2}{L(2|1)\cdot p_1} + \frac{1}{2}\ln\left(\frac{|\Sigma_1|}{|\Sigma_2|}\right). \qquad (8.31) \end{aligned}$$

**3. R 程序与例子**

按照上述方法写出两总体判别的 Bayes 判别程序 (程序名: `discriminiant.bayes.R`).

```
discriminiant.bayes <- function
   (TrnX1, TrnX2, rate = 1, TstX = NULL, var.equal = FALSE){
   if (is.null(TstX) == TRUE) TstX<-rbind(TrnX1,TrnX2)
   if (is.vector(TstX) == TRUE)  TstX <- t(as.matrix(TstX))
   else if (is.matrix(TstX) != TRUE)
      TstX <- as.matrix(TstX)
```

```
    if (is.matrix(TrnX1) != TRUE) TrnX1 <- as.matrix(TrnX1)
    if (is.matrix(TrnX2) != TRUE) TrnX2 <- as.matrix(TrnX2)

    nx <- nrow(TstX)
    blong <- matrix(rep(0, nx), nrow=1, byrow=TRUE,
             dimnames=list("blong", 1:nx))
    mu1 <- colMeans(TrnX1); mu2 <- colMeans(TrnX2)
    if (var.equal == TRUE  || var.equal == T){
       S <- var(rbind(TrnX1,TrnX2)); beta <- 2*log(rate)
       w <- mahalanobis(TstX, mu2, S)
            - mahalanobis(TstX, mu1, S)
    }
    else{
       S1 <- var(TrnX1); S2 <- var(TrnX2)
       beta <- 2*log(rate) + log(det(S1)/det(S2))
       w <- mahalanobis(TstX, mu2, S2)
            - mahalanobis(TstX, mu1, S2)
    }

    for (i in 1:nx){
       if (w[i] > beta)
           blong[i] <- 1
       else
           blong[i] <- 2
    }
    blong
}
```

在程序中，输入变量 TrnX1 、 TrnX2 表示 $X_1$ 类、 $X_2$ 类训练样本，其输入格式是数据框，或矩阵 (样本按行输入). rate= $\frac{L(1|2)}{L(2|1)} \cdot \frac{p_2}{p_1}$, 缺省值为 1. TstX 是待测样本，其输入格式是数据框，或矩阵 (样本按行输入), 或向量 (一个待测样本). 如果不输入 TstX(缺省值), 则待测样本为两个训练样本之和，即计算训练样本的回代情况. 输入变量 var.equal 是逻辑变量， var.equal=TRUE 表示认为两总体的

协方差阵是相同的；否则 (缺省值) 是不同的. 函数的输出是由 “1” 和 “2” 构成的的一维矩阵, “1” 表示待测样本属于 $X_1$ 类, “2” 表示待测样本属于 $X_2$ 类.

**例 8.3** 表 *8.2* 是某气象站预报有无春旱的实际资料, $x_1$ 与 $x_2$ 是综合预报因子 (气象含义略), 有春旱的是 *6* 个年份的资料, 无春旱的是 *8* 个年份的资料, 它们的先验概率分别用 *6/14* 和 *8/14* 来估计, 并假设误判损失相等. 试用 *Bayes* 估计对数据进行分析.

**表 8.2: 某气象站有无春旱的资料**

| 序号 | 春 旱 | | 无 春 旱 | |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 24.8 | −2.0 | 22.1 | −0.7 |
| 2 | 24.1 | −2.4 | 21.6 | −1.4 |
| 3 | 26.6 | −3.0 | 22.0 | −0.8 |
| 4 | 23.5 | −1.9 | 22.8 | −1.6 |
| 5 | 25.5 | −2.1 | 22.7 | −1.5 |
| 6 | 27.4 | −3.1 | 21.5 | −1.0 |
| 7 | | | 22.1 | −1.2 |
| 8 | | | 21.4 | −1.3 |

**解**: 输入数据 (按矩阵形式), 再调用函数 `discriminiant.bayes()` 进行判别 (程序名： `exam0803.R`)

```
> TrnX1<-matrix(
    c(24.8, 24.1, 26.6, 23.5, 25.5, 27.4,
      -2.0, -2.4, -3.0, -1.9, -2.1, -3.1),
    ncol=2)
> TrnX2<-matrix(
    c(22.1, 21.6, 22.0, 22.8, 22.7, 21.5, 22.1, 21.4,
      -0.7, -1.4, -0.8, -1.6, -1.5, -1.0, -1.2, -1.3),
    ncol=2)
> source("discriminiant.bayes.R")
> discriminiant.bayes(X1, X2, rate=8/6, var.equal=TRUE)
```

```
      1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14
blong 1 1 1 2 1 1 2 2 2  2  2  2  2  2
```

第 4 号样本被错判.

**4. 多分类问题的 Bayes 判别**

从上面的计算过程可知，Bayes 判别的本质就是找到一种判别准则，使得平均误判损失达到最小，也就是相应的概率达到最大.

假设样本共有 $k$ 类, 分别是 $X_1, X_2, \cdots, X_k$, 相应的先验概率为 $p_1, p_2, \cdots, p_k$, 并假设所有错判损失是相同的，因此相应的判别准则为

$$R_i = \{x \mid p_i f_i(x) = \max_{1\le j\le k} p_j f_j(x)\}, \quad i = 1, 2, \cdots, k. \tag{8.32}$$

当 $k$ 类总体的协方差阵相同，即 $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \cdots = \Sigma_k = \Sigma$, 此时概率密度函数为

$$f_j(x) = (2\pi)^{-\pi/2}|\Sigma|^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu_j)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_j)\right\}, \quad j = 1, 2, \cdots, k, \tag{8.33}$$

则计算函数

$$d_j(x) = \frac{1}{2}(x-\mu_j)^T\Sigma^{-1}(x-\mu_j) - \ln p_j, \tag{8.34}$$

在计算中，式 (8.34) 中方差 $\Sigma$ 用其估计值 $\widehat{\Sigma}$ 代替.

当 $k$ 类总体的协方差阵不同，此时概率密度函数为

$$f_j(x) = (2\pi)^{-\pi/2}|\Sigma_j|^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x-\mu_j)\right\}, \quad j = 1, 2, \cdots, k, \tag{8.35}$$

则计算函数

$$d_j(x) = \frac{1}{2}(x-\mu_j)^T\Sigma_j^{-1}(x-\mu_j) - \ln p_j - \frac{1}{2}\ln(|\Sigma_j|), \tag{8.36}$$

在计算中，式 (8.36) 中方差 $\Sigma_j$ 用其估计值 $\widehat{\Sigma}_j$ 代替.

判别准则 (8.32) 等价为

$$R_i = \{x \mid d_i(x) = \min_{1\le j\le k} d_j(x)\}, \quad i = 1, 2, \cdots, k. \tag{8.37}$$

用上述方法编写成 R 程序 (程序名： `distinguish.bayes.R`).

```
distinguish.bayes <- function
   (TrnX, TrnG, p = rep(1, length(levels(TrnG))),
    TstX = NULL, var.equal = FALSE){
  if ( is.factor(TrnG) == FALSE){
       mx <- nrow(TrnX); mg <- nrow(TrnG)
       TrnX <- rbind(TrnX, TrnG)
       TrnG <- factor(rep(1:2, c(mx, mg)))
   }
   if (is.null(TstX) == TRUE) TstX <- TrnX
   if (is.vector(TstX) == TRUE)  TstX <- t(as.matrix(TstX))
   else if (is.matrix(TstX) != TRUE)
      TstX <- as.matrix(TstX)
   if (is.matrix(TrnX) != TRUE) TrnX <- as.matrix(TrnX)

   nx <- nrow(TstX)
   blong <- matrix(rep(0, nx), nrow=1,
                dimnames=list("blong", 1:nx))
   g <- length(levels(TrnG))
   mu <- matrix(0, nrow=g, ncol=ncol(TrnX))
   for (i in 1:g)
      mu[i,] <- colMeans(TrnX[TrnG==i,])
   D <- matrix(0, nrow=g, ncol=nx)
   if (var.equal == TRUE  || var.equal == T){
      for (i in 1:g){
         d2 <- mahalanobis(TstX, mu[i,], var(TrnX))
         D[i,] <- d2 - 2*log(p[i])
      }
   }
   else{
      for (i in 1:g){
         S <- var(TrnX[TrnG==i,])
         d2 <- mahalanobis(TstX, mu[i,], S)
```

```
            D[i,] <- d2 - 2*log(p[i])-log(det(S))
         }
      }
      for (j in 1:nx){
         dmin <- Inf
         for (i in 1:g)
             if (D[i,j] < dmin){
                dmin <- D[i,j]; blong[j] <- i
         }
      }
      blong
   }
```

程序分别考虑了总体协方差阵相同和协方差阵不同的情况. 输入变量 TrnX 表示训练样本, 其输入格式是矩阵 (样本按行输入), 或数据框. TrnG 是因子变量, 表示训练样本的分类情况. 输入变量 p 是先验概率, 缺省值均为 1. 输入变量 TstX 是待测样本, 其输入格式是矩阵 (样本按行输入), 或数据框, 或向量 (一个待测样本). 如果不输入 TstX(缺省值), 则待测样本为训练样本. 输入变量 var.equal 是逻辑变量, var.equal=TRUE 表示认为总体协方差阵是相同的; 否则 (缺省值) 是不同的. 函数的输出是由数字构成的的一维矩阵, 数字表示相应的类. 为了与前面两总体的判别程序兼容, 对于二分类问题, 也可以按照 discriminiant.bayes 函数的输入格式输入.

**例 8.4** *用 Bayes 判别对 Fisher Iris 数据进行分析. 假设先验概率是相同的, 均为 1. 考虑方差不同的情况.*

**解:**

```
> X<-iris[,1:4]
> G<-gl(3,50)
> source("distinguish.bayes.R")
> distinguish.bayes(X,G)
> distinguish.bayes(X,G)
      1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22
blong 1 1 1 1 1 1 1 1 1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1
```

```
      23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41
blong  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1  1
      42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60
blong  1  1  1  1  1  1  1  1  1  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79
blong  2  2  2  2  2  2  2  2  3  2  3  2  3  2  2  2  2  3  2
      80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98
blong  2  2  2  2  3  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      99 100 101 102 103 104 105 106 107 108 109 110 111 112
blong  2   2   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
      113 114 115 116 117 118 119 120 121 122 123 124 125 126
blong   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
      127 128 129 130 131 132 133 134 135 136 137 138 139 140
blong   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
      141 142 143 144 145 146 147 148 149 150
blong   3   3   3   3   3   3   3   3   3   3
```

从计算结果可以看出，只有第 69 、 71 、 73 、 78 、 84 号样本错判，回代的判别正确率为 $145/150 = 96.67\%$.

### 8.1.3 Fisher 判别

Fisher（费歇）判别是按类内方差尽量小，类间方差尽量大的准则来求判别函数的．在这里仅讨论两个总体的判别方法.

#### 1. 判别准则

设两个总体 $X_1$ 和 $X_1$ 的均值与协方差阵分别为 $\mu_1$, $\mu_2$ 和 $\Sigma_1$, $\Sigma_2$, 对于任给一个样本 $x$, 考虑它的判别函数

$$u = u(x), \tag{8.38}$$

并假设

$$u_1 = E(u(x) \mid x \in X_1), \quad u_2 = E(u(x) \mid x \in X_2), \tag{8.39}$$

$$\sigma_1^2 = \mathrm{Var}(u(x) \mid x \in X_1), \quad \sigma_2^2 = \mathrm{Var}(u(x) \mid x \in X_2). \tag{8.40}$$

Fisher 判别准则就是要寻找判别函数 $u(x)$, 使类内偏差平方和

$$W_0 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2$$

最小，而类间偏差平方和

$$B_0 = (u_1 - u)^2 + (u_2 - u)^2$$

最大，其中 $u = \dfrac{1}{2}(u_1 + u_2)$.

将上面两个要求结合在一起， Fisher 判别准则就是要求函数 $u(x)$ 使得

$$I = \frac{B_0}{W_0} \tag{8.41}$$

达到最大. 因此，判别准则为

$$R_1 = \{x \mid |u(x) - u_1| \le |u(x) - u_2|\}, \tag{8.42}$$

$$R_2 = \{x \mid |u(x) - u_1| > |u(x) - u_2|\}. \tag{8.43}$$

**2. 线性判别函数中系数的确定**

从理论上讲， $u(x)$ 可以是任意函数，但对于任意函数 $u(x)$ 使式 (8.41) 中的 $I$ 达到最大是很困难的，因此，通常取 $u(x)$ 为线性函数，即令

$$u(x) = a^T x = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_p x_p. \tag{8.44}$$

因此，问题就转化为求 $u(x)$ 的系数 $a$, 使得目标函数 $I$ 达到最大.

与距离判别一样，在实际计算中，总体的均值与协方差阵是未知的，因此需要用样本均值与协方差阵来代替. 设 $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \cdots, x_{n_1}^{(1)}$ 是来自总体 $X_1$ 的 $n_1$ 个样本， $x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \cdots, x_{n_2}^{(2)}$ 是来自总体 $X_1$ 的 $n_2$ 个样本, 用这些样本得到 $u_1$, $u_2$, $u$, $\sigma_1$ 和 $\sigma_2$ 的估计,

$$\begin{aligned} \hat{u}_i &= \overline{u_i} = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} u(x_j^{(i)}) = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} a^T x_j^{(i)} \\ &= a^T \overline{x^{(i)}}, \quad i = 1, 2, \end{aligned} \tag{8.45}$$

$$\begin{aligned} \hat{u} &= \overline{u} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{n_i} u(x_j^{(i)}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{n_i} a^T x_j^{(i)} \\ &= a^T \overline{x}, \end{aligned} \tag{8.46}$$

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_i^2 &= \frac{1}{n_i-1}\sum_{j=1}^{n_i}\left[u(x_j^{(i)})-\overline{u_i}\right]^2=\frac{1}{n_i-1}\sum_{j=1}^{n_i}\left[a^T\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)\right]^2\\ &= \frac{1}{n_i-1}a^T\left[\sum_{j=1}^{n_i}\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)^T\right]a\\ &= \frac{1}{n_i-1}a^TS_ia,\quad i=1,2,\end{aligned}\tag{8.47}$$

其中

$$\begin{aligned}n &= n_1+n_2,\\ S_i &= \sum_{j=1}^{n_i}\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)\left(x_j^{(i)}-\overline{x^{(i)}}\right)^T,\quad i=1,2.\end{aligned}\tag{8.48}$$

因此，将类内偏差的平方 $W_0$ 与类间偏差平方和 $B_0$ 改为组内离差平方和 $\hat{W}_0$ 与组间离偏差的平方和 $\hat{B}_0$, 即

$$\hat{W}_0 = \sum_{i=1}^{2}(n_i-1)\hat{\sigma}_i^2=a^T\left(S_1+S_2\right)a=a^TSa,\tag{8.49}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_0 &= \sum_{i=1}^{2}n_i(\hat{u}_i-\hat{u})^2=a^T\left(\sum_{i=1}^{2}n_i\left(\overline{x^{(i)}}-\overline{x}\right)\left(\overline{x^{(i)}}-\overline{x}\right)^T\right)a\\ &= \frac{n_1n_2}{n}\,a^T\left(dd^T\right)a,\end{aligned}\tag{8.50}$$

其中 $S=S_1+S_2$, $n=n_1+n_2$, $d=\left(\overline{x^{(2)}}-\overline{x^{(1)}}\right)$. 因此，求 $I=\dfrac{\hat{B}_0}{\hat{W}_0}$ 最大，等价于求

$$\frac{a^T(dd^T)a}{a^TSa}$$

最大. 这个解是不唯一的，因为对任意的 $a\neq 0$, 它的任意非零倍均保持其值不变. 不失一般性，将求最大问题转化为约束优化问题

$$\max_a \quad a^T(dd^T)a,\tag{8.51}$$

$$\text{s.t.} \quad a^TSa=1.\tag{8.52}$$

由约束问题的一阶必要条件得到

$$a=S^{-1}d.\tag{8.53}$$

**3. 确定判别函数**

对于一个新样本 $x$, 现要确定 $x$ 属于哪一类. 为方便起见, 不妨设 $\overline{u_1} < \overline{u_2}$. 因此由判别准则 (8.42), 当 $u(x) < \overline{u_1}$ 时, 则判 $x \in X_1$. 当 $u(x) > \overline{u_2}$ 时, 则判 $x \in X_2$. 那么, 当 $\overline{u_1} < u(x) < \overline{u_2}$ 时, $x$ 属于哪一总体呢? 应当找 $\overline{u_1}$, $\overline{u_2}$ 的均值

$$\overline{u} = \frac{n_1}{n}\overline{u_1} + \frac{n_2}{n}\overline{u_2},$$

当 $u(x) < \overline{u}$ 时, 则判 $x \in X_1$; 否则判 $x \in X_2$.

由

$$\begin{aligned} u(x) - \overline{u} &= u(x) - \left(\frac{n_1}{n}\overline{u_1} + \frac{n_2}{n}\overline{u_2}\right) = a^T\left(x - \frac{n_1}{n}\overline{x^{(1)}} - \frac{n_2}{n}\overline{x^{(2)}}\right) \\ &= a^T(x - \overline{x}) = d^T S^{-1}(x - \overline{x}), \end{aligned} \tag{8.54}$$

其中

$$\begin{aligned} \overline{x^{(i)}} &= \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} x_j^{(i)}, \quad i = 1, 2, \\ \overline{x} &= \frac{n_1}{n}\overline{x^{(1)}} + \frac{n_2}{n}\overline{x^{(2)}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{n_i} x_j^{(i)}. \end{aligned}$$

由上式可知, $\overline{x}$ 就是样本均值. 因此, 构造判别函数

$$w(x) = d^T S^{-1}(x - \overline{x}), \tag{8.55}$$

此时, 判别准则 (8.42)-(8.43) 等价为

$$R_1 = \{x \mid w(x) \le 0\}, \quad R_2 = \{x \mid w(x) > 0\}. \tag{8.56}$$

**4. R 程序与例子**

根据前面所述方法, 编写相应的 R 程序 (程序名: `discriminiant.fisher.R`)

```
discriminiant.fisher <- function(TrnX1, TrnX2, TstX = NULL){
   if (is.null(TstX) == TRUE)    TstX <- rbind(TrnX1,TrnX2)
   if (is.vector(TstX) == TRUE)  TstX <- t(as.matrix(TstX))
   else if (is.matrix(TstX) != TRUE)
```

```
    TstX <- as.matrix(TstX)
  if (is.matrix(TrnX1) != TRUE)  TrnX1 <- as.matrix(TrnX1)
  if (is.matrix(TrnX2) != TRUE)  TrnX2 <- as.matrix(TrnX2)

  nx <- nrow(TstX)
  blong <- matrix(rep(0, nx), nrow=1, byrow=TRUE,
           dimnames=list("blong", 1:nx))
  n1 <- nrow(TrnX1); n2 <- nrow(TrnX2)
  mu1 <- colMeans(TrnX1); mu2 <- colMeans(TrnX2)
  S <- (n1-1)*var(TrnX1) + (n2-1)*var(TrnX2)
  mu <- n1/(n1+n2)*mu1 + n2/(n1+n2)*mu2
  w <- (TstX-rep(1,nx) %o% mu) %*% solve(S, mu2-mu1);
  for (i in 1:nx){
      if (w[i] <= 0)
          blong[i] <- 1
      else
          blong[i] <- 2
  }
  blong
}
```

在程序中，输入变量 TrnX1 、 TrnX2 表示 $X_1$ 类、 $X_2$ 类训练样本，其输入格式是数据框，或矩阵 (样本按行输入). TstX 是待测样本，其输入格式是数据框，或矩阵 (样本按行输入), 或向量 (一个待测样本). 如果不输入 TstX(缺省值), 则待测样本为两个训练样本之和，即计算训练样本的回代情况. 函数的输出是由 "1" 和 "2" 构成的的一维矩阵， "1" 表示待测样本属于 $X_1$ 类， "2" 表示待测样本属于 $X_2$ 类.

**例 8.5** 用 *Fisher* 判别解例 *8.1.*

**解**: 输入数据 (见程序 exam0801.R), 调用函数 discriminiant.fisher().

```
> source("discriminiant.fisher.R")
> discriminiant.fisher(classX1, classX2)
      1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22
```

```
blong 1 1 1 1 1 1 1 1 1  1  1  1  2  2  2  2  2  2  2  2  2  2
      23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35
blong  2  2  2  2  2  1  1  2  2  2  2  2  2
```

将训练样本回代进行判别，有两个点判错，分别是第 28, 29 号样本.

对于多类的 Fisher 判别，其基本原理是相同的，这里就不介绍了.

## 8.2 聚类分析

聚类分析 (cluster analysis) 是一类将数据所研究对象进行分类的统计方法. 这一类方法的共同特点是：事先不知道类别的个数与结构；据以进行分析的数据是对象之间的相似性 (similarity) 或相异性 (dissimilarity) 的数据. 将这些相似（相异）性数据看成是对象之间的“距离”远近的一种度量，将距离近的对象归入一类，不同类之间的对象距离较远. 这就是聚类分析方法的共同思路.

聚类分析根据分类对象不同分为 Q 型聚类分析和 R 型聚类分析. Q 型聚类分析是指对样本进行聚类， R 型聚类分析是指对变量进行聚类分析.

### 8.2.1 距离和相似系数

聚类分析是研究对样本或变量的聚类，在进行聚类时，可使用的方法有很多，而这些方法的选择往往与变量的类型是有关系的，由于数据的来源及测量方法的不同，变量大致可以分为两类.

(1) 定量变量. 也就是通常所说的连续量，如长度、重量、产量、人口、速度和温度等，它们是由测量或计数、统计所得到的量，这些变量具有数值特征，称为定量变量.

(2) 定性变量. 这些量并非真有数量上的变化，而只有性质上的差异. 这些量还可以分为两种，一种是有序变量，它没有数量关系，只有次序关系，如某种产品分为一等品、二等品、三等品等，矿石的质量分为贫矿和富矿. 另一种是名义变量，这种变量即无等级关系，也无数量关系，如天气 (阴、晴), 性别 (男、女) 、职业 (工人、农民、教师、干部) 和产品的型号等.

#### 1. 距离

设 $x_{ij}$ 为第 $i$ 个样本的第 $j$ 个指标，数据矩阵如表 8.3 所示. 在表 8.3 中,

**表 8.3: 数据矩阵**

| 样本 | 变量 | | | |
|---|---|---|---|---|
| | $x_1$ | $x_2$ | $\cdots$ | $x_p$ |
| 1 | $x_{11}$ | $x_{12}$ | $\cdots$ | $x_{1p}$ |
| 2 | $x_{21}$ | $x_{22}$ | $\cdots$ | $x_{2p}$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | | $\vdots$ |
| $n$ | $x_{n1}$ | $x_{n2}$ | $\cdots$ | $x_{np}$ |

每个样本有 $p$ 个变量，故每个样本可以看成是 $R^p$ 中的一个点， $n$ 个样本就是 $R^p$ 中的 $n$ 个点. 在 $R^p$ 中需要定义某种距离，第 $i$ 个样本与第 $j$ 个样本之间的距离记为 $d_{ij}$, 在聚类过程中，距离较近的点倾向于归为一类，距离较远的点应归属不同类. 所定义的距离一般满足如下四个条件：

(1) $d_{ij} \geq 0$, 对一切 $i, j$;

(2) $d_{ij} = 0$, 当且仅当第 $i$ 个样本与第 $j$ 个样本的各变量值相同;

(3) $d_{ij} = d_{ji}$, 对一切 $i, j$;

(4) $d_{ij} \leq d_{ik} + d_{kj}$, 对一切 $i, j, k$.

对于距离最常用的有以下几种：

(1) 绝对值距离

$$d_{ij}(1) = \sum_{k=1}^{p} |x_{ik} - x_{jk}|. \tag{8.57}$$

绝对值距离也称为 “棋盘距离” 或 “城市街区” 距离.

(2) Euclide 距离

$$d_{ij}(2) = \sqrt{\sum_{k=1}^{p} (x_{ik} - x_{jk})^2}. \tag{8.58}$$

这就是通常意义下的距离.

(3) Minkowski 距离

$$d_{ij}(q) = \left[ \sum_{k=1}^{p} (x_{ik} - x_{jk})^q \right]^{1/q}, \quad q > 0. \tag{8.59}$$

不难看出绝对值距离和 Euclide 距离是 Minkowski 距离的特例.

当各变量的单位不同或测量值的范围相差很大时, 不应直接采用 Minkowski 距离, 而应先对各变量的数据作标准化处理, 然后再用标准化后的数据进行计算.

(4) Chebyshev (切比雪夫) 距离

$$d_{ij}(\infty) = \max_{1\le k\le p} |x_{ik} - x_{jk}|, \tag{8.60}$$

它是 Minkowski 距离中 $q \to \infty$ 的情况.

(5) Mahalanobis 距离

$$d_{ij}(M) = \sqrt{(x_{(i)} - x_{(j)})^T S^{-1}(x_{(i)} - x_{(j)})}, \tag{8.61}$$

其中 $x_{(i)} = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})^T$, $x_{(j)} = (x_{j1}, x_{j2}, \cdots, x_{jp})^T$, $S$ 为样本方差矩阵.

用 Mahalanobis 距离的好处是考虑到各变量之间的相关性, 并且与变量的单位无关. 但 Mahalanobis 距离有一个很大的缺陷, 就是 Mahalanobis 距离公式中的 $S$ 难以确定.

(6) Lance 和 Williams 距离

$$d_{ij}(L) = \sum_{k=1}^{p} \frac{|x_{ik} - x_{jk}|}{x_{ik} + x_{jk}}, \tag{8.62}$$

其中 $x_{ij} > 0$, $i = 1, 2, \cdots, n$, $j = 1, 2, \cdots, p$.

以上几种距离的定义均要求变量是定量变量, 下面介绍一种定性变量距离的定义方法.

(7) 定性变量样本间的距离

在数量化的理论中, 常将定性变量称为项目, 而将定性变量的各种不同的取 "值" 称为类目. 例如, 性别是项目, 而男或女是这个项目的类目. 体形也是一个项目, 而适中、胖、瘦、壮等是这个项目的类目. 设样本

$$\begin{aligned} x_{(i)} \;=\; & (\delta_i(1,1), \delta_i(1,2), \cdots, \delta_i(2,r_1), \delta_i(2,1), \delta_i(2,2), \cdots, \delta_i(2,r_2), \\ & \cdots, \delta_i(m,1), \delta_i(m,2), \cdots, \delta_i(m,r_m))^T, \quad i = 1, 2, \cdots, n, \end{aligned}$$

其中 $n$ 为样本的个数，$m$ 为项目的个数，$r_k$ 为第 $k$ 个项目的类目数，$r_1+r_2+\cdots+r_m=p$,

$$\delta_i(k,l)=\begin{cases}1, & \text{第 } i \text{ 个样本中第 } k \text{ 个项目的数据为第 } l \text{ 个类目时,}\\ 0, & \text{否则.}\end{cases}$$

称 $\delta_i(k,l)$ 为第 $k$ 个项目之 $l$ 类在第 $i$ 个样本中的反应.

例如，考虑项目 1 为性别，其目类为男、女. 项目 2 为外语种类，其目类为英、日、德、俄. 项目 3 为专业，其目类为统计、会计、金融. 项目 4 为职业，其目类为教师、工程师. 现有两个样本，第一个人是男性，所学外语是英语，所学专业是金融，其职业是工程师；第二个人是女性，所学外语是英语，所学专业是统计，其职业是教师. 表 8.4 给出相应的项目、类目和样本的取值情况. 这里

**表 8.4: 项目、类目和样本的取值情况**

| 样本 | 性别 | | 外语 | | | | 专业 | | | 职业 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 男 | 女 | 英 | 日 | 德 | 俄 | 统计 | 会计 | 金融 | 教师 | 工程师 |
| $x_{(1)}$ | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 |
| $x_{(2)}$ | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 |

$n=2$, $m=4$, $r_1=2$, $r_2=4$, $r_3=3$, $r_4=2$, $p=11$.

设有两个样本 $x_{(i)},x_{(j)}$, 若 $\delta_i(k,l)=\delta_j(k,l)=1$, 则称这两个样本在第 $k$ 个项目的第 $l$ 类目上 $1-1$ 配对；若 $\delta_i(k,l)=\delta_j(k,l)=0$, 则称这两个样本在第 $k$ 个项目的第 $l$ 类目上 $0-0$ 配对；若 $\delta_i(k,l)\neq\delta_j(k,l)$, 则称这两个样本在第 $k$ 个项目的第 $l$ 类目上不配对.

记 $m_1$ 为 $x_{(i)}$ 和 $x_{(j)}$ 在 $m$ 个项目所有类目中 $1-1$ 配对的总数，$m_0$ 为 $0-0$ 配对的总数，$m_2$ 为不配对的总数. 显然，有

$$m_0+m_1+m_2=p.$$

样本 $x_{(i)}$ 和 $x_{(j)}$ 之间的距离可以定义为

$$d_{ij}=\frac{m_2}{m_1+m_2}. \tag{8.63}$$

对于表 8.4 中的数据，$m_0=4$, $m_1=1$, $m_2=6$. 因此，距离为 $d_{12}=6/7=0.8571429$.

在 R 软件中，`dist()` 函数给出了各种距离的计算结果，其使用格式为

```
dist(x, method = "euclidean",
        diag = FALSE, upper = FALSE, p = 2)
```

其中 x 是样本构成的数据矩阵 (样本按行输入) 或数据框. method 表示计算距离的方法, 缺省值为 Euclide 距离, 所定义的距离有

- "euclidean" — Euclide 距离, 即按公式 (8.58) 计算.
- "maximum" — Chebyshev 距离, 即按公式 (8.60) 计算.
- "manhattan" — 绝对值距离, 即按公式 (8.57) 计算.
- "canberra" — Lance 距离. 事实上, 它是 Lance 距离的扩充, 并不要求 $x_{ij} > 0$, 计算公式为

$$d_{ij} = \sum_{k=1}^{p} \frac{|x_{ik} - x_{jk}|}{|x_{ik} + x_{jk}|}. \tag{8.64}$$

- "minkowski" — Minkowski 距离, 其中参数 $p$ 是 Minkowski 距离的阶数, 即公式 (8.59) 中的 $q$.
- "binary" — 定性变量的距离, 按公式 (8.63) 计算.

diag 是逻辑变量, 当 diag = TRUE 时, 给出对角线上的距离. upper 是逻辑变量, 当 upper = TRUE 时, 给出上三角矩阵的值 (缺省值仅给出下三角矩阵的值).

**2. 数据中心化与标准化变换**

在作聚类分析过程中, 大多数数据往往是不能直接参与运算的, 需要先将数据作中心化或标准化处理.

(1) 中心化变换. 称

$$x_{ij}^* = x_{ij} - \overline{x}_j, \quad i = 1, 2, \cdots, n,\ j = 1, 2, \cdots, p \tag{8.65}$$

为中心化变换. 变换后数据的均值为 0, 方差阵不变.

(2) 标准化变换. 称

$$x_{ij}^* = \frac{x_{ij} - \overline{x}_j}{s_j}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,\ j = 1, 2, \cdots, p \tag{8.66}$$

为标准化变换. 变换后数据, 每个变量的样本均值为 0, 标准差为 1, 而且标准化后的数据与变量的量纲无关.

在 R 软件中, 可用 scale() 函数作数据的中心化或标准化, 其使用格式为

```
scale(x, center = TRUE, scale = TRUE)
```

其中 x 是样本构成的数据矩阵. center 是逻辑变量, TRUE(缺省值) 表示对数据作中心化变换, FALSE 表示不作变换. scale 是逻辑变量, TRUE(缺省值) 表示对数据作标准化变换, FALSE 表示不作变换. 对应于公式 (8.65) 的计算函数为 $x^*$ = scale(x, scale = FALSE); 对应于公式 (8.66) 的计算函数为 $x^*$ = scale(x).

(3) 极差标准化变换. 称

$$x_{ij}^* = \frac{x_{ij} - \overline{x}_j}{R_j}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,\ j = 1, 2, \cdots, p \tag{8.67}$$

为极差标准化变换. 变换后数据, 每个变量的样本均值为 0, 极差为 1, 且 $|x_{ij}^*| < 1$, 在以后的分析计算中可以减少误差的产生, 同时变换后的数据也是无量纲的量.

在 R 软件中, 可用 sweep() 函数作极差标准化变换, 其变换过程如下:

```
center <- sweep(x, 2, apply(x, 2, mean))
R <- apply(x, 2, max) - apply(x,2,min)
x_star <- sweep(center, 2, R, "/")
```

其中 x 是样本构成的数据矩阵. 第一行是将数据中心化, 即式 (8.65). 第二行是计算极差 $R_j, j = 1, 2, \cdots, p$. 第三行是将中心化后的数据除以极差, 得到数据的极差标准化数据.

在上述命令中用到 sweep() 函数, sweep() 函数对数组或矩阵进行运算, 其运算格式为

```
sweep(x, MARGIN, STATS, FUN="-", ...)
```

其中 x 是数组或矩阵. MARGIN 是运算的区域, 对于矩阵来讲, 1 表示行, 2 表示列. STATS 是统计量, 如 apply(x, 2, mean) 表示各列的均值. FUN 表示函数的运算, 缺省值为减法运算.

从 sweep() 函数的规则可知, 如果将命令中的第三行改为

```
x_star <- sweep(center, 2, sd(x), "/")
```

得到的就是 (普通) 标准化变换后的数据.

(4) 极差正规化变换. 称

$$x_{ij}^* = \frac{x_{ij} - \min\limits_{1 \le k \le n} x_{kj}}{R_j}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,\ j = 1, 2, \cdots, p \tag{8.68}$$

为极差正规化变换. 变换后数据 $0 \le x_{ij}^* \le 1$, 极差为 1, 也是无量纲的量.

利用 sweep() 函数, 可以很容易得到数据的极差正规化变换, 其变换过程如下:

```
center <- sweep(x, 2, apply(x, 2, min))
R <- apply(x, 2, max) - apply(x,2,min)
x_star <- sweep(center, 2, R, "/")
```

其中 x 是样本构成的数据矩阵.

**3. 相似系数**

聚类分析方法不仅用来对样本进行分类, 而且可用来对变量进行分类, 在对变量进行分类时, 常用相似系数来度量变量之间的相似程度.

设 $c_{ij}$ 表示变量 $X_i$ 和 $X_j$ 间的相似系数, 一般要求:

(1) $c_{ij} = \pm 1$ 当且仅当 $X_i = aX_j$ $(a \ne 0)$;

(2) $|c_{ij}| \le 1$, 对一切 $i, j$ 成立;

(3) $c_{ij} = c_{ji}$, 对一切 $i, j$ 成立.

$|c_{ij}|$ 越接近 1, 则表示 $X_i$ 和 $X_j$ 的关系越密切, $c_{ij}$ 越接近 0, 则两者关系越疏远.

(1) 夹角余弦. 变量 $X_i$ 的 $n$ 次观测值为 $(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{ni})$, 则 $X_i$ 与 $X_j$ 的夹角余弦称为两向量的相似系数, 记为 $c_{ij}(1)$, 即

$$c_{ij}(1) = \frac{\sum\limits_{k=1}^{n} x_{ki}x_{kj}}{\sqrt{\sum\limits_{k=1}^{n} x_{ki}^2}\sqrt{\sum\limits_{k=1}^{n} x_{kj}^2}}, \qquad i, j = 1, 2, \cdots, p. \tag{8.69}$$

当 $X_i$ 和 $X_j$ 平行时, $c_{ij}(1) = \pm 1$, 说明这两向量完全相似; 当 $X_i$ 和 $X_j$ 正交时, $c_{ij}(1) = 0$, 说明这两向量不相关.

在 R 软件中, 可用 scale() 函数完成两向量夹角余弦的计算, 其计算公式如下:

```
y <- scale(x, center = F, scale = T)/sqrt(nrow(x)-1)
C <- t(y) %*% y
```

其中 x 是样本构成的数据矩阵. C 是由式 (8.69) 计算相出的似系数构成的矩阵. 注意：由于标准化变换除的是 $S_i$, 而公式 (8.69) 需要除 $\sqrt{\sum_{k=1}^{n} x_{ki}^2}$, 相差 $\sqrt{n-1}$ 倍，故计算公式中还需再除上 $\sqrt{n-1}$.

(2) 相关系数. 相关系数就是对数据作标准化处理后的夹角余弦. 也就是变量 $X_i$ 和变量 $X_j$ 的相关系数 $r_{ij}$, 这里记为 $c_{ij}(2)$, 即

$$c_{ij}(2) = \frac{\sum_{k=1}^{n}(x_{ki}-\overline{x}_i)(x_{kj}-\overline{x}_j)}{\sqrt{\sum_{k=1}^{n}(x_{ki}-\overline{x}_i)^2}\sqrt{\sum_{k=1}^{n}(x_{kj}-\overline{x}_j)^2}}, \quad i,j=1,2,\cdots,p. \tag{8.70}$$

当 $c_{ij}(2)=\pm 1$ 时表示两变量线性相关.

在 R 软件中， $c_{ij}(2)$ 的计算更加方便，即样本的相关矩阵,

```
C <- cor(x)
```

其中 x 是样本构成的数据矩阵.

变量之间常借助于相似系数来定义距离，如令

$$d_{ij}^2 = 1 - c_{ij}^2. \tag{8.71}$$

有时也用相似系数来度量样本间的相似程度.

### 8.2.2 系统聚类法

系统聚类方法 (hierarchical clustering method) 是聚类分析诸方法中用得最多的一种，其基本思想是：开始将 $n$ 个样本各自作为一类，并规定样本之间的距离和类与类之间的距离，然后将距离最近的两类合并成一个新类，计算新类与其他类的距离；重复进行两个最近类的合并，每次减少一类，直至所有的样本合并为一类.

以下用 $d_{ij}$ 表示第 $i$ 个样本与第 $j$ 个样本的距离， $G_1, G_2, \cdots$ 表示类， $D_{KL}$ 表示 $G_K$ 与 $G_L$ 的距离. 在下面所介绍的系统聚类法中，所有的方法一开始每个样本自成一类，类与类之间的距离与样本之间的距离相同，即 $D_{KL}=d_{KL}$, 所以最初的距离矩阵全部相同，记为 $D_{(0)}=(d_{ij})$.

#### 1. 最短距离法

定义类与类之间的距离为两类最近样本间的距离，即

$$D_{KL} = \min_{i\in G_K, j\in G_L} d_{ij}. \tag{8.72}$$

称这种系统聚类法为最短距离法 (single linkage method).

当某步骤类 $G_K$ 和 $G_L$ 合并为 $G_M$ 后，按最短距离法计算新类 $G_M$ 与其他类 $G_J$ 的类间距离，其递推公式为

$$\begin{aligned} D_{MJ} &= \min_{i\in G_M, j\in G_J} d_{ij} = \min\left\{\min_{i\in G_K, j\in G_J} d_{ij}, \min_{i\in G_L, j\in G_J} d_{ij}\right\} \\ &= \min\{D_{KL}, D_{LJ}\}. \end{aligned} \tag{8.73}$$

**2. 最长距离法**

定义类与类之间的距离为两类最远样本间的距离，即

$$D_{KL} = \max_{i\in G_K, j\in G_L} d_{ij}. \tag{8.74}$$

称这种系统聚类法为最长距离法 (complete linkage method).

当某步骤类 $G_K$ 和 $G_L$ 合并为 $G_M$ 后，则 $G_M$ 与任一类 $G_J$ 距离为

$$D_{MJ} = \max\{D_{KL}, D_{LJ}\}. \tag{8.75}$$

**3. 中间距离法**

类与类之间的距离即不取两类最近样本的距离，也不取两类最远样本的距离，而是取介于两者中间的距离，称为中间距离法 (median method).

设某一步将 $G_K$ 和 $G_L$ 合并为 $G_M$, 对于任一类 $G_J$, 考虑由 $D_{KL}$, $D_{LJ}$ 和 $D_{KJ}$ 为边长组成的三角形 (如图 8.2 所示), 取 $D_{KL}$ 边的中线作为 $D_{MJ}$. 由初等平面几何可知， $D_{MJ}$ 的计算公式为

$$D_{MJ}^2 = \frac{1}{2}D_{KJ}^2 + \frac{1}{2}D_{LJ}^2 - \frac{1}{4}D_{KL}^2. \tag{8.76}$$

这就是中间距离法的递推公式.

中间法可推广为更一般的情形，将式 (8.76) 中三项的系数依赖于某个参数 $\beta$, 即

$$D_{MJ}^2 = \frac{1-\beta}{2}\left(\frac{1}{2}D_{KJ}^2 + \frac{1}{2}D_{LJ}^2\right) + \beta D_{KL}^2, \tag{8.77}$$

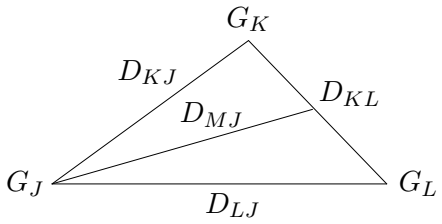



图 8.2: 中间距离法的几何表示

其中 $\beta < 1$, 这种方法称为可变法. 当 $\beta = 0$ 时, 递推公式变为

$$D_{MJ}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}D_{KJ}^2 + \frac{1}{2}D_{LJ}^2\right). \tag{8.78}$$

称此方法为 Mcquitty 相似分析法.

**4. 类平均法**

类平均法 (average linkage method) 有两种定义, 一种定义方法是把类与类之间的距离定义为所有样本对之间的平均距离, 即定义 $G_K$ 和 $G_L$ 之间的距离为

$$D_{KL} = \frac{1}{n_K n_L}\sum_{i\in G_K, j\in G_L} d_{ij}, \tag{8.79}$$

其中 $n_K$ 和 $n_L$ 分别为类 $G_K$ 和 $G_L$ 的样本个数, $d_{ij}$ 为 $G_K$ 中样本 $i$ 与 $G_L$ 中的样本 $j$ 之间的距离. 容易得到它的一个递推公式:

$$\begin{aligned} D_{MJ} &= \frac{1}{n_M n_J}\sum_{i\in G_M, j\in G_J} d_{ij} \\ &= \frac{1}{n_M n_J}\left(\sum_{i\in G_K, j\in G_J} d_{ij} + \sum_{i\in G_L, j\in G_J} d_{ij}\right) \\ &= \frac{n_K}{n_M}D_{KJ} + \frac{n_L}{n_M}D_{LJ}. \end{aligned} \tag{8.80}$$

另一种定义方法是定义类与类之间的平方距离为样本对之间平方距离的平均值, 即

$$D_{KL}^2 = \frac{1}{n_K n_L}\sum_{i\in G_K, j\in G_L} d_{ij}^2. \tag{8.81}$$

它的递推公式为

$$D_{MJ}^2 = \frac{n_K}{n_M}D_{KJ}^2 + \frac{n_L}{n_M}D_{LJ}^2. \tag{8.82}$$

类平均法较好在利用了所有样本之间的信息, 在很多情况下, 它被认为是一种较好的系统聚类法.

在递推公式 (8.82) 中, $D_{KL}$ 的影响没有被反映出来, 为此可将该递推公式进一步推广为

$$D_{MJ}^2 = (1-\beta)\left(\frac{n_K}{n_M}D_{KJ}^2 + \frac{n_L}{n_M}D_{LJ}^2\right) + \beta D_{KL}^2, \tag{8.83}$$

其中 $\beta < 1$, 称这种系统聚类法为可变类平均法.

**5. 重心法**

类与类之间的距离定义为它们的重心 (均值) 之间的 Euclide 距离. 设 $G_K$ 和 $G_L$ 的重心分别为 $\overline{x}_K$ 和 $\overline{x}_L$, 则 $G_K$ 与 $G_L$ 之间的平方距离为

$$D_{KL}^2 = d_{\overline{x}_K\overline{x}_L}^2 = (\overline{x}_K - \overline{x}_L)^T(\overline{x}_K - \overline{x}_L). \tag{8.84}$$

这种系统聚类方法称为重心法 (centroid hierarchical method). 它的递推公式为

$$D_{MJ}^2 = \frac{n_K}{n_M}D_{KJ}^2 + \frac{n_L}{n_M}D_{LJ}^2 - \frac{n_K n_L}{n_M^2}D_{KL}^2. \tag{8.85}$$

重心法在处理异常值方面比其他系统类法更稳健, 但是在别的方面一般不如类平均法或离差平方和法的效果好.

**6. 离差平方和法 (Ward 方法)**

离平方和法是 Ward(1936) 提出的, 也称为 Ward 法. 它基于方差分析思想, 如果类分得正确, 则同类样本之间的离差平方和应当较小, 不同类样本之间的离差平方和应当较大.

设类 $G_K$ 和 $G_L$ 合并成新的类 $G_M$, 则 $G_K, G_L, G_M$ 的离差平方和分别是

$$\begin{aligned} W_K &= \sum_{i\in G_K}(x_{(i)} - \overline{x}_K)^T(x_{(i)} - \overline{x}_K), \\ W_L &= \sum_{i\in G_L}(x_{(i)} - \overline{x}_L)^T(x_{(i)} - \overline{x}_L), \\ W_M &= \sum_{i\in G_M}(x_{(i)} - \overline{x}_M)^T(x_{(i)} - \overline{x}_M). \end{aligned}$$

它们反映了各自类内样本的分散程度. 如 $G_K$ 和 $G_L$ 这两类相距较近, 则合并后所增加的离差平方和 $W_M - W_K - W_L$ 应较小; 否则, 应较大. 于是定义 $G_K$ 和 $G_L$ 之间的平方距离为

$$D_{KL}^2 = W_M - W_K - W_L. \tag{8.86}$$

这种系统聚类法称为离差平方和法或 Ward 方法 (Ward's minimum variance method). 它的递推公式为

$$D_{MJ}^2 = \frac{n_J + n_K}{n_J + n_M} D_{KJ}^2 + \frac{n_J + n_L}{n_J + n_M} D_{LJ}^2 - \frac{n_J}{n_J + n_M} D_{KL}^2. \tag{8.87}$$

$G_K$ 和 $G_L$ 之间的平方距离也可以写成

$$D_{KL}^2 = \frac{n_K n_L}{n_M} (\overline{x}_K - \overline{x}_L)^T (\overline{x}_K - \overline{x}_L). \tag{8.88}$$

可见, 这个距离与由式 (8.84) 给出的重心法的距离只相差一个常数倍. 重心法的类间距与两类的样本数无关, 而离差平方和法的类间距与两类的样本数有较大的关系, 两个大类倾向于有较大的距离, 因而不易合并, 这更符合对聚类的实际要求. 离差平方和法在许多场合下优于重心法, 是比较好的一种系统聚类法, 但它对异常值很敏感.

**7. 系统聚类的 R 软件计算**

在 R 软件中, `hclust()` 函数提供了系统聚类的计算, `plot()` 函数可画出系统聚类的树形图 (或称为谱系图, dendrogram).

`hclust()` 函数的使用格式为

```
hclust(d, method = "complete", members=NULL)
```

其中 `d` 是由 `"dist"` 构成的结构. `method` 是系统聚类的方法 (缺省是最长距离法), 其参数有

- `"single"` — 最短距离法, 即公式 (8.72)–(8.73).
- `"complete"` — 最长距离法, 即公式 (8.74)–(8.75).
- `"median"` — 中间距离法, 即公式 (8.76).
- `"mcquitty"` — Mcquitty 相似法, 即公式 (8.78).
- `"average"` — 类平均法, 这里采用的是公式 (8.79)–(8.80).
- `"centroid"` — 重心法, 即公式 (8.84)–(8.85).

- "ward" — 离差平方和法，即公式 (8.86)–(8.87).

members 缺省值为 NULL, 或与 d 有相同变量长度的向量，具体使用方法请见在线帮助.

plot() 函数画出谱系图的格式为

```
plot(x, labels = NULL, hang = 0.1,
     axes = TRUE, frame.plot = FALSE, ann = TRUE,
     main = "Cluster Dendrogram",
     sub = NULL, xlab = NULL, ylab = "Height", ...)
```

其中 x 是由 hclust() 函数生成的对象. hang 是表明谱系图中各类所在的位置，当 hang 取负值时，谱系图中的类从底部画起. 其他参数的意义请见在线帮助.

下面通过一些简单的例子来说明系统聚类方法，以及 R 函数的使用方法.

**例 8.6** 设有五个样本，每个样本只有一个指标，分别是 *1,2,6,8,11,* 样本间的距离选用 *Euclide* 距离，试用最短距离法、最长距离法等方法进行聚类分析，并画出相应的谱系图.

**解**: 用 Euclide 距离计算各样本点间的距离，用最短距离法、最长距离法、中间距离法和 Mcquitty 相似法进行聚类分析，并画出四种方法的谱系图，而且将四个谱系图画在一个图上.

以下是 R 语句 (程序名： exam0806.R)

```
#### 输入数据，生成距离结构
x<-c(1,2,6,8,11); dim(x)<-c(5,1); d<-dist(x)
#### 生成系统聚类
hc1<-hclust(d, "single"); hc2<-hclust(d, "complete")
hc3<-hclust(d, "median"); hc4<-hclust(d, "mcquitty")
#### 绘出所有树形结构图，并以 2 × 2 的形式绘在一张图上
opar <- par(mfrow = c(2, 2))
plot(hc1,hang=-1); plot(hc2,hang=-1)
plot(hc3,hang=-1); plot(hc4,hang=-1)
par(opar)
```

画出的图形如图 8.3 所示.

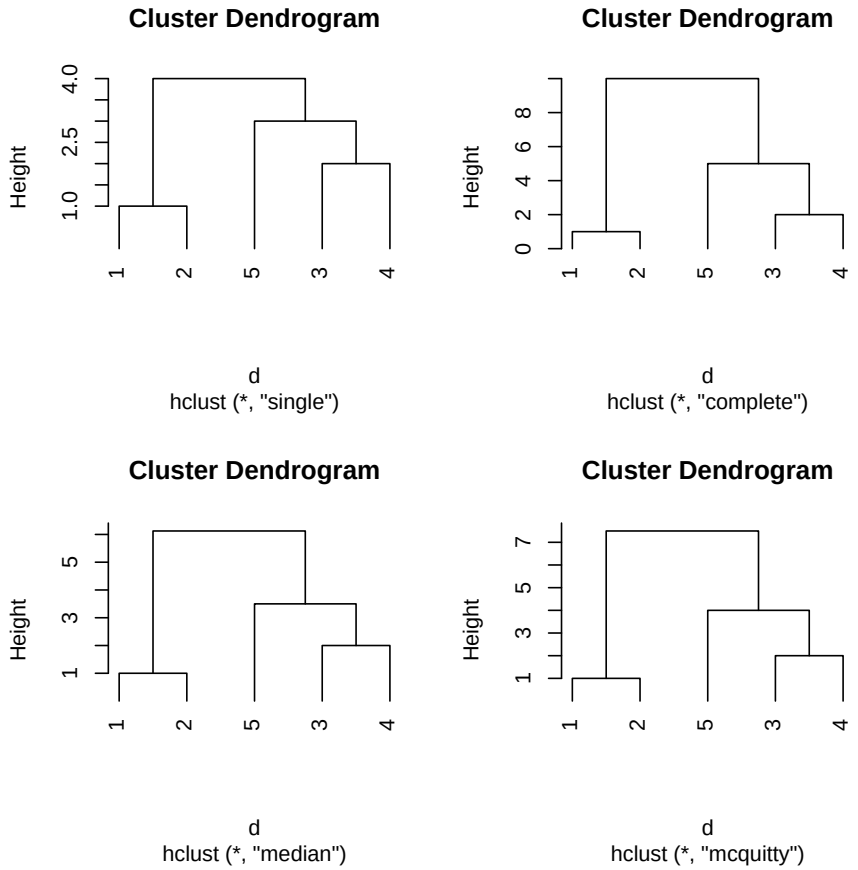



图 8.3: 四种不同距离的谱系图

与绘谱系图有关的函数还有 as.dendrogram(), 其意思是将系统聚类得到的对象强制为谱系图，它的使用格式为

```
as.dendrogram(object, hang = -1, ...)
```

其中 object 是由 hclust 得到的对象. 在此时， plot() 函数的用法为

```
plot(x, type = c("rectangle", "triangle"),
     center = FALSE,
     edge.root = is.leaf(x) || !is.null(attr(x,"edgetext")),
     nodePar = NULL, edgePar = list(),
     leaflab = c("perpendicular", "textlike", "none"),
     dLeaf = NULL, xlab = "", ylab = "", xaxt = "n", yaxt = "s",
     horiz = FALSE, frame.plot = FALSE, ...)
```

其中 x 是由 dendrogram 得到的对象. type 表示画谱系图的类型, "rectangle" 是矩形 (缺省值), "triangle" 为三角形. horiz 是逻辑变量, 当 horiz=TRUE 时, 表示谱系图水平放置. 其他参数见在线帮助.

以下命令和图形 (见图 8.4) 可以帮助我们理解有关参数的意义.

```
dend1<-as.dendrogram(hc1)
opar <- par(mfrow = c(2, 2),mar = c(4,3,1,2))
plot(dend1)
plot(dend1, nodePar=list(pch = c(1,NA), cex=0.8, lab.cex=0.8),
     type = "t", center=TRUE)
```

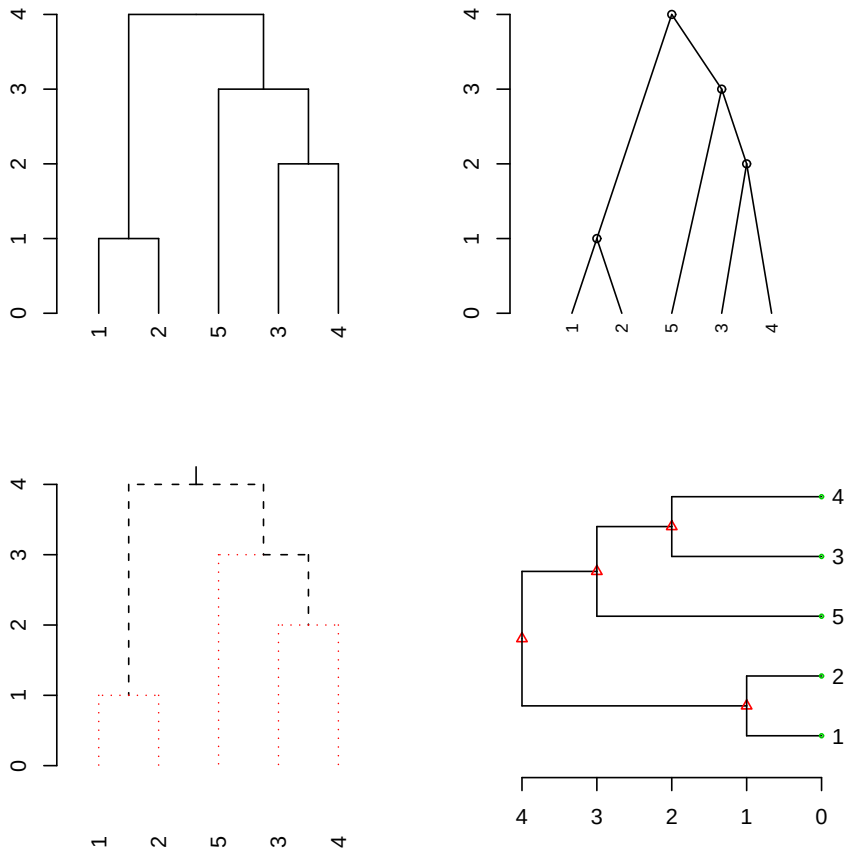



图 8.4: 不同参数下的谱系图

```
plot(dend1, edgePar=list(col = 1:2, lty = 2:3),
     dLeaf=1, edge.root = TRUE)
```

```
plot(dend1, nodePar=list(pch = 2:1, cex=.4*2:1, col=2:3),
     horiz=TRUE)
par(opar)
```

**例 8.7** 对 *305* 名女中学生测量八个体型指标，相应的相关矩阵如表 *8.5* 所示. 将相关系数看成相似系数，定义距离为

$$d_{ij} = 1 - r_{ij}.$$

用最长距离法作系统分析.

**表 8.5: 各对变量之间的相关系数**

| | 身高 $x_1$ | 手臂长 $x_2$ | 上肢长 $x_3$ | 下肢长 $x_4$ | 体重 $x_5$ | 颈围 $x_6$ | 胸围 $x_7$ | 胸宽 $x_8$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 身高 | 1.000 | | | | | | | |
| 手臂长 | 0.846 | 1.000 | | | | | | |
| 上肢长 | 0.805 | 0.881 | 1.000 | | | | | |
| 下肢长 | 0.859 | 0.826 | 0.801 | 1.000 | | | | |
| 体重 | 0.473 | 0.376 | 0.380 | 0.436 | 1.000 | | | |
| 颈围 | 0.398 | 0.326 | 0.319 | 0.329 | 0.762 | 1.000 | | |
| 胸围 | 0.301 | 0.277 | 0.237 | 0.327 | 0.730 | 0.583 | 1.000 | |
| 胸宽 | 0.382 | 0.277 | 0.345 | 0.365 | 0.629 | 0.577 | 0.539 | 1.000 |

**解**：输入相关系数矩阵. 在作谱系图中，用到前面讲过的函数 `hclust()`, `as.dendrogram()` 和 `plot()`. 为了使谱系图画的更好看，还增加一个自编的函数. 下面是相应的 R 程序 (程序名： `exam0807.R`)

```
####  输入相关矩阵
x<-c(1.000, 0.846, 0.805, 0.859, 0.473, 0.398, 0.301, 0.382,
     0.846, 1.000, 0.881, 0.826, 0.376, 0.326, 0.277, 0.277,
     0.805, 0.881, 1.000, 0.801, 0.380, 0.319, 0.237, 0.345,
     0.859, 0.826, 0.801, 1.000, 0.436, 0.329, 0.327, 0.365,
     0.473, 0.376, 0.380, 0.436, 1.000, 0.762, 0.730, 0.629,
     0.398, 0.326, 0.319, 0.329, 0.762, 1.000, 0.583, 0.577,
```

```
     0.301, 0.277, 0.237, 0.327, 0.730, 0.583, 1.000, 0.539,
     0.382, 0.415, 0.345, 0.365, 0.629, 0.577, 0.539, 1.000)
names<-c(" 身高 "," 手臂长 "," 上肢长 "," 下肢长 "," 体重 "," 颈围 ",
         " 胸围 "," 胸宽 ")
r<-matrix(x, nrow=8, dimnames=list(names, names))
####  作系统聚类分析,
####  函数 as.dist() 的作用是将普通矩阵转化为聚类分析用的距离结构.
d<-as.dist(1-r); hc<-hclust(d); dend<-as.dendrogram(hc)
####  写一段小程序, 其目的是在绘图命令中调用它, 使谱系图更好看.
nP<-list(col=3:2, cex=c(2.0, 0.75), pch= 21:22,
         bg= c("light blue", "pink"),
         lab.cex = 1.0, lab.col = "tomato")
addE <- function(n){
   if(!is.leaf(n)){
      attr(n,"edgePar")<-list(p.col="plum")
      attr(n,"edgetext")<-paste(attr(n,"members"),"members")
   }
   n
}
####  画出谱系图.
de <- dendrapply(dend, addE); plot(de, nodePar= nP)
```

所绘图形如图 8.5 所示.

从上面的谱系图 (图 8.5) 容易看出, 变量 $x_2$(手臂长) 与 $x_3$(上肢长) 最先合并成一类. 接下来是变量 $x_1$(身高) 与 $x_4$(下肢长) 合并成一类. 再合并就是将新得到的两类合并成一类 (可以称为 “长” 类). 后面要合并的是 $x_5$(体重) 与 $x_3$(颈围). 再合并就是将 $x_7$(胸围) 加到新类中, 再加就是 $x_8$(胸宽). 最后合并为一类.

**8. 类个数的确定**

在聚类过程中类的个数如何确定才是适宜的呢? 这是一个十分困难的问题, 至今仍未找到令人满意的方法, 但这又是一个不可回避的问题. 目前基本的方法有三种.

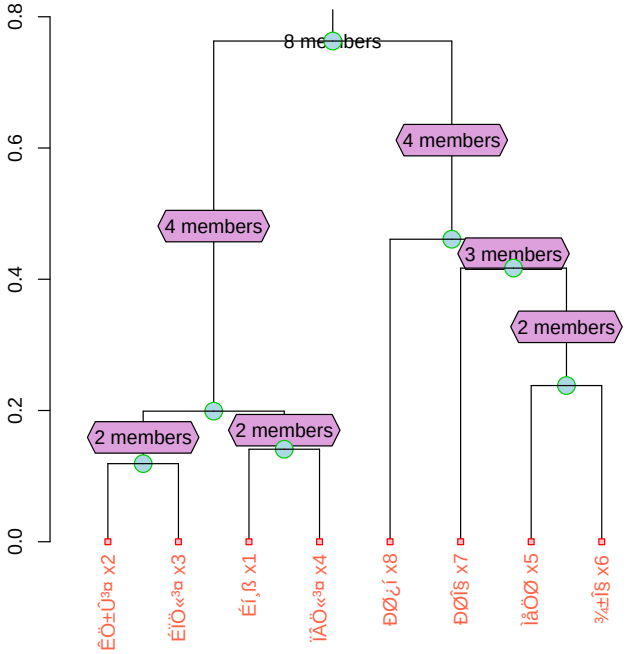



图 8.5: 八个体型指标的谱系图

(1) 给定一个阈值. 通过观察谱系图，给出一个你认为的阈值 $T$, 要求类与类之间的距离要大于 $T$.

(2) 观测样本的散点图. 对于二维或三维变量的样本，可以通过观测数据的散点图来确定类的个数.

(3) 使用统计量. 通过一些统计量来确定类的个数.

(4) 根据谱系图确定分类个数的准则.

Bemirmen (1972) 提出了根据研究目的来确定适当的分类方法，并提出一些根据谱系图来分析的准则：

**准则 A** 各类重心的距离必须很大；

**准则 B** 确定的类中，各类所包含的元素都不要太多；

**准则 C** 类的个数必须符合实用目的；

**准则 D** 若采用几种不同的聚类方法处理，则在各自的聚类图中应发现相同的类.

在 R 软件中，与确定类的个数有关的函数是 `rect.hclust()` 函数，它的本质是由给定类的个数或给定阈值来确定聚类的情况，其使用格式为

```
rect.hclust(tree, k = NULL, which = NULL, x = NULL, h = NULL,
```

```
        border = 2, cluster = NULL)
```

其中 tree 是由 hclust 生成的结构. k 是类的个数. h 是谱系图中的阈值，要求分成的各类的距离大于 h. border 是数或向量，标明矩形框的颜色.

对于八个体型指标的聚类分析中 (见例 8.7), 将变量分为三类，即 $k = 3$, 其程序和计算结果如下：

```
plclust(hc, hang=-1); re<-rect.hclust(hc, k=3)
```

得到身高 $(x_1)$, 手臂长 $(x_2)$, 上肢长 $(x_3)$, 下肢长 $(x_4)$ 分为第一类，胸宽 $(x_8)$ 为第二类，体重 $(x_5)$, 颈围 $(x_6)$, 胸围 $(x_7)$ 分为第三类. 其图形如图 8.6 所示.

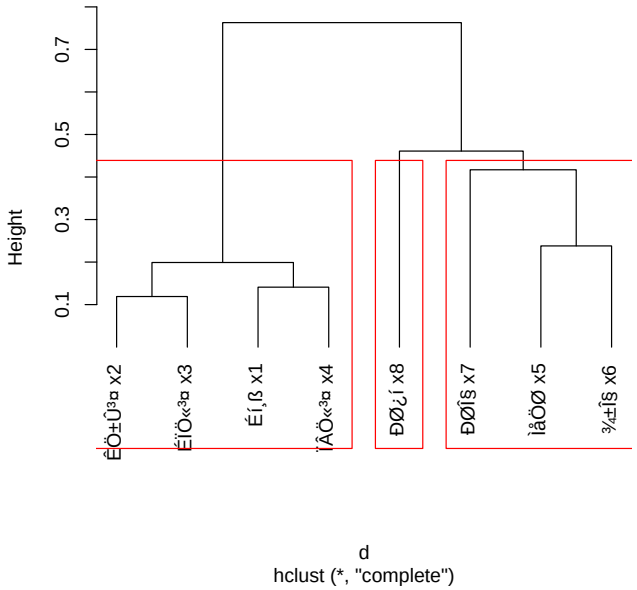



图 8.6: 八个体型指标的谱系图和聚类情况

在上述程序中, plclust() 函数是另一种绘谱系图的函数，与 plot() 函数所画图形略有差别，其具体使用格式如下：

```
plclust(tree, hang=0.1, unit=FALSE, level=FALSE, hmin=0,
        square=TRUE, labels=NULL, plot. = TRUE,
        axes = TRUE, frame.plot = FALSE, ann = TRUE,
        main = "", sub = NULL, xlab=NULL, ylab="Height")
```

中 tree 是由 hclust() 函数生成的对象. 其他参数与 plot() 函数中的参数相同.

**9. 实例**

下面用一个具体的实例来总结前面介绍的聚类分析的方法.

**例 8.8** 表 *8.6* 列出了 *1999* 年全国 *31* 个省、市、自治区的城镇居民家庭平均每人全年消费性支出的八个主要指标 *(*变量*)* 数据. 这八个变量是

$x_1$ — 食品　　$x_4$ — 医疗保健　　$x_6$ — 娱乐教育文化服务

$x_2$ — 衣着　　$x_5$ — 交通与通讯　　$x_7$ — 居住

$x_3$ — 家庭设备用品及服务　　$x_8$ — 杂项商品和服务

分别用最长距离法、类平均法、重心法和 *Ward* 方法对各地区作聚类分析.

**表 8.6: 31 个省、市、自治区消费性支出数据**

| | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ | $x_8$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 北京 | 2959.19 | 730.79 | 749.41 | 513.34 | 467.87 | 1141.82 | 478.42 | 457.64 |
| 天津 | 2459.77 | 495.47 | 697.33 | 302.87 | 284.19 | 735.97 | 570.84 | 305.08 |
| 河北 | 1495.63 | 515.90 | 362.37 | 285.32 | 272.95 | 540.58 | 364.91 | 188.63 |
| 山西 | 1046.33 | 477.77 | 290.15 | 208.57 | 201.50 | 414.72 | 281.84 | 212.10 |
| 内蒙古 | 1303.97 | 524.29 | 254.83 | 192.17 | 249.81 | 463.09 | 287.87 | 192.96 |
| 辽宁 | 1730.84 | 553.90 | 246.91 | 279.81 | 239.18 | 445.20 | 330.24 | 163.86 |
| 吉林 | 1561.86 | 492.42 | 200.49 | 218.36 | 220.69 | 459.62 | 360.48 | 147.76 |
| 黑龙江 | 1410.11 | 510.71 | 211.88 | 277.11 | 224.65 | 376.82 | 317.61 | 152.85 |
| 上海 | 3712.31 | 550.74 | 893.37 | 346.93 | 527.00 | 1034.98 | 720.33 | 462.03 |
| 江苏 | 2207.58 | 449.37 | 572.40 | 211.92 | 302.09 | 585.23 | 429.77 | 252.54 |
| 浙江 | 2629.16 | 557.32 | 689.73 | 435.69 | 514.66 | 795.87 | 575.76 | 323.36 |
| 安徽 | 1844.78 | 430.29 | 271.28 | 126.33 | 250.56 | 513.18 | 314.00 | 151.39 |
| 福建 | 2709.46 | 428.11 | 334.12 | 160.77 | 405.14 | 461.67 | 535.13 | 232.29 |
| 江西 | 1563.78 | 303.65 | 233.81 | 107.90 | 209.70 | 393.99 | 509.39 | 160.12 |
| 山东 | 1675.75 | 613.32 | 550.71 | 219.79 | 272.59 | 599.43 | 371.62 | 211.84 |
| 河南 | 1427.65 | 431.79 | 288.55 | 208.14 | 217.00 | 337.76 | 421.31 | 165.32 |
| 湖北 | 1783.43 | 511.88 | 282.84 | 201.01 | 237.60 | 617.74 | 523.52 | 182.52 |

**表 8.6(继): 31 个省、市、自治区消费性支出数据**

| | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ | $x_8$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 湖南 | 1942.23 | 512.27 | 401.39 | 206.06 | 321.29 | 697.22 | 492.60 | 226.45 |
| 广东 | 3055.17 | 353.23 | 564.56 | 356.27 | 811.88 | 873.06 | 1082.82 | 420.81 |
| 广西 | 2033.87 | 300.82 | 338.65 | 157.78 | 329.06 | 621.74 | 587.02 | 218.27 |
| 海南 | 2057.86 | 186.44 | 202.72 | 171.79 | 329.65 | 477.17 | 312.93 | 279.19 |
| 重庆 | 2303.29 | 589.99 | 516.21 | 236.55 | 403.92 | 730.05 | 438.41 | 225.80 |
| 四川 | 1974.28 | 507.76 | 344.79 | 203.21 | 240.24 | 575.10 | 430.36 | 223.46 |
| 贵州 | 1673.82 | 437.75 | 461.61 | 153.32 | 254.66 | 445.59 | 346.11 | 191.48 |
| 云南 | 2194.25 | 537.01 | 369.07 | 249.54 | 290.84 | 561.91 | 407.70 | 330.95 |
| 西藏 | 2646.61 | 839.70 | 204.44 | 209.11 | 379.30 | 371.04 | 269.59 | 389.33 |
| 陕西 | 1472.95 | 390.89 | 447.95 | 259.51 | 230.61 | 490.90 | 469.10 | 191.34 |
| 甘肃 | 1525.57 | 472.98 | 328.90 | 219.86 | 206.65 | 449.69 | 249.66 | 228.19 |
| 青海 | 1654.69 | 437.77 | 258.78 | 303.00 | 244.93 | 479.53 | 288.56 | 236.51 |
| 宁夏 | 1375.46 | 480.99 | 273.84 | 317.32 | 251.08 | 424.75 | 228.73 | 195.93 |
| 新疆 | 1608.82 | 536.05 | 432.46 | 235.82 | 250.28 | 541.30 | 344.85 | 214.40 |

**解**: 先输入数据, 在作聚类分析之前, 为同等地对待每个变量, 消除数据在数量级的影响, 对数据作标准化. 然后, 用 `hclust()` 作聚类分析, 用 `plot()` 函数画出谱系图. 最后用 `rect.hclust()` 将地区分成 5 类.

下面是相应的 R 程序 (程序名: `exam0808.R`).

```
#### 用数据框形式输入数据
X<-data.frame(
   x1=c(2959.19, 2459.77, 1495.63, 1046.33, 1303.97, 1730.84,
        1561.86, 1410.11, 3712.31, 2207.58, 2629.16, 1844.78,
        2709.46, 1563.78, 1675.75, 1427.65, 1783.43, 1942.23,
        3055.17, 2033.87, 2057.86, 2303.29, 1974.28, 1673.82,
        2194.25, 2646.61, 1472.95, 1525.57, 1654.69, 1375.46,
        1608.82),
   x2=c(730.79, 495.47, 515.90, 477.77, 524.29, 553.90, 492.42,
```

```
     510.71, 550.74, 449.37, 557.32, 430.29, 428.11, 303.65,
     613.32, 431.79, 511.88, 512.27, 353.23, 300.82, 186.44,
     589.99, 507.76, 437.75, 537.01, 839.70, 390.89, 472.98,
     437.77, 480.99, 536.05),
x3=c(749.41, 697.33, 362.37, 290.15, 254.83, 246.91, 200.49,
     211.88, 893.37, 572.40, 689.73, 271.28, 334.12, 233.81,
     550.71, 288.55, 282.84, 401.39, 564.56, 338.65, 202.72,
     516.21, 344.79, 461.61, 369.07, 204.44, 447.95, 328.90,
     258.78, 273.84, 432.46),
x4=c(513.34, 302.87, 285.32, 208.57, 192.17, 279.81, 218.36,
     277.11, 346.93, 211.92, 435.69, 126.33, 160.77, 107.90,
     219.79, 208.14, 201.01, 206.06, 356.27, 157.78, 171.79,
     236.55, 203.21, 153.32, 249.54, 209.11, 259.51, 219.86,
     303.00, 317.32, 235.82),
x5=c(467.87, 284.19, 272.95, 201.50, 249.81, 239.18, 220.69,
     224.65, 527.00, 302.09, 514.66, 250.56, 405.14, 209.70,
     272.59, 217.00, 237.60, 321.29, 811.88, 329.06, 329.65,
     403.92, 240.24, 254.66, 290.84, 379.30, 230.61, 206.65,
     244.93, 251.08, 250.28),
x6=c(1141.82, 735.97, 540.58, 414.72, 463.09, 445.20, 459.62,
     376.82, 1034.98, 585.23, 795.87, 513.18, 461.67, 393.99,
     599.43, 337.76, 617.74, 697.22, 873.06, 621.74, 477.17,
     730.05, 575.10, 445.59, 561.91, 371.04, 490.90, 449.69,
     479.53, 424.75, 541.30),
x7=c(478.42, 570.84, 364.91, 281.84, 287.87, 330.24, 360.48,
     317.61, 720.33, 429.77, 575.76, 314.00, 535.13, 509.39,
     371.62, 421.31, 523.52, 492.60, 1082.82, 587.02, 312.93,
     438.41, 430.36, 346.11, 407.70, 269.59, 469.10, 249.66,
     288.56, 228.73, 344.85),
x8=c(457.64, 305.08, 188.63, 212.10, 192.96, 163.86, 147.76,
     152.85, 462.03, 252.54, 323.36, 151.39, 232.29, 160.12,
     211.84, 165.32, 182.52, 226.45, 420.81, 218.27, 279.19,
```

```
        225.80, 223.46, 191.48, 330.95, 389.33, 191.34, 228.19,
        236.51, 195.93, 214.40),
    row.names=c(" 北京 ", " 天津 ", " 河北 ", " 山西 ", " 内蒙古 ",
        " 辽宁 ", " 吉林 ", " 黑龙江 ", " 上海 ", " 江苏 ", " 浙江 ",
        " 安徽 ", " 福建 ", " 江西 ", " 山东 ", " 河南 ", " 湖北 ",
        " 湖南 ", " 广东 ", " 广西 ","海南 ", " 重庆 ", " 四川 ",
        " 贵州 ", " 云南 ","西藏 ", " 陕西 ", " 甘肃 ", " 青海 ",
        " 宁夏 ", " 新疆 ")
)
#### 生成距离结构, 作系统聚类
d <- dist(scale(X))
hc1 <- hclust(d);              hc2 <- hclust(d, "average")
hc3 <- hclust(d, "centroid"); hc4 <- hclust(d, "ward")
#### 绘出谱系图和聚类情况 (最长距离法和类平均法)
opar<-par(mfrow=c(2,1), mar=c(5.2,4,0,0))
plclust(hc1, hang=-1); re1<-rect.hclust(hc1, k=5, border="red")
plclust(hc2, hang=-1); re2<-rect.hclust(hc2, k=5, border="red")
par(opar)
```

其结果如图 8.7 所示.

按照最长距离法得到的五类分别是:

**第一类**: 西藏

**第二类**: 河北、山西、内蒙古、辽宁、吉林、黑龙江、江苏、安徽、福建、江西、山东、河南、湖北、湖南、广西、海南、重庆、四川、贵州、云南、陕西、甘肃、青海、宁夏、新疆

**第三类**: 广东

**第四类**: 天津、浙江

**第五类**: 北京、上海

按照类平均法得到的五类分别是:

**第一类**: 西藏

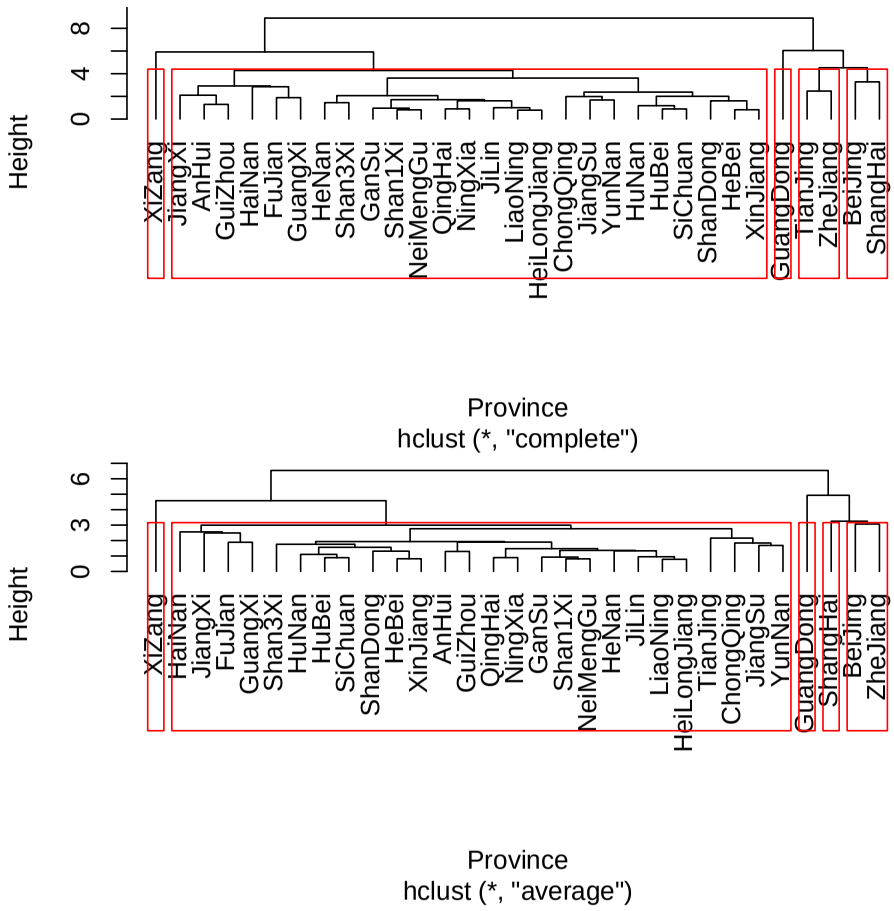



图 8.7: 消费性支出数据的谱系图和聚类结果 (1)

**第二类**：天津、河北、山西、内蒙古、辽宁、吉林、黑龙江、江苏、安徽、福建、江西、山东、河南、湖北、湖南、广西、海南、重庆、四川、贵州、云南、陕西、甘肃、青海、宁夏、新疆

**第三类**：广东

**第四类**：上海

**第五类**：北京、浙江

#### 绘出谱系图和聚类情况 (重心法和 Ward 法)

```
opar<-par(mfrow=c(2,1), mar=c(5.2,4,0,0))
plclust(hc3,hang=-1); re3<-rect.hclust(hc3,k=5,border="red")
plclust(hc4,hang=-1); re4<-rect.hclust(hc4,k=5,border="red")
par(opar)
```

其结果如图 8.8 所示.

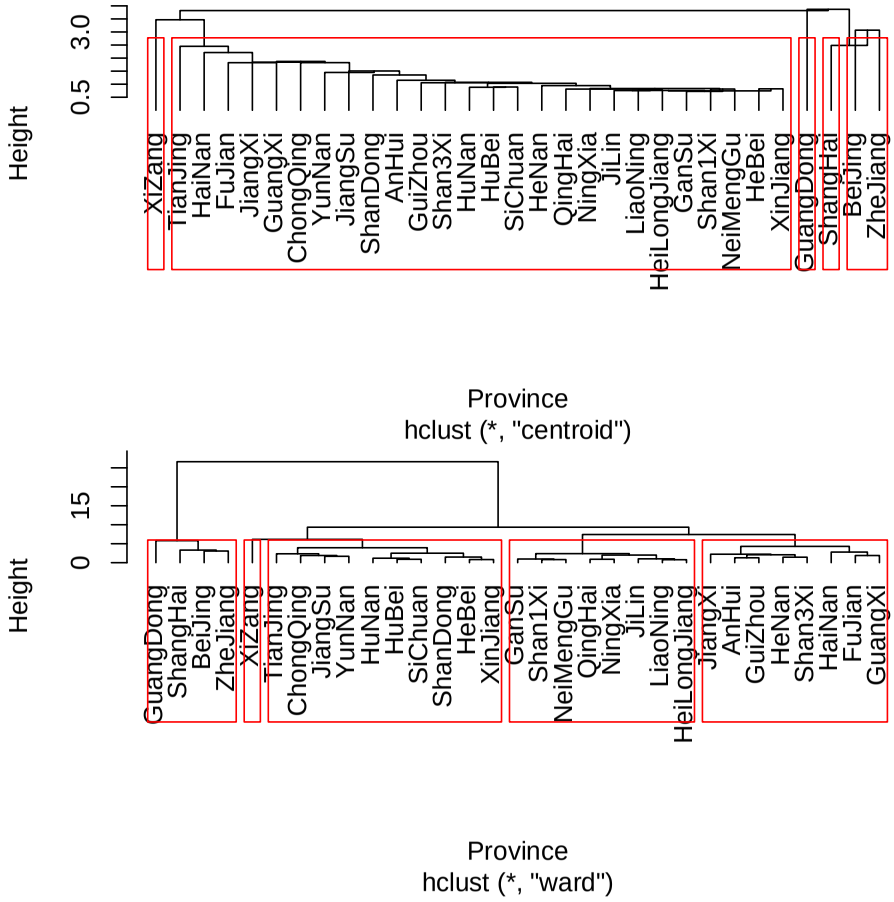



图 8.8: 消费性支出数据的谱系图和聚类结果 (2)

按照重心法得到的五类分别是:

**第一类**: 西藏

**第二类**: 天津、河北、山西、内蒙古、辽宁、吉林、黑龙江、江苏、安徽、福建、江西、山东、河南、湖北、湖南、广西、海南、重庆、四川、贵州、云南、陕西、甘肃、青海、宁夏、新疆

**第三类**: 广东

**第四类**: 上海

**第五类**: 北京、浙江

按照离差平方和法 (Ward 法) 得到的五类分别是:

**第一类**: 北京、上海、浙江、广东

**第二类**：西藏
**第三类**：天津、河北、江苏、山东、湖北、湖南、重庆、四川、云南、新疆
**第四类**：山西、内蒙古、辽宁、吉林、黑龙江、甘肃、青海、宁夏
**第五类**：安徽、福建、江西、河南、广西、海南、贵州、陕西

四种方法得到的类有的是相同的，有的是不相同的，可以根据具体的数据与背景再进一步确定认同哪种聚类是较为合理的.

### 8.2.3 动态聚类法

系统聚类法一次形成类以后就不能改变，这就要求一次分类分得比较准确，对分类的方法提出较高的要求，相应的计算量自然也较大. 如 Q 型系统聚类法，聚类的过程是在样本间距离矩阵的基础上进行，当样本容量很大时，需要占据足够大的计算机内存，而且在并类过程中，需要将每类样本和其他样本间的距离逐一加以比较，以决定应合并的类别，需要较长的计算时间. 所以对于大样本问题， Q 型系统聚类法可能会因计算机内存或计算时间的限制而无法进行计算，这给应用带来一定的不便. 基于这种情况，产生了动态聚类，即动态聚类法.

动态聚类又称为逐步聚类法，其基本思想是，开始先粗略地分一下类，然后按照某种最优原则修改不合理的分类，直至类分得比较合理为止，这样就形成一个最终的分类结果. 这种方法具有计算量较小，占计算机内存较少和方法简单的优点，适用于大样本的 Q 型聚类分析.

关于动态聚类法的算法这里就不作介绍了，任何一本《多元分析》的教科书，均有此方面的内容，如果需要的话，读者可以看这方面的参考书. 这里介绍用于动态聚类的 R 函数 — `kmeans()` 函数.

`kmeans()` 函数采用的是 $K-$ 均值方法，是采用逐个修改方法，最早由 MacQueen 在 1967 年提出来，随后许多人对此作了许多改进. `kmeans()` 函数的使用格式为

```
kmeans(x, centers, iter.max = 10, nstart = 1,
       algorithm = c("Hartigan-Wong", "Lloyd",
                     "Forgy", "MacQueen"))
```

其中 `x` 是由数据构成的矩阵或数据框， `centers` 是聚类的个数或者是初始类的中心. `iter.max` 为最大迭代次数 (缺省值为 10). `nstart` 随机集合的个数 (当 `centers` 为聚类的个数时). `algorithm` 为动态聚类的算法 (缺省值 Hartigan–

Wong 方法).

**例 8.9** *$K-$ 均值方法（ kmeans() 函数）对例 8.8 给出的 31 个省、市、自治区的消费水平进行聚类分析.*

**解**: 与例 8.8 一样，为消除数据数量级的影响，先对数据作标准化处理，然后再用 kmeans() 函数作动态聚类，为与前面的方法作比较，类的个数选择为 5. 算法选择 "Hartigan-Wong", 即缺省状态.

```
km <- kmeans(scale(X), 5, nstart = 20); km
```

得到

```
K-means clustering with 5 clusters of sizes 1, 1, 16, 10, 3
Cluster means:
          x1          x2         x3         x4          x5
1  1.8042004 -1.12776493  0.9368961  1.2959544  3.90904835
2  1.1255255  2.91079330 -1.0645632 -0.4082114  0.53291392
3 -0.7008593 -0.33291790 -0.5450901 -0.2500165 -0.54749319
4  0.2646918  0.04585518  0.2487958 -0.3405821 -0.01812541
5  1.8790347  1.02836873  2.1203833  2.1727806  1.49972764
          x6         x7          x8
1  1.6014419  3.8803141  2.01876530
2 -1.0476079 -0.9562089  1.66126641
3 -0.6131804 -0.5420723 -0.57966702
4  0.2587437  0.2874133 -0.02413414
5  2.2232050  0.9583064  1.94532737
Clustering vector:
```

| 北京 | 天津 | 河北 | 山西 | 内蒙古 | 辽宁 | 吉林 | 黑龙江 | 上海 | 江苏 | 浙江 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 5 | 4 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 5 | 4 | 5 |
| 安徽 | 福建 | 江西 | 山东 | 河南 | 湖北 | 湖南 | 广东 | 广西 | 海南 | 重庆 |
| 3 | 4 | 3 | 4 | 3 | 4 | 4 | 1 | 4 | 3 | 4 |
| 四川 | 贵州 | 云南 | 西藏 | 陕西 | 甘肃 | 青海 | 宁夏 | 新疆 | | |
| 4 | 3 | 4 | 2 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | | |

```
Within cluster sum of squares by cluster:
```

```
[1]  0.00000  0.00000 30.14432 22.12662 10.19134
Available components:
[1] "cluster"  "centers"  "withinss" "size"
```

这里 size 表示各类的个数， means 表示各类的均值， Clustering 表示聚类后的分类情况.

为便于看出聚类后的分类情况，用 sort() 函数 (sort(km$cluster)) 对分类起先情况排序，并整理得到

**第一类**：广东

**第二类**：西藏

**第三类**：河北、山西、内蒙古、辽宁、吉林、黑龙江、安徽、江西、河南、海南、贵州、陕西、甘肃、青海、宁夏、新疆

**第四类**：天津、江苏、福建、山东、湖北、湖南、广西、重庆、四川、云南

**第五类**：北京、上海、浙江

# 习题八

**8.1** 根据经验， 今天与昨天的湿度差 $X_1$ 及今天的压温差（气压与温度之差）

**表 8.7: 湿度差与压温差数据**

| 雨　天 | | 非 雨 天 | |
|---|---|---|---|
| $X_1$(湿度差) | $X_2$(压温差) | $X_1$(湿度差) | $X_2$(压温差) |
| − 1.9 | 3.2 | 0.2 | 0.2 |
| − 6.9 | 10.4 | −0.1 | 7.5 |
| 5.2 | 2.0 | 0.4 | 14.6 |
| 5.0 | 2.5 | 2.7 | 8.3 |
| 7.3 | 0.0 | 2.1 | 0.8 |
| 6.8 | 12.7 | −4.6 | 4.3 |
| 0.9 | −15.4 | −1.7 | 10.9 |
| −12.5 | −2.5 | −2.6 | 13.1 |
| 1.5 | 1.3 | 2.6 | 12.8 |
| 3.8 | 6.8 | −2.8 | 10.0 |

$X_2$ 是预报明天下雨或不下雨的两个重要因素. 现有一批已收集的数据资料, 如表 *8.7* 所示. 今测得 $x_1 = 8.1, x_2 = 2.0$, 试问预报明天下雨还是预报明天不下雨? 分别用距离判别、 *Bayes* 判别 ( 考虑方差相同与方差不同两种情况 ) 和 *Fisher* 判别来得到你所需要的结论.

**8.2** 某医院研究心电图指标对健康人 ( *I* )、硬化症患者 ( *II* ) 和冠心病患者 ( *III* ) 的鉴别能力. 现获得训练样本如表 *8.8* 所示. 试用距离判别 ( 考虑方差相同与方差不同两种情况 )、 *Bayes* 判别 ( 考虑方差相同与方差不同两种情况, 且先验概率为 *11/23, 7/23, 5/23* ) 对数据进行分析.

**表 8.8: 3 类 23 人的心电图指标数据**

| 序号 | 类别 | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | I | 8.11 | 261.01 | 13.23 | 7.36 |
| 2 | I | 9.36 | 185.39 | 9.02 | 5.99 |
| 3 | I | 9.85 | 249.58 | 15.61 | 6.11 |
| 4 | I | 2.55 | 137.13 | 9.21 | 4.35 |
| 5 | I | 6.01 | 231.34 | 14.27 | 8.79 |
| 6 | I | 9.64 | 231.38 | 13.03 | 8.53 |
| 7 | I | 4.11 | 260.25 | 14.72 | 10.02 |
| 8 | I | 8.90 | 259.91 | 14.16 | 9.79 |
| 9 | I | 7.71 | 273.84 | 16.01 | 8.79 |
| 10 | I | 7.51 | 303.59 | 19.14 | 8.53 |
| 11 | I | 8.06 | 231.03 | 14.41 | 6.15 |
| 12 | II | 6.80 | 308.90 | 15.11 | 8.49 |
| 13 | II | 8.68 | 258.69 | 14.02 | 7.16 |
| 14 | II | 5.67 | 355.54 | 15.03 | 9.43 |
| 17 | II | 3.71 | 316.32 | 17.12 | 8.17 |
| 17 | II | 5.37 | 274.57 | 16.75 | 9.67 |
| 18 | II | 9.89 | 409.42 | 19.47 | 10.49 |
| 19 | III | 5.22 | 330.34 | 18.19 | 9.61 |

**表 8.8(继): 3 类 23 人的心电图指标数据**

| 序号 | 类别 | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ |
|---|---|---|---|---|---|
| *20* | *III* | *4.71* | *331.47* | *21.26* | *13.72* |
| *21* | *III* | *4.71* | *352.50* | *20.79* | *11.00* |
| *22* | *III* | *3.36* | *347.31* | *17.90* | *11.19* |
| *23* | *III* | *8.27* | *189.56* | *12.74* | *6.94* |

**8.3** 为了更深入地了解我国人口的文化程度状况, 现利用 *1990* 年全国人中普查数据对全国 *30* 个省、直辖市、自治区进行聚类分析. 原始数据如表 *8.9* 所示. 分

**表 8.9: 1990 年全国人口普查文化程序人中比例**

| 地区 | DXBZ | CZBZ | WMBZ | 地区 | DXBZ | CZBZ | WMBZ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 北京 | 9.30 | 30.55 | 8.70 | 河南 | 0.85 | 26.55 | 16.15 |
| 天津 | 4.67 | 29.38 | 8.92 | 湖北 | 1.57 | 23.16 | 15.79 |
| 河北 | 0.96 | 24.69 | 15.21 | 湖南 | 1.14 | 22.57 | 12.10 |
| 山西 | 1.38 | 29.24 | 11.30 | 广东 | 1.34 | 23.04 | 10.45 |
| 内蒙古 | 1.48 | 25.47 | 15.39 | 广西 | 0.79 | 19.14 | 10.61 |
| 辽宁 | 2.60 | 32.32 | 8.81 | 海南 | 1.24 | 22.53 | 13.97 |
| 吉林 | 2.15 | 26.31 | 10.49 | 四川 | 0.96 | 21.65 | 16.24 |
| 黑龙江 | 2.14 | 28.46 | 10.87 | 贵州 | 0.78 | 14.65 | 24.27 |
| 上海 | 6.53 | 31.59 | 11.04 | 云南 | 0.81 | 13.85 | 25.44 |
| 江苏 | 1.47 | 26.43 | 17.23 | 西藏 | 0.57 | 3.85 | 44.43 |
| 浙江 | 1.17 | 23.74 | 17.46 | 陕西 | 1.67 | 24.36 | 17.62 |
| 安徽 | 0.88 | 19.97 | 24.43 | 甘肃 | 1.10 | 16.85 | 27.93 |
| 福建 | 1.23 | 16.87 | 15.63 | 青海 | 1.49 | 17.76 | 27.70 |
| 江西 | 0.99 | 18.84 | 16.22 | 宁夏 | 1.61 | 20.27 | 22.06 |
| 山东 | 0.98 | 25.18 | 16.87 | 新疆 | 1.85 | 20.66 | 12.75 |

析选用了三个指标： *(1)* 大学以上文化程度的人口占全部人口的比例 *(DXBZ); (2)* 初中文化程度的人口占全部人口的比例 *(CZBZ); (3)* 文盲半文盲人口占全部

人口的比例 *(WMBZ)* 分别用来反映较高、中等、较低文化程度人口的状况,

*(1)* 计算样本的 *Euclide* 距离, 分别用最长距离法、均值法、重心法和 *Ward* 法作聚类分析, 并画出相应的谱系图. 如果将所有样本分为 *4* 类, 试写出各种方法的分类结果;

*(2)* 用动态聚类方法 *(*共分为 *4* 类*)*, 给出相应的分类结果.

**8.4** 对 *48* 位应聘者数据 *(*见第三章例 *3.17* 中的表 *3.5)* 的自变量作聚类分析, 选择变量的相关系数作为变量间的相似系数 $(c_{ij})$, 距离定义为 $d_{ij} = 1 - c_{ij}$. 分别用最长距离法、均值法、重心法和 *Ward* 法作聚类分析, 并画出相应的谱系图. 如果将所有变量分为 *5* 类, 试写出各种方法的分类结果.

# 第九章　应用多元分析 (II)

前面一章介绍了判别分析和聚类分析, 这两种方法均是处理数据分类问题. 本章介绍多元分析的另一部分内容 — 主成分分析、因子分析和典型相关分析. 这三种方法的共同点是对数据作降维处理, 从数据中提取某些公共部分, 然后这这公共部分进行分析和处理, 得到我们需要的结论.

与上一章相同, 本章的重点还是放在用 R 软件来进行主成分分析、因子分析和典型相关分析, 而对于各种分析所用到的概念只作简单介绍.

## 9.1　主成分分析

主成分分析 (principal component analysis) 是将多指标化为少数几个综合指标的一种统计分析方法, 是由 Pearson(1901) 提出, 后来被 Hotelling(1933) 发展了. 主成分分析是一种通过降维技术把多个变量化成少数几个主成分的方法. 这些主成分能够发映原始变量的绝大部分信息, 它们通常表示为原始变量的线性组合.

### 9.1.1　总体主成分

#### 1. 主成分的定义与导出

设 $X$ 是 $p$ 维随机变量, 并假设 $\mu = E(X)$, $\Sigma = \mathrm{Var}(X)$. 考虑如下线性变换

$$\begin{cases} Z_1 = a_1^T X \\ Z_2 = a_2^T X \\ \quad \vdots \\ Z_p = a_p^T X \end{cases}, \tag{9.1}$$

易见

$$\mathrm{Var}(Z_i) = a_i^T \Sigma a_i, \quad i = 1, 2, \cdots, p, \tag{9.2}$$

$$\mathrm{Cov}(Z_i, Z_j) = a_i^T \Sigma a_j, \quad i, j = 1, 2, \cdots, p, \quad i \neq j. \tag{9.3}$$

我们希望 $Z_1$ 方差达到最大, 即 $a_1$ 是约束优化问题

$$\begin{aligned} \max \quad & a^T \Sigma a \\ \text{s.t.} \quad & a^T a = 1 \end{aligned}$$

的解. 因此, $a_1$ 是 $\Sigma$ 最大特征值 (不妨设为 $\lambda_1$) 的特征向量. 此时, 称 $Z_1 = a_1^T X$ 为第一主成分. 类似地, 希望 $Z_2$ 的方差达到最大, 并且要求 $\mathrm{Cov}(Z_1, Z_2) = a_1^T \Sigma a_2 = 0$. 由于 $a_1$ 是 $\lambda_1$ 的特征向量, 所以, 选择的 $a_2$ 应与 $a_1$ 正交. 类似于前面的推导, $a_2$ 是 $\Sigma$ 第二大特征值 (不妨设为 $\lambda_2$) 的特征向量. 称 $Z_2 = a_2^T X$ 为第二主成分.

一般情况. 对于协方差阵 $\Sigma$, 存在正交阵 $Q$, 将它化为对角阵, 即

$$Q^T \Sigma Q = \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p \end{bmatrix}, \tag{9.4}$$

且 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p$. 则 $Q$ 的第 $i$ 列就对应于 $a_i$, 相应的 $Z_i$ 为第 $i$ 主成分.

**2. 主成分的性质**

关于主成分有如下性质:

(1) 主成分的均值和协方差阵.

记

$$Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_p \end{bmatrix}, \quad \nu = E(Z), \quad \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p \end{bmatrix},$$

由于

$$Z = Q^T X, \tag{9.5}$$

所以有

$$\begin{aligned} \nu &= E(Z) = E(Q^T X) = Q^T E(X) = Q^T \mu, \\ \mathrm{Var}(Z) &= Q^T \mathrm{Var}(X) Q = Q^T \Sigma Q = \Lambda. \end{aligned}$$

(2) 主成分的总方差.

由于

$$\mathrm{tr}(\Lambda) = \mathrm{tr}(Q^T \Sigma Q) = \mathrm{tr}(\Sigma Q Q^T) = \mathrm{tr}(\Sigma),$$

所以,

$$\sum_{i=1}^{p}\lambda_i=\sum_{i=1}^{p}\sigma_{ii}\quad 或\quad \sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(Z_i)=\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(X_i).$$

由此可以看出，主成分分析把 $p$ 个原始变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的总方差分解成了 $p$ 个不相关变量 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_p$ 的方差之和.

称总方差中第 $i$ 个主成分 $Z_i$ 的比例 $\lambda_i/\sum\limits_{i=1}^{p}\lambda_i$ 为主成分 $Z_i$ 的贡献率. 第一主成分 $Z_1$ 的贡献率最大，表明它解释原始变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的能力最强，而 $Z_2,Z_3,\cdots,Z_p$ 的解释能力依次递减. 主成分分析的目的就是为了减少变量的个数，因而一般是不会使用所有的 $p$ 个主成分，忽略一些有较小方差的主成分，将不会给总方差带来大的影响. 称前 $m$ 个主成分的贡献率之和 $\sum\limits_{i=1}^{m}\lambda_i/\sum\limits_{i=1}^{p}\lambda_i$ 为主成分 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_m$ 的累积贡献率，它表明 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_m$ 解释 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的能力. 相对于 $p$, 通常取较小的 $m$, 使得累积贡献率达到一个较高的百分比 (如 80% 至 90%). 此时， $Z_1,Z_2,\cdots,Z_m$ 可用来代替 $X_1,X_2,\cdots,X_p$, 达到降维的目的，而信息的损失却不多.

(3) 原始变量 $X_j$ 与主成分 $Z_i$ 之间的相关系数.

由于式 (9.5), 知

$$X=QZ, \tag{9.6}$$

即

$$X_j=q_{j1}Z_1+q_{j2}+\cdots+q_{jp}Z_p, \tag{9.7}$$

所以,

$$\mathrm{Cov}(X_j,Z_i) = \mathrm{Cov}(q_{ij}Z_j,Z_i)=q_{ji}\lambda_i,\quad j,i=1,2,\cdots,p, \tag{9.8}$$

$$\rho(X_j,Z_i) = \frac{\mathrm{Cov}(X_j,Z_i)}{\sqrt{\mathrm{Var}(X_j)}\sqrt{\mathrm{Var}(Z_i)}}=\frac{\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{jj}}}q_{ji},\quad j,i=1,2,\cdots,p. \tag{9.9}$$

在实际应用中，通常只对 $X_j$ 与 $Z_i$ 的相关系数感兴趣.

(4) $m$ 个主成分对原始变量的贡献率.

前面提到的累积贡献率这个概念度量了 $m$ 个主成分 $Z_1$, $Z_2$, $\cdots$, $Z_m$ 从原始变量 $X_1$, $X_2$, $\cdots$, $X_p$ 中提取信息的多少，那么 $Z_1$, $Z_2$, $\cdots$, $Z_m$ 包含有 $X_j(j=1,2,\cdots,p)$ 的多少信息应该用什么指标来度量呢？这个指标就是 $X_j$ 与 $Z_1$, $Z_2$,

$\cdots$, $Z_m$ 的复相关系数的平方，称为 $m$ 个主成分 $Z_1$, $Z_2$, $\cdots$, $Z_m$ 对原始变量 $X_j$ 的贡献率，记为 $\rho^2_{j\cdot 1\cdots m}$, 即

$$\rho^2_{j\cdot 1\cdots m} = \sum_{i=1}^{m} \rho^2(X_j, Z_i) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i q^2_{ji}/\sigma_{jj}. \tag{9.10}$$

对式 (9.7) 两边取方差，得到

$$\sigma_{jj} = q^2_{j1}\lambda_1 + q^2_{j2}\lambda_2 + \cdots + q^2_{jp}\lambda_p, \tag{9.11}$$

由于 $q^2_{j1} + q^2_{j2} + \cdots + q^2_{jp} = 1$, 故 $\sigma_{jj}$ 实际上是 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p$ 的加权平均.

由式 (9.10)– 式 (9.11), 可以得到 $Z_1, Z_2, \cdots, Z_p$ 对 $X_j$ 的贡献率

$$\rho^2_{j\cdot 1\cdots p} = \sum_{i=1}^{p} \rho^2(X_j, Z_i) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i q^2_{ji}/\sigma_{jj} = 1. \tag{9.12}$$

(5) 原始变量对主成分的影响.

式 (9.5) 也可以表示成

$$Z_i = q_{1i}X_1 + q_{2i}X_2 + \cdots + q_{pi}X_p,$$

称 $q_{ji}$ 为第 $i$ 主成分在第 $j$ 个原始变量 $X_j$ 上的载荷，它度量了 $X_j$ 对 $Z_i$ 的重要程度.

**3. 从相关矩阵出发求主成分**

当各变量的单位不全相同，或虽单位相同，但变量间的数值大小相差较大时，直接从协方差阵 $\Sigma$ 出发进行主成分分析就显得不妥. 为了使主成分分析能够均等的对待每一个原始变量，消除由于单位不同时可能带来的影响，常常将原始变量作标准化处理，即令

$$X^*_j = \frac{X_j - \mu_j}{\sqrt{\sigma_{jj}}}, \quad j = 1, 2, \cdots, p. \tag{9.13}$$

显然， $X^* = (X^*_1, X^*_2, \cdots, X^*_p)^T$ 的方差矩阵就是 $X$ 的相关矩阵 $R$.

从相关矩阵 $R$ 出发导出的主成分方法与从协方差阵 $\Sigma$ 出发的导出的主成分方法完全类似，并且得到的主成分的一些性质更加简洁.

设 $\lambda_1^* \geq \lambda_2^* \geq \cdots \geq \lambda_p^* \geq 0$ 为相关矩阵 $R$ 的 $p$ 个特征值， $a_1^*, a_2^*, \cdots, a_p^*$ 为相应的单位特征向量，且相互正交，则相应的 $p$ 个主成分为

$$Z_i^* = a_i^{*T} X_i^*, \quad i = 1, 2, \cdots, p.$$

令 $Z^* = (Z_1^*, Z_2^*, \cdots, Z_p^*)^T$, $Q^* = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_p^*)$, 于是

$$Z^* = Q^{*T} X^*.$$

关于相关矩阵 $R$ 的主成分有如下性质：

(1) $E(Z^*) = 0$, $\mathrm{Var}(Z^*) = \Lambda^*$, 其中 $\Lambda^* = \mathrm{diag}(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \cdots, \lambda_p^*)$.

(2) $\sum\limits_{i=1}^{p} \lambda_i^* = p$.

(3) 变量 $X_j^*$ 与主成分 $Z_i^*$ 之间的相关系数

$$\rho(X_j^*, Z_i^*) = \sqrt{\lambda_i^*} q_{ji}^*, \quad j, i = 1, 2, \cdots, p.$$

(4) 主成分 $Z_1^*, Z_2^*, \cdots, Z_m^*$ 对 $X_j^*$ 的贡献率

$$\rho_{j\cdot 1\cdots m}^2 = \sum_{i=1}^{m} \rho^2(X_j^*, Z_i^*) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* q_{ji}^2.$$

(5)

$$\rho_{j\cdot 1\cdots p}^2 = \sum_{i=1}^{p} \rho^2(X_j^*, Z_i^*) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i q_{ji}^2 = 1.$$

### 9.1.2 样本主成分

前面讨论的是总体主成分，而在实际问题中，一般总体的协方差阵 $\Sigma$ 或相关矩阵 $R$ 是未知的，需要通过样本来估计.

设 $X_{(k)} = (x_{k1}, x_{k2}, \cdots, x_{kp})^T$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ 为来自总体 $X$ 的样本，记样本数据矩阵为

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_{(1)}^T \\ X_{(2)}^T \\ \vdots \\ X_{(n)}^T \end{bmatrix} = [X_1, X_2, \cdots . X_p],$$

其中 $X_{(k)}$ 表示样本数据矩阵的各行，$X_j$ 表示样本数据矩阵的各列. 所以，样本的方差矩阵 $S$ 为

$$S = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}\left(X_{(k)}-\overline{X}\right)\left(X_{(k)}-\overline{X}\right)^T = (s_{ij})_{p\times p},$$

其中

$$\begin{aligned}\overline{X} &= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}X_{(k)} = (\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots,\bar{x}_p)^T,\\ s_{ij} &= \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}(x_{ki}-\bar{x}_i)(x_{kj}-\bar{x}_j),\quad i,j=1,2,\cdots,p.\end{aligned}$$

及样本的相关矩阵 $R$ 为

$$R = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}X^*_{(k)}{X^*_{(k)}}^T = (r_{ij})_{p\times p},$$

其中

$$\begin{aligned}X^*_{(k)} &= \left[\frac{x_{k1}-\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}},\frac{x_{k2}-\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}},\cdots,\frac{x_{kp}-\bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}}\right],\\ r_{ij} &= \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}s_{jj}}},\quad i,j=1,2,\cdots,p.\end{aligned}$$

**1. 从 $S$ 出发求主成分**

设 $\lambda_1\geq\lambda_2\geq\cdots\geq\lambda_p\geq 0$ 为样本协方差阵 $S$ 的特征值，$a_1,a_2,\cdots,a_p$ 为相应的单位特征向量，且彼此正交. 则第 $i$ 个主成分 $z_i=a_i^Tx$, $i=1,2,\cdots,p$, 其中 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_p)^T$. 令

$$z=(z_1,z_2,\cdots,z_p)^T=(a_1,a_2,\cdots,a_p)^Tx=Q^Tx,$$

其中 $Q=(a_1,a_2,\cdots,a_p)=(q_{ij})_{p\times p}$.

下面构造样本主成分，令

$$Z_{(k)}=Q^TX_{(k)},$$

因此样本主成分为

$$\begin{aligned}\mathbf{Z} &= \begin{bmatrix} z_{11} & z_{12} & \cdots & z_{1p} \\ z_{21} & z_{22} & \cdots & z_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ z_{n1} & z_{n2} & \cdots & z_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_{(1)}^T \\ Z_{(2)}^T \\ \vdots \\ Z_{(n)}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_{(1)}^T Q \\ X_{(2)}^T Q \\ \vdots \\ X_{(n)}^T Q \end{bmatrix} = \mathbf{X}Q \\ &= [\mathbf{X}a_1, \mathbf{X}a_2, \cdots, \mathbf{X}a_p] = [Z_1, Z_2, \cdots, Z_p],\end{aligned}$$

其中 $Z_{(k)}$ 表示样本主成分的各行， $Z_j$ 表示样本主成分的各列.

对于样本主成分有如下性质：

(1) $\mathrm{Var}(Z_j) = \lambda_j$, $j = 1, 2, \cdots, p$.

(2) $\mathrm{Cov}(Z_i, Z_j) = 0$, $i, j = 1, 2, \cdots, p$, $\quad i \neq j$.

(3) 样本总方差

$$\sum_{j=1}^{p} s_{jj} = \sum_{j=1}^{p} \lambda_j.$$

(4) $X_j$ 与 $Z_i$ 的样本相关系数

$$r(X_j, Z_i) = \frac{\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{s_{jj}}} q_{ji}, \qquad j, i = 1, 2, \cdots, p.$$

在实际应用中，常常将样本数据中心化，这不影响样本协方差阵 $S$. 考虑中心化数据矩阵

$$\mathbf{X} - \mathbf{1}\overline{X}^T = \begin{bmatrix} (X_{(1)} - \overline{X})^T \\ (X_{(2)} - \overline{X})^T \\ \vdots \\ (X_{(n)} - \overline{X})^T \end{bmatrix},$$

其中 $\mathbf{1} = (1, 1, \cdots, 1)^T \in R^n$, 对应的主成分数据为

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} z_{11} & z_{12} & \cdots & z_{1p} \\ z_{21} & z_{22} & \cdots & z_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ z_{n1} & z_{n2} & \cdots & z_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_{(1)}^T \\ Z_{(2)}^T \\ \vdots \\ Z_{(n)}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (X_{(1)} - \overline{X})^T Q \\ (X_{(2)} - \overline{X})^T Q \\ \vdots \\ (X_{(n)} - \overline{X})^T Q \end{bmatrix}.$$

**2. 从 $R$ 出发求主成分**

设 $\lambda_1^* \geq \lambda_2^* \geq \cdots \geq \lambda_p^* \geq 0$ 为样本相关矩阵 $R$ 的特征值， $a_1^*, a_2^*, \cdots, a_p^*$ 为相应的单位特征向量，且彼此正交.

令

$$Z_{(i)}^* = Q^T X_{(i)}^*,$$

其中 $Q = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_p^*)$, 因此样本主成分为

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^* &= \begin{bmatrix} z_{11}^* & z_{12}^* & \cdots & z_{1p}^* \\ z_{21}^* & z_{22}^* & \cdots & z_{2p}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ z_{n1}^* & z_{n2}^* & \cdots & z_{np}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {Z_{(1)}^*}^T \\ {Z_{(2)}^*}^T \\ \vdots \\ {Z_{(n)}^*}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {X_{(1)}^*}^T Q \\ {X_{(2)}^*}^T Q \\ \vdots \\ {X_{(n)}^*}^T Q \end{bmatrix} = \mathbf{X}^* Q \\ &= [\mathbf{X}^* a_1^*, \mathbf{X}^* a_2^*, \cdots, \mathbf{X} a_p^*] = [Z_1^*, Z_2^*, \cdots, Z_p^*], \end{aligned}$$

其中 $Z_{(k)}^*$ 表示样本主成分的各行， $Z_j^*$ 表示样本主成分的各列.

对于样本主成分有如下性质：

(1) $\mathrm{Var}(Z_j^*) = \lambda_j^*$, $j = 1, 2, \cdots, p$.

(2) $\mathrm{Cov}(Z_i^*, Z_j^*) = 0$, $i, j = 1, 2, \cdots, p$, $i \neq j$.

(3) $\sum_{j=1}^{p} \lambda_j^* = 1$.

(4) $X_j^*$ 与 $Z_i^*$ 的样本相关系数

$$r(X_j^*, Z_i^*) = \sqrt{\lambda_i}\, q_{ji}, \quad j, i = 1, 2, \cdots, p.$$

### 9.1.3 相关的 R 函数以及实例

下面介绍与主成分分析有关的函数.

**1. princomp 函数**

作主成分分析最主要的函数是 `princomp()` 函数，其使用格式为

```
princomp(formula, data = NULL, subset, na.action, ...)
```

其中 `formula` 是没有响应变量的公式 (类似回归分析、方差分析, 但无响应变量). `data` 是数据框 (类似于回归分析、方差分析). 或者

```
princomp(x, cor = FALSE, scores = TRUE, covmat = NULL,
         subset = rep(TRUE, nrow(as.matrix(x))), ...)
```

其中 x 是用于主成分分析的数据，以数值矩阵或数据框的形式给出． cor 是逻辑变量，当 cor=TRUE 表示用样本的相关矩阵 $R$ 作主成分分析，当 cor=FALSE (缺省值) 表示用样本的协方差阵 $S$ 作主成分分析． covmat 是协方差阵，如果数据不用 x 提供，可由协方差阵提供．其他参数的意义见在线帮助．

prcomp() 函数的意义与使用方法与 princomp() 函数相同．

**2. summary 函数**

summary() 与回归分析中的用法相同，其目的是提取主成分的信息，其作用格式为

```
summary(object, loadings = FALSE, cutoff = 0.1, ...)
```

其中 object 是由 princomp() 得到的对象． loadings 是逻辑变量，当 loadings = TRUE 表示显示 loadings 的内容 (具体含义在下面的 loadings() 函数)，当 loadings = FALSE 则不显示．

**3. loadings 函数**

loadings() 函数是显示主成分分析或因子分析中 loadings(载荷，见因子分析) 的内容．在主成分分析中，该内容实际上是主成分对应的各列，即前面分析的正交矩阵 $Q$．在因子分析中，其内容就是载荷因子矩阵． loadings() 函数的使用格式为

```
loadings(x)
```

其中 x 是由函数 princomp() 或 factanal()(见因子分析) 得到的对象．

**4. predict 函数**

predict() 函数是预测主成分的值 (类似于回归分析中的使用方法)，其使用格式为

```
predict(object, newdata, ...)
```

其中 object 是由 princomp() 得到的对象． newdata 是由预测值构成的数据框，当 newdata 缺省时，预测已有数据的主成分值．

**5. screeplot 函数**

screeplot() 函数是画出主成分的碎石图，其使用格式为

```
screeplot(x, npcs = min(10, length(x$sdev)),
```

```
        type = c("barplot", "lines"),
        main = deparse(substitute(x)), ...)
```

其中 x 是由 princomp() 得到的对象. npcs 是画出的主成分的个数. type 是描述画出的碎石图的类型, "barplot" 是直方图类型, "lines" 是直线图类型.

**6. biplot 函数**

biplot() 是画出数据关于主成分的散点图和原坐标在主成分下的方向, 其使用格式为

```
biplot(x, choices = 1:2, scale = 1, pc.biplot = FALSE, ...)
```

其中 x 是由 princomp() 得到的对象. choices 是选择的主成分, 缺省值是第 1、第 2 主成分. pc.biplot 是逻辑变量 (缺省值为 FALSE), 当 pc.biplot=TRUE, 用 Gabriel (1971) 提出的画图方法.

**7. 实例**

下面用一个例子说明前面介绍的函数的使用方法.

**例 9.1** (中学生身体四项指标的主成分分析)

*在某中学随机抽取某年级 30 名学生, 测量其身高 ($X_1$) 、体重 ($X_2$) 、胸围 ($X_3$) 和坐高 ($X_4$), 数据如表 9.1 所示. 试对这 30 名中学生身体四项指标数据做主成分分析.*

**解**: 用数据框的形式输入数据. 用 princomp() 作主成分分析, 由前面的分析, 选择相关矩阵作主成分分析更合理, 因此, 这里选择的参数是 cor=TRUE. 最后用 summary() 列出主成分分析的值, 这里选择 loadings=TRUE. 以下是相应的程序 (程序名: exam0901.R).

```
#### 用数据框形式输入数据
> student<-data.frame(
    X1=c(148, 139, 160, 149, 159, 142, 153, 150, 151, 139,
         140, 161, 158, 140, 137, 152, 149, 145, 160, 156,
         151, 147, 157, 147, 157, 151, 144, 141, 139, 148),
    X2=c(41, 34, 49, 36, 45, 31, 43, 43, 42, 31,
         29, 47, 49, 33, 31, 35, 47, 35, 47, 44,
         42, 38, 39, 30, 48, 36, 36, 30, 32, 38),
```

**表 9.1: 30 名中学生身体四项指标数据**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 148 | 41 | 72 | 78 | 16 | 152 | 35 | 73 | 79 |
| 2 | 139 | 34 | 71 | 76 | 17 | 149 | 47 | 82 | 79 |
| 3 | 160 | 49 | 77 | 86 | 18 | 145 | 35 | 70 | 77 |
| 4 | 149 | 36 | 67 | 79 | 19 | 160 | 47 | 74 | 87 |
| 5 | 159 | 45 | 80 | 86 | 20 | 156 | 44 | 78 | 85 |
| 6 | 142 | 31 | 66 | 76 | 21 | 151 | 42 | 73 | 82 |
| 7 | 153 | 43 | 76 | 83 | 22 | 147 | 38 | 73 | 78 |
| 8 | 150 | 43 | 77 | 79 | 23 | 157 | 39 | 68 | 80 |
| 9 | 151 | 42 | 77 | 80 | 24 | 147 | 30 | 65 | 75 |
| 10 | 139 | 31 | 68 | 74 | 25 | 157 | 48 | 80 | 88 |
| 11 | 140 | 29 | 64 | 74 | 26 | 151 | 36 | 74 | 80 |
| 12 | 161 | 47 | 78 | 84 | 27 | 144 | 36 | 68 | 76 |
| 13 | 158 | 49 | 78 | 83 | 28 | 141 | 30 | 67 | 76 |
| 14 | 140 | 33 | 67 | 77 | 29 | 139 | 32 | 68 | 73 |
| 15 | 137 | 31 | 66 | 73 | 30 | 148 | 38 | 70 | 78 |

```
    X3=c(72, 71, 77, 67, 80, 66, 76, 77, 77, 68,
         64, 78, 78, 67, 66, 73, 82, 70, 74, 78,
         73, 73, 68, 65, 80, 74, 68, 67, 68, 70),
    X4=c(78, 76, 86, 79, 86, 76, 83, 79, 80, 74,
         74, 84, 83, 77, 73, 79, 79, 77, 87, 85,
         82, 78, 80, 75, 88, 80, 76, 76, 73, 78)
  )
```

#### 作主成分分析，并显示分析结果

```
> student.pr <- princomp(student, cor = TRUE)
> summary(student.pr, loadings=TRUE)
Importance of components:
                          Comp.1     Comp.2     Comp.3     Comp.4
```

```
Standard deviation     1.8817805 0.55980636 0.28179594 0.25711844
Proportion of Variance 0.8852745 0.07834579 0.01985224 0.01652747
Cumulative Proportion  0.8852745 0.96362029 0.98347253 1.00000000

Loadings:
   Comp.1 Comp.2 Comp.3 Comp.4
X1 -0.497  0.543 -0.450  0.506
X2 -0.515 -0.210 -0.462 -0.691
X3 -0.481 -0.725  0.175  0.461
X4 -0.507  0.368  0.744 -0.232
```

在上述程序中, 语句 `student.pr <- princomp(student, cor = TRUE)` 可以改成 `student.pr <- princomp(~X1+X2+X3+X4, data=student, cor=TRUE)`, 两者是等价的.

`summary()` 函数列出了主成分分析的重要信息, `Standard deviation` 行表示的是主成分的标准差, 即主成分的方差的开方, 也就是相就的特征值 $\lambda_1$, $\lambda_2$, $\lambda_3$, $\lambda_4$ 的开方. `Proportion of Variance` 行表示的是方差的贡献率. `Cumulative Proportion` 行表示的是方差的累积贡献率.

由于在 `summary` 函数的参数中选取了 `loadings=TRUE`, 因此列出了 `loadings` (载荷) 的内容, 它实际上是主成分对应于原始变量 $X_1, X_2, X_3, X_4$ 的系数, 即前面介绍的矩阵 $Q$. 因此, 得到

$$\begin{aligned} Z_1^* &= -0.497X_1^* - 0.515X_2^* - 0.481X_3^* - 0.507X_4^*, \\ Z_2^* &= 0.543X_1^* - 0.210X_2^* - 0.725X_3^* + 0.368X_4^*, \end{aligned}$$

由于前两个主成分的累积贡献率已达到 $96\%$, 另外二个主成分可以舍去, 达到降维的目的.

第 1 主成分对应系数的符号都相同, 其值在 0.5 左右, 它反映了中学生身材魁梧程度: 身体高大的学生, 他的 4 个部分的尺寸都比较大, 因此, 第 1 主成分的值就较小 (因为系数均为负值); 而身材矮小的学生, 他的 4 部分的尺寸都比较小, 因此, 第 1 主成分绝对值就较大. 我们称第 1 主成分为大小因子. 第 2 主成分是高度与围度的差, 第 2 主成分值大的学生表明该学生 "细高", 而第 2 主成分值越小的学生表明该学生 "矮胖", 因此, 称第 2 主成分为体形因子.

我们看一下各样本的主成分的值 (用 predict() 函数).

```
#### 作预测

> predict(student.pr)
        Comp.1      Comp.2      Comp.3       Comp.4
1   0.06990950 -0.23813701 -0.35509248 -0.266120139
2   1.59526340 -0.71847399  0.32813232 -0.118056646
3  -2.84793151  0.38956679 -0.09731731 -0.279482487
4   0.75996988  0.80604335 -0.04945722 -0.162949298
5  -2.73966777  0.01718087  0.36012615  0.358653044
6   2.10583168  0.32284393  0.18600422 -0.036456084
7  -1.42105591 -0.06053165  0.21093321 -0.044223092
8  -0.82583977 -0.78102576 -0.27557798  0.057288572
9  -0.93464402 -0.58469242 -0.08814136  0.181037746
10  2.36463820 -0.36532199  0.08840476  0.045520127
11  2.83741916  0.34875841  0.03310423 -0.031146930
12 -2.60851224  0.21278728 -0.33398037  0.210157574
13 -2.44253342 -0.16769496 -0.46918095 -0.162987830
14  1.86630669  0.05021384  0.37720280 -0.358821916
15  2.81347421 -0.31790107 -0.03291329 -0.222035112
16  0.06392983  0.20718448  0.04334340  0.703533624
17 -1.55561022 -1.70439674 -0.33126406  0.007551879
18  1.07392251 -0.06763418  0.02283648  0.048606680
19 -2.52174212  0.97274301  0.12164633 -0.390667991
20 -2.14072377  0.02217881  0.37410972  0.129548960
21 -0.79624422  0.16307887  0.12781270 -0.294140762
22  0.28708321 -0.35744666 -0.03962116  0.080991989
23 -0.25151075  1.25555188 -0.55617325  0.109068939
24  2.05706032  0.78894494 -0.26552109  0.388088643
25 -3.08596855 -0.05775318  0.62110421 -0.218939612
26 -0.16367555  0.04317932  0.24481850  0.560248997
27  1.37265053  0.02220972 -0.23378320 -0.257399715
```

```
28  2.16097778  0.13733233  0.35589739  0.093123683
29  2.40434827 -0.48613137 -0.16154441 -0.007914021
30  0.50287468  0.14734317 -0.20590831 -0.122078819
```

从第 1 主成分来看，较小的几个值是 25 号样本、 3 号样本和 5 号样本，因此说明这几个学生身材魁梧；而 11 号样本、 15 号样本和 29 号样本的的值较大，说明这几个学生身材瘦小.

从第 2 主成分来看，较大的几个值是 23 号样本、 19 号样本和 4 号样本，因此说明这几个学生属于 “细高” 型；而 17 号样本、 8 号样本和 2 号样本的的值较小，说明这几个学生身材属于 “矮胖” 型.

画出主成分的的碎石图.

```
> screeplot(student.pr,type="lines")
```

参数选择的直线型，其图形如图 9.1 所示.

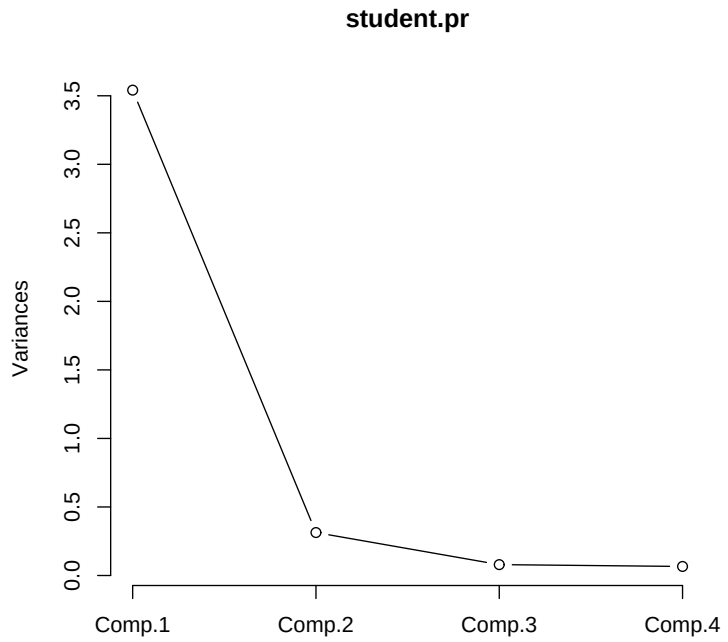



图 9.1: 30 名中学生身体指标数据主成分的碎石图

还可以画出关于第 1 主成分和第 2 主成分样本的散点图，其图形如图 9.2 所示. 从该散点图可以很容易看出：哪些学生属于高大魁梧型，如 25 号学生，哪些学生属于身材瘦小型，如 11 号或 15 号；哪些学生属于 “细高” 型，如 23 号，

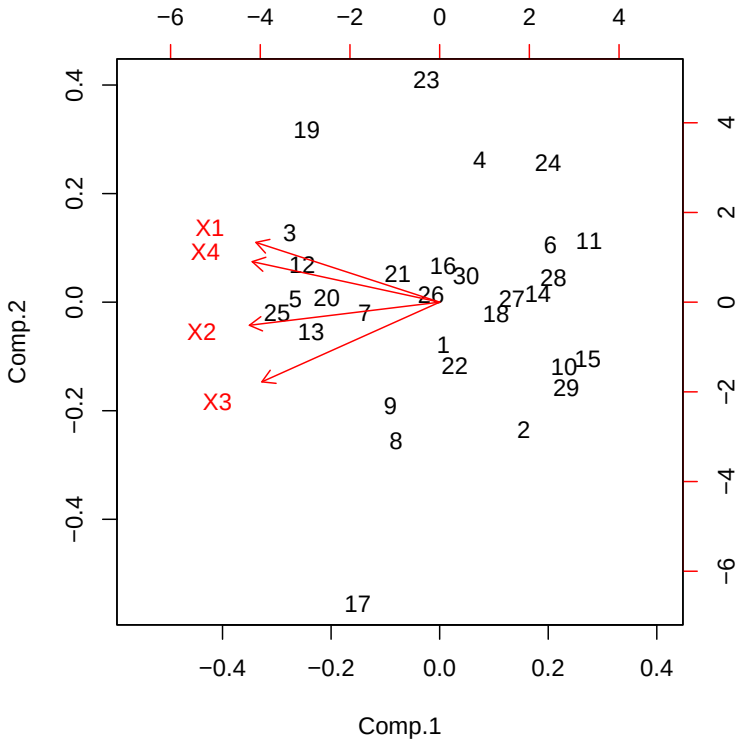



图 9.2: 30 名中学生身体指标数据关于第 1 主成分和第 2 主成分的散点图

哪些学生属于“矮胖”型，如 17 号. 还有哪些学生属于正常体形，如 26 号，等等.

### 9.1.4 主成分分析的应用

这一小节讲两个问题作为主成分分析的应用，一个是变量分类问题；另一个是主成分回归问题.

#### 1. 主成分分类

**例 9.2** 对 *128* 个成年男子的身材进行测量，每人各测得 *16* 项指标：身高 $(X_1)$、坐高 $(X_2)$、胸围 $(X_3)$、头高 $(X_4)$、裤长 $(X_5)$、下档 $(X_6)$、手长 $(X_7)$、领围 $(X_8)$、前胸 $(X_9)$、后背 $(X_{10})$、肩厚 $(X_{11})$、肩宽 $(X_{12})$、袖长 $(X_{13})$、肋围 $(X_{14})$、腰围 $(X_{15})$ 和腿肚 $(X_{16})$. *16* 项指标的相关矩阵 $R$ 如表 *9.2* 所示 (由于相关矩阵是对称的，只给出下三角部分). 试从相关矩阵 $R$ 出发进行主成分分析，对 *16* 项指标进行分类.

**表 9.2: 16 项身体指标数据的相关矩阵**

| | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $X_5$ | $X_6$ | $X_7$ | $X_8$ | $X_9$ | $X_{10}$ | $X_{11}$ | $X_{12}$ | $X_{13}$ | $X_{14}$ | $X_{15}$ | $X_{16}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $X_1$ | 1.00 | | | | | | | | | | | | | | | |
| $X_2$ | 0.79 | 1.00 | | | | | | | | | | | | | | |
| $X_3$ | 0.36 | 0.31 | 1.00 | | | | | | | | | | | | | |
| $X_4$ | 0.96 | 0.74 | 0.38 | 1.00 | | | | | | | | | | | | |
| $X_5$ | 0.89 | 0.58 | 0.31 | 0.90 | 1.00 | | | | | | | | | | | |
| $X_6$ | 0.79 | 0.58 | 0.30 | 0.78 | 0.79 | 1.00 | | | | | | | | | | |
| $X_7$ | 0.76 | 0.55 | 0.35 | 0.75 | 0.74 | 0.73 | 1.00 | | | | | | | | | |
| $X_8$ | 0.26 | 0.19 | 0.58 | 0.25 | 0.25 | 0.18 | 0.24 | 1.00 | | | | | | | | |
| $X_9$ | 0.21 | 0.07 | 0.28 | 0.20 | 0.18 | 0.18 | 0.29 | -0.04 | 1.00 | | | | | | | |
| $X_{10}$ | 0.26 | 0.16 | 0.33 | 0.22 | 0.23 | 0.23 | 0.25 | 0.49 | -0.34 | 1.00 | | | | | | |
| $X_{11}$ | 0.07 | 0.21 | 0.38 | 0.08 | -0.02 | 0.00 | 0.10 | 0.44 | -0.16 | 0.23 | 1.00 | | | | | |
| $X_{12}$ | 0.52 | 0.41 | 0.35 | 0.53 | 0.48 | 0.38 | 0.44 | 0.30 | -0.05 | 0.50 | 0.24 | 1.00 | | | | |
| $X_{13}$ | 0.77 | 0.47 | 0.41 | 0.79 | 0.79 | 0.69 | 0.67 | 0.32 | 0.23 | 0.31 | 0.10 | 0.62 | 1.00 | | | |
| $X_{14}$ | 0.25 | 0.17 | 0.64 | 0.27 | 0.27 | 0.14 | 0.16 | 0.51 | 0.21 | 0.15 | 0.31 | 0.17 | 0.26 | 1.00 | | |
| $X_{15}$ | 0.51 | 0.35 | 0.58 | 0.57 | 0.51 | 0.26 | 0.38 | 0.51 | 0.15 | 0.29 | 0.28 | 0.41 | 0.50 | 0.63 | 1.00 | |
| $X_{16}$ | 0.21 | 0.16 | 0.51 | 0.26 | 0.23 | 0.00 | 0.12 | 0.38 | 0.18 | 0.14 | 0.31 | 0.18 | 0.24 | 0.50 | 0.65 | 1.00 |

**解**: 首先输入相关矩阵, 再用 `princomp()` 对相关矩阵作主成分分析, 最后画出各变量在第一、第二主成分下的散点图 (程序名: `exam0902.R`)

```
#### 输入数据, 按下三角输入, 构成向量
x<-c(1.00,
     0.79, 1.00,
     0.36, 0.31, 1.00,
     0.96, 0.74, 0.38, 1.00,
     0.89, 0.58, 0.31, 0.90, 1.00,
     0.79, 0.58, 0.30, 0.78, 0.79, 1.00,
     0.76, 0.55, 0.35, 0.75, 0.74, 0.73, 1.00,
     0.26, 0.19, 0.58, 0.25, 0.25, 0.18, 0.24, 1.00,
     0.21, 0.07, 0.28, 0.20, 0.18, 0.18, 0.29,-0.04, 1.00,
     0.26, 0.16, 0.33, 0.22, 0.23, 0.23, 0.25, 0.49,-0.34, 1.00,
```

```
    0.07, 0.21, 0.38, 0.08,-0.02, 0.00, 0.10, 0.44,-0.16, 0.23,
    1.00,
    0.52, 0.41, 0.35, 0.53, 0.48, 0.38, 0.44, 0.30,-0.05, 0.50,
    0.24, 1.00,
    0.77, 0.47, 0.41, 0.79, 0.79, 0.69, 0.67, 0.32, 0.23, 0.31,
    0.10, 0.62, 1.00,
    0.25, 0.17, 0.64, 0.27, 0.27, 0.14, 0.16, 0.51, 0.21, 0.15,
    0.31, 0.17, 0.26, 1.00,
    0.51, 0.35, 0.58, 0.57, 0.51, 0.26, 0.38, 0.51, 0.15, 0.29,
    0.28, 0.41, 0.50, 0.63, 1.00,
    0.21, 0.16, 0.51, 0.26, 0.23, 0.00, 0.12, 0.38, 0.18, 0.14,
    0.31, 0.18, 0.24, 0.50, 0.65, 1.00)
#### 输入变量名称
names<-c("X1", "X2", "X3", "X4", "X5", "X6", "X7", "X8", "X9",
         "X10", "X11", "X12", "X13", "X14", "X15", "X16")
#### 将矩阵生成相关矩阵
R<-matrix(0, nrow=16, ncol=16, dimnames=list(names, names))
for (i in 1:16){
   for (j in 1:i){
      R[i,j]<-x[(i-1)*i/2+j]; R[j,i]<-R[i,j]
   }
}
#### 作主成分分析
pr<-princomp(covmat=R); load<-loadings(pr)
#### 画散点图
plot(load[,1:2]); text(load[,1], load[,2], adj=c(-0.4, 0.3))
```

得到的图形由图 9.3 所示.

图 9.3 中左上角的点看成一类, 它们是 “长” 类, 即身高 $(X_1)$、坐高 $(X_2)$、头高 $(X_4)$、裤长 $(X_5)$、下档 $(X_6)$、手长 $(X_7)$、袖长 $(X_{13})$.

右下角的点看成一类, 它们是 “围” 类, 即身胸围 $(X_3)$、领围 $(X_8)$、肩厚 $(X_{11})$、肋围 $(X_{14})$、腰围 $(X_{15})$、腿肚 $(X_{16})$.

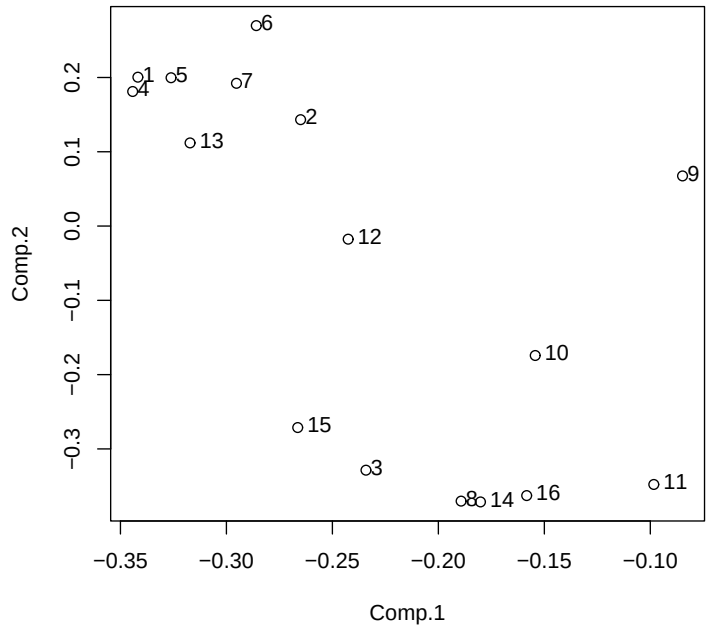



图 9.3: 16 个变量在第一、第二主成分下的散点图

中间的点看成一类, 为体形特征指标, 即前胸 ($X_9$) 、后背 ($X_{10}$) 、肩宽 ($X_{12}$).

**2. 主成分回归**

在回归分析一章中, 曾经讲过, 当自变量出现多重共线性时, 经典回归方法作回归系数的最小二乘估计, 一般效果会较差, 而采用主成分回归能够克服直接回归的不足. 下面用一个例子来说明如何作主成分回归, 并且是如何克服经典回归的不足.

**例 9.3** (法国经济分析数据)

*考虑进口总额 $Y$ 与三个自变量: 国内总产值 $X_1$, 存储量 $X_2$, 总消费量 $X_3$(单位为 10 亿法郎) 之间的关系. 现收集了 1949 年至 1959 年共 11 年有数据, 如表 9.3 所示. 试对此数据作经典回归分析和主成分回归分析.*

**解**: 输入数据 (采用数据框形式), 再用一般线性回归方法作回归分析 (程序名: exam0903.R).

```
#### 用数据框的形式输入数据
> conomy<-data.frame(
    x1=c(149.3, 161.2, 171.5, 175.5, 180.8, 190.7,
```

**表 9.3: 法国经济分析数据**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|
| 1 | 149.3 | 4.2 | 108.1 | 15.9 |
| 2 | 161.2 | 4.1 | 114.8 | 16.4 |
| 3 | 171.5 | 3.1 | 123.2 | 19.0 |
| 4 | 175.5 | 3.1 | 126.9 | 19.1 |
| 5 | 180.8 | 1.1 | 132.1 | 18.8 |
| 6 | 190.7 | 2.2 | 137.7 | 20.4 |
| 7 | 202.1 | 2.1 | 146.0 | 22.7 |
| 8 | 212.4 | 5.6 | 154.1 | 26.5 |
| 9 | 226.1 | 5.0 | 162.3 | 28.1 |
| 10 | 231.9 | 5.1 | 164.3 | 27.6 |
| 11 | 239.0 | 0.7 | 167.6 | 26.3 |

```
        202.1, 212.4, 226.1, 231.9, 239.0),
    x2=c(4.2, 4.1, 3.1, 3.1, 1.1, 2.2, 2.1, 5.6, 5.0, 5.1, 0.7),
    x3=c(108.1, 114.8, 123.2, 126.9, 132.1, 137.7,
         146.0, 154.1, 162.3, 164.3, 167.6),
    y=c(15.9, 16.4, 19.0, 19.1, 18.8, 20.4, 22.7,
        26.5, 28.1, 27.6, 26.3)
  )
```

#### 作线性回归

```
> lm.sol<-lm(y~x1+x2+x3, data=conomy)
> summary(lm.sol)
Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2 + x3, data = conomy)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
```

```
-0.52367 -0.38953  0.05424  0.22644  0.78313

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -10.12799    1.21216  -8.355  6.9e-05 ***
x1           -0.05140    0.07028  -0.731 0.488344
x2            0.58695    0.09462   6.203 0.000444 ***
x3            0.28685    0.10221   2.807 0.026277 *
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.4889 on 7 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9919,     Adjusted R-squared: 0.9884
F-statistic: 285.6 on 3 and 7 DF,  p-value: 1.112e-07
```

从计算结果可以看出，按三个变量得到回归方程

$$Y = -10.12799 - 0.05140X_1 + 0.58695X_2 + 0.28685X_3. \tag{9.14}$$

仔细分析方程 (9.14), 发现它并不合理. 回到问题本身， $Y$ 是进口量， $X_1$ 是国内总产值，而对应系数的符号确为负，也就是说，国内的总产值越高，其进口量确越少，这与实际情况是不相符的. 问其原因，三个变量存在着多重共线性 (后面我们将会看到最小特征值接近于 0).

为克服多重共线性的影响，对变量作作主成分回归. 先作主成分分析.

```
#### 作主成分分析
> conomy.pr<-princomp(~x1+x2+x3, data=conomy, cor=T)
> summary(conomy.pr, loadings=TRUE)
Importance of components:
                          Comp.1    Comp.2       Comp.3
Standard deviation     1.413915 0.9990767 0.0518737839
Proportion of Variance 0.666385 0.3327181 0.0008969632
Cumulative Proportion  0.666385 0.9991030 1.0000000000
```

```
Loadings:
   Comp.1 Comp.2 Comp.3
x1  0.706          0.707
x2         -0.999
x3  0.707         -0.707
```

前两个主成分已达到 99% 的贡献率. 第 1 主成分是关于国内总产值和总消费, 因此称第 1 主成分为产销因子. 第 2 主成分只与存储量有关, 称为存储因子. 注意,

$$\lambda_3 = 0.0518737839^2 = 0.002690889 \approx 0,$$

所以变量存在着多重共线性.

下面作主成分回归. 首先计算样本的主成分的预测值, 并将第 1 主成分的预测值和第 2 主成分的预测值存放在数据框 conomy 中, 然后再对主成分作回归分析. 其命令格式如下

```
#### 预测测样本主成分, 并作主成分分析
> pre<-predict(conomy.pr)
> conomy$z1<-pre[,1]; conomy$z2<-pre[,2]
> lm.sol<-lm(y~z1+z2, data=conomy)
> summary(lm.sol)
Call:
lm(formula = y ~ z1 + z2, data = conomy)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.89838 -0.26050  0.08435  0.35677  0.66863

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  21.8909     0.1658 132.006 1.21e-14 ***
z1            2.9892     0.1173  25.486 6.02e-09 ***
z2           -0.8288     0.1660  -4.993  0.00106 **
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.55 on 8 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.9883,     Adjusted R-squared: 0.9853
F-statistic: 337.2 on 2 and 8 DF,  p-value: 1.888e-08
```

回归系数和回归方程均通过检验，而且效果显著．即得到回归方程

$$Y = 21.8909 + 2.9892Z_1^* - 0.8288Z_2^*.$$

上述方程得到是响应变量与主成分的关系，但应用起来并不方便，还是希望得到响应变量与原变量之间的关系．由于，

$$\begin{aligned} Y &= \beta_0^* + \beta_1^* Z_1^* + \beta_2^* Z_2^*, \\ Z_i^* &= a_{i1}X_1^* + a_{i2}X_2^* + a_{i3}X_3^*, \\ &= \frac{a_{i1}(X_1 - \bar{x}_1)}{\sqrt{s_{11}}} + \frac{a_{i2}(X_2 - \bar{x}_2)}{\sqrt{s_{22}}} + \frac{a_{i3}(X_3 - \bar{x}_3)}{\sqrt{s_{33}}}, \quad i = 1, 2, \end{aligned}$$

所以，

$$\begin{aligned} Y &= \beta_0^* - \beta_1^* \left( \frac{a_{11}\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} + \frac{a_{12}\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} + \frac{a_{13}\bar{x}_3}{\sqrt{s_{33}}} \right) - \beta_2^* \left( \frac{a_{21}\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} + \frac{a_{22}\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} + \frac{a_{23}\bar{x}_3}{\sqrt{s_{33}}} \right) \\ &+ \frac{(\beta_1^* a_{11} + \beta_2^* a_{21})}{\sqrt{s_{11}}} X_1 + \frac{(\beta_1^* a_{12} + \beta_2^* a_{22})}{\sqrt{s_{22}}} X_2 + \frac{(\beta_1^* a_{13} + \beta_2^* a_{23})}{\sqrt{s_{33}}} X_3 \\ &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3, \end{aligned} \tag{9.15}$$

其中

$$\beta_0 = \beta_0^* - \beta_1^* \left( \frac{a_{11}\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} + \frac{a_{12}\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} + \frac{a_{13}\bar{x}_3}{\sqrt{s_{33}}} \right) - \beta_2^* \left( \frac{a_{21}\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} + \frac{a_{22}\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} + \frac{a_{23}\bar{x}_3}{\sqrt{s_{33}}} \right), \tag{9.16}$$

$$\beta_i = \frac{(\beta_1^* a_{1i} + \beta_2^* a_{2i})}{\sqrt{s_{ii}}}, \quad i = 1, 2, 3. \tag{9.17}$$

按照式 (9.16)–(9.17) 编写计算系数的函数

```
#### 作变换，得到原坐标下的关系表达式
> beta<-coef(lm.sol); A<-loadings(conomy.pr)
> x.bar<-conomy.pr$center; x.sd<-conomy.pr$scale
> coef<-(beta[2]*A[,1]+ beta[3]*A[,2])/x.sd
> beta0 <- beta[1]- sum(x.bar * coef)
```

在程序中， `coef` 函数是提取回归系数， `loadings` 是提取主成分对于的特征向量，`conomy.pr$center` 是数据的中心, 也就是数据 $X$ 的均值，`conomy.pr$scale` 是数据的标准差，即 $s_{ii}$ 的开方. 因此得到相应的系数

```
> c(beta0, coef)
(Intercept)          x1          x2          x3
-9.13010782  0.07277981  0.60922012  0.10625939
```

即回归方程为

$$Y = -9.13010782 + 0.07277981X_1 + 0.60922012X_2 + 0.10625939X_3. \quad (9.18)$$

此时，对应 $X_1, X_2, X_3$ 的系数均为正数，比原回归方程 (9.14) 更合理.

## 9.2 因子分析

因子分析 (factor analysis) 是主成分分析的推广和发展，它也是多元统计分析中降维的一种方法, 是一种用来分析隐藏在表面现象背后的因子作用的一类统计模型. 因子分析是研究相关阵或协方差阵的内部依赖关系，它将多个变量综合为少数几个因子，以再现原始变量与因子之间的相关关系.

因子分析起源于 20 世纪初， K. Pearson 和 C. Spearman 等学者为定义和测定智力所作的统计分析. 目前因子分析在心理学、社会学、经济学等学科取得了成功的应用.

### 9.2.1 引例

下面用几个例子说明如何用因子分析来构造因子模型.

**例 9.4** 为了解学生的学习能力，观测了 $n$ 个学生的 $p$ 个科目的成绩 *(*分数*)*, 用 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 表示 $p$ 个科目 *(*例如代数、几何、语文、英语、政治， $\cdots$*)*, $X_{(i)} = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})^T$, $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 表示第 $i$ 个学生的 $p$ 科目的成绩. 现要分析主要由哪些因素决定学生的学习能力.

现对这些资料进行归纳分析，可以看出各个科目 (变量) 由两部分组成：

$$X_i = a_i f + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \cdots, p, \quad (9.19)$$

其中 $f$ 是对所有 $X_i(i=1,2,\cdots,p)$ 都起作用的公共因子 (common factor), 它表示智能高低的因子; 系数 $a_i$ 称为因子载荷 (loading); $\varepsilon_i$ 是科目 (变量)$X_i$ 特有的特殊因子 (specific factor). 这就是一个最简单的因子模型.

进一步, 可把简单因子模型推广到多个因子的情况, 即科目 $X$ 所有的因子有 $m$ 个, 如数学推导因子、记忆因子、计算因子等, 分别记为 $f_1,f_2,\cdots,f_m$, 即

$$X_i=a_{i1}f_1+a_{i2}f_2+\cdots+a_{im}f_m+\varepsilon_i,\quad i=1,2,\cdots,p. \tag{9.20}$$

用这 $m$ 个不可观测的互不相关的公共因子 $f_1,f_2,\cdots,f_m$(也称为潜因子) 和一个特殊因子 $\varepsilon_i$ 来描述原始可测的相关变量 (科目)$X_1,X_2,\cdots,X_p$, 并解释分析学生的学习能力. 它们的系数 $a_{i1},a_{i2},\cdots,a_{ip}$ 称为因子载荷, 表示第 $i$ 个科目在 $m$ 个方面的表现. 这就是一个因子模型.

**例 9.5** *Linden* 对二次大战以来奥林匹克十项全能的得分作研究, 他收集了 *160* 组数据, 以 $X_1,X_2,\cdots,X_{10}$ 分别表示十项全能的标准得分, 这里十项全能依次是: *100* 米短跑、跳远、跳高、 *400* 米跑、 *110* 米跨栏、铁饼、撑杆跳高、标枪、 *1500* 米跑. 现要分析主要由哪些因素决定十项全能的成绩, 以此可用来指导运动员的选拔.

对于这十项得分, 基本上可以归结于短跑速度、爆发性臂力、爆发性腿力和耐力四个方面, 每一方面都称为一个因子, 因此该类问题可用因子分析模型去处理.

**例 9.6** 考察人体的五项生理指标: 收缩压 $(X_1)$、舒张压 $(X_2)$、心跳间隔 $(X_3)$、呼吸间隔 $(X_4)$ 和舌下温度 $(X_5)$. 从这些指标考察人体的健康状况.

从生理学的知识可知, 这五项指标是受植物神经支配的, 植物神经又分为交感神经和副交感神经, 因此这五项指标至少受到两个公共因子的影响, 也可用因子分析的模型去处理.

通过以上几个例子可以看到, 因子分析的主要应用有两个方面, 一是寻求基本结构, 简化观测系统, 将具有错综复杂关系的对象 (变量或样本) 综合为少数几个因子 (不可观测的随机变量), 以再现因子与原始变量之间的内在联系; 二是用于分类, 对于 $p$ 个变量或 $n$ 个样本进行分类.

因子分析根据研究对象的不同可以分为 R 型和 Q 型因子分析. R 型因子分析研究变量 (指标) 之间的相关关系, 通过对变量的相关阵或协方差阵内部结构的研究, 找出控制所有变量的几个公共因子 (或称主因子、潜在因子), 用以对

变量或样本进行分类. Q 型因子分析研究样本之间的相关关系，通过对样本的相似矩阵内部结构的研究找出控制样本的几个主要因素 (或称为主因子). 这两种因子分析的处理方法是一样的，只是出发点不同. R 型从变量的相关阵出发，Q 型从样本的相似矩阵出发. 对一批观测数据，可以根据实际问题的需要来决定采用哪一种类型的因子分析.

### 9.2.2 因子模型

#### 1. 数学模型

设 $X=(X_1,X_2,\cdots,X_p)^T$ 是可观测的随机向量，且

$$E(X)=\mu=(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_p)^T,\quad \mathrm{Var}(X)=\Sigma=(\sigma_{ij})_{p\times p}.$$

因子分析的一般模型为

$$\begin{cases} X_1-\mu_1=a_{11}f_1+a_{12}f_2+\cdots+a_{1m}f_m+\varepsilon_1\\ X_2-\mu_2=a_{21}f_1+a_{22}f_2+\cdots+a_{2m}f_m+\varepsilon_2\\ \quad\vdots\\ X_p-\mu_p=a_{p1}f_1+a_{p2}f_2+\cdots+a_{pm}f_m+\varepsilon_p \end{cases} \tag{9.21}$$

其中 $f_1,f_2,\cdots,f_m$ $(m<p)$ 为公共因子，$\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_p$ 为特殊因子，它们都是不可观测的随机变量. 公共因子 $f_1,f_2,\cdots,f_m$ 出现在每一个原始变量 $X_i(i=1,2,\cdots,p)$ 的表达式中，可理解为原始变量共同具有的公共因素，每个公共因子 $f_j(j=1,2,\cdots,m)$ 一般至少对两个原始变量有作用，否则它将归入特殊因子. 每个特殊因子 $\varepsilon_i(i=1,2,\cdots,p)$ 仅仅出现在与之相应的第 $i$ 个原始变量 $X_i$ 的表达式中，它只对这个原始变量有作用. 可将式 (9.21) 写成矩阵表示形式

$$X=\mu+AF+\varepsilon, \tag{9.22}$$

其中 $F=(f_1,f_2,\cdots,f_m)^T$ 为公共因子向量，$\varepsilon=(\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_p)^T$ 为特殊因子向量，$A=(a_{ij})_{p\times m}$ 为因子载荷矩阵. 通常假设

$$E(F)=0,\quad \mathrm{Var}(F)=I_m, \tag{9.23}$$

$$E(\varepsilon)=0,\quad \mathrm{Var}(\varepsilon)=D=\mathrm{diag}(\sigma_1^2,\sigma_2^2,\cdots,\sigma_p^2), \tag{9.24}$$

$$\mathrm{Cov}(F,\varepsilon)=0. \tag{9.25}$$

由上述假定可以看出, 公共因子彼此不相关且具有单位方阵, 特殊因子也彼此不相关且和公共因子也不相关.

**2. 因子模型的性质**

(1) $\Sigma$ 的分解

$$\Sigma = AA^T + D. \tag{9.26}$$

(2) 模型不受单位的影响. 若 $X^* = CX$, 则有

$$X^* = \mu^* + A^*F^* + \varepsilon^*,$$

其中 $\mu^* = C\mu$, $A^* = CA$, $F^* = F$, $\varepsilon^* = C\varepsilon$.

(3) 因子载荷不是惟一的. 设 $T$ 是一 $m$ 阶正交矩阵, 令 $A^* = AT$, $F^* = T^TF$, 则模型 (9.22) 可表示为

$$X = \mu + A^*F^* + \varepsilon. \tag{9.27}$$

因子载荷矩阵不惟一对实际应用是有好处的, 通常利用这一点, 通过因子旋转, 使得新因子有更好的实际意义.

**3. 因子载荷矩阵的统计意义**

(1)

$$\mathrm{Cov}(X, F) = A \quad \text{或} \quad \mathrm{Cov}(X_i, f_j) = a_{ij}. \tag{9.28}$$

即因子载荷 $a_{ij}$ 是第 $i$ 个变量与第 $j$ 个公共因子的相关系数. 由于 $X_i$ 是 $f_1$, $f_2$, $\cdots$, $f_m$ 的线性组合, 所以系数 $a_{i1}, a_{i2}, \cdots, a_{im}$ 是用来度量 $X_i$ 可由 $f_1, f_2, \cdots, f_m$ 线性组合表示的程度.

(2) 令 $h_i^2 = \sum\limits_{j=1}^{m} a_{ij}^2$, 则有

$$\sigma_{ii} = h_i^2 + \sigma_i^2, \quad i = 1, 2, \cdots, p. \tag{9.29}$$

$h_i^2$ 反映了公共因子对原始变量 $X_i$ 的影响, 可以看成是公共因子对 $X_i$ 的方差贡献, 称为变量 $X_i$ 的共同度 (communality) 或共性方差 (common variance); 而 $\sigma_i^2$ 是特殊因子 $\varepsilon_i$ 对 $X_i$ 的方差贡献, 称为变量 $X_i$ 特殊方差 (specifie variance). 当 $X$ 为各分量已标准化的随机变量 ($\sigma_{ii} = 1$), 此时有

$$h_i^2 + \sigma_i^2 = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, p. \tag{9.30}$$

(3) 令 $g_j^2 = \sum\limits_{i=1}^{p} a_{ij}^2$, 则有

$$\sum_{i=1}^{p} \mathrm{Var}(X_i) = \sum_{j=1}^{m} g_j^2 + \sum_{i=1}^{p} \sigma_i^p. \tag{9.31}$$

$g_j^2$ 反映了公共因子 $f_j$ 对 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的影响, 是衡量公共因子 $f_j$ 重要性的一个尺度, 可视为公共因子 $f_j$ 对 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的总方差贡献.

### 9.2.3 参数估计

设 $X_{(1)}, X_{(2)}, \cdots, X_{(n)}$ 是一组 $p$ 维样本, 其中 $X_{(i)} = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ip})^T$. 则 $\mu$ 和 $\Sigma$ 可分别估计为

$$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_{(i)} \quad \text{或} \quad S = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} \left(X_{(i)} - \overline{X}\right)\left(X_{(i)} - \overline{X}\right)^T.$$

为了建立因子模型, 首先要估计因子载荷矩阵 $A = (a_{ij})_{p\times m}$ 和特殊方差矩阵 $D = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_p^2)$. 常用的参数估计方法有如下三种: 主成分法、主因子法和极大似然法.

#### 1. 主成分法

设样本的协方差阵 $S$ 的特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$, 相应单位正交特征向量为 $l_1, l_2, \cdots, l_p$, 则 $S$ 有谱分解式

$$S = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i l_i l_i^T.$$

当最后 $p-m$ 个特征值较小时, $S$ 可近似地分解成

$$\begin{aligned} S &= \lambda_1 l_1 l_1^T + \cdots + \lambda_m l_m l_m^T + \lambda_{m+1} l_{m+1} l_{m+1}^T + \cdots + \lambda_p l_p l_p^T \\ &\approx \lambda_1 l_1 l_1^T + \cdots + \lambda_m l_m l_m^T + D \\ &= AA^T + D, \end{aligned} \tag{9.32}$$

其中

$$A = (\sqrt{\lambda_1} l_1, \sqrt{\lambda_2} l_2, \cdots, \sqrt{\lambda_m} l_m) = (a_{ij})_{p\times m} \tag{9.33}$$

$$D = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_p^2), \tag{9.34}$$

$$\sigma_i^2 = s_{ii} - \sum_{j=1}^{m} a_{ij}^2 = s_{ii} - h_i^2, \quad i = 1, 2, \cdots, p. \tag{9.35}$$

式 (9.33)–(9.35) 给出的 $A$ 和 $D$ 就是因子模型的一个解. 载荷矩阵 $A$ 中的第 $j$ 列和 $X$ 的第 $j$ 个计成分的系数相差一个倍数 $\sqrt{\lambda_j}(j = 1, 2, \cdots, m)$. 故由式 (9.33)–(9.35) 给出的这个解称为因子模型的主成分解.

当相关变量所取单位不同时, 常常先对变量标准化, 标准化变量的样本协方差阵就是原始变量的样本相关阵 $R$, 再用 $R$ 代替 $S$, 与上类似, 即可得主成分解.

下面写出主成分法的 R 程序 (程序名: factor.analy1.R)

```
factor.analy1<-function(S, m){
   p<-nrow(S); diag_S<-diag(S); sum_rank<-sum(diag_S)
   rowname<-paste("X", 1:p, sep="")
   colname<-paste("Factor", 1:m, sep="")
   A<-matrix(0, nrow=p, ncol=m,
             dimnames=list(rowname, colname))
   eig<-eigen(S)
   for (i in 1:m)
      A[,i]<-sqrt(eig$values[i])*eig$vectors[,i]
   h<-diag(A%*%t(A))
   rowname<-c("SS loadings","Proportion Var","Cumulative Var")
   B<-matrix(0, nrow=3, ncol=m,
             dimnames=list(rowname, colname))
   for (i in 1:m){
     B[1,i]<-sum(A[,i]^2)
     B[2,i]<-B[1,i]/sum_rank
     B[3,i]<-sum(B[1,1:i])/sum_rank
  }
   method<-c("Principal Component Method")
   list(method=method, loadings=A,
        var=cbind(common=h, spcific=diag_S-h), B=B)
}
```

函数输入值 S 是样本方差阵或相关矩阵, m 是主因子的个数. 函数的输出值是列表形式, 其内容有估计参数的方法 (主成分法), 因子载荷 (loadings), 共性方差和特殊方差, 以及因子 $F$ 对变量 $X$ 的贡献、贡献率和累积贡献率.

**例 9.7** 对 *55* 个国家和地区的男子径赛记录作统计, 每位运动员记录 *8* 项指标: *100* 米跑 $(X_1)$、*200* 米跑 $(X_2)$、*400* 米跑 $(X_3)$、*800* 米跑 $(X_4)$、*1500* 米跑 $(X_5)$、*5000* 米跑 $(X_6)$、*10000* 米跑 $(X_7)$、马拉松 $(X_8)$. *8* 项指标的相关矩阵 $R$ 如表 *9.4* 所示. 取 $m = 2$, 用主成分法估计因子载荷和共性方差等指标.

**表 9.4: 16 项身体指标数据的相关矩阵**

| | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $X_5$ | $X_6$ | $X_7$ | $X_8$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $X_1$ | 1.000 | | | | | | | |
| $X_2$ | 0.923 | 1.000 | | | | | | |
| $X_3$ | 0.841 | 0.851 | 1.000 | | | | | |
| $X_4$ | 0.756 | 0.807 | 0.870 | 1.000 | | | | |
| $X_5$ | 0.700 | 0.775 | 0.835 | 0.918 | 1.000 | | | |
| $X_6$ | 0.619 | 0.695 | 0.779 | 0.864 | 0.928 | 1.000 | | |
| $X_7$ | 0.633 | 0.697 | 0.787 | 0.869 | 0.935 | 0.975 | 1.000 | |
| $X_8$ | 0.520 | 0.596 | 0.705 | 0.806 | 0.866 | 0.932 | 0.943 | 1.000 |

**解**: 输入相关矩阵, 用编写的函数 `factor.analy1()` 主成分法估计载荷和相关指标 (程序名: `exam0907.R`)

```
x<-c(1.000,
     0.923, 1.000,
     0.841, 0.851, 1.000,
     0.756, 0.807, 0.870, 1.000,
     0.700, 0.775, 0.835, 0.918, 1.000,
     0.619, 0.695, 0.779, 0.864, 0.928, 1.000,
     0.633, 0.697, 0.787, 0.869, 0.935, 0.975, 1.000,
     0.520, 0.596, 0.705, 0.806, 0.866, 0.932, 0.943, 1.000)
names<-c("X1", "X2", "X3", "X4", "X5", "X6", "X7", "X8")
R<-matrix(0, nrow=8, ncol=8, dimnames=list(names, names))
for (i in 1:8){
   for (j in 1:i){
      R[i,j]<-x[(i-1)*i/2+j]; R[j,i]<-R[i,j]
   }
```

```
}
source("factor.analy1.R")
fa<-factor.analy1(R, m=2); fa
```

得到

```
$method
[1] "Principal Component Method"
$loadings
      Factor1     Factor2
X1 -0.8171700 -0.53109531
X2 -0.8672869 -0.43271347
X3 -0.9151671 -0.23251311
X4 -0.9487413 -0.01184826
X5 -0.9593762  0.13147503
X6 -0.9376630  0.29267677
X7 -0.9439737  0.28707618
X8 -0.8798085  0.41117192
$var
      common    spcific
X1 0.9498290 0.05017099
X2 0.9394274 0.06057257
X3 0.8915931 0.10840689
X4 0.9002505 0.09974954
X5 0.9376883 0.06231171
X6 0.9648716 0.03512837
X7 0.9734990 0.02650100
X8 0.9431254 0.05687460
$B
                  Factor1   Factor2
SS loadings    6.6223580 0.8779264
Proportion Var 0.8277947 0.1097408
Cumulative Var 0.8277947 0.9375355
```

若记

$$E = S - (AA^T + D) = (e_{ij})_{p\times p},$$

可以证明,

$$Q(m) = \sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{p} e_{ij}^2 \le \lambda_{m+1}^2 + \cdots + \lambda_p^2, \tag{9.36}$$

当 $m$ 选择适当，则近似公式 (9.32) 的误差平方和 $Q(m)$ 很小.

计算出例 9.7 的 $Q(m)$ 值.

```
> E<- R-fa$loadings %*% t(fa$loadings)-diag(fa$var[,2])
> sum(E^2)
[1] 0.01740023
```

公因子个数 $m$ 的确定方法一般有两种，一是根据实际问题的意义或专业理论知识来确定；二是用确定主成分个数的原则，选 $m$ 为满足：

$$\sum_{i=1}^{m}\lambda_i \Big/ \sum_{i=1}^{p}\lambda_i \ge P_0$$

的最小个数 (比如取 $P_0 \ge 0.70$ 且 $P_0 < 1$).

**2. 主因子法**

主因子法是对主成分法的修正, 这里假定变量已经标准化. 设 $R = AA^T + D$, 则

$$R - D = AA^T = R^*,$$

称为约相关阵 (reduced correlation matrix). 易见， $R^*$ 中对角线元素是 $h_i^2$, 而不是 1, 非对角线元素与 $R$ 中是完全一样的，并且 $R^*$ 也一定是非负矩阵.

设 $\widehat{\sigma}_i^2$ 是特殊方差 $\sigma_i^2$ 的一个合适的初始估计，则约相关矩阵可估计为

$$\widehat{R}^* = \begin{bmatrix} \hat{h}_1^2 & r_{12} & \cdots & r_{1p} \\ r_{21} & \hat{h}_2^2 & \cdots & r_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{p1} & r_{p2} & \cdots & \hat{h}_p^2 \end{bmatrix},$$

其中 $\hat{h}_i^2 = 1 - \widehat{\sigma}_i^2$ 是 $h_i^2$ 的初始估计.

设 $\widehat{R}^*$ 的前 $m$ 个特征值依次为 $\hat{\lambda}_1^* \geq \hat{\lambda}_2^* \geq \cdots \geq \hat{\lambda}_m^* > 0$, 相应的单位正交特征向量为 $\hat{l}_1^*, \hat{l}_2^*, \cdots, \hat{l}_m^*$, 则有近似分解式:

$$\widehat{R}^* = \widehat{A}\widehat{A}^T, \tag{9.37}$$

其中

$$\widehat{A} = \left( \sqrt{\widehat{\lambda}_1^*}\, \hat{l}_1^*, \sqrt{\widehat{\lambda}_2^*}\, \hat{l}_2^*, \cdots, \sqrt{\widehat{\lambda}_m^*}\, \hat{l}_m^* \right). \tag{9.38}$$

令

$$\widehat{\sigma}_i^2 = 1 - \widehat{h}_i^2 = 1 - \sum_{j=1}^{m} \widehat{a}_{ij}^2, \quad i = 1, 2, \cdots, p, \tag{9.39}$$

则 $\widehat{A}$ 和 $\widehat{D} = \mathrm{diag}(\widehat{\sigma}_1^2, \widehat{\sigma}_2^2, \cdots, \widehat{\sigma}_p^2)$ 为因子模型的一个解, 这个解就称为主因子解.

如果希望求得拟合程度更好的解, 则可以采用迭代的方法, 即式 (9.39) 中的 $\widehat{\sigma}_i^2$ 再作为特殊方差的初始估计, 重复上述步骤, 直至解稳定为止.

与主成分法类似, 主因子法中的 $R$ 也可以换成样本方差阵 $S$, 只不过此时 $\widehat{h}_i^2 = s_{ii} - \widehat{\sigma}_i^2$.

按照主因子法的思想编写相应的 R 程序 (程序名: `factor.analy2.R`)

```
factor.analy2<-function(R, m, d){
   p<-nrow(R); diag_R<-diag(R); sum_rank<-sum(diag_R)
   rowname<-paste("X", 1:p, sep="")
   colname<-paste("Factor", 1:m, sep="")
   A<-matrix(0, nrow=p, ncol=m,
             dimnames=list(rowname, colname))
   kmax=20; k<-1; h <- diag_R-d
   repeat{
      diag(R)<- h; h1<-h; eig<-eigen(R)
      for (i in 1:m)
         A[,i]<-sqrt(eig$values[i])*eig$vectors[,i]
      h<-diag(A %*% t(A))
      if ((sqrt(sum((h-h1)^2))<1e-4)|k==kmax) break
      k<-k+1
   }
```

```
    rowname<-c("SS loadings","Proportion Var","Cumulative Var")
    B<-matrix(0, nrow=3, ncol=m,
              dimnames=list(rowname, colname))
    for (i in 1:m){
      B[1,i]<-sum(A[,i]^2)
      B[2,i]<-B[1,i]/sum_rank
      B[3,i]<-sum(B[1,1:i])/sum_rank
    }
    method<-c("Principal Factor Method")
    list(method=method, loadings=A,
         var=cbind(common=h,spcific=diag_R-h),B=B,iterative=k)
}
```

函数输入值 R 是样本相关矩阵或样本方差矩阵，m 是主因子的个数，d 是特殊方差的估计值. 函数的输出值是列表形式，其内容有估计参数的方法 (主因子法), 因子载荷 (loadings), 共性方差和特殊方差，因子 $F$ 对变量 $X$ 的贡献、贡献率和累积贡献率，以及求解的迭代次数.

**例 9.8** 取 $m = 2$, 特殊方差的估计值 $\widehat{\sigma}_i^2$ 为

0.123, 0.112, 0.155, 0.116, 0.073, 0.045, 0.033, 0.095,

用主因子法估计例 *9.7* 因子载荷和共性方差等指标.

**解:**

```
> d<-c(0.123, 0.112, 0.155, 0.116, 0.073, 0.045, 0.033, 0.095)
> source("factor.analy2.R")
> fa<-factor.analy2(R, m=2, d); fa
$method
[1] "Principal Factor Method"
$loadings
      Factor1    Factor2
X1 -0.8123397 -0.5138770
X2 -0.8610033 -0.4156335
X3 -0.9005036 -0.2105394
X4 -0.9370464 -0.0178458
```

```
X5 -0.9545376  0.1186825
X6 -0.9384689  0.2861327
X7 -0.9470951  0.2858694
X8 -0.8728340  0.3770009
$var
      common    spcific
X1 0.9239653 0.07603473
X2 0.9140779 0.08592213
X3 0.8552337 0.14476635
X4 0.8783744 0.12162560
X5 0.9252275 0.07477251
X6 0.9625958 0.03740416
X7 0.9787105 0.02128951
X8 0.9039690 0.09603103
$B
                Factor1   Factor2
SS loadings    6.54088 0.8012746
Proportion Var 0.81761 0.1001593
Cumulative Var 0.81761 0.9177692
$iterative
[1] 16
```

用了 16 次迭代得到稳定解. 再计算 $Q(m)$,

```
> E<- R-fa$loadings %*% t(fa$loadings)-diag(fa$var[,2])
> sum(E^2)
[1] 0.005421902
```

要优于主成分法.

特殊方差 $\sigma_i^2$ 的常用初始估计方法有以下几种:

(1) 取 $\widehat{\sigma}_i^2 = 1/r^{ii}$, 其中 $r^{ii}$ 是 $R^{-1}$ 的第 $i$ 个对角线元素.

(2) 取 $\widehat{h}_i^2 = \max\limits_{j\neq i} |r_{ij}|$, 此时, $\widehat{\sigma}_i^2 = 1 - \widehat{h}_i^2$.

(3) 取 $\widehat{h}_i^2 = 1$, 此时, $\widehat{\sigma}_i^2 = 0$.

**3. 极大似然法**

设公共因子 $F \sim N_m(0, I)$, 特殊因子 $\varepsilon \sim N_p(0, I)$, 且相互独立, 那么可以得到因子载荷矩阵和特殊方差的极大似然估计. 设 $p$ 维观测向量 $X_{(1)}, X_{(2)}, \cdots, X_{(n)}$ 为来自总体 $N_p(\mu, \Sigma)$ 的随机样本, 则样本的似然函数为 $\mu$, $\Sigma$ 的函数 $L(\mu, \Sigma)$.

设 $\Sigma = AA^T + D$, 取 $\mu = \overline{X}$, 则似然函数 $L(\overline{X}, AA^T + D)$ 的对数似然函数为 $A, D$ 的函数, 记为 $\varphi(A, D)$. 设 $(A, D)$ 的极大似然估计为 $(\widehat{A}, \widehat{D})$, 即有

$$\varphi(\widehat{A}, \widehat{D}) = \max \varphi(A, D),$$

则 $\widehat{A}, \widehat{D}$ 满足以下方程组

$$\widehat{\Sigma}\widehat{D}^{-1}\widehat{A} = \widehat{A}\left(I + \widehat{A}^T\widehat{D}^{-1}\widehat{A}\right), \tag{9.40}$$

$$\widehat{D} = \operatorname{diag}\left(\widehat{\Sigma} - \widehat{A}\widehat{A}^T\right), \tag{9.41}$$

其中

$$\widehat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_{(i)} - \overline{X})(X_{(i)} - \overline{X})^T.$$

为了保证方程组 (9.40) 得到惟一解, 可附加计算上方便的惟一性条件:

$$A^T D A = \text{对角矩阵}. \tag{9.42}$$

Jöreskog 和 Lawley 等人 (1967) 提出了一种较为实用的迭代法, 使极大似然法逐步被人们采用. 其基本思想是, 先取一个初始矩阵

$$D_0 = \operatorname{diag}(\widehat{\sigma}_1^2, \widehat{\sigma}_1^2, \cdots, \widehat{\sigma}_p^2),$$

现计算 $A_0$, 计算 $A_0$ 的办法是先求 $D_0^{-1/2}\widehat{\Sigma}D_0^{-1/2}$ 的特征值 $\theta_1 \geq \theta_2 \geq \theta_p$, 及相应的特征向量 $l_1, l_2, \cdots, l_p$. 令 $\Theta = \operatorname{diag}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m)$, $L = (l_1, l_2, \cdots, l_m)$ 且令

$$A_0 = D_0^{1/2} L \left(\Theta - I_m\right)^{1/2}. \tag{9.43}$$

再由式 (9.41) 得到 $D_1$, 然后再按上述方法得到 $A_1$, 直到满足方程 (9.40) 为止.

下面是由上述思想编写的 R 程序 (程序名: `factor.analy3.R`)

```
factor.analy3<-function(S, m, d){
   p<-nrow(S); diag_S<-diag(S); sum_rank<-sum(diag_S)
   rowname<-paste("X", 1:p, sep="")
```

```
    colname<-paste("Factor", 1:m, sep="")
    A<-matrix(0, nrow=p, ncol=m,
              dimnames=list(rowname, colname))
    kmax=20; k<-1
    repeat{
       d1<-d; d2<-1/sqrt(d); eig<-eigen(S * (d2 %o% d2))
       for (i in 1:m)
          A[,i]<-sqrt(eig$values[i]-1)*eig$vectors[,i]
       A<-diag(sqrt(d)) %*% A
       d<-diag(S-A%*%t(A))
       if ((sqrt(sum((d-d1)^2))<1e-4)|k==kmax) break
       k<-k+1
    }
    rowname<-c("SS loadings","Proportion Var","Cumulative Var")
    B<-matrix(0, nrow=3, ncol=m,
              dimnames=list(rowname, colname))
    for (i in 1:m){
      B[1,i]<-sum(A[,i]^2)
      B[2,i]<-B[1,i]/sum_rank
      B[3,i]<-sum(B[1,1:i])/sum_rank
    }
    method<-c("Maximum Likelihood Method")
    list(method=method, loadings=A,
         var=cbind(common=diag_S-d, spcific=d),B=B,iterative=k)
}
```

**例 9.9** 取 $m=2$, 特殊方差的估计值 $\widehat{\sigma}_i^2$ 为

0.123, 0.112, 0.155, 0.116, 0.073, 0.045, 0.033, 0.095,

用极大似然法估计例 *9.7* 因子载荷和共性方差等指标.

**解:**

```
> d<-c(0.123, 0.112, 0.155, 0.116, 0.073, 0.045, 0.033, 0.095)
> source("factor.analy3.R")
```

```
> fa<-factor.analy3(R, m=2, d); fa
$method
[1] "Maximum Likelihood Method"
$loadings
        Factor1     Factor2
[1,] -0.7310172 -0.62009641
[2,] -0.7919994 -0.54575786
[3,] -0.8549232 -0.34252454
[4,] -0.9158820 -0.16063750
[5,] -0.9580091 -0.02492734
[6,] -0.9725436  0.14485411
[7,] -0.9806291  0.14276290
[8,] -0.9226101  0.24953974
$var
      common    spcific
X1 0.9189057 0.08109428
X2 0.9251146 0.07488539
X3 0.8482167 0.15178334
X4 0.8646442 0.13535579
X5 0.9184028 0.08159724
X6 0.9668237 0.03317631
X7 0.9820147 0.01798529
X8 0.9134795 0.08652046
$B
                Factor1   Factor2
SS loadings    6.407848 0.9297541
Proportion Var 0.800981 0.1162193
Cumulative Var 0.800981 0.9172002
$iterative
[1] 14
```

用了 14 次迭代得到稳定解. 再计算 $Q(m)$,

```
> E<- R-fa$loadings %*% t(fa$loadings)-diag(fa$var[,2])
> sum(E^2)
[1] 0.006710651
```

将上述三种估计方法结合在一起，并考虑在主成分估计中介绍的因子个数 $m$ 的选取方法，和在主因子法中介绍特殊方差 $\widehat{\sigma}_i^2$ 初始估计方法. 编写相应的 R 程序 (程序名： factor.analy.R)

```
factor.analy<-function(S, m=0,
   d=1/diag(solve(S)), method="likelihood"){
   if (m==0){
      p<-nrow(X); eig<-eigen(S)
      sum_eig<-sum(diag(S))
      for (i in 1:p){
         if (sum(eig$values[1:i])/sum_eig>0.70){
             m<-i; break
         }
      }
   }
   source("factor.analy1.R"); source("factor.analy2.R")
   source("factor.analy3.R")
   switch(method,
             princomp=factor.analy1(S, m),
             factor=factor.analy2(S, m, d),
             likelihood=factor.analy3(S, m, d)
          )
}
```

函数输入样本方差矩阵 $S$ 或样本相关矩阵 $R$. 因子个数 $m$(缺省值由贡献率计算出 $m$ 值). 特殊方差的初始估计 $d$(缺省值为 $\widehat{\sigma}_i^2 = 1/r^{ii}$). 计算因子载荷的方法， method=princomp 采用主成分方法， method=factor 采用主因子方法，method=likelihood(缺省值) 采用极大似然方法. 函数输出就是采用前面介绍三种方法的输出格式.

### 9.2.4 方差最大的正交旋转

因子分析的目的不仅是求出公共因子, 更主要的是应该知道每个公因子的实际意义. 但由于前面介绍的估计方法所求出的公因子解, 其初始因子载荷矩阵并不满足 "简单结构准则", 即各个公因子的典型代表变量很不突出, 因而容易使公因子的实际意义含糊不清, 不利用对因子的解释. 为此, 必须对因子载荷矩阵施行旋转变换, 使得因子载荷的每一列各元素的平方按列向 0 或 1 两极转化, 达到其结构简化的目的.

**1. 理论依据**

设因子模型: $X = AF + \varepsilon$, 其中 $F$ 为公因子向量, 对 $F$ 施行正交变换, 令 $Z = \Gamma^T F$($\Gamma$ 为任一 $m$ 阶正交矩阵), 则

$$X = A\Gamma Z + \varepsilon, \tag{9.44}$$

且

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(Z) &= \mathrm{Var}(\Gamma^T F) = \Gamma^T \mathrm{Var}(F)\Gamma = I_m, && (9.45)\\ \mathrm{Cov}(Z,\varepsilon) &= \mathrm{Cov}(\Gamma^T F,\varepsilon) = \Gamma^T \mathrm{Cov}(F,\varepsilon) = 0, && (9.46)\\ \mathrm{Var}(X) &= \mathrm{Var}(A\Gamma Z) + \mathrm{Var}(\varepsilon) = A\Gamma \mathrm{Var}(Z)\Gamma^T A^T + D \\ &= AA^T + D. && (9.47) \end{aligned}$$

式 (9.44)–(9.47) 说明, 若 $F$ 是因子模型的公因子向量, 则对任一正交矩阵 $\Gamma$, $Z = \Gamma^T F$ 也是公因子向量. 相应的 $A\Gamma$ 是公因子 $Z$ 的因子载荷矩阵.

利用此性质, 在因子分析的实际计算中, 当求得初始因子载荷矩阵 $A$ 后, 反复右乘正交矩阵 $\Gamma$, 使得 $A\Gamma$ 具有更明显的实际意义. 这种变换载荷矩阵的方法, 称为因子轴的正交旋转.

**2. 因子载荷方差**

设因子模型 $X = AF + \varepsilon$, $A = (a_{ij})_{p\times m}$ 为公因子向量 $F$ 的因子载荷矩阵, $h_i^2 = \sum\limits_{j=1}^{m} a_{ij}^2$ $(i = 1, 2, \cdots, p)$ 为变量 $X_i$ 的共同度.

如果 $A$ 的每一列 (即因子载荷向量) 数值越分散, 相应的因子载荷向量的方差越大. 为消除由于 $a_{ij}$ 符号不同的影响及各变量对公共因子依赖程度不同的影

响，令

$$d_{ij}^2=\frac{a_{ij}^2}{h_i^2},\quad i=1,2,\cdots,p,\ \ j=1,2,\cdots,m,$$

将第 $j$ 列的 $p$ 个数据 $d_{1j}^2,d_{2j}^2,\cdots,d_{pj}^2$ 的方差定义为

$$V_j=\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\left(d_{ij}^2-\overline{d}_j\right)^2=\frac{1}{p^2}\left[p\sum_{i=1}^{p}\frac{a_{ij}^4}{h_i^4}-\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{a_{ij}^2}{h_i^2}\right)^2\right],$$

其中 $\overline{d}_j=\frac{1}{p}\sum\limits_{i=1}^{p}d_{ij}^2$, $j=1,2,\cdots,m$. 则因子载荷矩阵 $A$ 的方差为

$$V=\sum_{j=1}^{m}V_j=\frac{1}{p^2}\left\{\sum_{j=1}^{m}\left[p\sum_{i=1}^{p}\frac{a_{ij}^4}{h_i^4}-\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{a_{ij}^2}{h_i^2}\right)^2\right]\right\}.$$

若 $V_j$ 值越大， $A$ 的第 $j$ 个因子载荷向量数值越分散，如果载荷值或是趋于 1 或是趋于 0, 这时相应的公共因子 $F_j$ 具有简单化结构，因而我们希望因子载荷矩阵 $A$ 的方差尽可能大.

**3. 方差最大的正交旋转**

通常采用正交旋转得到方差最大的载荷矩阵. 设 $m=2$, 因子载荷矩阵为

$$A=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\\ \vdots & \vdots\\ a_{p1} & a_{p2}\end{bmatrix},$$

取正交矩阵 $\Gamma=\begin{bmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{bmatrix}$, 则

$$B=\begin{bmatrix}a_{11}\cos\varphi+a_{12}\sin\varphi & -a_{11}\sin\varphi+a_{12}\cos\varphi\\ a_{21}\cos\varphi+a_{22}\sin\varphi & -a_{21}\sin\varphi+a_{22}\cos\varphi\\ \vdots & \vdots\\ a_{p1}\cos\varphi+a_{p2}\sin\varphi & -a_{p1}\sin\varphi+a_{p2}\cos\varphi\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}b_{11} & b_{12}\\ b_{21} & b_{22}\\ \vdots & \vdots\\ b_{p1} & b_{p2}\end{bmatrix}$$

是 $Z=\Gamma^TF$ 的因子载荷矩阵，这相当于将 $f_1,f_2$ 确定的因子平面上旋转一个角度 $\varphi$. 此时,

$$V_j=\frac{1}{p^2}\left[p\sum_{i=1}^{p}\frac{b_{ij}^4}{h_i^4}-\left(\sum_{i=1}^{p}\frac{b_{ij}^2}{h_i^2}\right)^2\right],\ \ j=1,2.$$

为了使

$$\frac{\partial V}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi}(V_1 + V_2) = 0,$$

$\varphi$ 应满足

$$\tan\varphi = \frac{d - 2\alpha\beta/p}{c - (\alpha^2 - \beta^2)/p}, \tag{9.48}$$

其中

$$\alpha = \sum_{i=1}^{p}\mu_i, \quad \beta = \sum_{i=1}^{p}\nu_i, \quad c = \sum_{i=1}^{p}(\mu_i^2 - \nu_i^2), \quad d = 2\sum_{i=1}^{p}\mu_i\nu_i, \tag{9.49}$$

$$\mu_i = \left(\frac{a_{i1}}{h_i}\right)^2 - \left(\frac{a_{i2}}{h_i}\right)^2, \quad i = 1, 2, \cdots, p. \tag{9.50}$$

对于 $m > 2$ 的情况，需要作多次的旋转变换，这里就不再介绍其方法了，因为 R 软件中的 `varimax()` 函数可以完成因子载荷矩阵的旋转变换 (或反射变换). 它们的使用格式为

```
varimax(x, normalize = TRUE, eps = 1e-5)
```

其中 `x` 是因子载荷矩阵. `normalize` 是逻辑变量，即是否对变量进行 Kaiser 正则化. `eps` 是迭代终止精度.

**例 9.10** 用 `varimax()` 函数对例 *9.7*、例 *9.8* 和例 *9.9* 中得到的因子载荷矩阵作旋转变换，使其方差达到最大.

**解**：用自编的函数 `factor.analy()` 得到三种方法计算的因子载荷估计矩阵，再用 `varimax()` 函数得到方差最大的因子载荷矩阵. 以主因子方法计算为例，基本格式为

```
> source("factor.analy.R")
> fa<-factor.analy(R, m=2, method="princomp")
> vm1<-varimax(fa$loadings, normalize = F); vm1
```

将程序中的 `"princomp"` 改为 `"factor"` 和 `"likelihood"`, 就可得到另外两种方法的计算结果，具体的计算结果列在表 9.5 中.

### 9.2.5 因子分析的计算函数

事实上, 在 R 软件中, 提供了作因子分析计算的函数 — `factanal()` 函数，它可以从样本数据、样本的方差矩阵和相关矩阵出发对数据作因子分析，并可直接给出方差最大的载荷因子矩阵.

**表 9.5: 旋转后的因子载荷矩阵**

| 变量 | 主成分 | | 主因子 | | 极大似然 | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $f_1^*$ | $f_2^*$ | $f_1^*$ | $f_2^*$ | $f_1^*$ | $f_2^*$ |
| $X_1$ | −0.278 | −0.934 | −0.299 | −0.913 | −0.297 | −0.911 |
| $X_2$ | −0.380 | −0.891 | −0.399 | −0.869 | −0.388 | −0.880 |
| $X_3$ | −0.547 | −0.770 | −0.561 | −0.736 | −0.548 | −0.740 |
| $X_4$ | −0.715 | −0.624 | −0.711 | −0.610 | −0.695 | −0.617 |
| $X_5$ | −0.816 | −0.521 | −0.812 | −0.516 | −0.803 | −0.524 |
| $X_6$ | −0.904 | −0.385 | −0.906 | −0.377 | −0.904 | −0.387 |
| $X_7$ | −0.905 | −0.393 | −0.912 | −0.382 | −0.910 | −0.393 |
| $X_8$ | −0.937 | −0.257 | −0.913 | −0.265 | −0.916 | −0.272 |
| 贡献 | 4.211 | 3.289 | 4.215 | 3.127 | 4.152 | 3.186 |
| 贡献率 | 0.526 | 0.411 | 0.527 | 0.391 | 0.519 | 0.398 |
| 累积贡献率 | 0.526 | 0.938 | 0.527 | 0.918 | 0.519 | 0.917 |
| 旋转 | 0.762 | 0.648 | 0.771 | 0.637 | 0.851 | 0.525 |
| 矩阵 | −0.648 | 0.762 | −0.637 | 0.771 | −0.525 | 0.851 |

函数 `factanal()` 采用极大似然法估计参数, 其使用格式为

```
factanal(x, factors, data = NULL, covmat = NULL, n.obs = NA,
         subset, na.action, start = NULL,
         scores = c("none", "regression", "Bartlett"),
         rotation = "varimax", control = NULL, ...)
```

其中 `x` 是数据的公式, 或者是由数据 (每个样本按行输入) 构成的矩阵, 或者是数据框. `factors` 是因子的个数. `data` 是数据框, 当 `x` 由公式形式给出时使用. `covmat` 是样本的协方差矩阵或样本的相关矩阵, 此时不必输入变量 `x`. `scores` 表示因子得分的方法, `scores="regression"`, 表示用回归方法计算因子得分, 当参数为 `scores="Bartlett"`, 表示用 Bartlett 方法计算因子得分 (具体意义见下小节), 缺省值为 `"none"`", 即不计算因子得分. `rotation` 表示旋转, 缺省值为方差最大旋转, 当 `rotation="none"` 时, 不作旋转变换.

**例 9.11** 取 $m = 2$, 用 `factanal()` 函数估计例 *9.7* 因子载荷和共性方差等指

标，参数选择方差最大.

**解:**

```
> fa<-factanal(factors=2, covmat=R); fa
Call:
factanal(factors = 2, covmat = R)
Uniquenesses:
   X1    X2    X3    X4    X5    X6    X7    X8
0.081 0.075 0.152 0.135 0.082 0.033 0.018 0.087
Loadings:
   Factor1 Factor2
X1 0.291   0.913
X2 0.382   0.883
X3 0.543   0.744
X4 0.691   0.622
X5 0.799   0.529
X6 0.901   0.393
X7 0.907   0.399
X8 0.914   0.278
               Factor1 Factor2
SS loadings      4.112   3.225
Proportion Var   0.514   0.403
Cumulative Var   0.514   0.917
The degrees of freedom for the model is 13 and the fit was 0.3318
```

在上述信息中， call 表示调用函数的方法. uniquenesses 是特殊方差，即 $\sigma_i^2$ 的值. loadings 是因子载荷矩阵，其中 Factor1 Factor2 是因子，X1 X2 ... X8 是对应的变量. SS loadings 是公共因子 $f_j$ 对变量 $X_1$, $X_2$, $\cdots$, $X_p$ 的总方差贡献，即 $g_j^2 = \sum\limits_{i=1}^{p} a_{ij}^2$. Proportion Var 是方差贡献率，即 $g_j^2 / \sum\limits_{i=1}^{p} \mathrm{Var}(X_i)$. Cumulative Var 是累积方差贡献率，即 $\sum\limits_{k=1}^{j} g_k^2 / \sum\limits_{i=1}^{p} \mathrm{Var}(X_i)$.

在计算结果中，因子 $f_1$ 后几个变量 $(X_6, X_7, X_8)$ 的载荷因子接近于 1, 这些变量涉及的是长跑，因此可称 $f_1$ 是耐力因子. 而因子 $f_2$ 中前几个变量 $(X_1, X_2)$

接近 1, 涉及的是短跑, 因此可称 $f_2$ 是速度因子.

**例 9.12** 现有 *48* 名应聘者应聘某公司的某职位, 公司为这些应聘者的 *15* 项指标打分, 其指标与得分情况见第三章例 *3.17*. 试用因子分析的方法对 *15* 项指标作因子分析, 在因子分析中选取 *5* 个因子.

**解**: 读数据 (由例 3.17 知, 数据在数据文件 applicant.data 中), 再调用函数 factanal() 进行因子分析.

```
> rt<-read.table("applicant.data")
> factanal(~., factors=5, data=rt)
Call:
factanal(x = ~., factors = 5, data = rt)
Uniquenesses:
   FL   APP    AA    LA    SC    LC   HON   SMS   EXP   DRV
0.439 0.597 0.509 0.197 0.118 0.005 0.292 0.140 0.365 0.223
  AMB   GSP   POT    KJ  SUIT
0.098 0.119 0.084 0.005 0.267
Loadings:
     Factor1 Factor2 Factor3 Factor4 Factor5
FL    0.127   0.722   0.102  -0.117
APP   0.451   0.134   0.270   0.206   0.258
AA            0.129           0.686
LA    0.222   0.246   0.827
SC    0.917           0.167
LC    0.851   0.125   0.279          -0.420
HON   0.228  -0.220   0.777
SMS   0.880   0.266   0.111
EXP           0.773           0.171
DRV   0.754   0.393   0.199           0.114
AMB   0.909   0.187   0.112           0.165
GSP   0.783   0.295   0.354   0.148  -0.181
POT   0.717   0.362   0.446   0.267
KJ    0.418   0.399   0.563  -0.585
```

```
SUIT  0.351   0.764           0.148
               Factor1 Factor2 Factor3 Factor4 Factor5
SS loadings      5.490   2.507   2.188   1.028   0.331
Proportion Var   0.366   0.167   0.146   0.069   0.022
Cumulative Var   0.366   0.533   0.679   0.748   0.770
Test of the hypothesis that 5 factors are sufficient.
The chi square statistic is 60.97 on 40 degrees of freedom.
The p-value is 0.0179
```

第一行是读数据，得到的 rt 是数据框格式，第二行作因子分析，`~.` 表示全部变量.

在得到的结果中，公共因子还有比较鲜明的实际意义.

第一公共因子中，系数绝对值大的变量主要是： SC(自信心), LC(洞察力), SMS(推销能力), DRV(驾驶水平), AMB(事业心), GSP(理解能力), POT(潜在能力), 这些主要表现求职者外露能力;

第二公共因子系数绝对值大的变量主要是： FL(求职信的形式), EXP(经验), SUIT(适应性), 这些主要反映了求职者的经验;

第三公系数绝对值大的变量主要是： LA(讨人喜欢), HON(诚实), 它主要反映了求职者提否讨人喜欢;

第四、五公共因子系数绝对值较小，这说明这两个公共因子相对次要一些. 第四公共因子相对较大的变量是： AA(专业能力), KJ(交际能力), 它主要反映了求职者的专业能力; 第五公共因子相对较大的变量是： APP(外貌), LC(洞察力), 它主要反映求职者的外貌.

### 9.2.6 因子得分

迄今为止，已介绍了如何从样本协方差矩阵 $S$ 或相关矩阵 $R$ 来得到公共因子和因子载荷，并给出相应的实际背景. 当我们得到公共因子和因子载荷后，就应当反过来考察每一个样本. 如对于例 9.12, 在得到五个公共因子后，应当考察 48 名应聘者在五个因子的得分情况，这样可以便于公司从中挑选更适合本公司需要的人员.

估计因子得分的方法有两种：一是加权最小二乘法，二是回归方法.

**1. 加权最小二乘法**

设 $X$ 满足因子模型 (不妨设 $\mu = 0$),

$$X = AF + \varepsilon.$$

假定因子载荷矩阵 $A$ 和特殊因子方差矩阵 $D$ 已知，考虑加权最小二乘函数

$$\varphi(F) = (X - AF)^T D^{-1} (X - AF).$$

求 $F$ 的估计值 $\widehat{F}$, 使得 $\varphi(\widehat{F}) = \min \varphi(F)$. 由极值的必要条件得到

$$\widehat{F} = \left(A^T D^{-1} A\right)^{-1} A^T D^{-1} X, \tag{9.51}$$

这就是因子得分的加权最小二乘估计.

如果假定 $X \sim N_p(AF, D)$, 则由式 (9.51) 得到的 $\widehat{F}$ 也是对 $F$ 的极大似然估计. 该方法称为 Bartlett 因子得分.

在实际问题中，式 (9.51) 中的 $A$ 和 $D$ 用估计值 $\widehat{A}$ 和 $\widehat{D}$ 代替， $X$ 用样本 $X_{(i)}$ 来代替，此时，得到因子得分 $F_{(i)}$.

**2. 回归法**

在因子模型中，也可以反过来，将因子表示成变量的线性组合，即

$$f_i = \beta_{i1} X_1 + \beta_{i2} X_2 + \cdots + \beta_{ip} X_p, \quad i = 1, 2, \cdots, m \tag{9.52}$$

来计算因子得分. 称式 (9.52) 为因子得分函数. 写成矩阵形式

$$F = \mathcal{B} X, \tag{9.53}$$

其中 $F = (f_1, f_2, \cdots, f_m)^T$, $\mathcal{B} = (\beta_{ij})_{m \times p}$.

下面用回归的方法计算式 (9.53) 中 $\mathcal{B}$ 的估计值.

假设变量 $X$ 已标准化，公共因子 $F$ 也已标准化，并假设公共因子 $F$ 和变量 $X$ 满足回归方程

$$f_j = b_{j1} X_1 + b_{j2} X_2 + \cdots + b_{jp} X_p + \varepsilon_j, \quad j = 1, 2, \cdots, m. \tag{9.54}$$

由因子载荷矩阵 $A = (a_{ij})_{p \times n}$ 的意义，有

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \mathrm{Cov}(X_i, f_j) = \mathrm{Cov}(X_i, b_{j1} X_1 + b_{j2} X_2 + \cdots + b_{jp} X_p + \varepsilon_j) \\ &= b_{j1} r_{i1} + b_{j2} r_{i2} + \cdots + b_{jp} r_{ip}, \\ &= \sum_{k=1}^{p} r_{ik} b_{jk}, \quad i = 1, 2, \cdots, p, \quad j = 1, 2, \cdots, m, \end{aligned} \tag{9.55}$$

即

$$A = RB^T, \tag{9.56}$$

其中 $R = (r_{ij})_{p\times p}$ 为相关矩阵，$B = (b_{ij})_{m\times p}$. 因此，用

$$B = A^T R^{-1} \tag{9.57}$$

作为 $\mathcal{B}$ 的估计值. 代入式 (9.53) 得到

$$\widehat{F} = A^T R^{-1} X. \tag{9.58}$$

式 (9.58) 是因子得分的计算公式. 由于该公式是由回归方程得到的，因此称为回归法. 此方法是 Thompson (1939) 提出来的，也称为 Thompson 方法.

到目前为止，计算因子得分的两种估计方法到底哪一个好还没有定论，因此，R 软件中作因子分析的函数 `factanal()` 同时给出了两种方法，当参数 `scores="regression"` 时，采用的回归法；当参数为 `scores="Bartlett"` 时，采用的是加权最小二乘法.

**例 9.13** *计算例 9.12 中 48 名应聘者的因子得分.*

**解:**

```
> rt<-read.table("applicant.data")
> fa<-factanal(~., factors=5, data=rt, scores="regression")
```

这里采用的是回归法. `fa$scores` 将给出 48 名应聘者在 5 个公共因子的得分情况 (略). 为直观起见，画出 48 位应聘者在第一、第二公共因子下的散点图，

```
> plot(fa$scores[, 1:2], type="n")
> text(fa$scores[,1], fa$scores[,2])
```

其图形如图 9.4 所示. 由前面分析可知，第一公共因子主要表现求职者外露能力，第二公共因子主要表现求职者的经验. 公司可以选择两者得分都比较高的应聘者，如 39 、 40 、 7 、 8 、 9 和 2 号应聘者. 如偏重外露能力，则选取第一公共因子得分较大的应聘者. 如偏重经验，则可以考虑第二公共因子得分较大的应聘者. 公司也可以根据情况，画出第二、第三公共因子得分的散点图，或选择 Bartlett 方法计算因子得分.

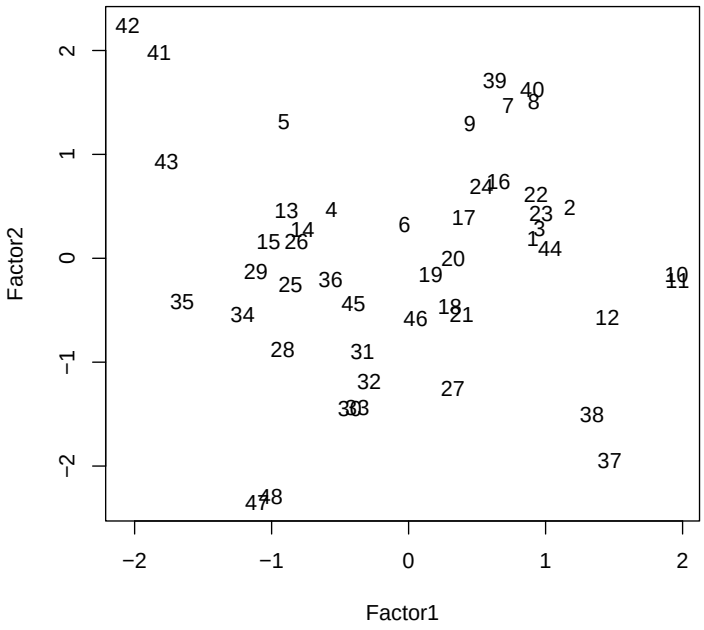



图 9.4: 48 位应聘者在第一、第二公共因子下的散点图

## 9.3 典型相关分析

典型相关分析 (canonical correlation analysis) 是用于分析两组随机变量之间的相关性程度的一种统计方法, 它能够有效地揭示两组随机变量之间的相互线性依赖关系. 这一方法是由 Hotelling (霍特林, 1935) 首先提出来的.

在实际问题中, 经常遇到要研究一部分变量与另一部分变量之间的相互关系. 例如, 在工厂, 考察原料的主要指标 $(X_1, X_2, \cdots, X_p)$ 与产品的主要指标 $(Y_1, Y_2, \cdots, Y_p)$; 在经济学中, 研究主要肉食品的价格与销售之间的关系; 在地质学中, 为研究岩石形成的成因关系, 考察岩石的化学成分与其周围岩化学成分的相关性; 在教育学中, 考察研究生入学考试成绩与本科阶段一些主要课程成绩的相关性, 等等.

一般地, 假设有两组随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 和 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_q$, 研究它们的相关关系, 当 $p = q = 1$ 时, 就是通常两个变量 $X$ 与 $Y$ 的相关关系. 当 $p > 1, q > 1$ 时, 采用类似于主成分分析的方法, 找出第一组变量的线性组合 $U$ 和第二组变

量的线性组合 $V$, 即

$$\begin{aligned} U &= a_1X_1 + a_2X_2 + \cdots + a_pX_p, \\ V &= b_1Y_1 + b_2Y_2 + \cdots + b_qY_q, \end{aligned}$$

于是将研究两组变量的相关性问题转化成研究两个变量的相关性问题, 并且可以适当地调整相应的系数 $a, b$, 使得变量 $U$ 和 $V$ 的相关性达到最大, 称这种相关为典型相关, 基于这种原则的分析方法称为典型相关分析.

### 9.3.1 总体典型相关

#### 1. 典型相关的定义

设 $X = (X_1, X_2, \cdots, X_p)^T$, $Y = (Y_1, Y_2, \cdots, Y_q)^T$ 为随机向量, 用 $X$ 与 $Y$ 的线性组合 $a^TX$ 和 $b^TY$ 之间的相关来研究 $X$ 与 $Y$ 之间的相关, 并希望找到 $a$ 与 $b$, 使 $\rho(a^TX, b^TY)$ 最大. 由相关系数的定义,

$$\rho(a^TX, b^TY) = \frac{\mathrm{Cov}(a^TX, b^TY)}{\sqrt{\mathrm{Var}(a^TX)}\sqrt{\mathrm{Var}(b^TY)}}. \tag{9.59}$$

对任意的 $\alpha, \beta$ 和 $c, d$, 有

$$\rho\left(\alpha(a^TX) + \beta, c(b^TY) + d\right) = \rho\left(a^TX, b^TY\right). \tag{9.60}$$

式 (9.60) 说明使得相关系数最大的 $a^TX$ 和 $b^TY$ 并不惟一. 因此, 在综合变量时, 可限定

$$\mathrm{Var}(a^TX) = 1, \quad \mathrm{Var}(b^TY) = 1.$$

设 $X = (X_1, X_2, \cdots, X_p)^T$, $Y = (Y_1, Y_2, \cdots, Y_q)^T$, $p+q$ 维随机向量 $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$ 的均值为 0, 协方差阵 $\Sigma > 0$. 若存在 $a_1 = (a_{11}, a_{12}, \cdots, a_{1p})^T$ 和 $b_1 = (b_{11}, b_{12}, \cdots, b_{1q})^T$ 使得 $\rho(a_1^TX, b_1^TY)$ 是约束问题

$$\max \quad \rho(\alpha^TX, \beta^TY), \tag{9.61}$$

$$\text{s.t.} \quad \mathrm{Var}(\alpha^TX) = 1, \tag{9.62}$$

$$\mathrm{Var}(\beta^TY) = 1. \tag{9.63}$$

目标函数的最大值，则称 $U_1 = a_1^T X$, $V_1 = b_1^T Y$ 为 $X, Y$ 的第一对 (组) 典型变量 (canonical variates), 称它们之间的相关系数 $\rho(U_1, V_1)$ 为第一典型相关系数 (canonical correlation).

如果存在 $a_k = (a_{k1}, a_{k2}, \cdots, a_{kp})^T$ 和 $b_k = (b_{k1}, b_{k2}, \cdots, b_{kq})^T$ 使得

(1) $a_k^T X, b_k^T Y$ 和前面的 $k-1$ 对典型变量都不相关;

(2) $\mathrm{Var}(a_k^T X) = 1$, $\mathrm{Var}(b_k^T Y) = 1$;

(3) $a_k^T X$ 与 $b_k^T Y$ 相关系数最大.

则称 $U_k = a_k^T X$, $V_k = b_k^T Y$ 为 $X, Y$ 的第 $k$ 对 (组) 典型变量，称它们之间的相关系数 $\rho(U_k, V_k)$ 为第 $k\,(k = 2, 3, \cdots, \min\{p, q\})$ 典型相关系数.

**2. 典型变量和典型相关系数的计算**

令 $Z = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$, 则有

$$E(Z) = 0, \quad \mathrm{Var}(Z) = \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix},$$

令 $U = a^T X, V = b^T Y$, 因此，求解第一对典型变量和典型相关系数的约束优化问题 (9.61)–(9.63) 就等价为

$$\max \quad \rho(U, V) = \alpha^T \Sigma_{12} \beta, \tag{9.64}$$

$$\text{s.t.} \quad \alpha^T \Sigma_{11} \alpha = 1, \tag{9.65}$$

$$\beta^T \Sigma_{22} \beta = 1. \tag{9.66}$$

这是一个典型的约束优问题，这里采用约束问题的一阶必要条件进行求解.

构造约束问题 (9.64)–(9.66) 的 Lagrange 函数

$$L(\alpha, \beta, \lambda) = \alpha^T \Sigma_{12} \beta - \frac{\lambda_1}{2} \left( \alpha^T \Sigma_{11} \alpha - 1 \right) - \frac{\lambda_2}{2} \left( \beta^T \Sigma_{22} \beta - 1 \right),$$

其中 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)^T$ 为 Lagrange 乘子.

由约束问题 (9.64)–(9.66) 的一阶必要条件

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \beta} = 0, \quad \alpha^T \Sigma_{11} \alpha = 1, \quad \beta^T \Sigma_{22} \beta = 1.$$

得到如下方程

$$\Sigma_{12}\beta - \lambda_1\Sigma_{11}\alpha = 0, \tag{9.67}$$

$$\Sigma_{21}\alpha - \lambda_2\Sigma_{22}\beta = 0, \tag{9.68}$$

$$\alpha^T\Sigma_{11}\alpha = 1, \tag{9.69}$$

$$\beta^T\Sigma_{22}\beta = 1. \tag{9.70}$$

下面求解该方程. 在式 (9.67) 上左乘 $\alpha^T$, 式 (9.68) 上左乘 $\beta^T$, 再利用式 (9.69) 和式 (9.70), 得到 $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$.

由于 $\Sigma > 0$, 所以 $\Sigma_{11}^{-1}$, $\Sigma_{22}^{-1}$ 存在, 整理式 (9.67) 和式 (9.68) 得到

$$\lambda\alpha = \Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}\beta, \quad \lambda\beta = \Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\alpha, \tag{9.71}$$

所以有

$$\lambda^2\alpha = \Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\alpha = M_1\alpha, \quad \lambda^2\beta = \Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}\beta = M_2\beta, \tag{9.72}$$

其中 $M_1 = \Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}$, $M_2 = \Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}$.

因此, $\lambda^2$ 是矩阵 $M_1$ 或 $M_2$ 的特征值 (注意, $M_1$ 和 $M_2$ 有相同的特征值), $\alpha$ 是 $M_1$ 特征值 $\lambda^2$ 对应的特征向量, $\beta$ 是 $M_2$ 特征值 $\lambda^2$ 对应的特征向量.

由于

$$\alpha^T\Sigma_{12}\beta = \lambda\alpha^T\Sigma_{11}\alpha = \lambda\beta^T\Sigma_{11}\beta = \lambda,$$

因此, 优化问题 (9.64)–(9.66) 的解 $a_1, b_1$ 是求 $M_1$ 或 $M_2$ 最大特征值 $\lambda_1^2$ 和相应的满足

$$\left\|\Sigma_{11}^{1/2}\alpha\right\| = 1, \quad \left\|\Sigma_{22}^{1/2}\beta\right\| = 1$$

的特征向量 $\alpha$ 和 $\beta$.

下面给出计算过程:

(1) 令 $M_1 = \Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}$;

(2) 计算 $M_1$ 的最大特征值 $\lambda_1^2$ 和相应的特征向量 $\alpha_1$, 令

$$\beta_1 = \Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\alpha_1, \quad a_1 = \alpha_1\Big/\sqrt{\alpha_1^T\Sigma_{11}\alpha_1}, \quad b_1 = \beta_1\Big/\sqrt{\beta_1^T\Sigma_{22}\beta_1},$$

前面已经说明系数不唯一，故beta无需再除以lambda2

则 $\lambda_1 = \sqrt{\lambda_1^2}$ 为第一对典型相关系数, $U_1 = a_1^TX, V_1 = b_1^TY$ 为第一对典型变量.

对于第 $k$ 对典型相关变量的求解方法类似于第 1 对典型相关变量，求解第 $k$ 个最大特征值和相应的特征向量. 略去推导过程，只需将上面的第二步改为：

$(2')$ 计算 $M_1$ 的第 $k$ 大特征值 $\lambda_k^2$ 和相应的特征向量 $\alpha_k$, 令

$$\beta_k = \Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\alpha_k, \quad a_k = \alpha_k \Big/ \sqrt{\alpha_k^T\Sigma_{11}\alpha_k}, \quad b_k = \beta_k \Big/ \sqrt{\beta_k^T\Sigma_{22}\beta_k},$$

则 $\lambda_k = \sqrt{\lambda_k^2}$ 为第 $k$ 对典型相关系数， $U_k = a_k^T X, V_k = b_k^T Y$ 为第 $k$ 对典型变量.

### 9.3.2 样本典型相关

设总体 $Z = (X_1, X_2, \cdots, X_p, Y_1, Y_2, \cdots, Y_q)^T$, 在实际中，总体的均值向量 $E(Z) = \mu$ 和协方差矩阵 $\mathrm{Cov}(Z) = \Sigma$ 通常是未知的，因而无法求得总体的典型变量和典型相关系数，因此需要根据样本对 $\Sigma$ 进行估计.

已知总体 $Z$ 的 $n$ 次观测数据

$$Z_{(i)} = \begin{pmatrix} X_{(i)} \\ Y_{(i)} \end{pmatrix}_{(p+q)\times 1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

于是样本资料为

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} & y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1q} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} & y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} & y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{nq} \end{bmatrix}.$$

假设 $Z \sim N_{p+q}(\mu, \Sigma)$, 则协方差矩阵 $\Sigma$ 的极大似然估计为

$$\widehat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(Z - \overline{Z}\right)\left(Z - \overline{Z}\right)^T,$$

其中 $\overline{Z} = \frac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} Z_{(i)}$, 称矩阵 $\widehat{\Sigma}$ 为样本协方差阵.

因此，关于样本典型变量的计算，只需要将矩阵 $M_1$ 或 $M_2$ 中的 $\Sigma_{11}$, $\Sigma_{12}$, $\Sigma_{21}$, $\Sigma_{22}$ 换成 $\widehat{\Sigma}_{11}$, $\widehat{\Sigma}_{12}$, $\widehat{\Sigma}_{21}$, $\widehat{\Sigma}_{22}$ 即可，因此计算过程为：

(1) 令 $M_1 = \widehat{\Sigma}_{11}^{-1}\widehat{\Sigma}_{12}\widehat{\Sigma}_{22}^{-1}\widehat{\Sigma}_{21}$;

(2) 计算 $M_1$ 的全部特征值 $\lambda_1^2 \geq \lambda_2^2 \geq \cdots \geq \lambda_m^2$, 其中 $m = \min(p, q)$, 和相应的特征向量 $\alpha_k$, $k = 1, 2, \cdots, m$, 令

$$\beta_k = \Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\alpha_k, \quad a_k = \alpha_k \Big/ \sqrt{\alpha_k^T \widehat{\Sigma}_{11}\alpha_k}, \quad b_k = \beta_k \Big/ \sqrt{\beta_k^T \widehat{\Sigma}_{22}\beta_k},$$

则 $\lambda_k = \sqrt{\lambda_k^2}$ 为第 $k$ 对样本典型相关系数, $U_k = a_k^T X, V_k = b_k^T Y$ 为第 $k$ 对样本典型变量.

### 9.3.3 典型相关分析的计算

R 软件提供了典型相关分析的计算, 其计算形式为

```
cancor(x, y, xcenter = TRUE, ycenter = TRUE)
```

其中 x, y 是相应的数据矩阵, xcenter, ycenter 是逻辑变量, TRUE 是将数据中心化, FLASE 是不中心化 (缺省值是 TRUE).

**例 9.14** 某康复俱乐部对 *20* 名中年人测量了三个生理指标: 体重 $(X_1)$、腰围 $(X_2)$、脉搏 $(X_3)$ 和三个训练指标: 引体向上 $(Y_1)$、起从次数 $(Y_2)$、跳跃次数 $(Y_3)$. 其数据列在表 *9.6* 中. 试对这组数据进行典型相关分析.

**表 9.6: 康复俱乐部测量的生理指标和训练指标**

| 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y_1$ | $Y_2$ | $Y_3$ | 序号 | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $Y_1$ | $Y_2$ | $Y_3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 191 | 36 | 50 | 5 | 162 | 60 | 11 | 189 | 37 | 52 | 2 | 110 | 60 |
| 2 | 193 | 38 | 58 | 12 | 101 | 101 | 12 | 162 | 35 | 62 | 12 | 105 | 37 |
| 3 | 189 | 35 | 46 | 13 | 155 | 58 | 13 | 182 | 36 | 56 | 4 | 101 | 42 |
| 4 | 211 | 38 | 56 | 8 | 101 | 38 | 14 | 167 | 34 | 60 | 6 | 125 | 40 |
| 5 | 176 | 31 | 74 | 15 | 200 | 40 | 15 | 154 | 33 | 56 | 17 | 251 | 250 |
| 6 | 169 | 34 | 50 | 17 | 120 | 38 | 16 | 166 | 33 | 52 | 13 | 210 | 115 |
| 7 | 154 | 34 | 64 | 14 | 215 | 105 | 17 | 247 | 46 | 50 | 1 | 50 | 50 |
| 8 | 193 | 36 | 46 | 6 | 70 | 31 | 18 | 202 | 37 | 62 | 12 | 210 | 120 |
| 9 | 176 | 37 | 54 | 4 | 60 | 25 | 19 | 157 | 32 | 52 | 11 | 230 | 80 |
| 10 | 156 | 33 | 54 | 15 | 225 | 73 | 20 | 138 | 33 | 68 | 2 | 110 | 43 |

**解**: 用数据框的形式输入数据, 为消除数据数量级的影响, 先将数据标准化, 再调用函数 cancor() 进行计算 (程序名： exam0914.R)

```
test<-data.frame(
  X1=c(191, 193, 189, 211, 176, 169, 154, 193, 176, 156,
       189, 162, 182, 167, 154, 166, 247, 202, 157, 138),
  X2=c(36, 38, 35, 38, 31, 34, 34, 36, 37, 33,
       37, 35, 36, 34, 33, 33, 46, 37, 32, 33),
  X3=c(50, 58, 46, 56, 74, 50, 64, 46, 54, 54,
       52, 62, 56, 60, 56, 52, 50, 62, 52, 68),
  Y1=c( 5, 12, 13,  8, 15, 17, 14,  6,  4, 15,
        2, 12,  4,  6, 17, 13,  1, 12, 11,  2),
  Y2=c(162, 101, 155, 101, 200, 120, 215,  70,  60, 225,
       110, 105, 101, 125, 251, 210,  50, 210, 230, 110),
  Y3=c(60, 101, 58, 38, 40, 38, 105, 31, 25, 73,
       60, 37, 42, 40, 250, 115, 50, 120, 80, 43)
)
test<-scale(test)
ca<-cancor(test[,1:3],test[,4:6])
```

计算结果为

```
> ca
$cor
[1] 0.79560815 0.20055604 0.07257029
$xcoef
           [,1]        [,2]        [,3]
X1 -0.17788841 -0.43230348 -0.04381432
X2  0.36232695  0.27085764  0.11608883
X3 -0.01356309 -0.05301954  0.24106633
$ycoef
          [,1]        [,2]        [,3]
Y1 -0.0801801 -0.08615561 -0.29745900
Y2 -0.2418067  0.02833066  0.28373986
```

```
Y3  0.1643596  0.24367781 -0.09608099
$xcenter
           X1            X2            X3
 2.331468e-16  4.385381e-16 -2.220446e-16
$ycenter
           Y1            Y2            Y3
 1.443290e-16 -1.776357e-16  2.775558e-17
```

其中 cor 是典型相关系数. xcoef 是对应于数据 $X$ 的系数, 也称为关于数据 $X$ 的典型载荷 (canonical loadings), 即样本典型变量 $U$ 系数矩阵 $A$ 的转置. ycoef 是对应于数据 $Y$ 的系数, 也称为关于数据 $Y$ 的典型载荷, 即样本典型变量 $V$ 系数矩阵 $B$ 的转置. $xcenter 是数据 $X$ 的中心, 即数据 $X$ 的样本均值 $\overline{X}$. $ycenter 是数据 $Y$ 的中心, 即数据 $Y$ 的样本均值 $\overline{Y}$. 由于数据已作了标准化处理, 因此这里计算出的样本均值为 0.

对于康复俱乐部数据, 与计算结果相对应的数学意义是

$$\begin{cases} U_1 = -0.178X_1^* + 0.362X_2^* - 0136X_3^*, \\ U_2 = -0.432X_1^* + 0.271X_2^* - 0.0530X_3^*, \\ U_3 = -0.0438X_1^* + 0.116X_2^* + 0.241X_3^*, \end{cases} \tag{9.73}$$

$$\begin{cases} V_1 = -0.0802Y_1^* - 0.242Y_2^* + 0.164Y_3^*, \\ V_2 = -0.08615Y_1^* + 0.0283Y_2^* + 0.244Y_3^*, \\ V_3 = -0.297Y_1^* + 0.284Y_2^* - 0.0961Y_3^*, \end{cases} \tag{9.74}$$

其中 $X_i^*, Y_i^*$, $i = 1, 2, 3$ 是标准化后的数据. 相应的相关系数为

$$\rho(U_1, V_1) = 0.796, \quad \rho(U_2, V_2) = 0.201, \quad \rho(U_3, V_3) = 0.0726.$$

由式 (9.60) 可知, 式 (9.73) 和式 (9.74) 的系数并不惟一, 是它们的任意倍均可.

下面计算样本数据在典型变量下的得分. 由于 $U = AX$, $V = BY$, 所以得分的 R 程序为

```
U<-as.matrix(test[, 1:3])%*% ca$xcoef
V<-as.matrix(test[, 4:6])%*% ca$ycoef
```

画出以相关变量 $U_1, V_1$ 和 $U_3, V_3$ 为坐标的数据散点图, 其命令为

```
plot(U[,1], V[,1], xlab="U1", ylab="V1")
plot(U[,3], V[,3], xlab="U3", ylab="V3")
```

其图形如图 9.5 和图 9.6 所示.

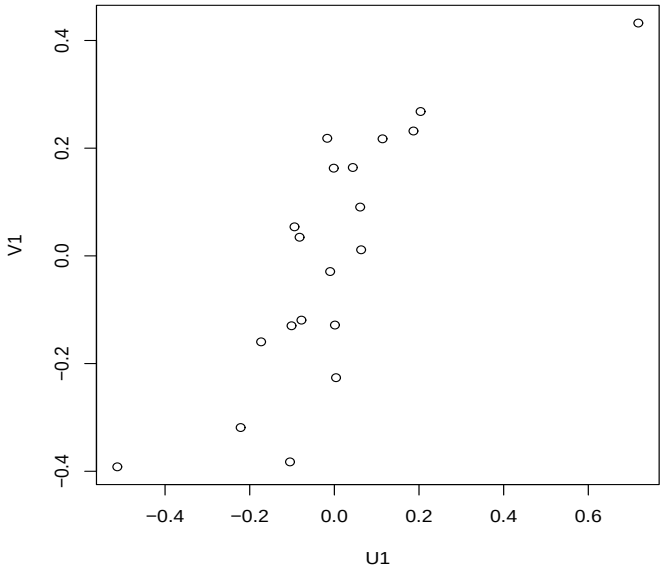



图 9.5: 第一典型变量为坐标的散点图

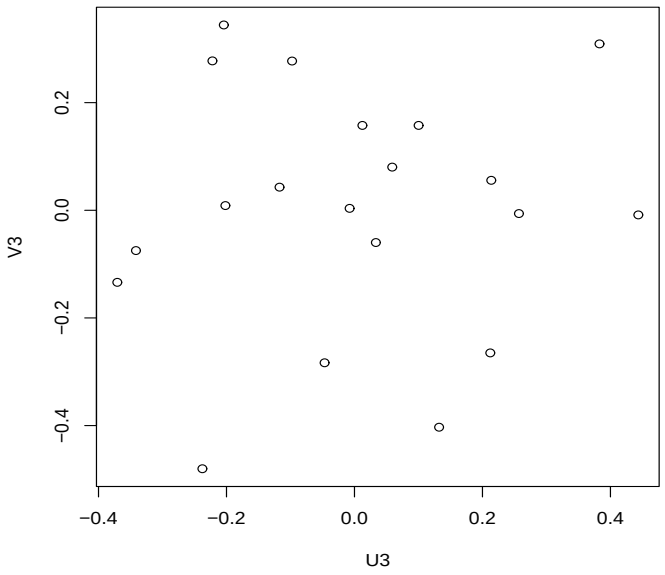



图 9.6: 第三典型变量为坐标的散点图

观察这两张图，你会发现，图 9.5 中的点基本上在一条直线附近，而图 9.6 中的点，基本上分布很散. 这是为什么呢？事实上，图 9.5 画的是第一典型变量的散点图，其相关系数为 0.796, 接近于 1, 所以在一直线附近，而图 9.6 画的是第三典型变量的散点图，其相关系数为 0.0726, 接近于 0, 所以很分散.

### 9.3.4 典型相关系数的显著性检验

作相关分析的目的，与前面的主成分分析、因子分析类似，都是利用降维的方法来处理数据，这里同样存在着一个问题，就是选择多少对典型变量？要回答这一问题，就需要作典型相关系数的显著性检验. 若认为典型相关系数 $\rho_k = 0$, 则就不必考虑第 $k$ 对典型变量.

**1. 全部总体典型相关系数均为零的检验**

设 $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \sim N_{p+q}(\mu, \Sigma)$, $\Sigma > 0$, $S$ 为样本的协方差矩阵， $n$ 为样本个数，且 $n > p + q$.

考虑假设检验问题：

$$H_0 : \rho_1 = \rho_2 = \cdots = \rho_m = 0, \quad H_1 : \text{至少一个 } \rho_i \text{ 不为 } 0, \tag{9.75}$$

其中 $m = \min\{p, q\}$.

若检验接受 $H_0$, 则认为讨论两组变量之间的相关性没有意义；若检验拒绝 $H_0$, 则认为第一对典型变量是显著的. 事实上，式 (9.75) 等价于假设检验问题

$$H_0 : \Sigma_{12} = 0, \quad H_1 : \Sigma_{12} \neq 0. \tag{9.76}$$

当 $H_0$ 成立，表明 $X$ 与 $Y$ 互不相关. 似然比检验统计量为

$$\Lambda_1 = \prod_{i=1}^{m} \left(1 - r_i^2\right) \tag{9.77}$$

对于充分大的 $n$, 当 $H_0$ 成立时，统计量

$$Q_1 = -\left[n - \frac{1}{2}(p + q + 3)\right] \ln \Lambda_1 \tag{9.78}$$

近似服从自由度为 $pq$ 的 $\chi^2$ 分布. 在给定的显著性水平 $\alpha$ 下，若 $Q_1 \geq \chi_\alpha^2(pq)$, 则拒绝原假设 $H_0$, 认为典型变量 $U_1$ 与 $V_1$ 之间相关性显著；否则认为第一典型相关系数不显著. 在这种情况下，就没有必要作典型相关分析了.

**2. 部分总体典型相关系数均为零的检验**

假设前 $k$ 个典型相关系数是显著的，现要检验第 $k+1$ 个典型相关系数是否显著，则作如下检验：

$$H_0 : \rho_{k+1} = \rho_{k+2} = \cdots = \rho_m = 0, \quad H_1 : \text{至少一个 } \rho_i \text{ 不为 } 0. \tag{9.79}$$

其检验统计量为

$$\Lambda_{k+1} = \prod_{i=k+1}^{m} \left(1 - r_i^2\right) \tag{9.80}$$

对于充分大的 $n$, 当 $H_0$ 为真时，统计量

$$Q_{k+1} = -\left[n - k - \frac{1}{2}(p+q+3) + \sum_{i=1}^{k} r_i^{-2}\right] \ln \Lambda_{k+1} \tag{9.81}$$

近似服从自由度为 $(p-k)(q-k)$ 的 $\chi^2$ 分布. 在给定的显著性水平 $\alpha$ 下，若 $Q_{k+1} \geq \chi_\alpha^2((p-k)(q-k))$, 则拒绝原假设 $H_0$, 认为第 $k+1$ 个典型相关系数 $\rho_{k+1}$ 是显著的；否则认典型相关系数不显著，那么典型变量只取到 $k$ 为止.

**3. 相关系数检验的 R 程序**

按照前面介绍有方法编写出相应的 R 程序 (程序名： `corcoef.test.R`)

```
corcoef.test<-function(r, n, p, q, alpha=0.1){
   m<-length(r); Q<-rep(0, m); lambda <- 1
   for (k in m:1){
      lambda<-lambda*(1-r[k]^2);
      Q[k]<- -log(lambda)
   }
   s<-0; i<-m
   for (k in 1:m){
      Q[k]<- (n-k+1-1/2*(p+q+3)+s)*Q[k]
      chi<-1-pchisq(Q[k], (p-k+1)*(q-k+1))
      if (chi>alpha){
         i<-k-1; break
      }
      s<-s+1/r[k]^2
```

```
    }
    i
}
```

程序的输入值是相关系数 $r$, 样本个数 $n$, 两个随机向量的维数 $p$ 和 $q$, 以及置信水平 $\alpha$(缺省值为 0.1). 程序的输出值是典型变量的对数.

**例 9.15** (续例 9.14) 对例 *9.14* 的典型相关系数作检验.

**解**: 利用计算公式所编写的 R 函数 `corcoef.test()` 作检验.

```
> source("corcoef.test.R")
> corcoef.test(r=ca$cor, n=20, p=3, q=3)
[1] 1
```

只需第一对典型变量. 从图 9.6, 我们也可以看到, 散点图很分散, 无法给出相关信息. 同样, 画第二典型变量的散点图, 其图形也很分散. 因此, 我们只利用第一典型变量分析问题, 达到降维的目的.

## 习题九

**9.1** 用主成分方法探讨城市工业主体结构. 表 *9.7* 是某市工业部门十三个行业, 分别是冶金 (1) 、电力 (2) 、煤炭 (3) 、化学 (4) 、机械 (5) 、建材 (6) 、森工 (7) 、食品 (8) 、纺织 (9) 、缝纫 (10) 、皮革 (11) 、造纸 (12) 和文教艺术用品 (13), 八个指标, 分别是年末固定资产净值 $X_1$ (万元)、职工人数 $X_2$ (人)、工业总产值 $X_3$ (万元)、全员劳动生产率 $X_4$ (元 / 人年)、百元固定原值实现产值 $X_5$ (元)、资金利税率 $X_6$ ( % )、标准燃料消费量 $X_7$ (吨) 和能源利用效果 $X_8$ (万元 / 吨) 的数据.

*(1)* 试用主成分分析方法确定 *8* 个指标的几个主成分, 并对主成分进行解释;

*(2)* 利用主成分得分对 *13* 个行业进行排序和分类.

**9.2** 对某地区的某类消费品的销售量 $Y$ 进行调查, 它与下面四个变量有关: $X_1$ 居民可支配收入, $X_2$ 该类消费品平均价格指数, $X_3$ 社会该消费品保有量, $X_4$ 其他消费品平均价格指数, 历史资料如表 *9.8* 所示. 试利用主成分回归方法建立销售量 $Y$ 与四个变量 $X_1, X_2, X_3$ 和 $X_4$ 的回归方程.

**表 9.7: 某市工业部门十三个行业人个指标的数据**

| | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $X_5$ | $X_6$ | $X_7$ | $X_8$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 90342 | 52455 | 101091 | 19272 | 82.0 | 16.1 | 197435 | 0.172 |
| 2 | 4903 | 1973 | 2035 | 10313 | 34.2 | 7.1 | 592077 | 0.003 |
| 3 | 6735 | 21139 | 3767 | 1780 | 36.1 | 8.2 | 726396 | 0.003 |
| 4 | 49454 | 36241 | 81557 | 22504 | 98.1 | 25.9 | 348226 | 0.985 |
| 5 | 139190 | 203505 | 215898 | 10609 | 93.2 | 12.6 | 139572 | 0.628 |
| 6 | 12215 | 16219 | 10351 | 6382 | 62.5 | 8.7 | 145818 | 0.066 |
| 7 | 2372 | 6572 | 8103 | 12329 | 184.4 | 22.2 | 20921 | 0.152 |
| 8 | 11062 | 23078 | 54935 | 23804 | 370.4 | 41.0 | 65486 | 0.263 |
| 9 | 17111 | 23907 | 52108 | 21796 | 221.5 | 21.5 | 63806 | 0.276 |
| 10 | 1206 | 3930 | 6126 | 15586 | 330.4 | 29.5 | 1840 | 0.437 |
| 11 | 2150 | 5704 | 6200 | 10870 | 184.2 | 12.0 | 8913 | 0.274 |
| 12 | 5251 | 6155 | 10383 | 16875 | 146.4 | 27.5 | 78796 | 0.151 |
| 13 | 14341 | 13203 | 19396 | 14691 | 94.6 | 17.8 | 6354 | 1.574 |

**表 9.8: 某类消费品销售的原始数据**

| | $X_1$ | $X_2$ | $X_3$ | $X_4$ | $Y$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 82.9 | 92 | 17.1 | 94 | 8.4 |
| 2 | 88.0 | 93 | 21.3 | 96 | 9.6 |
| 3 | 99.9 | 96 | 25.1 | 97 | 10.4 |
| 4 | 105.3 | 94 | 29.0 | 97 | 11.4 |
| 5 | 117.7 | 100 | 34.0 | 100 | 12.2 |
| 6 | 131.0 | 101 | 40.0 | 101 | 14.2 |
| 7 | 148.2 | 105 | 44.0 | 104 | 15.8 |
| 8 | 161.8 | 112 | 49.0 | 109 | 17.9 |
| 9 | 174.2 | 112 | 51.0 | 111 | 19.6 |
| 10 | 184.7 | 112 | 53.0 | 111 | 20.8 |

**9.3** 对 *305* 名女中学生测量八个体型指标,相应的相关矩阵见例 *8.7*中的表 *8.5*所示. 试用因子分析的方法对这八个体型指标进行分析，找出公共因子，并给出合理的解释.

**9.4** 为考查学生的学习情况，学校随机的抽取 *12* 名学生的 *5* 门课期末考试的成绩，其数据见例 *3.18* 中的表 *3.6,* 试用因子分析的方法对这种数据进行分析.

*(1)* 找出五门课程的公共因子，并进行合理的解释;

*(2)* 用回归方法或 *Bartlett* 方法计算样本的因子得分，画出因子得分的第一、第二公共因子的散点图，通过这些散点图来分析这 *12* 名学生的学习情况.

**9.5** 欲研究儿童形态与肺通气功能的关系，测得某小学 *40* 名 *8*∼*12* 岁健康儿童形态 *(*身高、体重和胸围*)* 与肺通气功能 *(*肺活量、静息通气和每分钟最大通气量*),* 数据如表 *9.9* 所示. 试分析儿童形态指标与肺通气指标的相关系，确定典型变量的对数.

**表 9.9: 儿童形态肺通气功能指标表**

| | 儿童形态 | | | 肺通气功能 | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 序号 | 身高 (cm)$X_1$ | 体重 (kg)$X_2$ | 胸围 (cm)$X_3$ | 肺活量 (L)$Y_1$ | 静息通气量 (L)$Y_2$ | 每分钟最大通气量 (L)$Y_3$ |
| 1 | 140.6 | 43.7 | 77.9 | 2.67 | 7.00 | 108.0 |
| 2 | 135.7 | 39.5 | 63.9 | 2.08 | 6.98 | 91.7 |
| 3 | 140.2 | 48.0 | 75.0 | 2.62 | 6.17 | 101.8 |
| 4 | 152.1 | 52.3 | 88.1 | 2.89 | 10.42 | 112.5 |
| 5 | 132.2 | 36.7 | 62.4 | 2.14 | 7.47 | 97.5 |
| 6 | 147.1 | 45.2 | 78.9 | 2.86 | 9.25 | 92.4 |
| 7 | 147.5 | 47.4 | 76.2 | 3.14 | 8.78 | 95.4 |
| 8 | 130.6 | 38.4 | 61.8 | 2.03 | 5.31 | 77.2 |
| 9 | 154.9 | 48.2 | 87.2 | 2.91 | 10.69 | 80.8 |
| 10 | 142.4 | 42.6 | 74.1 | 2.33 | 11.15 | 76.7 |
| 11 | 136.5 | 38.4 | 69.6 | 1.98 | 7.77 | 49.9 |
| 12 | 162.0 | 58.7 | 95.6 | 3.29 | 3.35 | 58.0 |
| 13 | 148.9 | 42.4 | 80.6 | 2.74 | 10.11 | 82.4 |

**表 9.9(续): 儿童形态肺通气功能指标表**

| | 儿童形态 | | | 肺通气功能 | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 序号 | 身高 $(cm)X_1$ | 体重 $(kg)X_2$ | 胸围 $(cm)X_3$ | 肺活量 $(L)Y_1$ | 静息通气量 $(L)Y_2$ | 每分钟最大通气量 $(L)Y_3$ |
| 14 | 136.3 | 33.1 | 68.3 | 2.44 | 7.82 | 76.5 |
| 15 | 159.5 | 49.1 | 87.7 | 2.98 | 11.77 | 88.1 |
| 16 | 165.9 | 55.7 | 93.5 | 3.17 | 13.14 | 110.3 |
| 17 | 134.5 | 41.6 | 61.9 | 2.25 | 8.75 | 75.1 |
| 18 | 152.5 | 53.4 | 83.2 | 2.96 | 6.60 | 71.5 |
| 19 | 138.2 | 35.5 | 66.1 | 2.13 | 6.62 | 105.4 |
| 20 | 144.2 | 42.0 | 76.2 | 2.52 | 5.59 | 82.0 |
| 21 | 128.1 | 37.3 | 57.0 | 1.92 | 5.81 | 92.7 |
| 22 | 127.5 | 32.0 | 57.9 | 2.02 | 6.42 | 78.2 |
| 23 | 140.7 | 44.7 | 73.7 | 2.64 | 8.00 | 89.1 |
| 24 | 150.4 | 49.7 | 82.4 | 2.87 | 9.09 | 61.8 |
| 25 | 151.5 | 48.5 | 81.3 | 2.71 | 10.20 | 98.9 |
| 26 | 151.3 | 47.2 | 84.3 | 2.92 | 6.16 | 83.7 |
| 27 | 150.2 | 48.1 | 85.8 | 2.79 | 9.50 | 84.0 |
| 28 | 139.4 | 33.6 | 67.0 | 2.27 | 8.92 | 71.0 |
| 29 | 150.8 | 45.6 | 84.9 | 2.86 | 12.03 | 125.4 |
| 30 | 140.6 | 46.7 | 67.9 | 2.67 | 7.00 | 108.0 |
| 31 | 135.7 | 47.5 | 57.9 | 2.38 | 6.98 | 91.7 |
| 32 | 140.2 | 48.0 | 71.0 | 2.62 | 6.17 | 101.8 |
| 33 | 152.1 | 50.3 | 88.1 | 2.89 | 10.42 | 112.5 |
| 34 | 132.2 | 43.7 | 62.4 | 2.14 | 7.47 | 97.5 |
| 35 | 147.1 | 41.2 | 78.9 | 2.66 | 9.25 | 92.4 |
| 36 | 147.5 | 45.4 | 76.2 | 2.75 | 8.78 | 95.4 |
| 37 | 130.6 | 38.4 | 65.8 | 2.13 | 5.31 | 77.2 |
| 38 | 154.9 | 48.2 | 91.2 | 2.91 | 10.69 | 80.8 |
| 39 | 142.4 | 42.6 | 83.1 | 2.63 | 11.15 | 76.7 |
| 40 | 136.5 | 40.4 | 69.6 | 2.01 | 7.77 | 49.9 |

# 第十章　计算机模拟

在用传统的方法难以解决的问题中, 有很大一部分可以用概率统计模型进行描述. 由于这类模型难以作定量分析, 得不到解析结果, 或者有解析结果但工作量太大以至无法实现. 另外, 即便是确定性模型, 也有可能得不到解析的结果. 在这种情况下, 可以采用计算机模拟的方法来分析和解决问题.

本章介绍最基本的计算机模拟方法,和与计算机模拟密不可分的 Monte Carlo 方法.

## 10.1　概率分析与 Monte Carlo 方法

### 10.1.1　概率分析

概率分析是指用概率的方法来分析和讨论随机模型. 下面请看一个例子.

**例 10.1** (赶火车问题)

一列火车从 $A$ 站开往 $B$ 站, 某人每天赶往 $B$ 站上火车. 他已了解到火车从 $A$ 站到 $B$ 站的运行时间是服从均值为 *30* 分钟, 标准差为 *2* 分钟的正态随机变量. 火车大约下午 *13* 点离开 $A$ 站, 此人大约 *13:30* 达到 $B$ 站. 火车离开 $A$ 站的时刻及概率如表 *10.1* 所示. 此人到达 $B$ 站的时刻及概率如表 *10.2* 所示. 问他能赶上火车的概率是多少?

**表 10.1: 火车离开 A 站的时刻及概率**

| 火车离站时刻 | 13:00 | 13:05 | 13:10 |
|---|---|---|---|
| 概率 | 0.7 | 0.2 | 0.1 |

**表 10.2: 某人到达 B 站的时刻及概率**

| 人到站时刻 | 13:28 | 13:30 | 13:32 | 13:34 |
|---|---|---|---|---|
| 概率 | 0.3 | 0.4 | 0.2 | 0.1 |

**解**: 记 $T_1$ 为火车从 A 站出发的时刻, $T_2$ 为火车从 A 站到达 B 站运行的时间, $T_3$ 为此人到达 B 站的时刻. 因此, $T_1, T_2, T_3$ 均是随机变量, 且 $T_2 \sim N(30, 2^2)$, $T_1, T_3$ 的分布律由表 10.3 和表 10.4 所示.

**表 10.3: $T_1$ 的分布律**

| 时刻 $T_1$/ 分 | 0 | 5 | 10 |
|---|---|---|---|
| 概率 $p$ | 0.7 | 0.2 | 0.1 |

其中记 13 时为时刻 $t=0$.

**表 10.4: $T_3$ 的分布律**

| 时刻 $T_3$/ 分 | 28 | 30 | 32 | 34 |
|---|---|---|---|---|
| 概率 $p$ | 0.3 | 0.4 | 0.2 | 0.1 |

其中记 13 时为时刻 $t=0$.

通过分析可知，此人能及时赶上火车的充分必要条件是： $T_1+T_2>T_3$. 由此得到，此人赶上火车的概率为 $P\{T_1+T_2>T_3\}$. 上述分析方法称为概率分析.

还有许许多多的概率分析问题. 提到概率分析就必须提到 Monte Carlo（蒙特卡洛）方法，因为 Monte Carlo 方法是完成概率分析和计算机模拟的重要手段.

### 10.1.2 Monte Carlo 方法

Monte Carlo 方法，又称为 Monte Carlo 模拟，或统计试验方法或随机模拟等. 所谓模拟就是把某一现实的或抽象的系统的部分状态或特征，用另一个系统 (称为模型) 来代替或模仿. 在模型上作实验称为模拟实验，所构造的模型为模拟模型.

Monte Carlo 是摩纳哥国的世界著名赌城，第二次世界大战期间， Von Neuman (冯 · 诺依曼) 和 Ulam(乌拉姆) 将他们从事的与研制原子弹有关的秘密工作，以赌城 Monte Carlo 作为秘密代号的称呼. 他们的具体工作是对裂变物质的中子随机扩散进行模拟.

Monte Carlo 方法的基本思想是将各种随机事件的概率特征（概率分布、数学期望）与随机事件的模拟联系起来，用试验的方法确定事件的相应概率与数学期望. 因而， Monte Carlo 方法的突出特点是概率模型的解是由试验得到的，而不是计算出来的.

此外，模拟任何一个实际过程， Monte Carlo 方法都需要用到大量的随机数，计算量很大，人工计算是不可能的，只能在计算机上实现.

我们可用 Monte Carlo 方法实现在第一章介绍的 Buffon 掷针问题.

**例 10.2** (Buffon 掷针问题)

*在概率论中，著名的 Buffon 掷针问题就是用统计试验的方法求圆周率 $\pi$ 的典型代表. 现用模拟的方法重现 Buffon 掷针问题.*

**解**: 由第一章的例 1.2 可知，针与平行线相交的充分必要条件是

$$x \leq \frac{l}{2}\sin\theta.$$

Buffon 的投针试验在计算机上实现，需要作以下两个步骤:

(1) 产生随机数. 首先产生 $n$ 个相互独立的随机变量 $\theta, x$ 的抽样序列 $\theta_i, x_i$, $i = 1, 2, \cdots, n$, 其中 $\theta_i \sim U(0, \pi)$, $x \sim U(0, \frac{a}{2})$.

(2) 模拟试验. 检验不等式

$$x_i \leq \frac{l}{2}\sin\theta_i \tag{10.1}$$

是否成立. 若式 (10.1) 成立，表示第 $i$ 次试验成功 (即针与平行线相交). 设 $n$ 次试验中有 $k$ 次成功，则 $\pi$ 的估值为

$$\widehat{\pi} = \frac{2ln}{ak}, \tag{10.2}$$

其中 $a > l$, 均为预先给定.

将上述步骤编写成 R 模拟程序 (程序名: buffon.R)

```
buffon<-function(n, l=0.8, a=1){
   k<-0
   theta<-runif(n, 0, pi); x<-runif(n, 0, 1/2)
   for (i in 1:n){
      if (x[i]<= l/2*sin(theta[i]))
         k<-k+1
   }
   2*l*n/(k*a)
}
```

调用已编好的 R 程序 buffon.R, 进行模拟，取 $n = 100000$, $l = 0.8$, $a = 1$.

```
> source("buffon.R")
> buffon(100000, l=0.8, a=1)
[1] 3.142986
```

Buffon 的投针试验的模拟过程虽然简单，但基本反应了 Monte Carlo 方法求解实际问题的基本步骤. 大体需要有建模、模型改进、模拟实验和求解四个过程.

为了便于理解模型改进，这里用概率分析方法再讨论求 $\pi$ 的另一种模拟方法.

**例 10.3** 用概率分析方法进行模拟，计算圆周率 $\pi$ 的估计值.

**解**: 考虑服从 $(0,1)$ 区间上均匀分布的独立的随机变量 $X$ 与 $Y$, 因此，二维随机变量 $(X,Y)$ 的联合概率密度为

$$f(x,y)=\begin{cases}1, & 0<x<1,\ \ 0<y<1,\\ 0, & \text{其它}.\end{cases}$$

则 $P\left\{X^2+Y^2\le 1\right\}=\dfrac{\pi}{4}$.

考虑边长为 1 的正方形，以一个角 (点 $O$) 为圆心， 1 为半径的 $1/4$ 圆弧. 然后，在正方形内等概率地产生 $n$ 个随机点 $(x_i,y_i)$, $i=1,2,\cdots,n$, 即 $x_i$ 和 $y_i$ 是 $(0,1)$ 上均匀分布的随机数，如图 10.1 所示. 设 $n$ 个点中有 $k$ 个点落在 $1/4$

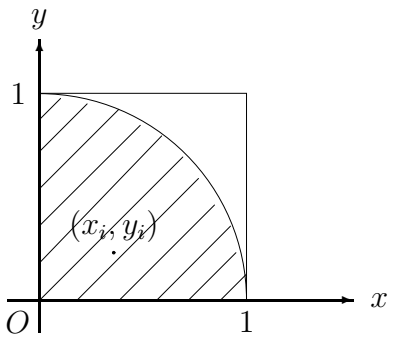



图 10.1: 用 Monte Carlo 方法求 $\pi$ 的估计值

圆内，即有 $k$ 个点 $(x_i,y_i)$ 满足 $x_i^2+y_i^2\le 1$. 则当 $n\to\infty$, 有如下关系，

$$\left(\frac{k}{n}\right)_{n\to\infty}\ \longrightarrow\ \frac{1/4\text{圆面积}}{\text{正方形面积}},\qquad \left(\frac{k}{n}\right)_{n\to\infty}\ \longrightarrow\ \frac{\pi}{4}.$$

因此， $\pi$ 的估计值为

$$\hat{\pi}=\frac{4k}{n}.$$

下面编写的模拟程序 (程序名： `MC1.R`)

```
MC1 <- function(n){
    k <- 0; x <- runif(n); y <- runif(n)
    for (i in 1:n){
       if (x[i]^2+y[i]^2 < 1)
          k <- k+1
    }
    4*k/n
}
```

其中 `runif()` 是产生均匀分布的随机数, 其使用方法为 `runif(n, a, b)` 产生区间 $n$ 个 $(a,b)$ 区间上均匀分布的随机数, 若 $a,b$ 值省缺, 则产生 $n$ 个 $(0,1)$ 区间上均匀分布的随机数. 调用 MC1 函数, 取 $n=100000$, 得到

```
>  source("MC1.R"); MC1(100000)
[1] 3.14268
```

上面讨论的用 Monte Carlo 方法求 $\pi$ 的方法, 本质上就是用 Monte Carlo 方法求定积分 $\int_0^1 \sqrt{1-x^2}dx$. 下面给出求定积分的一般方法.

**例 10.4** 用 *Monte Carlo* 方法求定积分

$$I=\int_a^b g(x)dx. \tag{10.3}$$

**解:** 图 10.2(a) 的阴影面积表示是定积分 (10.3) 的值. 为简化问题, 将函数限制在单位正方形 $(0\le x\le 1, 0\le y\le 1)$ 内, 如图 10.2(b) 所示. 只要函数 $g(x)$

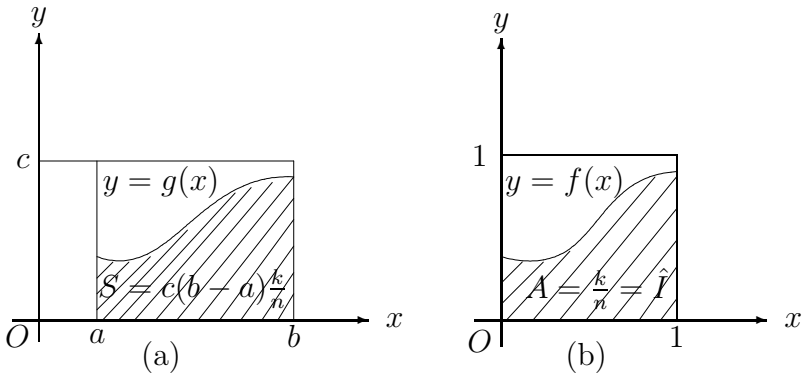



图 10.2: 用 Monte Carlo 方法求定积分的示意图

在区间 $[a,b]$ 内有界，则可以适当选择坐标轴的比例尺度，总可以得到图 10.2(b) 的形式.

现在只考虑图 10.2(b) 的情况，计算定积分

$$I=\int_0^1 f(x)dx. \tag{10.4}$$

令 $x,y$ 为相互独立的 $(0,1)$ 区间上均匀随机数，在单位正方形内随机的投掷 $n$ 个点 $(x_i,y_i)$, $i=1,2,\cdots,n$. 若第 $j$ 个随机点 $(x_j,y_j)$ 落于曲线 $f(x)$ 下的区域内 (图 10.2(b) 内有阴影的区域), 表明第 $j$ 次试验成功，这相应于满足概率模型

$$y_j\le f(x_j). \tag{10.5}$$

设成功的总点数有 $k$ 个，总的试验次数为 $n$, 则由强大数定律，有

$$\lim_{n\to\infty}\frac{k}{n}=p,$$

从而有

$$\hat{I}=\frac{k}{n}\approx p. \tag{10.6}$$

显然，概率 $p$ 即为图 10.2(b) 的面积 $A$. 从而，随机点落在区域 $A$ 的概率 $p$ 恰是所求积分的估值 $\hat{I}$.

综上所述，可以把 Monte Carlo 方法解题的一般过程归纳为以下三点.

(1) 构造问题的概率模型

对随机性质的问题，如中子碰撞、粒子扩散运动等，主要是描述和模拟运动的概率过程. 建立概率模型或判别式. 这一问题，在后面的应用中还将进一步讨论.

对确定性问题，如确定 $\pi$ 值，计算定积分，则需将问题转化为随机性问题，例如图 10.2(a) 计算连续函数 $g(x)$ 在区间 $[a,b]$ 的定积分，则是在 $c(b-a)$ 的有界区城内产生若干随机点，并计数满足不等式 $y_j\le g(x_j)$ 的点数，从而构成了问题的概率模型.

(2) 从已知概率分布抽样

从已知概率分布抽样，实际上是产生已知分布的随机数序列，从而实现对随机事件的模拟. 例如, 要得到估值 $\hat{I}$, 关键在于产生 $f(x)$ 的抽样序列 $f(x_1)$, $f(x_2)$, $\cdots$, $f(x_n)$, 即产生具有密度函数为 $f(x)$ 的随机序列.

(3) 建立所需的统计量

对求解的问题，用试验的随机变量 $k/n$ 作为问题解的估值，若 $k/n$ 的期望值恰好是所求问题的解，则所得结果为无偏估计，这种情况在 Monte Carlo 方法中用得最多. 除无偏估计外，有时也用极大似然估计、渐近估计等.

### 10.1.3 Monte Carlo 方法的精度分析

Monte Carlo 方法是以随机变量抽样的统计估值去推断概率分布的，抽样不是总体，这里就有一个误差估计的重要问题. Monte Carlo 方法所能达到的精度与其应用范围的大小紧密相关. 我们希望能以较少的试验次数 ( 即较低的费用 ) 得到较高的精度，下面讨论这一问题.

设有随机变量 $X$, 其抽样值为 $x_1, x_2, \cdots$, 现欲求其期望值 $\mathrm{E}(X)$, 可以有两种方法.

#### 1. 随机投点方法

随机投点方法 (见例 10.3 和例 10.4), 是进行 $n$ 次试验，当 $n$ 充分大时，以随机变量 $k/n$ 作为期望值 $\mathrm{E}(X)$ 的近似估值，即

$$\mathrm{E}(X) \approx \overline{p} = k/n.$$

其中 $k$ 是 $n$ 次试验中成功的次数.

若一次投点试验的成功概率为 $p$, 并以

$$X_i = \begin{cases} 1, & \text{表明试验成功}, \\ 0, & \text{表明试验失败}, \end{cases}$$

则一次试验成功的均值与方差为

$$\begin{aligned} \mathrm{E}(X_i) &= 1 \cdot p + 0 \cdot (1-p) = p, \\ \mathrm{Var}(X_i) &= 1^2 \cdot p + 0^2 \cdot (1-p) - p^2 = p(1-p). \end{aligned}$$

若进行 $n$ 次试验，其中 $k$ 次试验成功，则 $k$ 为具有参数为 $(n, p)$ 的二项分布. 此时，随机变量 $k$ 的估值为

$$\overline{p} = k/n.$$

显然，随机变量 $\overline{p}$ 的均值和方差满足

$$\mathrm{E}(\overline{p}) = \mathrm{E}\left(\frac{k}{n}\right) = \frac{1}{n}\mathrm{E}(k) = p, \qquad \mathrm{Var}(\overline{p}) = \frac{p(1-p)}{n}.$$

因而标准差 $S = \sqrt{p(1-p)/n}$. 当 $p = 0.5$ 时，标准差达到最大.

现在讨论，当试验次数 $n$ 取多大时，不等式 $|\overline{p} - p| < \varepsilon$ 的概率不小于 $1-\alpha$，即

$$P\{|\overline{p} - p| < \varepsilon\} = 1 - \alpha. \tag{10.7}$$

这就是说，等式 (10.7) 的置信度为 $\alpha$, 其精度为 $\varepsilon$. 例如，若取 $\alpha = 0.05, \varepsilon = 0.01$, 则在 100 次试验中，估值 $\overline{p}$ 与真值 $p$ 之差，大约有 95 次不超过 1% 的误差.

由中心极限定理可知, 当 $n \to \infty$ 时，$(\overline{p} - p)/S$ 渐近于标准正态分布 $N(0,1)$, 因此有

$$P\left\{\frac{|\overline{p} - p|}{S} < Z_{\alpha/2}\right\} = 1 - \alpha, \tag{10.8}$$

其中 $Z_{\alpha/2}$ 正态分布的上 $\alpha/2$ 分位点.

比较式 (10.7) 和式 (10.8), 得到

$$\varepsilon = Z_{\alpha/2}S = Z_{\alpha/2}\sqrt{p(1-p)/n},$$

从则有

$$n \geq \frac{p(1-p)}{\varepsilon^2} Z_{\alpha/2}^2. \tag{10.9}$$

例 10.3 是用随机投点法来估计圆周率 $\pi$, 下面来计算它需要多少次试验才能达到精度要求.

**例 10.5** *(续例 10.3) 考虑置信度为 5%, 精度要求为 0.01 的情况下，求例 10.3 所需的试验次数.*

**解**: 由题意知 $\alpha = 0.05$, 因为 $\pi/4$ 就是模拟的期望值，得到 $p = \pi/4 = 0.785$, $\varepsilon = 0.01/4$. 查表或经计算 (`qnorm(1-0.05/2)`) 得到 $Z_{\alpha/2} = 1.96$, 因此

$$n = \left\lfloor \frac{p(1-p)}{\varepsilon^2} Z_{\alpha/2}^2 \right\rfloor = \left\lfloor \frac{0.785 \times 0.215 \times 1.96^2}{(0.01/4)^2} \right\rfloor = 103739.$$

其中 $\lfloor \cdot \rfloor$ 表示上取整.

因此，作 100000 次模拟，得到 $\pi$ 的模拟值与真实值有 95% 的可能误差在 1% 以内.

**表 10.5: 投点算法的试验次数** ($\alpha = 0.05$)

| $p$ | $\varepsilon = 0.05$ | $\varepsilon = 0.01$ | $\varepsilon = 0.005$ | $\varepsilon = 0.001$ |
|---|---|---|---|---|
| 0.1(0.9) | 140 | 3500 | 14000 | 350000 |
| 0.2(0.8) | 250 | 6200 | 25000 | 620000 |
| 0.3(0.7) | 330 | 8100 | 33000 | 810000 |
| 0.4(0.6) | 370 | 9300 | 37000 | 930000 |
| 0.5(0.5) | 390 | 9600 | 39000 | 960000 |

按公式 (10.9), 可得到不同精度 $\varepsilon$ 和不同概率 $p$ 情况下随机投点方法的试验次数, 如表 10.5 所示.

**2. 平均值方法**

平均值方法是用 $n$ 次试验的平均值

$$\overline{x} = \frac{1}{n}(x_1 + x_2 + \cdots + x_n) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i,$$

作为 $X$ 的期望值 $\mathrm{E}(X)$ 的近似估值.

设有 $n$ 个独立同分布的随机变量序列 $x_1, x_2, \cdots, x_n$, 每个随机变量的均值为 $\mu$, 方差为 $\sigma^2$, 则

$$\frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}}$$

渐近地服从标准正态分布, 也就是说, 当 $n \to \infty$ 时, 有

$$P\left\{\left|\frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}}\right| \le Z_{\alpha/2}\right\} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-Z_{\alpha/2}}^{Z_{\alpha/2}} \exp\left(-x^2/2\right) dx = 1 - \alpha,$$

或者

$$P\left\{|\overline{x} - \mu| \le Z_{\alpha/2}\sqrt{\sigma^2/n}\right\} = 1 - \alpha.$$

同样, 若要求 $|\overline{x} - \mu| \le \varepsilon$, 则

$$\varepsilon = Z_{\alpha/2}\sqrt{\sigma^2/n},$$

从而有

$$n \ge Z_{\alpha/2}^2\sigma^2/\varepsilon^2. \tag{10.10}$$

式 (10.10) 即为平均值方法在给定 $\alpha$ 和 $\varepsilon$ 下所需的试验次数.

在进行计算时，通常并不知道方差 $\sigma^2$, 一般用其估计值代替. 即先作 $n_0$ 次试验，得到方差 $\sigma^2$ 的估计值

$$S^2 = \frac{1}{n_0 - 1} \sum_{i=1}^{n_0} (x_i - \overline{x})^2.$$

在得到 $S^2$ 后，用 $S^2$ 近似式 (10.10) 中的 $\sigma^2$, 则平均值方法的试验次数为

$$n \geq Z_{\alpha/2}^2 S^2 / \varepsilon^2. \tag{10.11}$$

若 $n > n_0$, 需要作补充试验.

**例 10.6** *用平均值法估计圆周率 $\pi$, 并考虑置信度为 $5\%$, 精度要求为 $0.01$ 的情况下所需的试验次数.*

**解**: 事实上, 计算 $\pi/4$, 本质上就是用概率的方法计算积分 $\int_0^1 \sqrt{1-x^2}dx$. 也就是说，随机变量 $X \sim U[0,1]$, 令 $g(X) = \sqrt{1-X^2}$, 其期望值为

$$E[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx = \int_0^1 \sqrt{1-x^2}dx = \frac{\pi}{4},$$

因此,

$$\frac{\pi}{4} = E[g(X)] \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sqrt{1-x_i^2}, \tag{10.12}$$

其中 $x_i$ 是 [0,1] 区间上均匀分布的随机数.

按式 (10.12) 编写 R 程序 (程序名： `MC1_2.R`)

```
MC1_2 <- function(n){
    x <- runif(n)
    4*sum(sqrt(1-x^2))/n
}
```

作 10 万次模拟,

```
>  source("MC1_2.R"); MC1_2(100000)
[1] 3.141816
```

下面估计所需的试验次数. 由式 (10.10) 可知, 其关键是求方差 $\sigma^2$. 由统计知识得到

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= E[g(X)^2] - (E[g(X)])^2 = \int_0^1 (1-x^2)dx - \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 \\ &= \frac{2}{3} - \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 = 0.04981641\end{aligned}$$

此时, $\alpha = 0.05$, $Z_{\alpha/2} = 1.96$, $\varepsilon = 0.01/4$, 所以,

$$n = \left\lfloor \frac{Z_{\alpha/2}^2 \sigma^2}{\varepsilon^2} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{1.96^2 \times 0.04981641}{(0.01/4)^2} \right\rfloor = 30620.$$

可见, 达到同样精度的情况下, 用平均值法的随机试验次数只是随机投点法的 1/3. 从这个例子可以看出, 平均值法要优于随机投点法.

从例 10.6 的计算过程, 可以得到用平均值法计算一般定积分的方法.

如要计算定积分 $\int_a^b g(x)dx$. 令 $y = (x-a)/(b-a)$, 则有 $dy = dx/(b-a)$,

$$I = \int_a^b g(x)dx = \int_0^1 g(a+(b-a)y)(b-a)dy = \int_0^1 h(y)dy,$$

其中 $h(y) = (b-a)g(a+(b-a)y)$.

若 $Y \sim U(0,1)$, 则

$$E[h(Y)] = \int_{-\infty}^{\infty} h(y)f(y)dy = \int_0^1 h(y)dy = I,$$

所以,

$$I \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(y_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(b-a)g(a+(b-a)y_i),$$

其中 $y_i$ 是 [0,1] 区间上均匀分布的随机数.

综上讨论, 可归纳如下:

(1) Monte Carlo 方法的估值精度 $\varepsilon$ 与试验次数 $n$ 的平方根成反比, 即 $\varepsilon \propto 1/\sqrt{n}$. 若精度 $\varepsilon$ 提高 10 倍, 则试验次数 $n$ 需要增加 100 倍, 这意味着解题的时间要慢 100 倍. 故收敛速度慢是 Monte Carlo 方法的主要缺点.

(2) 式 (10.9) 和式 (10.11) 表明: 当 $\varepsilon$ 一定时, 试验次数 $n$ 取决于方差的数值, 即 $n \propto S^2$. 因而降低方差是加速 Monte Carlo 方法收敛的主要途径.

(3) Monte Carlo 方法的精度估计具有概率性质. 它并不能断言精度一定小于 $\varepsilon$, 而只是表明, 计算精度以接近于 1 的概率不超过 $\varepsilon$.

## 10.2 随机数的产生

在上一节介绍的 Monte Carlo 方法中，需要用到随机数，在这一节介绍随机数产生的方法.

随机数产生的方法大致可分为三类. 第一类是利用专门的随机数表. 有一些已制备好的随机数表可供使用，原则上可以把随机数表输入到计算机中储存起来以备使用，但由于计算时常常需要大量的随机数而计算机的储存量有限，因此这种方法一般不采用. 第二类是用物理装置即随机数发生器产生随机数，但其成本太高. 第三类是用专门的数学方法用计算机计算出来的. 这些数一般是按一定规律递推计算出来的，因此它们不是真正的随机数（称为伪随机数），所得的数列经过一定时间会出现周期性的重复. 但是，如果计算方法选得恰当，它们是可以同真正的随机数有近似的随机特征. 它的最大优点是计算速度快，占用内存小，并可用计算机来产生和检验.

下面我们介绍几种常用的随机数产生的方法.

### 10.2.1 均匀分布随机数的产生

#### 1. 乘同余法

用以产生 (0, 1) 均匀分布随机数的递推公式为

$$x_i = \lambda x_{i-1} (\mathrm{mod}\ M) \qquad i = 1, 2, \cdots, \tag{10.13}$$

式中 $\lambda$ 是乘因子（简称乘子），$M$ 是模数，当给定一个初始值 $x_0$ 之后，就可以利用式 (10.13), 计算出序列 $x_1, x_2, \cdots, x_k, \cdots$. 再取

$$r_i = \frac{x_i}{M}, \tag{10.14}$$

则 $r_i$ 就是均匀分布的第 $i$ 个随机数.

由于 $x_i$ 是除数为 $M$ 的被除数的余数，所以有 $0 \leq x_i \leq M$, 则 $0 \leq r_i \leq 1$. 因此序列 $\{r_i\}$ 是 (0, 1) 区间上均匀分布. 由式 (10.13) 和式 (10.14) 可以看出，每一个 $x_i$ 、 $r_i$ 至多有 $M$ 个互异的值，因此 $x_i$ 、 $r_i$ 是有周期 $L$ 的，即 $L \leq M$. 因此 $\{r_i\}$ 不是真正的随机数列. 但是，当 $L$ 充分大，则在一个周期内的数可能经受住独立性和均匀性检验，而这些完全取决于参数 $x_0$ 、 $\lambda$ 、 $M$ 的选择. 一些文献推荐下列参数，取 $x_0 = 1$ 或正奇数， $M = 2^k$, $\lambda = 5^{2q+1}$, 其中 $k$, $q$ 都

是正整数. 其 $k$ 愈大, 则 $L$ 愈大. 若计算机位数为 $n$, 一般取 $k \leq n$, $q$ 是满足 $5^{2q+1} < 2^n$ 的最大整数.

**2. 混合同余法**

混合同余法的递推公式为

$$x_i = (\lambda x_i + c)(\mathrm{mod}\ M), \qquad i = 1, 2, \cdots, \tag{10.15}$$

$$r_i = \frac{x_i}{M}. \tag{10.16}$$

通过适当的选取参数可以改善伪随机数的统计性质. 例如, 若 $c$ 取正整数, $M = 2^k$, $\lambda = 4q + 1$, $x_0$ 取任意非负整数, 可产生随机性好, 且有最大周期 $L = 2^k$ 的序列 $\{r_i\}$.

### 10.2.2 均匀随机数的检验

由于算法产生的随机数是伪随机数, 因此需要对产生的伪随机数进行统计检验, 下面介绍两种常用的检验方法.

**1. 参数检验**

若总体 $X$ 服从 $(0, 1)$ 区间上的均匀分布, 则

$$\mathrm{E}(X) = \frac{1}{2}, \quad \mathrm{Var}(X) = \mathrm{E}(X^2) - [\mathrm{E}(X)]^2 = \frac{1}{12},$$

$$\mathrm{E}(X^2) = \frac{1}{3}, \quad \mathrm{Var}(X^2) = \mathrm{E}(X^4) - \left[\mathrm{E}(X^2)\right]^2 = \frac{4}{45}.$$

若 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 是 $n$ 个来自总体 $X$ 的独立的观测值, 令

$$\overline{r} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} r_i, \qquad \overline{r^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} r_i^2,$$

则它们的均值和方差分别为

$$\mathrm{E}(\overline{r}) = \frac{1}{2}, \quad \mathrm{Var}(\overline{r}) = \frac{1}{12n}, \quad \mathrm{E}\left(\overline{r^2}\right) = \frac{1}{3}, \quad \mathrm{Var}\left(\overline{r^2}\right) = \frac{4}{45n}$$

由中心极限定理, 当 $n$ 较大时统计量

$$u_1 = \frac{\overline{r} - \mathrm{E}(\overline{r})}{\sqrt{\mathrm{Var}(\overline{r})}} = \sqrt{12n}\left(\overline{r} - \frac{1}{2}\right), \tag{10.17}$$

$$u_2 = \frac{\overline{r^2} - \mathrm{E}\left(\overline{r^2}\right)}{\sqrt{\mathrm{Var}\left(\overline{r^2}\right)}} = \frac{1}{2}\sqrt{45n}\left(\bar{r} - \frac{1}{3}\right), \tag{10.18}$$

渐近地服从标准正态分布 $N(0,1)$. 当给定显著性水平 $\alpha$ 后，即可根据正态分布表确定的临界值，判断 $\bar{r}$ 与 $X$ 的均值 $\mathrm{E}(X)$ 和 $\overline{r^2}$ 与 $X^2$ 的均值 $\mathrm{E}(X^2)$ 的差异是否显著，从而决定能否把 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 看成来自总体为区间 $(0,1)$ 上均匀分布的随机数 $X$ 的 $n$ 个独立的取值. 检验时，一般可取显著性水平 $\alpha = 0.05$, 此时临界值为 1.96, 即当 $|u_i| > 1.96$ 时，认为有显著差异.

**2. 均匀性检验**

随机数的均匀性检验又称频率检验，它用来检验经验频率和理论频率是否有显著性差异.

把区间 [0, 1) 分成 $k$ 等分，以 $\left[\dfrac{i-1}{k}, \dfrac{i}{k}\right)(i = 1, 2, \cdots, k)$ 表示第 $i$ 个子区间. 如 $r_s$ 是 [0,1) 上均匀分布的随机数 $X$ 的一个取值，则它落在每个子区间的概率均应等于这些子区间的长度 $\dfrac{1}{k}$, 故 $n$ 个点中落在第 $i$ 个子区间上的平均数为 $m_i = np_i = \dfrac{n}{k}$, 设实际上 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 中属于第 $i$ 个子区间的数目为 $n_i$, 则统计量

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{k} \frac{(n_i - m_i)^2}{m_i} = \frac{k}{n} \sum_{i=1}^{k} \left(n_i - \frac{n}{k}\right)^2, \tag{10.19}$$

渐近地服从自由度为 $k-1$ 的 $\chi^2$ 分布. 据此进行显著性检验，通常取显著性水平 $\alpha = 0.05$, 由自由度为 $k-1$ 的 $\chi^2$ 分布表查出临界值 $\chi^2_{0.05}(k-1)$. 如果 $\chi^2 > \chi^2_{0.05}(k-1)$, 则拒绝均匀性假设.

**3. 独立性检验**

独立性检验主要检验随机数 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 中前后的统计相关性是否显著. 我们知道，两个随机变量的相关系数反映了它们之间的线性相关程度. 若两个随机变量相互独立，则它们的相关系数必为 0(反之不一定). 因此，可用相关系数来检验随机变量的独立性.

给定随机数 $r_1, r_2, \cdots, r_n$, 计算前后相距为 $k$ 的样本的相关系数

$$\rho_k = \left(\frac{1}{n-k} \sum_{i=1}^{n-k} r_i r_{i+k} - (\overline{r})^2\right) \Big/ S^2, \quad k = 1, 2, \cdots, \tag{10.20}$$

其中 $S^2 = \dfrac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (r_i - \overline{r})^2$.

对若干个不同的 $k$ 值做检验，提出原假设 $H_{0k}:\ \rho_k = 0$. 若假设成立，则当 $n-k$ 充分大时，统计量 $\rho_k$ 渐近于标准正态分布 $N(0,1)$. 在给定显著性水平下，若拒绝原假设，则可认为 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 有一定的线性相关性，则它们不是相互独立的.

随机数的统计检验除上述三种检验外，还有其它的检验方法，还可以用到前面章节讲过的参数或非参数检验方法，这里就不一一介绍了.

### 10.2.3 任意分布随机数的产生

#### 1. 离散型随机变量的情形

设随机变量 $X$ 具有分布律 $P\{X = x_i\} = p_i, i = 1, 2, \cdots$. 令 $p^{(0)} = 0$, $p^{(i)} = \sum\limits_{j=1}^{i} p_j$, $i = 1, 2, \cdots$, 将 $\{p^{(i)}\}$ 作为区间 $(0,1)$ 上的分位点. 设 $r$ 是区间 $(0,1)$ 上均匀分布的随机变量，当且仅当 $p^{(i-1)} < r \le p^{(i)}$ 时，令 $X = x_i$, 则

$$P\{p^{(i-1)} < r \le p^{(i)}\} = P\{X = x_i\} = p^{(i)} - p^{(i-1)} = p_i, \quad i = 1, 2, \cdots.$$

具体的执行过程是，每产生 $(0,1)$ 区间上的一个随机数 $r$, 若 $p^{(i-1)} < r \le p^{(i)}$, 则令 $X = x_i$.

**例 10.7** 产生具有分布律

| $X = x_i$ | 0 | 1 | 2 |
|---|---|---|---|
| $p_i$ | 0.3 | 0.3 | 0.4 |

的离散型随机变量 $X$ 的随机数.

**解**: 设 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 是 $(0,1)$ 上均匀分布的随机数，令

$$x_i = \begin{cases} 0, & 0 < r_i \le 0.3, \\ 1, & 0.3 < r_i \le 0.6, \\ 2, & 0.6 < r_i \le 1, \end{cases}$$

则 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 是具有 $X$ 的分布律的随机数.

**例 10.8** 产生 *Possion* 分布的随机数

**解**：Possion 分布是离散型分布， Possion 分布的分布律为

$$P\{X=k\}=\frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!},\qquad k=0,1,2,\cdots, \tag{10.21}$$

因此，由 $(0,1)$ 区间上均匀分布产生的随机数 $r$, 并给出参数 $\lambda$ 值之后，可由

$$e^{-\lambda}\sum_{j=0}^{k-1}\frac{\lambda^j}{j!}<r\le e^{-\lambda}\sum_{j=0}^{k}\frac{\lambda^j}{j!},\quad k=0,1,2,\cdots, \tag{10.22}$$

确定出 $k$ 值，并令 $X=k$, 则 $X$ 为具有 Possion 分布 (10.21) 的随机数.

**2. 连续型随机变量的情形**

一般地讲，对具有给定分布的连续型随机变量 $X$, 均可利用 $(0,1)$ 区间上均匀分布的随机数来产生分布的随机数，其中最常用的方法是反函数法.

设连续型随机变量 $X$ 的概率密度函数为 $f(x)$, 令

$$r=\int_{-\infty}^{x}f(t)dt,$$

则 $r$ 为 $(0,1)$ 区间上均匀分布的随机变量. 当给出了 $(0,1)$ 区间上的均匀随机数 $r_1,r_2,\cdots$ 时，可根据方程

$$r_i=\int_{-\infty}^{x_i}f(t)dt,\quad i=1,2,\cdots, \tag{10.23}$$

解出 $x_1,x_2,\cdots$. 此时 $x_1,x_2,\cdots$ 可作为随机变量 $X$ 的随机数.

**例 10.9** 产生参数为 $\lambda$ 的指数分布的随机数.

**解**：由于指数分布的概率密度为 $f(x)=\lambda e^{-\lambda x}(x>0)$, 由公式 (10.4) 得到

$$r_i=\int_0^{x_i}\lambda e^{-\lambda t}dt=1-e^{-\lambda x_i},\quad i=1,2,\cdots,$$

即

$$x_i=-\frac{1}{\lambda}\ln(1-r_i),\quad i=1,2,\cdots.$$

由于 $1-r_i$ 与 $r_i$ 同分布，故上式可简化为

$$x_i=-\frac{1}{\lambda}\ln r_i,\quad i=1,2,\cdots. \tag{10.24}$$

反函数方法是一种普通的方法，但是当反函数难以求得时，此方法不宜使用.

### 10.2.4 正态分布随机数的产生

这里介绍两种产生正态分布随机数的方法.

**1. 极限近似法**

设 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 是 $(0,1)$ 区间上 $n$ 个独立的均匀分布的随机数，由中心极限定理得到

$$x = \frac{\sum_{i=1}^{n} r_i - n/2}{\sqrt{n/12}} \tag{10.25}$$

近似地服从正态分布 $N(0,1)$. 为了保证一定的精度，式 (10.25) 中的 $n$ 应取得足够大，一般大约取 $n = 10$ 左右，为方便起见，可取 $n = 12$. 此时，(10.25) 有最简单的形式

$$x = \sum_{i=1}^{12} r_i - 6. \tag{10.26}$$

当 $r_i$ 是 $(0,1)$ 上的随机数，则 $1 - r_i$ 也是 $(0,1)$ 上的随机数，因此式 (10.26) 可改写为

$$x = \sum_{i=1}^{6} r_i - \sum_{i=7}^{12} r_i. \tag{10.27}$$

若随机数 $x$ 服从 $N(0,1)$ 时，令

$$y = \sigma x + \mu, \tag{10.28}$$

则 $y$ 是正态 $N(\mu, \sigma^2)$ 的随机数. 由此可以得到任意参数 $\mu, \sigma^2$ 的正态分布的随机数.

**2. 坐标变换法**

可以证明，有如下关系，当 $r_1, r_2$ 是两个相互独立的 $(0,1)$ 区间上均匀分布的随机数时，作变换

$$x_1 = \sqrt{-2\ln r_1}\cos(2\pi r_2), \quad x_2 = \sqrt{-2\ln r_1}\sin(2\pi r_2). \tag{10.29}$$

则 $x_1, x_2$ 是两个独立的标准正态分布 $N(0,1)$ 的随机数. 再由式 (10.28), 可以得到任意参数的正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$ 的两个独立的随机数.

### 10.2.5 用 R 软件生成随机数

前面讲了各种产生随机数的方法，实际上，有很多软件可以自动生成各种分布的随机数．现以 R 软件为例，介绍用计算机软件生成随机数的方法．

在 R 软件中列出了各种分布 (见第 3 章的表 3.1), 在这些分布的函数前加 r, 则表示是生成该分布的随机数．如

(1) runif — 产生均匀分布的随机数，参数为 $n, a, b$, 其中 $n$ 为随机数的个数， $a, b$ 为区间 $(a, b)$ 端点值，当 $a, b$ 省缺时，为 (0,1) 区间上的随机数．

(2) rnorm — 产生正态分布的随机数，参数为 $n, \mu, \sigma$, 其中 $n$ 为随机数的个数， $\mu$ 为均值， $\sigma$ 为标准差，当 $\mu, \sigma$ 省缺时，为标准正态分布 $N(0, 1)$ 的随机数．

(3) rpois — 产生 Poisson 分布的随机数，参数为 $n, \lambda$, 其中 $n$ 为随机数的个数， $\lambda$ 为 Poisson 分布的参数．

R 软件还可以产生其他分布的随机数，这里就不一一列举了．

## 10.3 系统模拟

系统模拟是研究系统的重要方法．对于一个结构复杂的系统，要建立一个数学模型来描述它是非常困难的，甚至是做不到的．即使能构造出数学模型，但由于结构复杂，采用解析的方法得到模型的解也并非易事，或者根本得不到解析解．有些系统，虽然结构并不复杂，但其内部机理有不明确的“黑箱”系统，因此无法采用解析的方法来分析问题．对于这类的系统，采用模拟的方法不失为一种求解的好方法．

### 10.3.1 连续系统模拟

状态随着时间连续变化的系统，称为连续系统．我们知道，电子计算机的工作状态是离散化和数字化的．因此，对连续系统的计算机模拟只能是近似的，获得的是系统状态在一些离散抽样点上的数值．不过，只要这种近似达到一定的精度，也就可以满足要求了．

连续系统模拟的一般方法是首先建立系统的连续模型，然后转化为离散模型并对该模型进行模拟．现举例说明．

**例 10.10** (追逐问题) 在正方形 $ABCD$ 的四个顶点各有一人. 在某一时刻, 四人同时出发以匀速 $v$ 走向顺时针方向的下一个人. 如果他们的方向始终保持对准目标, 则最终将按螺旋状曲线汇合于中心点 $O$. 试求出这种情况下每个人的轨迹.

**解**: 这一问题的模拟方法是, 建立平面直角坐标系, 以时间间隔 $\Delta t$ 进行采样, 在每一时刻 $t$ 计算每个人在下一时刻 $t+\Delta t$ 时的坐标. 不妨设甲的追逐对象是乙, 在时间 $t$, 甲的坐标为 $(x_1, y_1)$, 乙的坐标为 $(x_2, y_2)$, 那么甲在 $t+\Delta t$ 时的坐标为 $(x_1 + v\Delta t\cos\theta, y_1 + v\Delta t\sin\theta)$, 其中

$$\cos\theta = \frac{x_2 - x_1}{d}, \quad \sin\theta = \frac{y_2 - y_1}{d}, \quad d = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}.$$

选取足够小的 $\Delta t$, 模拟到甲、乙的距离小于 $v\Delta t$ 为止.

以下是模拟的 R 程序 (程序名: `trace.R`), ABCD 的四个顶点的初始位置为 $A(0,1)$, $B(1,1)$, $C(1,0)$, $D(0,0)$.

```
#### 画出 A, B, C, D 和 O 五点的位置, 再作标记
plot(c(0,1,1,0), c(0,0,1,1), xlab =" ", ylab = " ")
text(0, 1, labels="A", adj=c( 0.3, 1.3))
text(1, 1, labels="B", adj=c( 1.5, 0.5))
text(1, 0, labels="C", adj=c( 0.3, -0.8))
text(0, 0, labels="D", adj=c(-0.5, 0.1))
points(0.5,0.5); text(0.5,0.5,labels="O",adj=c(-1.0,0.3))
#### 将计算出的各点位置存入矩阵 X, Y 中,
#### X 是 ABCD 四点的 x 值, Y 是 ABCD 四点的 y 值
delta_t<-0.01; n=110
x<-matrix(0, nrow=5, ncol=n); x[,1]<-c(0,1,1,0,0)
y<-matrix(0, nrow=5, ncol=n); y[,1]<-c(1,1,0,0,1)
d<-c(0,0,0,0)
for (j in 1:(n-1)){
   for (i in 1:4){
      d[i]<-sqrt((x[i+1, j]-x[i,j])^2+(y[i+1, j]-y[i,j])^2)
      x[i,j+1]<-x[i,j]+delta_t*(x[i+1,j]-x[i,j])/d[i]
      y[i,j+1]<-y[i,j]+delta_t*(y[i+1,j]-y[i,j])/d[i]
   }
```

```
    x[5,j+1]<-x[1, j+1]; y[5, j+1]<-y[1, j+1]
}
#### 画出相应的曲线
for (i in 1:4) lines(x[i,], y[i,])
```

连接四个人在各时刻的位置，就得到所求的轨迹，其图形如图 10.3 所示.

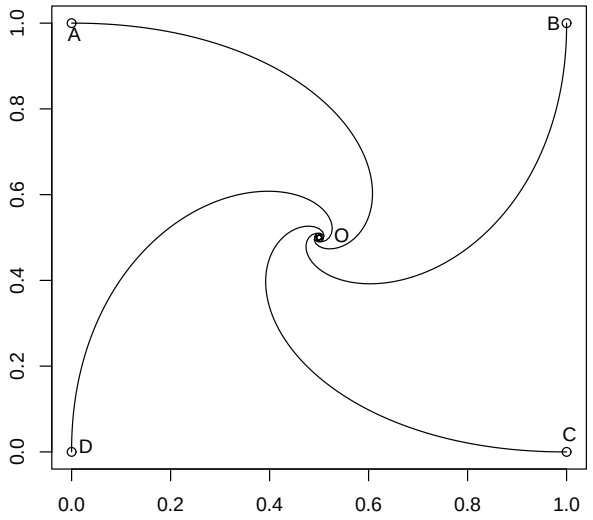



图 10.3: 追逐问题

连续系统的描述常常用到常微分方程或微分方程组，而求解方法则需要用求解微分方程的数值方法，如 Runge–Kutta 法等. 有关连续系统的模拟的进一步讨论，大家可以参见有关书籍，这里就不论述了.

### 10.3.2 离散系统模拟

离散系统是指系统状态只在有限的时间点，或无限但可数的时间点上发生变化的系统. 假设离散系统状态的变化是在一个时间点上瞬间完成的.

**例 10.11** *用模拟的方法求解例 10.1.*

**解**：设

$T_1$ — 火车从 A 站出发的时刻；

$T_2$ — 火车从 A 站到 B 站的运行时间；

$T_3$ — 某人到达 B 站的时刻.

该人能赶上火车的充分必要条件是 $T_1 + T_2 > T_3$.

假设 $T_1, T_2, T_3$ 均是随机变量，且 $T_2 \sim N(30, 2^2)$, $T_1, T_3$ 的分布律由表 10.3 和表 10.4 所示.

设 $r_1, r_2$ 是 (0,1) 区间上均匀分布的随机数，则 $T_1$ 和 $T_3$ 的分布律的模拟公式为

$$t_1 = \begin{cases} 0, & 0 < r_1 \le 0.7, \\ 5, & 0.7 < r_1 \le 0.9, \\ 10, & 0.9 < r_1 \le 1. \end{cases} \qquad t_3 = \begin{cases} 28, & 0 < r_2 \le 0.3, \\ 30, & 0.3 < r_2 \le 0.7, \\ 32, & 0.7 < r_2 \le 0.9, \\ 34, & 0.9 < r_2 \le 1. \end{cases}$$

则 $t_1$ 和 $t_3$ 可以看成 $T_1, T_3$ 的一个观察值.

令 $t_2$ 是服从正态分布 $N(30, 2^2)$ 的随机数，则将 $t_2$ 看成火车运行时间 $T_2$ 的一个观察值.

在每次试验中，产生两个 $U(0,1)$ 的随机数 $t_1, t_3$，一个 $N(30, 2^2)$ 的随机数 $t_2$，当 $t_1 + t_2 > t_3$，认为试验成功 (能够赶上火车). 若在 $n$ 次试验中，有 $k$ 次成功，则用频率 $k/n$ 作为此人赶上火车的概率. 当 $n$ 很大时，频率值与概率值近似相等.

以下是求解过程的 R 程序 (程序名： MC2.R).

```
MC2<-function(n){
   r1<-runif(n); r2<-runif(n); t2<-rnorm(n,30,2)
   t1<-array(0,dim=c(1,n)); t3<-t1;
   for(i in 1:n){
      if (r1[i]<=0.7){
          t1[i]<-0
      }else if (r1[i]<=0.9){
          t1[i]<-5
      }else
          t1[i]<-10
   }
   for(i in 1:n){
      if (r2[i]<=0.3){
          t3[i]<-28
```

```
        }else if (r2[i]<=0.7){
            t3[i]<-30
        }else if (r2[i]<=0.9){
            t3[i]<-32
        }else
            t3[i]<-34
    }
    k<-0
    for(i in 1:n)
        if (t1[i]+t2[i]>t3[i])  k<-k+1
    k/n
}
```

作一万次试验，得到

```
> source("MC2.R"); MC2(10000)
[1] 0.6306
```

此人赶上火车的概率大约是 0.63.

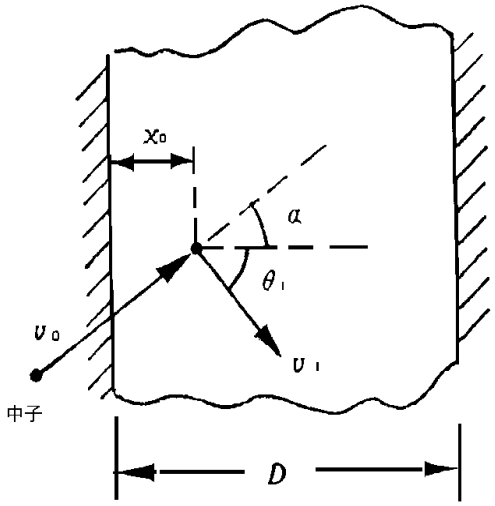
**例 10.12** *核反应堆屏蔽层设计问题.*

**解**：核反应堆屏蔽层是用一定厚度的铅 (Pb), 把反应堆四周包围起来，用以阻挡或减弱反应堆发出的各种射线. 在各种射线中, 中子对人体伤害极大, 因此，屏蔽设计，主要是了解中子穿透屏蔽的百分比 (或概率), 这对反应堆的安全运行是至关重要的. 首先考虑一个中子进入屏蔽层后运动的物理过程：假定屏蔽层是理想的均匀平板，中子以初速 $v_0$ 和方向角 $\alpha$ 射入屏蔽层内 (见图 10.4), 运动一段距离后，在 $x_0$ 处与铅核碰撞之后，中子获得新的速度及方向 $(v_1, \theta_1)$, 再运动一段距离后，与铅核第二次碰撞，并获得新的状态 $(v_2, \theta_2)$ 等等，经若干次碰撞后，发生以下情况之一而终止运动过程：

(1) 弹回反应堆；(2) 穿透屏蔽层；(3) 第 $i$ 次碰撞后，中子被屏蔽层吸收.

下面对问题做若干简化与假设：

(1) 假定屏蔽层平行板的厚度为 $D = 3d$, 其中 $d$ 为两次碰撞之间中子的平均游动距离；每次碰撞后中子因损失一部分能量而速度下降，假设在第 10 次碰撞后，中子速度下降到某一很小的数值而终止运动 (被吸收). 由于对穿透屏蔽层的中子感兴趣，故用 $(x_i, \theta_i)$ 描述第 $i$ 次碰撞后中子的运动状态，其中 $x_i$ 为中子在




$\alpha$ — 中子入射角， $D$ — 屏蔽层厚度

$\theta_1$ — 中子第一次碰撞弹射角

图 10.4: 中了穿入屏蔽层的运动

$x$ 轴上的位置， $\theta_i$ 中子运动的方向与 $x$ 轴的夹角.

(2) 假定中子在屏蔽层内相继两次碰撞之间游动的距离服从指数分布，中子经碰撞后的弹射角服从 $(0, 2\pi)$ 上的均匀分布. 从而得到第 $i$ 次碰撞后中子在屏蔽层的位置

$$x_i = x_{i-1} + R_i \cos\theta_i, \quad i = 1, 2, \cdots, 10. \tag{10.30}$$

其中 $\theta_i$ 是中子第 $i$ 次碰撞后的弹射角度， $R_i$ 是中子从第 $i-1$ 次碰撞到第 $i$ 次碰撞时所游动的距离. 由假设可能得到,

$$R_i = d \cdot (-\ln r_i), \quad \theta_i = 2\pi u_i, \quad i = 1, 2, \cdots, 10.$$

其中 $d$ 为两次碰撞之间中子的平均游动距离； $r_i, u_i$ 是 (0,1) 区间上均匀分布的随机数. 式 (10.30) 表明了中子在屏蔽层内运动的概率模型，可见中子运动的位置和方向都是随机的.

(3) 在第 $i$ 次碰撞后，中子的位置 $x_i$ 有三种情况发生：

i) $x_i < 0$, 中子返回反应堆;

ii) $x_i > D$, 中子穿出屏蔽层;

ⅲ) $0 < x_i < D$, 若 $i < 10$, 则中子在屏蔽层内继续运动; 若 $i = 10$, 则中子被屏蔽层吸收.

中子运动的三种模式如图 10.5 所示. 为简化问题, 假定中子入射角 $\alpha = 0$(即中子以垂直方向穿入屏蔽层), 屏蔽层的厚度为 $D = 3d$.

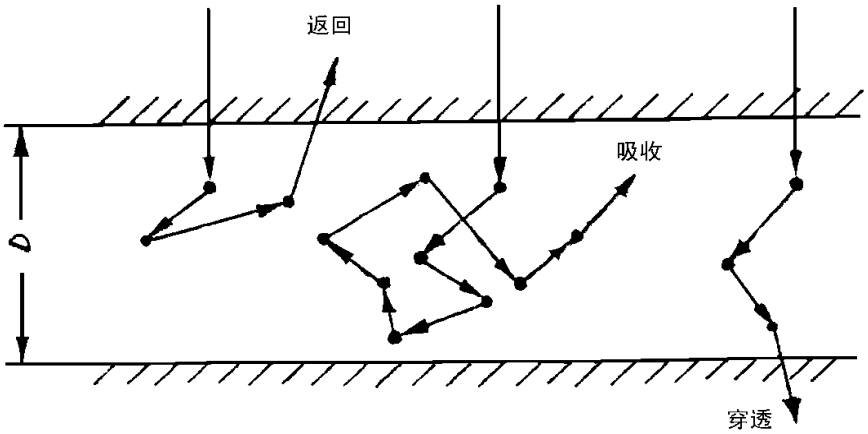



图 10.5: 中子在屏蔽层内运动的三种模式

下面是用 R 软件编写的模拟程序 (程序名: MC3.R).

```
MC3<-function(n){
   D<-3; pi<-3.1416; back<-0; absorb<-0; pierce<-0
   for (k in 1:n){
      x<- -log(runif(1))
      for (i in 1:10){
         index <- 1
         r <- runif(2); R <- -log(r[1]); t <- 2*pi*r[2]
         x <- x + R * cos(t)
         if (x<0) {
            back<-back+1; index<-0; break
         }else if (x>D){
            pierce<-pierce+1; index<-0; break
         }else
            next
      }
```

```
        if (index==1)
            absorb<-absorb+1
    }
    data.frame(Pierce=pierce/n*100, Absorb=absorb/n*100,
                Back=back/n*100)
}
```

表 10.6 列出的是上述程序计算的结果.

**表 10.6: 不同中子数的模拟结果**

| 中子数 (个) | 穿透 (%) | 吸收 (%) | 返回 (%) |
|---|---|---|---|
| 100 | 35.0 | 11.0 | 54.0 |
| 1000 | 34.0 | 10.6 | 55.4 |
| 3000 | 33.1 | 10.5 | 56.4 |
| 5000 | 32.1 | 10.9 | 57.0 |

表 10.6 表明, 取屏蔽层厚度 $D = 3d$ 是不合适的, 因为此时中子穿透屏蔽层的百分比在 $1/3$ 左右. 而在实际应用中, 要求中子穿透屏蔽层的概率极小, 一般数量级为 $10^{-6} \sim 10^{-10}$, 即穿入屏蔽层的中子若为几百万个, 也只能有几个中子穿过屏蔽层. 问题是多厚的屏蔽层才能使它被穿透的概率 $W_D < 10^{-6}$?

值得注意的是, 仅模拟 5000 个中子的运动, 就用其穿透屏蔽层的频率来估计穿透屏蔽层的概率总在 "勉强" 之嫌, 因为这时的模拟精度只有 $1\%$, 欲提高模拟精度, 应适当增加模拟次数. 第二个问题是, 需要模拟多少个中子的运动, 才能用频率估计其概率?

先回答第二个问题. 由 10.1 节关于模拟精度与模拟次数的讨论, 由式 (10.9) 可以得到, 若使模拟精度达到千分之一, 则模拟次数要在 $10^6$ 次以上. 由于中子穿透概率在 $10^{-6}$ 以下, 所以其精度至少应达到这个数量级, 那么模拟次数就应在 $10^{12}$ 次以上, 这一要求在通常的情况下, 显然是行不通的.

我们采用如下的解决办法. 将均匀平行板分为厚度相同的 $m$ 层, 只取一层作模拟. 设中子在这一层中吸收和弹回的概率之和为 $W$, 则穿过一层的概率是 $(1-W)$, 因而穿透 $m$ 层的概率是 $(1-W)^m$. 由于中子穿过一层的平均速度有所下降, 因而总穿透概率比 $(1-W)^m$ 要小.

用 Monte Carlo 方法，先模拟 10000 个中子的运动时，可以保证 $(1-W)$ 的精度要小于 1%. 经 $m$ 层后，有 $(1-W)^m < (0.01)^m$, 若取 $m=3$, 就可获得穿透概率 $(1-W)^3 < (0.01)^3 = 10^{-6}$. 这样处理后，不必作高达 $10^{12}$ 的实验，只需作 $10^4$ 次试验就可达到 $10^{-6}$ 的精度，这一改进比直接方法大大加快了收敛速度，减少了模拟时间.

利用 R 程序 (`MC3.R`), 作 10000 次模拟，得到：当 $D=3d$ 时，穿透概率为 $W_{3d} \leq 1/3$, 问题是多厚的屏蔽层才能使 $W_D < 0.01$?

设需要的屏蔽厚度为 $x$, 则 $(W_{3d})^x < 0.01$, 或 $3^x > 100$, 即

$$x > \frac{\lg 100}{\lg 3} = \frac{2}{0.47712} = 4.1918.$$

即屏蔽层的厚度在达到 $4.1918D \approx 13d$, 才能使中子穿透概率不大于 0.01.

这时可以回答第一个问题了，若使 $W_D < 10^{-6}$, 则总厚度为

$$TD = 3x = 39d.$$

也就是说，屏蔽层总厚度为 $39d$ 时，可使中子穿透屏蔽层的概率 $W_D < 10^{-6}$.

## 10.4 模拟方法在排队论中的应用

排队论 (Queueing Theory) 又称随机服务系统，是通过研究各种服务系统等待现象中的概率特征，从而解决服务系统最优设计与最优控制的一种理论.

排队论属于随机过程的一部分，这里以排队模型为例子来说明此类问题的随机模拟方法. 在介绍模型方法之前，先简单介绍排队论的基本概念.

### 10.4.1 排队服务系统的基本概念

#### 1. 排队的例子

**例 10.13** 某维修中心在周末只安排一名员工为顾客提供服务. 新来维修的顾客到达后，若已有顾客正在接受服务，则需要排队等待. 若排队的人数过多，势必会造成顾客抱怨，会影响到公司产品的销售；若维修人员多，会增加维修中心的支出，如何调整两者的关系，使得系统达到最优.

例 10.13 是一个典型的排队的例子，关于排队的例子有很多，例如：上下班坐公交车，等待公交车的排队；顾客到商店购物形成的排队；病人到医院看病形成的排队；故售票处购票形成的排队等；另一种排队是物的排队，例如文件等待打印或发送；路口红灯下面的汽车、自行车通过十字路口.

排队现象是由两个方面构成，一方要求得到服务，另一方设法给予服务. 我们把要求得到服务的人或物（设备）统称为顾客、给予服务的服务人员或服务机构统称为服务员或服务台. 顾客与服务台就构成一个排队系统. 或称为随机服务系统. 显然，缺少顾客或服务台任何一方都不会形成排队系统.

对于任何一个排队服务系统，每一名顾客通过排队服务系统总要经过如下过程：顾客到达、排队等待、接受服务和离去，其过程如图 10.6 所示.

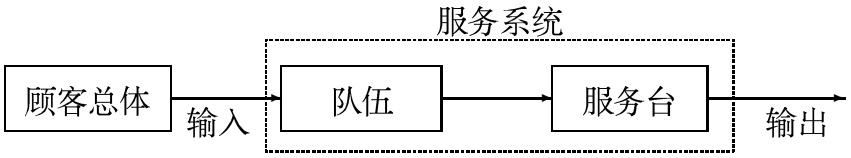



图 10.6: 服务系统的描述

**2. 排队服务系统的基本概念**

(1) 输入过程

输入过程是描述顾客来源及顾客是按怎样的规律抵达排队系统. a) 顾客源总体：顾客的来源可能是有限的，也可能是无限的，例如工厂内发生故障待修的机器是有限的；到达窗口购票的顾客总体可以看成是无限的. b) 到达的类型：顾客是单个到达，或是成批到达，例如工厂内发生故障待修的机器是单个到达；在库存问题中，进货看成顾客到达、就是成批到达的例子. c) 相继顾客到达的间隔时间：通常假定是相互独立、同分布的，有的是等距间隔时间，有的是服从 Poisson 分布，有的是服从 $k$ 阶 Erlang 分布.

(2) 排队规则

排队规则是指服务允许不允许排队，顾客是否愿意排队. 常见的排队规则有如下几种情况. a) 损失制排队系统：顾客到达时，若有服务台均被占，服务机构又不允许顾客等待，此时该顾客就自动辞去，例如通常使用的损失制电话系统. b) 等待制排队系统：顾客到达时. 若所有服务台均被占，他们就排队等待服务.

在等待制系统中，服务顺序又分为：先到先服务，即顾客按到达的先后顺序接受服务；后到先服务，例如情报系统、天气预报资料总是后到的信息越重要，要先处理；随机服务，即在等待的顾客中随机地挑选一个顾客进行服务，例如电话员接线就是用这种方式工作；有优先权的服务，即在排队等待的顾客中．某些类型的顾客具有持殊性，在服务顺序上要给予特别待遇，让他们先得到服务，例如病危人先治疗：带小孩的顾客先进站等． c) 混合制排队系统：损失制与等待制的混合，分为队长（容量）有限的混合制系统，等待时间有限的混合制系统，以及逗留时间有限制的混合系统.

(3) 服务机构

服务机构主要包括以下几个方面： a) 服务台的数目．在多个服务台的情形下，是串联或是并联； b) 顾客所需的服务时间服从什么样的概率分布，每个顾客所需的服务时间是否相互独立，是成批服务或是单个服务等．常见顾客的服务时间分布有：定长分布、指数分布、超指数分布、$k$ 阶 Erlang 分布、几何分布、一般分布等.

**3．符号表示**

排队论模型的记号是 20 世纪 50 年代初由 D. G. Kendall (肯达尔) 引入的，通常由 $3\sim5$ 个英文字母组成，其形式为

$$A/B/C/n$$

其中 $A$ 表示输入过程， $B$ 表示服务时间， $C$ 表示服务台数目， $n$ 表示系统空间数．例如：

(1) $M/M/S/\infty$ 表示输入过程是 Poisson 流，服务时间服从指数分布，系统有 $S$ 个服务台平行服务，系统容量为无穷的等待制排队系统.

(2) $M/G/1/\infty$ 表示输入过程是 Poisson 流，顾客所需的服务时间为独立、服从一般概率分布，系统中只有一个服务台，容量为无穷的等待制系统.

(3) $GI/M/1/\infty$ 表示输入过程为顾客独立到达且相继到达的间隔时间服从一般概率分布，服务时间是相互独立、服从指数分布，系统中只有一个服务台，容量为无穷的等待制系统.

(4) $E_k/G/1/K$ 表示相继到达的间隔时间独立、服从 $k$ 阶 Erlang 分布，服务时间为独立、服从一般概率分布，系统中只有一个服务台，容量为 $K$ 的混合制系统.

(5) $D/M/S/K$ 表示相继到达的间隔时间独立、服从定长分布、服务时间相互独立、服从指数分布，系统中有 $S$ 个服务台平行服务，容量为 $K$ 的混合制系统.

**4. 描述排队系统的主要数量指标**

(1) 队长 ($L_s$)

队长是指在系统中的顾客的平均数 ( 包括正在接受服务的顾客 ).

(2) 顾客的平均等待时间与平均逗留时间 ($W_s$)

顾客的平均等待时间是指从顾客进入系统的时刻起直到开始接受服务止的平均时间. 平均逗留时间是指顾客在系统中的平均等待时间与平均服务时间之和. 平均等待时间与平均服务时间是顾客最关心的数量指标.

(3) 系统的忙期与闲期

从顾客到达空闲的系统，服务立即开始，直到系统再次变为空闲，这段时间是系统连续繁忙的时间，我们称为系统的忙期，它反映了系统中服务机构的工作强度，是衡量服务机构利用效率的指标.

### 10.4.2 排队模型模拟的关键

**1. 关键变量**

模型模拟的关键变量是事件，以及每个事件发生的时间. 由于排队模型中的每个事件是按时间发生的，例如在某时刻有顾客到达，某时刻有顾客离开 (服务完成) 等. 因此进行模拟有三个关键变量：

(1) 时间变量. 记录系统发生某一事件的时间，如顾客到达或顾客离开.
(2) 计数变量. 当前在服务系统中顾客的个数.
(3) 系统状态变量. 系统的状态，如系统是空闲还繁忙；系统中顾客的个数，分别在哪个服务如台接受服务等.

有了这三个关键变量，其他变量就好处理了.

**2. Poisson 过程的模拟**

在排队服务系统中，通常假设顾客的到达时间和接受的时间服从 Poisson 过程，因此，对于 Poisson 过程的模拟是十分重要的.

由概率知识可知，当随机过程是强度为 $\lambda$ 的 Poisson 过程时，其点间间距是相互独立的随机变量，且服从参数为 $\lambda$ 的指数分布，即

$$f_{T_i}(t)=\begin{cases}\lambda \mathrm{e}^{-\lambda t}, & t>0,\\ 0, & t\le 0,\end{cases}\qquad i=2,3,\cdots,$$

相应的分布函数为

$$F_{T_i}(t)=\begin{cases}1-\lambda \mathrm{e}^{-\lambda t}, & t>0,\\ 0, & t\le 0,\end{cases}\qquad i=2,3,\cdots.$$

因此，有

$$t=-\frac{1}{\lambda}\ln(1-F_{T_i}(t)).$$

由于 $F_{T_i}(t)\sim U(0,1)$, 则 $1-F_{T_i}(t)\sim U(0,1)$, 因此，模拟 Poisson 过程到达的时间间隔公式为

$$t_i=-\frac{1}{\lambda}\ln u_i,\quad i=1,2,\cdots, \tag{10.31}$$

其中 $u_i\sim U(0,1)$.

### 10.4.3 等待制排队模型的模拟

等待制排队模型中最常见的模型是 $M/M/S/\infty$, 即顾客到达系统的相继到达时间间隔独立，且服从参数为 $\lambda$ 的指数分布 ( 即输入过程为 Poisson 过程 ), 服务台的服务时间也独立同分布，且服从参数为 $\mu$ 的指数分布，而且系统空间无限，允许永远排队.

**1.** $S=1$ **的情况** $(M/M/1/\infty)$

**系统变量**

单一变量

$t$ — 时间变量　　$N_A$ — 在 $t$ 时刻到达系统的顾客总数

$t_A$ — 顾客的到达时间　$n$ — 在 $t$ 时刻当前达系统的顾客数

$t_D$ — 顾客的离开时间　$T$ — 总服务时间

数组变量 (以 $k$ 为自变量)

$w_t$ — 记录发生事件的时间　$w_n$ — 记录系统中的顾客数

$w_s$ — 记录上一事件到下一事件的间隔时间

**模拟算法 I**

(1) 初始步：置 $t = N_A = 0$, 产生顾客到达系统的初始时间 $T_0$, 置 $t_A = T_0$, $t_D = \infty$(此时系统中无顾客). 置 $k = 0$.

(2) 记录系统状态. 置 $k = k + 1$, $w_t(k) = t$, $w_n(k) = n$. 如果 $t_A < T$, 则置

$$w_s(k) = \min(t_A, t_D) - t,$$

然后转 (3); 否则置

$$w_s(k) = \begin{cases} 0, & t_D = \infty, \\ t_D - t, & t_D < \infty, \end{cases}$$

然后转 (8).

(3) 如果 $t_A < t_D$, 则置 $t = t_A$, $N_A = N_A + 1$(顾客到达总数 +1), $n = n + 1$(系统中顾客数 +1), 产生下一顾客到达系统的时间 $t_A$.

(4) 如果 $n = 1$, 产生服务台上顾客的离开时间 $t_D$.

(5) 如果 $t_A \geq t_D$, 则置 $t = t_D$, $n = n - 1$(系统中顾客数 −1).

(6) 如果 $n = 0$(系统中无顾客), 置 $t_D = \infty$; 否则产生服务台上顾客的离开时间 $T_D$.

(7) 转 (2).

(8) (此时 $t_A \geq T$, 不再接收新顾客，只完成系统中顾客的服务). 如果 $n > 0$(系统中还有顾客), 并置 $t = t_D$, $n = n - 1$(系统中顾客数 −1). 如果 $n > 0$, 产生服务台上顾客的离开时间 $T_D$, 然后转 (2); 否则转 (9).

(9) 计算队长 ($L_s$) 、平均逗留时间 ($W_s$) 和顾客等待的概率 ($P_{\text{wait}}$).

$$\begin{aligned} L_s &= \frac{1}{t}\sum_k w_s(k) \cdot w_n(k), \\ W_s &= \frac{1}{N_A}\sum_k w_s(k) \cdot w_n(k), \\ P_{\text{wait}} &= \frac{1}{t}\sum_{w_n(k)\geq 1} w_s(k), \end{aligned}$$

停止计算，输出 $L_s$ 、 $W_s$ 和 $P_{\text{wait}}$.

**R 程序**(程序名： `queue1.R`)

```
queue1<-function(lambda, mu, T){
   k<-0; wt<-0; wn<-0; ws<-0;
   tp<-0; nA<-0; n<-0; t<-0
   r<-runif(1); tA<--1/lambda*log(r); tD<-Inf

   repeat{
      k<-k+1; wt[k]<-t; wn[k]<-n
      if (tA < T){
         ws[k]<-min(tA, tD)-t
         if (tA < tD){
            t<-tA; n<-n+1; nA<-nA+1
            r<-runif(1); tA<-t-1/lambda*log(r)
            if (n==1){
               r<-runif(1); tD<-t-1/mu*log(r)
            }
         }else{
            t<-tD; n<-n-1
            if (n==0){
               tD<-Inf
            }else{
               r<-runif(1); tD<-t-1/mu*log(r)
            }
         }
      }else{
         ws[k]<-if(tD==Inf) 0 else tD-t
         if (n>0){
            t<-tD; n<-n-1
            if (n>0){
               r<-runif(1); tD<-t-1/mu*log(r)
            }
         }else
            tp<-1
```

```
        }
        if (tp==1) break
    }
    data.frame(Ls=sum(ws*wn)/t, Ws=sum(ws*wn)/nA,
               Pwait=sum(ws[wn>=1])/t)
}
```

**例 10.14** 某维修中心在周末现只安排一名员工为顾客提供服务. 新来维修的顾客到达后, 若已有顾客正在接受服务, 则需要排队等待. 假设来维修的顾客到达过程为 *Poisson* 流, 平均 *4* 人 / 小时, 维修时间服从指数分布, 平均需要 *6* 分钟. 试用模拟的方法求该系统的的队长 $(L_s)$ 、平均逗留时间 $(W_s)$ 和顾客等待的概率 (系统繁忙概率)$(P_{\text{wait}})$.

**解**: 调用编好的程序 queue1.R, 输入相应的参数指标, 模拟 1000 小时的排队服从系统的运行情况,

```
> source("queue1.R")
> queue1(lambda=4, mu=10, T=1000)
         Ls        Ws     Pwait
1 0.6938313 0.1685005 0.4118629
```

其理论值为 $L_s = 0.6666667$(人), $W_s = 0.1666667$(小时). $P_{\text{wait}} = 0.4$.

**例 10.15** 在商业中心处设置一台 *ATM* 机, 假设来取钱的顾客平均每分钟 *0.6* 个, 而每个顾客的平均取钱的时间为 *1.25* 分钟, 试用模拟的方法求该 *ATM* 机的队长 $(L_s)$ 、平均逗留时间 $(W_s)$ 和顾客等待的概率 $(P_{\text{wait}})$.

**解**: 模拟 10000 分钟的排队服从系统的运行情况,

```
> queue1(lambda=0.6, mu=0.8, T=10000)
        Ls       Ws     Pwait
1 2.949336 4.895917 0.7577775
```

其理论值为 $L_s = 5$(人), $W_s = 5$(分钟). $P_{\text{wait}} = 0.75$.

从上面两个例子可以看出, 模拟值与理论值还是很接近的.

**2.** $S > 1$ **的情况** $(M/M/S/\infty)$

**系统变量**

对于 $S>1$ 的情况，变量意义基本上与 $S=1$ 的情况相同，只是此时的 $t_D$ 为数组，增加一个状态变量 $SS$, 记录系统的状态情况.

**模拟算法 Ⅱ**

(1) 初始步：置 $t=N_A=0$, 产生顾客到达系统的初始时间 $T_0$, 置 $t_A=T_0$, $t_D(i)=\infty, i=1,2,\cdots,S$(此时系统中无顾客). $SS(i)=0, i=1,2,\cdots,S+1$($SS(1)$ 记录系统当前状态的顾客数，$SS(2\sim S+1)$ 记录 $S$ 个服务台的工作状态，0 为空闲，1 为工作), 置 $k=0$.

(2) 如果 $SS(1)=0$, 则置 $t_1=\infty$, $i_1=1$; 否则置 $t_1=\min(t_D)$, $i_1=\operatorname{argmin}(t_D)$.

(3) 记录系统状态. 置 $k=k+1$, $w_t(k)=t$, $w_n(k)=n$. 如果 $t_A<T$, 则置

$$w_s(k)=\min(t_A,t_1)-t,$$

然后转 (4); 否则置

$$w_s(k)=\begin{cases}0, & t_1=\infty,\\ t_1-t, & t_1<\infty,\end{cases}$$

然后转 (11).

(4) 如果 $t_A<t_1$, 则置 $t=t_A$, $N_A=N_A+1$(顾客到达总数 +1), 产生下一顾客到达系统的时间 $T_A$. 置 $n=SS(1)$, $SS(1)=n+1$(系统中顾客数 +1).

(5) 对于 $i=1,2,\cdots,S$, 如果 $SS(1+i)=0$(第 $i$ 个服务台空闲), 则置 $SS(1+i)=1$(将系统中的顾客分配给第 $i$ 个服务台，开始服务), 产生第 $i$ 个服务台上顾客离开的时间 $T_D(i)$, 然后中止循环.

(6) 如果 $t_A\geq t_1$, 则置 $t=t_1$, $n=SS(1)$, $SS(1)=n-1$(系统中顾客数 −1).

(7) 如果 $n=1$(系统中无顾客), 置 $SS(1+i)=0$, $t_D(i)=\infty$, $i=1,2,\cdots,S$.

(8) 如果 $n\leq S$, 置 $SS(1+i_1)=0$, $t_D(i_1)=\infty$(第 $i_1$ 个服务台空闲).

(9) 如果 $n>S$, 产生顾客离开第 $i_1$ 个服务台的时间 $T_D(i_1)$.

(10) 转 (2).

(11) (此时 $t_A\geq T$, 不再接收新顾客，只完成系统中顾客的服务). 置 $n=SS(1)$. 如果 $n>0$, 则置 $t=t_D$, $SS(1)=n-1$(系统中顾客数 −1), 然后转 (7); 否则转 (12).

(12) 计算队长 ($L_s$) 、平均逗留时间 ($W_s$) 和顾客等待的概率 ($P_{\text{wait}}$).

$$\begin{aligned} L_s &= \frac{1}{t}\sum_k w_s(k)\cdot w_n(k), \\ W_s &= \frac{1}{N_A}\sum_k w_s(k)\cdot w_n(k), \\ P_{\text{wait}} &= \frac{1}{t}\sum_{w_n(k)\geq S} w_s(k), \end{aligned}$$

停止计算，输出 $L_s$ 、 $W_s$ 和 $P_{\text{wait}}$.

**R 程序**(程序名： queue2.R)

```
queue2<-function(lambda, mu, T, S=2){
   k<-0; wt<-0; wn<-0; ws<-0
   tp<-0; nA<-0; t<-0
   r<-runif(1); tA<--1/lambda*log(r)
   tD<-rep(Inf, S); SS<-rep(0, S+1)

   repeat{
      t1<-if(SS[1]==0) Inf else min(tD)
      i1<-if(SS[1]==0) 1 else which.min(tD)
      k<-k+1; wt[k]<-t; wn[k]<-SS[1]
      if (tA < T){
         ws[k]<-min(tA, t1)-t
         if (tA < t1){
            t<-tA; nA<-nA+1
            r<-runif(1); tA<-t-1/lambda*log(r)
            n<-SS[1]; SS[1]<-n+1
            for (i in 1:S){
               if (SS[1+i]==0){
                  SS[1+i]<-1
                  r<-runif(1); tD[i]<-t-1/mu*log(r)
                  break
               }
```

```
            }
         }else{
            t<-t1; n<-SS[1]; SS[1]<-n-1
            if (n==1){
               SS[2:(S+1)]<-0; tD[1:S]<-Inf
            }else if (n<=S){
               SS[1+i1]<-0; tD[i1]<-Inf
            }else{
               r<-runif(1); tD[i1]<-t-1/mu*log(r)
            }
         }
      }else{
         ws[k]<- if( t1==Inf) 0 else t1-t
         n<-SS[1]
         if (n>0){
            t<-t1; SS[1]<-n-1;
            if (n==1){
               SS[2:(S+1)]<-0; tD[1:S]<-Inf
            }else if (n<=S){
               SS[1+i1]<-0; tD[i1]<-Inf
            }else{
               r<-runif(1); tD[i1]<-t-1/mu*log(r)
            }
         }else
            tp<-1
      }
      if (tp==1) break
   }
   data.frame(Ls=sum(ws*wn)/t, Ws=sum(ws*wn)/nA,
              Pwait=sum(ws[wn>=S])/t)
}
```

**例 10.16** 设打印室有 *3* 名打字员，平均每个文件的打印时间为 *10* 分钟，而文件

的到达率为每小时 15 件，试用模拟的方法求该打印室文件的队长 ($L_s$)、文件的平均逗留时间 ($W_s$) 和文件等待的概率 ($P_{\text{wait}}$).

**解**：调用编好的程序 queue2.R, 输入相应的参数指标，模拟 1000 小时的排队服从系统的运行情况，

```
> source("queue2.R")
> queue2(lambda=15, mu=6, T=1000, S=3)
        Ls        Ws     Pwait
1 5.980315 0.4010408 0.7002678
```

其理论值为 $L_s = 6.011236$(件), $W_s = 0.4007491$(小时). $P_{\text{wait}} = 0.7022472$.

### 10.4.4 损失制与混合制排队模型

损失制排队模型通常记为 $M/M/S/S$, 当 $S$ 个服务器被占用后，顾客自动离去.

混合制排队模型通常记为 $M/M/S/K$, 即有 $S$ 个服务台或服务员，系统空间容量为 $K(K \geq S)$, 当 $K$ 个位置已被顾客占用时，新到的顾客自动离去，当系统中有空位置时，新到的顾客进入系统排队等待. 当 $K = S$ 时，混合制排队模型就退化成损失制排队模型.

这里只给出混合制排队模型的模拟情况，因为当 $K = S$ 时，就是损失制排队模型的情况. 在前面给出等待制模型的模拟后，混合制排队模型的模拟就简单多了，只需对前面的程序作小的修改，在当前系统顾客数达到 $K$ 时，则新到的顾客自动离开. 其他程序不变.

下面给出相应的算法和程序. 注意：对于损失制与混合制排队模型，除关心队长 ($L_s$)、平均等待时间 ($W_s$) 外，还要关心系统的顾客损失率 ($P_{\text{lost}}$).

**1. $S = 1$ 的情况** $(M/M/1/K)$

**模拟算法 III**

(1) 初始步：置 $t = N_A = 0$, 产生顾客到达系统的初始时间 $T_0$, 置 $t_A = T_0$, $t_D = \infty$(此时系统中无顾客). 置 $k = 0$.

(2) 记录系统状态. 置 $k = k + 1$, $w_t(k) = t$, $w_n(k) = n$. 如果 $t_A \leq T$, 则置

$$w_s(k) = \min(t_A, t_D) - t,$$

然后转 (3); 否则置

$$w_s(k)=\begin{cases}0, & t_D=\infty,\\ t_D-t, & t_D<\infty,\end{cases}$$

然后转 (9).

(3) 如果 $t_A<t_D$, 则置 $t=t_A$, $N_A=N_A+1$(顾客到达总数 +1), $n=n+1$(系统中顾客数 +1), 产生下一顾客到达系统的时间 $t_A$.

(4) 如果 $n=1$, 产生服务台上顾客的离开时间 $t_D$.

(5) 如果 $n=K$(当前顾客达到系统容量), 做如下工作：

若 $t_A<t_D$(新顾客在已被服务的顾客离开前到达), 则产生下一顾客到达系统的时间 $t_A$(因为这个新顾客需要离开), 直至 $t_A\geq t_D$ 为止.

(6) 如果 $t_A\geq t_D$, 则置 $t=t_D$, $n=n-1$(系统中顾客数 $-1$).

(7) 如果 $n=0$(系统中无顾客), 置 $t_D=\infty$; 否则产生服务台上顾客的离开时间 $T_D$.

(8) 转 (2).

(9) (此时 $t_A\geq T$, 不再接收新顾客，只完成系统中顾客的服务). 如果 $n>0$(系统中还有顾客), 并置 $t=t_D$, $n=n-1$(系统中顾客数 $-1$). 如果 $n>0$, 产生服务台上顾客的离开时间 $T_D$, 然后转 (2); 否则转 (10).

(10) 计算队长 ($L_s$) 、平均逗留时间 ($W_s$) 和系统的顾客损失率 ($P_{\text{lost}}$).

$$\begin{aligned}L_s &= \frac{1}{t}\sum_k w_s(k)\cdot w_n(k),\\ W_s &= \frac{1}{N_A}\sum_k w_s(k)\cdot w_n(k),\\ P_{\text{lost}} &= \frac{1}{t}\sum_{w_n(k)\geq K} w_s(k),\end{aligned}$$

停止计算，输出 $L_s$ 、 $W_s$ 和 $P_{\text{lost}}$.

**R 程序**(程序名： queue3.R)

```
queue3<-function(lambda, mu, T, K=1){
   k<-0; wt<-0; wn<-0; ws<-0
   tp<-0; nA<-0; n<-0; t<-0
   r<-runif(1); tA<--1/lambda*log(r); tD<-Inf
```

```
repeat{
   k<-k+1; wt[k]<-t; wn[k]<-n
   if (tA < T){
      ws[k]<-min(tA, tD)-t
      if (tA<=tD){
         t<-tA; n<-n+1; nA<-nA+1
         r<-runif(1); tA<-tA-1/lambda*log(r)
         if (n==1){
            r<-runif(1); tD<-t-1/mu*log(r)
         }
         if (n==K){
            while (tA < tD){
               r<-runif(1); tA<-tA-1/lambda*log(r)
            }
         }
      }else{
         t<-tD; n<-n-1
         if (n==0){
            tD<-Inf
         }else{
            r<-runif(1); tD<-t-1/mu*log(r)
         }
      }
   }else{
      ws[k]<-if(tD==Inf) 0 else tD-t
      if (n>0){
         t<-tD; n<-n-1
         if (n>0){
            r<-runif(1); tD<-t-1/mu*log(r)
         }
      }else
```

```
            tp<-1
        }
        if (tp==1) break
    }
    data.frame(Ls=sum(ws*wn)/t, Ws=sum(ws*wn)/nA,
               Plost=sum(ws[wn>=K])/t)
}
```

**例 10.17** 设某条电话线, 平均每分钟有 *0.6* 次呼唤, 若每次通话时间平均为 *1.25* 分钟, 试用模拟的方法求该系统的队长 *($L_s$)* 、平均逗留时间 *($W_s$)* 和系统的损失率 *($P_{\text{lost}}$).*

**解**: 调用编好的程序 queue3.R, 输入相应的参数指标, 模拟 10000 分钟的排队服从系统的运行情况,

```
> source("queue3.R")
> queue3(lambda=0.6, mu=0.8, T=10000)
        Ls       Ws     Plost
1 0.4289211 1.259454 0.4289211
```

其理论值为 $L_s = 0.4285714$(次), $W_s = 1.25$(分钟). $P_{\text{lost}} = 0.4285714$.

**例 10.18** 某理发店只有 *1* 名理发员, 因场所有限, 店里最多可容纳 *4* 名顾客, 假设来理发的顾客按 *Poisson* 过程到达, 平均到达率为每小时 *6* 人, 理发时间服从指数分布, 平均 *12* 分钟可为 *1* 名顾客理发, 试用模拟的方法求该系统的队长 *($L_s$)* 、平均逗留时间 *($W_s$)* 和系统的损失率 *($P_{\text{lost}}$).*

**解**: 模拟 1000 小时的排队服从系统的运行情况,

```
> queue3(lambda=6, mu=5, T=1000, K=4)
        Ls        Ws     Plost
1 2.364356 0.5412132 0.2718579
```

其理论值为 $L_s = 2.359493$(人), $W_s = 0.5451565$(小时). $P_{\text{lost}} = 0.2786498$.

**2.** $S > 1$ **的情况** $(M/M/S/K)$

**模拟算法 IV**

(1) 初始步: 置 $t = N_A = 0$, 产生顾客到达系统的初始时间 $T_0$, 置 $t_A = T_0$, $t_D(i) = \infty, i = 1, 2, \cdots, S$(此时系统中无顾客). $SS(i) = 0, i = 1, 2, \cdots, S +$

1($SS(1)$ 记录系统当前状态的顾客数， $SS(2\sim S+1)$ 记录 $S$ 个服务台的工作状态， 0 为空闲， 1 为工作), 置 $k=0$.

(2) 如果 $SS(1)=0$, 则置 $t_1=\infty$, $i_1=1$; 否则置 $t_1=\min(t_D)$, $i_1=\operatorname{argmin}(t_D)$.

(3) 记录系统状态. 置 $k=k+1$, $w_t(k)=t$, $w_n(k)=n$. 如果 $t_A<T$, 则置

$$w_s(k)=\min(t_A,t_1)-t,$$

然后转 (4); 否则置

$$w_s(k)=\begin{cases}0, & t_1=\infty,\\ t_1-t, & t_1<\infty,\end{cases}$$

然后转 (12).

(4) 如果 $t_A<t_1$, 则置 $t=t_A$, $N_A=N_A+1$(顾客到达总数 +1), 产生下一顾客到达系统的时间 $T_A$. 置 $n=SS(1)$, $SS(1)=n+1$(系统中顾客数 +1).

(5) 对于 $i=1,2,\cdots,S$, 如果 $SS(1+i)=0$(第 $i$ 个服务台空闲), 则置 $SS(1+i)=1$(将系统中的顾客分配给第 $i$ 个服务台，开始服务), 产生第 $i$ 个服务台上顾客离开的时间 $T_D(i)$, 然后中止循环.

(6) 如果 $SS(1)=K$(当前顾客达到系统容量), 做如下工作：

置 $t_1=\min(t_D)$. 若 $t_A<t_1$(新顾客在已被服务的顾客离开前到达), 则产生下一顾客到达系统的时间 $t_A$(因为这个新顾客需要离开), 直至 $t_A\geq t_1$ 为止.

(7) 如果 $t_A\geq t_1$, 则置 $t=t_1$, $n=SS(1)$, $SS(1)=n-1$(系统中顾客数 −1).

(8) 如果 $n=1$(系统中无顾客), 置 $SS(1+i)=0$, $t_D(i)=\infty$, $i=1,2,\cdots,S$.

(9) 如果 $n\leq S$, 置 $SS(1+i_1)=0$, $t_D(i_1)=\infty$(第 $i_1$ 个服务台空闲).

(10) 如果 $n>S$, 产生顾客离开第 $i_1$ 个服务台的时间 $T_D(i_1)$.

(11) 转 (2).

(12) (此时 $t_A\geq T$, 不再接收新顾客，只完成系统中顾客的服务). 置 $n=SS(1)$. 如果 $n>0$, 则置 $t=t_D$, $SS(1)=n-1$(系统中顾客数 −1), 然后转 (8); 否则转 (13).

(13) 计算队长 ($L_s$) 、平均逗留时间 ($W_s$) 和顾客等待的概率 ($P_{\text{lost}}$).

$$\begin{aligned} L_s &= \frac{1}{t}\sum_k w_s(k)\cdot w_n(k), \\ W_s &= \frac{1}{N_A}\sum_k w_s(k)\cdot w_n(k), \\ P_{\text{lost}} &= \frac{1}{t}\sum_{w_n(k)\geq K} w_s(k), \end{aligned}$$

停止计算，输出 $L_s$ 、 $W_s$ 和 $P_{\text{lost}}$.

**R 程序**(程序名： queue4.R)

```
queue4<-function(lambda, mu, T, S=1, K=1){
   if (K<S) K<-S
   k<-0; wt<-0; wn<-0; ws<-0
   tp<-0; nA<-0; t<-0
   r<-runif(1); tA<--1/lambda*log(r)
   tD<-rep(Inf, S); SS<-rep(0, S+1)

   repeat{
      t1<-if(SS[1]==0) Inf else min(tD)
      i1<-if(SS[1]==0) 1 else which.min(tD)
      k<-k+1; wt[k]<-t; wn[k]<-SS[1]
      if (tA < T){
         ws[k]<-min(tA, t1)-t
         if (tA < t1){
            t<-tA; nA<-nA+1
            r<-runif(1); tA<-t-1/lambda*log(r)
            n<-SS[1]; SS[1]<-n+1
            for (i in 1:S){
               if (SS[1+i]==0){
                  SS[1+i]<-1
                  r<-runif(1); tD[i]<-t-1/mu*log(r)
                  break
```

```
            }
         }
         if (SS[1]==K){
            t1 <- min(tD)
            while (tA < t1){
               r<-runif(1); tA<-tA-1/lambda*log(r)
            }
         }
      }else{
         t<-t1; n<-SS[1]; SS[1]<-n-1
         if (n==1){
            SS[2:(S+1)]<-0; tD[1:S]<-Inf
         }else if (n<=S){
            SS[1+i1]<-0; tD[i1]<-Inf
         }else{
            r<-runif(1); tD[i1]<-t-1/mu*log(r)
         }
      }
   }else{
      ws[k]<- if( t1==Inf) 0 else t1-t
      n<-SS[1]
      if (n>0){
         t<-t1; SS[1]<-n-1;
         if (n==1){
            SS[2:(S+1)]<-0; tD[1:S]<-Inf
         }else if (n<=S){
            SS[1+i1]<-0; tD[i1]<-Inf
         }else{
            r<-runif(1); tD[i1]<-t-1/mu*log(r)
         }
      }else
         tp<-1
```

```
        }
        if (tp==1) break
    }
    data.frame(Ls=sum(ws*wn)/t, Ws=sum(ws*wn)/nA,
               Plost=sum(ws[wn>=K])/t)
}
```

**例 10.19** 某工厂的机器维修中心有 *9* 名维修工，因为场地限制，中心内最多可以容纳 *12* 台需要维修的设备，假设待修的设备按 *Poisson* 过程到达，平均每天 *4* 台，维修设备服从指数分布，每台设备平均需要 *2* 天时间，试用模拟的方法求该系统的队长 $(L_s)$、平均逗留时间 $(W_s)$ 和系统的损失率 $(P_{\text{lost}})$.

**解**：调用编好的程序 queue4.R, 输入相应的参数指标，模拟 1000 天的排队服从系统的运行情况，

```
> source("queue4.R")
> queue4(lambda=4, mu=1/2, T=1000, S=9, K=12)
        Ls       Ws      Plost
1 7.736918 2.148876 0.08801383
```

其理论值为 $L_s = 7.872193$(台), $W_s = 2.153466$(分钟). $P_{\text{lost}} = 0.08610186$.

## 习题十

**10.1** 用 *Monte Carlo* 方法计算定积分 $I = \int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx$, 分别考虑随机投点法和平均值法，并计算在置信度为 $\alpha = 0.05$, 精度要求为 $\varepsilon = 0.01$ 条件下，两种方法所需的试验次数.

**10.2** 一只兔子在 $O$ 点处，它的洞穴在正北 *20* 米的 $B$ 点处，一只狼位于兔子的正东 *33* 米的 $A$ 点处. 模拟如下追逐问题：狼以一倍于兔子的速度紧盯着兔子追击. 画出狼追兔子的追逐曲线. 问：当兔子到达洞口前是否被狼逮住？

**10.3** 一个服务员的售货亭，顾客的平均到达时间服从均值为 *20* 秒，标准差 *10* 秒的正态分布，顾客购买 *1* ∼ *4* 件商品的概率为

*1* 件： *0.5*, *2* 件： *0.2*, *3* 件： *0.2*, *4* 件： *0.1*.

购买每件商品需要的时间服从均值为 *15* 秒，标准差为 *5* 秒的正态分布．若售货亭无顾客，则新到的顾客接受服务；否则排队等待，即看成是等待制排队系统．试模拟售货亭运营 *12* 个小时后，售货亭的顾客队长 $(L_s)$，顾客的平均逗留时间 $(W_s)$ 和售货亭繁忙的概率．

**10.4** 电梯运输问题．游客参观电视高塔，到达为指数分布，平均的到达间隔为 *3* 分钟，在下面排队等候电梯，电梯容量 *8* 人，至少有 *3* 人乘电梯时才开动，电梯运行时间为常数．在塔顶，游客停留时间服从均值为 *5* 分钟，标准差为 *3* 分钟的正态分布，然后下塔．在下塔人中，有 *20%* 的人步行下塔，有 *80%* 的人乘电梯．若塔顶的游客全部要下塔，虽不足 *3* 人电梯也开动，而且最后 *1* 人下塔总是乘电梯．试模拟 *10* 小时内游客上、下塔的平均等待时间．

**10.5** 按下列条件模拟理发店系统工作状态情况．

*(1)* 理发店上午 *10:00* 开门，开门时无顾客等待．

*(2)* 各顾客是否来此店理发及何时来此店理发与他人无关，且任意两个顾客到达的时间间隔服从均值为 *4* 分钟的指数分布．

*(3)* 顾客中有 *60%* 的人仅剪发， *40%* 的需要洗发、剪发和吹发．

*(4)* 服务员甲为一位顾客剪发的时间服从 *6* 分分钟的指数分布，洗发、剪发和吹发所花时间服从 *9* 分钟的指数分布．服务员乙的服务时时间也服从指数分布，均值分别为 *5* 分钟和 *7.5* 分钟．

*(5)* 当顾客到达时，如发现已有 *6* 位顾客正在排队等待服务，则放弃等待（离去）．

*(6)* 每位服务员不间断地为 *4* 位顾客服务后都要休息 *1* 分钟．

*(7)* 理发店晚 *8:00* 后谢绝顾客进入，在完成店内的顾客服务后关门．

试模拟在一天的运营中，来店顾客的队长 $(L_s)$、平均逗留时间 $(W_s)$ 和理发店的损失率 $(P_{\text{lost}})$.

# 附录　索引

在书中，共有两类函数，一类是作者自编的函数，另一类是 R 软件提供的函数. 为便于读者查找，下面给出函数的索引. 索引由三部分组成，第一部分是函数名，第二部分是函数的意义，第三部分是能够解释该函数意义或能够体现该函使用方法的章节号. 由于有些函数在全书中不断调用，因此在其他位置出现的章节号就不再列出了.

## 附录 1　自编写的函数 (程序)

**A**

`anova.tab` — 计算方差分析表， 7.1.3 节， 7.1.6 节， 7.2.1 节， 7.2.2 节
`area` — 计算定积分， 2.9.4 节

**B**

`beta.int` — 回归参数 $\beta$ 的区间估计， 6.1.4 节， 6.3.4 节， 6.3.7 节
`buffon` — 模拟 Buffon 的投针试验， 10.1.2 节

**C**

`corcoef.test` — 典型相关系数检验函数， 9.3.4 节

**D**

`data_outline` — 计算样本的各种描述性统计量， 3.1.3 节
`discriminiant.bayes` — Bayes 判别函数 (两类), 8.1.2 节
`distinguish.bayes` — Bayes 判别函数 (多类), 8.1.2 节
`discriminiant.distance` — 距离判别函数 (两类), 8.1.1 节
`distinguish.distance` — 距离判别函数 (多类), 8.1.1 节
`discriminiant.fisher` — Fisher 判别函数 (两类), 8.1.3 节

**F**

`factor.analy` — 因子分析 (综合), 9.2.3 节

**I**



**M**



**N**



**O**

**P**

paramet.int — 非线性拟合参数的区间估计， 6.7.2 节
P_value — 计算 P– 值， 5.2.1 节

**Q**

queue1 — 模拟等待制 (单服务台) 排队模型， 10.4.3 节
queue2 — 模拟等待制 (多服务台) 排队模型， 10.4.3 节
queue3 — 模拟混合制 (单服务台) 排队模型， 10.4.4 节
queue4 — 模拟混合制 (多服务台) 排队模型， 10.4.4 节

**R**

Reg_Diag — 回归诊断， 6.5.4 节
Rosenbrock — Rosenbrock 函数， 4.1.2 节
ruben.test — 通过样本的相关系数估计总体的相关系数， 3.4.2 节

**T**

trace — 模拟追逐问题， 10.3.1 节
twosam — 计算两样本的 t 统计量， 2.9.1 节

**U**

unison — 绘数据的调和曲线， 3.5.3 节

**V**

var.test1 — 方差检验 (单个正态总体), 5.2.2 节
var.test2 — 方差比检验 (两个正态总体), 5.2.2 节

# 附录 2 R 软件中的函数 (程序)

**A**

abline — 低水平作图函数，加直线， 3.3.3 节， 6.1.7 节
add — 图中的逻辑命令，是否加图， 3.3.2 节

**B**



**C**

**D**



**E**

**F**



**G**



**H**



**I**

**K**



**L**



**M**

**N**



**O**



**P**

**Q**



**R**

**S**

**T**



**U**



**V**



**W**

**其他**

# 参考文献


[1] 高惠璇．应用多元统计分析．北京：北京大学出版社， 2005.1

[2] 王学民．应用多元统计分析．上海：上海财经大学出版社 (第二版), 2004.1

[3] 范金城，梅长林．数据分析．北京：科学出版社， 2002.7

[4] 王松桂，陈敏，陈立萍．线性统计模型．北京：高等教育出版社， 1999.9

[5] Johnson, D. Applied Multivariate Methods for Data Analysts (影印版). 北京：高等教育出版社， 2005.6

[6] Weisberg, S. Applied Linear Regression (Second Edition). 王静龙，梁小筠，李宝慧译，柴根象校．应用线性回归 (第二版). 北京：中国统计出版社，1998.3

[7] 王玲玲，周纪芗．常用统计方法．上海：华东师范大学出版社， 1994.

[8] 吴国富，安万福，刘景海．实用数据分析方法．北京：中国统计出版社，1992.1

[9] 薛毅主编．数学建模基础．北京：北京工业大学出版社， 2004.4

[10] 沈其君． SAS 统计分析．北京：高等教育出版社， 2005.8

[11] http://www.r-project.org

[12] http://cran.r-project.org/bin/windows/base/(下载 R 软件)