(京)新登字 158 号

内 容 简 介

本书为多元统计分析领域内的经典著作，对社会科学和自然科学的许多学科中常要运用多元统计方法来分析数据的研究者是一本很好的专业参考书，同时也可以作为高等院校研究生学习应用统计类课程的教学参考书。本书的内容十分丰富，涵盖多元统计分析的各种有广泛应用的、经典和现代的模型和方法，分为四大部分：

第一部分：预备知识，其中包括多元分析概述，矩阵代数与随机向量，样本几何与随机抽样，多元正态分布；

第二部分：关于多元均值与线性模型的推断，其中包括关于均值向量的推断，多个多元均值向量的比较，多元线性回归模型；

第三部分：协方差结构分析，其中包括主成分分析，因子分析与对协方差矩阵结构的推断，典型相关分析；

第四部分：分类和分组方法，其中包括判别与分类，聚类、距离方法与多维标度变换。

Applied Multivariate Statistical Analysis, 4th ed. /Richard A. Johnson, Dean W. Wichern.
Copyright © 1998 by Prentice-Hall, Inc.

本书中文版专有出版权由 Prentice-Hall 公司授予清华大学出版社，版权为清华大学出版社所有。未经出版者书面允许，不得以任何方式复制或抄袭本书内容。

版权所有，翻印必究。
本书封面贴有清华大学出版社激光防伪标签，无标签者不得销售。

北京市版权局著作权合同登记号：01-98-1482

书　名：实用多元统计分析(第四版)
作　者：Richard A. Johnson, Dean W. Wichern　著　陆　璇　译
出版者：清华大学出版社(北京清华大学学研大厦，邮编 100084)
http：//www.tup.tsinghua.edu.cn
印刷者：北京市清华园胶印厂
发行者：新华书店总店北京发行所
开　本：787×1092 1/16　**印张**：38.5　**字数**：889 千字
版　次：2001 年 4 月第 4 版　2001 年 4 月第 1 次印刷
书　号：ISBN 7-302-04347-7/F・313
印　数：0001～4000
定　价：69.50 元(含盘)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第一部分

预备知识

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第1章 多元分析概述

1.1 引言

科学研究是一个反复学习的过程。首先必须指定一些与某种社会现象或自然现象有关的解释作为目标，然后通过收集数据和分析数据对这些目标进行检验。对通过实验或观察收集来的数据进行分析之后，人们通常会对现象提出一个改进的解释。在这个反复学习的全过程中，往往有些变量会被增添到研究中去，有些则会被剔除。因此大多数现象的复杂性要求研究人员去收集许多不同变量的观测值。本书讨论能从这几类数据集中获取信息的各种统计方法。由于这些数据包含许多变量的同时测量值，所以这一类方法称为**多元分析**。

人们需要了解许多变量之间的关系，这就使多元分析必然成为一个困难问题。因为一方面人的头脑常常被一大堆数据弄得不知所措；另一方面，供推断用的多元统计方法的推导却比在一元情形下需要更多的数学。我们选择的做法是只提供基于代数概念的解释，避开需要用到多元微积分学的统计结果的推导。我们的目标是以一种清晰的方式，利用大量说明性的例子和最低限度的数学，向读者介绍几种有用的多元方法。不过某些数学上的复杂知识仍是需要的，也要求读者具有进行定量思考的愿望。

我们的主要侧重点在于对那些不受控制或操纵的变量所提供的测量值进行**分析**，只是在第 6 和第 7 两章中，我们才处理少数几个实验设计方案，以产生人们主动操纵重要变量时才会出现的数据。尽管实验设计通常是一项科学研究中最重要的部分，但要在某学科中控制适当数据的生成通常是不可能的。(情况的确是这样，例如在商业、经济学、生态学、地质学及社会学中就是如此。)实验设计原理的详情可参考[7]和[8]，幸运的是，这些文献的内容也适用于多元情形。

许多多元方法的基本依据是一种被称为多元正态分布的基本概率模型，这点以后将看得越来越清楚。另一些方法就性质而言属于特殊方法，其正确性要由逻辑或常识方面的论据来证明。无论多元方法的来源如何，都必须在计算机上实现。计算机技术的最新进展已产生出一些相当复杂的统计软件包，从而使实现步骤变得比较容易。

多元分析是一个“混合包”。很难为多元方法建立一个分类体系，使之既能被广泛接受，又能指明这种方法的合适性。有一种分类法可将旨在研究相互依赖关系的方法同旨在研究从属关系的方法区分开来。另一种方法则根据所研究总体的个数及变量集的数目对多元方法进行分类。本书根据各种处理均值的推断、协方差结构的推断以及分类或分组技术来对各章进行分节。但决不应将这种做法看成是试图将每一种方法定位。相反，方法的

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

选择和分析类型的采用很大程度上取决于研究目标。下面我们列出少量实际问题，用以说明统计方法的选择与研究目标之间的联系。这些问题加上书中的例子将对多元方法在不同领域的适用性提供正确评价。

多元方法能最自然地发挥作用之处，便是下列科学研究目标：

1. 数据简化或结构简化 在不损失有价值信息的情况下尽可能简单地将被研究的现象描述出来。希望这样能使解释变得容易些。

2. 分类与分组 根据所测量的特征将一些“类似的”对象或变量分组。另外，或许需要一些分类规则，以便将对象归入明确定义的各组。

3. 变量间依赖性的研究 人们对变量间关系的本质感兴趣。是否所有变量都相互独立？还是有一个或多个变量依赖于其他变量？如果是后者，那又是怎样依赖的？

4. 预测 为了根据某些变量的观测值预测另一个或另一些变量的值，必须确定诸变量之间的关系。

5. 假设的构造与检验 对以多元总体参数形式陈述的多种特殊统计假设进行检验。这样做可以验证某些假设或增强事先建立的信念。

我们引用F. H. C. 马里奥特(Marriott)[19]的一段话为多元分析做一简要的综述。这段话是在讨论聚类分析时说的，不过我们觉得它适用于更多的方法。无论何时，在你尝试或阅读某种数据分析方法时，应该记住这一点。它可以使你保持正确的眼光，不致被理论中某些漂亮词句所左右。

> 要是所得结果与你所获悉的看法不一致，不要接受一个简单的逻辑解释，也不要在某种图形表示中清楚显露出来，因为这些结果可能是错的。数值方法并非魔术，招致失败的原因有很多。它们对数据解释来说不过是有用的帮手，不是能将大量数字自动转变成一组科学事实的碎肉灌肠机。

1.2 多元方法的应用

有关多元方法应用的出版物近年来有了惊人的增加。现在已很难像本书先前那些版本那样用简短的讨论来概括这些方法各式各样的实际应用了。然而，为了说明多元方法的实用价值，我们对来自若干学科的研究成果作一个简要介绍。所介绍的内容是依据前一节中给出的目标类别组织的。当然，我们的许多例子具有多面性，可适用于一个以上的类别。

数据缩减或简化

- 用一些进行放射治疗的癌症患者的变量数据构造一个进行放射治疗的患者的简单测量法。(参见练习 1.15。)
- 用许多国家和地区的径赛运动记录为男女运动员建立一个成绩标准。(参见[10]和[21]。)
- 由高精度扫描仪获得的多光谱图像数据被简化成一种形式，可被看作是一个二维的海岸线的图像。(参见[22]。)
- 利用与产量及蛋白质含量有关的几个变量的数据，建立一个选择母体的标准以改

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

善下几代豆类植物。(参见[14]。)

分类与分组

- 使用与计算机用途有关的几个变量的数值,按计算机工作的类型分成几组,以便更好地决定如何利用现存的(或计划的)计算机资源。(参见[2]。)
- 一些生理学的变量的测量值可用来产生一种筛选法将酗酒者与不酗酒者区分开。(参见[25]。)
- 有关对视觉刺激的反应的数据可用来形成一条规则区分由多发性硬化症引起的视觉疾病患者与未曾患病者。(参见习题 1.14。)
- 美国国内税务署根据从所得税申报单上收集的数据,将纳税人分为两类:需要进行审计的和不需要审计的。(参见[30]。)

变量间依赖性的研究

- 几个变量的数据被用来识别令委托人成功地雇用外来顾问的因素。(参见[13]。)
- 对于创新以及商业环境和商业组织的有关变量的测量,使我们可以发现为什么一些公司实现了产品创新,而另一些公司却没有。(参见[5]。)
- 表示 10 次奥运会上十项全能运动的结果的变量的数据,被用来确定担负十项全能项目取得成功的身体因素。(参见[17]。)
- 对高水平企业经理的冒险倾向的测量与社会经济学特性的测量结合起来,以评估冒险行为与个人业绩间的联系。(参见[18]。)

预测

- 利用考试得分以及几个高中成绩变量与几个大学成绩变量之间的联系,构造用来预测在大学里会成功与否的指标。(参见[11]。)
- 关于沉积物分布尺寸的几个变量数据可用来建立预报不同的沉积物的周围环境的规则。(参见[9]和[20]。)
- 利用会计财务方面的变量的测量值,可构造识别潜在的无偿还能力的财产保险公司的方法。(参见[27]。)
- 利用关于蘩缕苗的几个变量数据,构造一种方法用来预报新苗的种类。(参见[4]。)

假设检验

- 测量一些与污染有关的变量,以确定一个大城市地区的污染程度是在一周中大致保持不变,还是在工作日与周末之间会有明显的不同。(参见练习 1.6。)
- 用几个变量的实验性数据可看出,教育的本质是否造成发觉风险的任何差异,由测验分数来度量。(参见[26]。)
- 利用众多变量的数据来研究美国职业结构的差别,以决定支持两个对立的社会学理论中的哪一个。(参见[16]和[24]。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

- 利用几个变量的数据来确定在新兴工业化国家中不同类型的公司是否呈现出不同的改革模式。(参见[15]。)

前面的描述使我们看到了多元方法在各种领域中的广泛应用。

1.3 数据的组织

在本书中,我们将涉及分析由几个变量或特征构成的测量值。这些测量值(通常称为**数据**)常常必须以不同方式排列和显示。例如,曲线图和列表方式是数据分析的重要手段。概括数字可定量地描绘数据的某些特征,对于任何描述都是必要的。

现在我们介绍一些初步的概念,作为数据组织的第一步。

阵列

每当一个研究者试图了解一个社会现象或自然现象时,他会选择 $p(p\geqslant 1)$ 个**变量**或**事物的特征**来进行记录,从而出现多元数据。对每个个别的**项目**、**个体**或**实验单元**,这些变量的值都被记录下来。

我们将用记号 x_{jk} 表示第 k 个变量在第 j 项上或第 j 次试验中的观测值,即

$$x_{jk} = \text{第 } k \text{ 个变量的第 } j \text{ 项测量值}$$

因此,p 个变量的 n 个测量值可以表示如下:

	变量 1	变量 2	…	变量 k	…	变量 p
项目 1:	x_{11}	x_{12}	…	x_{1k}	…	x_{1p}
项目 2:	x_{21}	x_{22}	…	x_{2k}	…	x_{2p}
⋮	⋮	⋮		⋮		⋮
项目 j:	x_{j1}	x_{j2}	…	x_{jk}	…	x_{jp}
⋮	⋮	⋮		⋮		
项目 n:	x_{n1}	x_{n2}	…	x_{nk}	…	x_{np}

或者我们可用一个有 n 行 p 列的矩形阵列来表示这些数据,称为 $\mathbf{X}$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{j1} & x_{j2} & \cdots & x_{jk} & \cdots & x_{jp} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

于是,阵列 $\mathbf{X}$ 包含了全部变量的所有观测值。

例 1.1 (一个数据阵列)

从一所大学的书店选出四张收据来了解书籍的销售情况。每张收据提供了售书数量及每笔买卖的总量。用第一个变量表示总销售金额,第二个变量表示售出书的数量。然后我们可将收据上相关数据看作是这两个变量的四组测量值。假定数据如下所示:

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

变量 1(销售美元):42　52　48　58

变量 2(书的总数):4　5　4　3

用我们刚才引入的记号,就有

$$x_{11}=42 \quad x_{21}=52 \quad x_{31}=48 \quad x_{41}=58$$

$$x_{12}=4 \quad x_{22}=5 \quad x_{32}=4 \quad x_{42}=3$$

而数据阵列 **X** 由 4 行 2 列组成,即

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}42 & 4\\ 52 & 5\\ 48 & 4\\ 58 & 3\end{bmatrix}$$

以阵列格式考虑数据,简化了对问题的说明,并使数字计算以一种有序且有效的方式进行。从以下两点得到的是双重益处:(1)以阵列运算**描述**数字计算;(2)以计算机为**实现**计算的工具,现在在计算机上用多种语言及统计程序包来进行阵列运算。在第 2 章我们考虑数字阵列的变换。在这方面,我们只考虑它们作为展示数据方法的价值。

描述统计量

一个大的数据集是很庞大的,而正是它的庞大严重地干扰了任何从中提取适当信息的企图。包含在数据中的许多信息,可以通过计算某些通称为**描述**统计量的概括数字进行估计。例如,算术平均值,或样本均值,是一种描述统计量,它提供了一种定位测量——即一个数集的"中心值"。而从均值到所有数的距离的平方的平均值提供出用这些数的分布程度或变差。

我们将尽量依靠描述统计量来测量定位、变差以及线性结合。这些量的正式定义如下:

设 $x_{11},x_{21},\cdots,x_{n1}$是第一个变量的 n 个测量值,则这些测量值的算术平均值是

$$\bar{x}_1=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}x_{j1}$$

如果这 n 个测量值代表被观测的全部测量值集合的一个子集,则 $\bar{x}_1$ 也称为第一个变量的**样本均值**。我们采用这个术语是由于本书的大部分内容是用于研究为了分析来自较大聚集的测量值样本而设计的计算方法。

样本均值可用 p 个变量中的每一个变量的 n 个测量值计算出来,因此,一般地,将有 p 个样本均值:

$$\bar{x}_k=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}x_{jk} \qquad k=1,2,\cdots,p \tag{1-1}$$

分布的程度由**样本方差**给出,对第一个变量的 n 个观测值定义为

$$s_1^2=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{j1}-\bar{x}_1)^2$$

其中 $\bar{x}_1$ 是 x_{j1}的样本均值。一般地,对于 p 个变量,我们有

$$s_k^2=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{jk}-\bar{x}_k)^2 \qquad k=1,2,\cdots,p \tag{1-2}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

有两点说明。首先许多作者定义样本方差时，用 $n-1$ 而不是 n 作为除数。后面我们将看到这样做是有理论上的理由的，并且当测量值的数目 n 较小时，这样做尤其适当。样本方差的两种形式总能用适当的式子区分开来。

第二，尽管记号 s^2 是样本方差传统的表示方法，我们仍将考虑一个样本方差位于主对角线的数量阵列。在这种情况下，为了表明方差在阵列中的位置，使用双下标是比较方便的。因此，引入记号 s_{ii} 来表示由第 i 个变量的测量值计算出的方差，并有式子

$$s_k^2 = s_{kk} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{jk} - \bar{x}_k)^2 \qquad k = 1,2,\cdots,p \tag{1-3}$$

样本方差的平方根 $\sqrt{s_{ii}}$，称为**样本标准差**。这个变差的度量单位和观测值的单位相同。

考虑变量 1 和 2 的 n 对测量值：

$$\begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{12} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_{21} \\ x_{22} \end{bmatrix}, \cdots, \begin{bmatrix} x_{n1} \\ x_{n2} \end{bmatrix}$$

其中 x_{j1} 和 x_{j2} 是由第 j 次试验项观测的（$j=1,2,\cdots,n$）。变量 1 和 2 的测量值的线性结合由**样本协方差**给出

$$s_{12} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{j1} - \bar{x}_1)(x_{j2} - \bar{x}_2)$$

或是它们各自的平均值的偏差之积的平均值。若对一个变量的大观测值与对另一变量的大观测值一起出现，而小值也一起出现，s_{12} 将为正数。若一个变量的大值与另一变量的小值一起出现，s_{12} 将为负数。若两个变量的值间没有什么特别的联系，s_{12} 将近似等于零。

样本协方差

$$s_{ik} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)(x_{jk} - \bar{x}_k) \qquad i = 1,2,\cdots,p,\ k = 1,2,\cdots,p \tag{1-4}$$

度量第 i 个和第 k 个变量间的结合。我们注意到，当 $i=k$ 时，协方差就简化为样本方差。此外，对所有的 i 和 k 都有 $s_{ik}=s_{ki}$。

在此，描述统计量最后一个要考虑的是**样本相关系数**（或**皮尔逊积矩相关系数**；参见[3]）。两个变量间线性结合的这个度量不依赖于测量单位，第 i 个和第 k 个变量的样本相关系数定义为

$$r_{ik} = \frac{s_{ik}}{\sqrt{s_{ii}}\sqrt{s_{kk}}} = \frac{\sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)(x_{jk} - \bar{x}_k)}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)^2}\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{jk} - \bar{x}_k)^2}} \tag{1-5}$$

其中 $i=1,2,\cdots,p$ 和 $k=1,2,\cdots,p$。注意对所有 i,k 都有 $r_{ik}=r_{ki}$。

样本相关系数是样本协方差的一个标准化形式，其中样本方差的平方根的乘积提供了标准化。请注意，对于 s_{ii}，s_{kk} 和 s_{ik} 不论是用 n 或 $n-1$ 作为除数，r_{ik} 的值都是相同的。

样本相关系数 r_{ik} 也可看作是一个样本**协方差**。假设初始值 x_{ji}，x_{jk} 由**标准化**值 $(x_{ji}-\bar{x}_i)/\sqrt{s_{ii}}$ 和 $(x_{jk}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}}$ 取代。标准化值是可公度的，因为两个集合都是中心在零，并用

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

单位标准差表达。样本相关系数正是标准观测值的样本协方差。

尽管样本相关系数与样本协方差的记号相同，通常相关较容易解释，因为它的大小是有界的。概括地讲，样本相关系数 r 有以下性质：

1. r 的值必定在 -1 与 $+1$ 之间。

2. 这里 r 度量的是线性结合的强度。如果 $r=0$，这就意味着分量之间无线性结合。另外，r 的正负号指出了结合的方向：$r<0$ 意味着一个趋势，即当一对数中一个值大于它的平均值，而另一个值小于它的平均值；$r>0$ 则表示这样的趋势，即当一对数中一个值大时另一个值也大，或者两值一起小。

3. 若第 i 个变量的测量值变为 $y_{ji}=ax_{ji}+b, j=1,2,\cdots,n$，且第 k 个变量的测量值变为 $y_{jk}=cx_{jk}+d, j=1,2,\cdots,n$，假定常数 a 和 c 的正负号相同，则 r_{rk} 的值保持不变。

参量 s_{ik} 和 r_{ik} 一般不能传送有关两个变量间结合的全部信息。可能存在不被描述统计量揭示的**非线性**结合。协方差和相关系数提供了线性结合或沿直线结合的度量。它们的值对其他类型的结合不能给出太多信息。另一方面，这些参量对于“杂乱的”观测值（“离群值”）非常敏感，可能会表示出事实上几乎不存在的结合。尽管有这些缺点，协方差和相关系数仍常常被用于计算与分析。当数据没有显示出明显的非线性结合模式且没有出现杂乱的观测值时，它们能提供有说服力的结合的数值概括。

必须考虑可疑的观测值，以便改正明显的记录错误并根据所发现的原因而采取相应措施。s_{ik} 和 r_{ik} 的值应该同时用它们的观测值或同时不用这些观测值来引证。

来自均值的偏差的平方和与偏差的交叉乘积的和常常是有用的。这些参量是：

$$w_{kk}=\sum_{j=1}^{n}(x_{jk}-\bar{x}_k)^2 \qquad k=1,2,\cdots,p \tag{1-6}$$

和

$$w_{ik}=\sum_{j=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_i)(x_{jk}-\bar{x}_k) \qquad i=1,2,\cdots,p,\quad k=1,2,\cdots,p \tag{1-7}$$

由 p 个变量的 n 组测量值计算出的描述统计量也可用阵列来构成。

基本的描述统计量阵列

$$\text{样本均值}\quad \bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}\bar{x}_1\\ \bar{x}_2\\ \vdots\\ \bar{x}_p\end{bmatrix}$$

$$\text{样本方差和协方差}\quad \mathbf{S}_n=\begin{bmatrix}s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p}\\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp}\end{bmatrix} \tag{1-8}$$

$$\text{样本相关系数}\quad \mathbf{R}=\begin{bmatrix}1 & r_{12} & \cdots & r_{1p}\\ r_{21} & 1 & \cdots & r_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ r_{p1} & r_{p2} & \cdots & 1\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

样本均值阵列由 $\bar{\mathbf{x}}$ 表示，样本方差和协方差阵列用大写字母 $\mathbf{S}_n$ 表示，而样本相关系数阵列用 $\mathbf{R}$ 表示。在阵列 $\mathbf{S}_n$ 中下标 n 作为助记符用来提醒你 n 被当作元素 s_{ik} 的除数。所有阵列的大小取决于变量的个数 p。

阵列 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 由 p 行 p 列组成。$\bar{\mathbf{x}}$ 是个只有 1 列 p 行的阵列。阵列 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 中每个元素的第 1 个下标表示行，第 2 个下标表示列。由于 $s_{ik}=s_{ki}$ 和 $r_{ik}=r_{ki}$ 对所有的 i,k 成立，阵列 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 中与主对角线对称位置上的元素是相同的，并且这样的阵列称为是**对称**的。

例 1.2 （关于二元数据的阵列 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$）

考虑例 1.1 中所用数据。每张收据产生一对测量值，总销售金额和售书总数。求阵列 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。

由于有 4 张收据，共得到每个变量的 4 个测量值。

样本均值是

$$\bar{x}_1 = \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4} x_{j1} = \frac{1}{4} \times (42 + 52 + 48 + 58) = 50$$

$$\bar{x}_2 = \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4} x_{j2} = \frac{1}{4} \times (4 + 5 + 4 + 3) = 4$$

$$\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 50 \\ 4 \end{bmatrix}$$

样本方差和协方差是

$$\begin{aligned} s_{11} &= \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4}(x_{j1} - \bar{x}_1)^2 \\ &= \frac{1}{4} \times [(42-50)^2 + (52-50)^2 + (48-50)^2 + (58-50)^2] = 34 \\ s_{22} &= \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4}(x_{j2} - \bar{x}_2)^2 \\ &= \frac{1}{4} \times [(4-4)^2 + (5-4)^2 + (4-4)^2 + (3-4)^2] = 0.5 \\ s_{12} &= \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4}(x_{j1} - \bar{x}_1)(x_{j2} - \bar{x}_2) \\ &= \frac{1}{4} \times [(42-50)(4-4) + (52-50)(5-4) \\ &\quad + (48-50)(4-4) + (58-50)(3-4)] = -1.5 \\ s_{21} &= s_{12} \end{aligned}$$

和

$$\mathbf{S}_n = \begin{bmatrix} 34 & -1.5 \\ -1.5 & 0.5 \end{bmatrix}$$

样本相关系数是

$$r_{12} = \frac{s_{12}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}} = \frac{-1.5}{\sqrt{34} \times \sqrt{0.5}} = -0.36$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$r_{21} = r_{12}$$

故

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & -0.36 \\ -0.36 & 1 \end{bmatrix}$$

图解法

作图是进行数据分析的重要的辅助手段，但常常被人们忽略。尽管不可能同时对几个变量的所有测量值作图并研究它们的形状，但单个变量的图形和一对变量的图形仍可提供很多信息。高级计算机程序和显示设备使我们可以相对容易地从一维、二维或三维空间轻松而直观地检查数据。另一方面，利用纸和笔绘图，也可从数据中领悟许多有价值的东西。表示数据的简单、优美且有效的方法可以从[28]得到。为一对对的变量作图并直观地考察连结的模式，这是一种很好的统计学做法。考虑以下两个变量的 7 对观测值：

变量 1(x_1)：	3	4	2	6	8	2	5
变量 2(x_2)：	5	5.5	4	7	10	5	7.5

这些数据在二维平面上用 7 个点表示(每个坐标轴代表一个变量)，如图 1.1 所示。每个点的坐标由一对测量值确定：(3,5)，(4,5.5)，…，(5,7.5)，所得到的二维图形称为**散布图表**或**散布图**。

图 1.1 还分别显示了由变量 1 和变量 2 的观测值单独作的散点图。这种图称为(**边缘**)**点图**。它们可以从原始观测值直接得到，也可将点投影到散布图的每个坐标轴上得到。

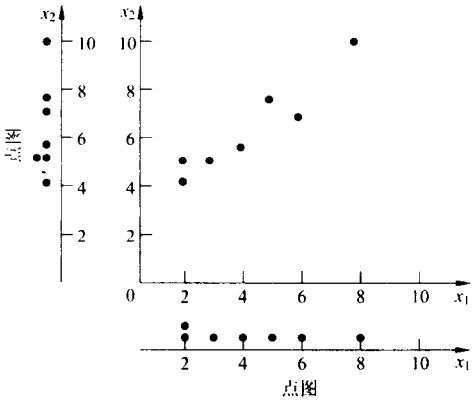


图 1.1　散布图和边缘点图

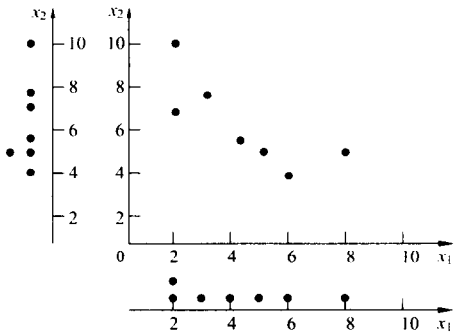


图 1.2　数据重新排列后的散布图和点图

单变量点图中所包含的信息可被用来计算样本均值 $\bar{x}_1$ 和 $\bar{x}_2$ 及样本方差 s_{11} 和 s_{22}(参考练习 1.1。)散布图表明了点的方位，这些点的坐标可用来计算样本协方差 s_{12}。在图 1.1 的散布图中，x_1 的大值与 x_2 的大值一起出现，而 x_1 的小值又与 x_2 的小值一起出现。因此，s_{12}将是正的。

点图与散布图包含了不同类型的信息。边缘点图中所含信息不足以构造出散布图。作为一个说明，假设对前面图 1.1 中的数据重新配对之后，使得变量 x_1 和 x_2 的测量值如下：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

变量 1 (x_1):	5	4	6	2	2	8	3
变量 2 (x_2):	5	5.5	4	7	10	5	7.5

(我们已简单地重新排列了变量 1 的数值。)"新"数据的散布图和点图在图 1.2 中。比较图 1.1 和图 1.2,我们发现边缘点图是相同的,而散布图却明显不同了。在图 1.2 中,x_1 的大值与 x_2 的小值一起出现,而 x_1 的小值又与 x_2 的大值同时出现。因此,描述统计量中单独的变量 $\bar{x}_1$,$\bar{x}_2$,s_{11} 和 s_{22} 保持不变,而度量一对变量间结合的样本协方差 s_{12} 现在却变为负数。

图 1.1 和图 1.2 中数据的不同取向无法通过单独的边缘点图辨别。然而,在两种情况下边缘点图是相同的,这个事实也无法立即从散布图中显示出来。这两种图解法不是对立的,而是相互补充的。

接下来两个例子可进一步说明通过图形表示可以传递的信息。

例 1.3 (异常的观测值对样本相关系数的影响)

在 1990 年 4 月 30 日的《福布斯》杂志上的一篇文章中,列出了 16 家最大的出版公司的某些财务数据,以体现其工作情况与生产率。关于 x_1=雇员(工作)和 x_2=每个雇员创的利润(生产率)这一对变量的数据如图 1.3 所示。我们已标明两个独特的观测值。邓·布拉德街公司从雇员人数讲是最大的公司,但从每个雇员所创利润看是很"典型的"。时代华纳公司在雇员人数方面是很"典型的",而在人均创利润上则相当的少(负值)。

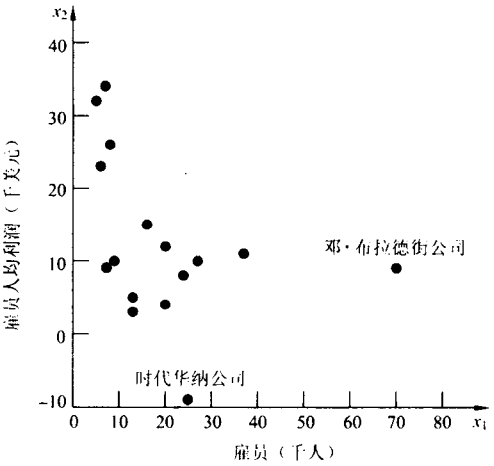


图 1.3 16 家出版公司的雇员人均利润和雇员人数

由 x_1 和 x_2 的值算出的样本相关系数是

$$r_{12}=\begin{cases}-0.39 & \text{对所有 16 个公司}\\ -0.56 & \text{对除邓·布拉德街公司之外的所有公司}\\ -0.39 & \text{对除时代华纳公司之外的所有公司}\\ -0.50 & \text{对除邓·布拉德街公司和时代华纳公司之外的所有公司}\end{cases}$$

显然异常的观测值对于样本相关系数有着相当大的影响。

例 1.4 (棒球数据的散布图)

1978 年 7 月 17 日,Sports Illustrated 杂志上一篇关于体育界工资的文章,为 x_1=国家东部联盟棒球队为球员发放的工资总额提供了一些数据。

我们增加了 x_2=1977 年的胜负比的数据。数据由表 1.1 给出。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 1.1　关于国家东部联盟棒球队 1977 年工资和最终记录

队	x_1＝运动员工资	x_2＝胜负比
Philadelphia Phillies	3 497 900	0.623
Pittsburgh Pirates	2 485 475	0.593
St. Louis Cardinals	1 782 875	0.512
Chicago Cubs	1 725 450	0.500
Montreal Expos	1 645 575	0.463
New York Mets	1 469 800	0.395

图 1.4 的散布图支持了一种看法：冠军是可以买来的。当然，这种因果关系是无法证实的，因为实验不包括随机的工资总额的分配。因此，统计量无法回答这个问题：如果 Mets 队有 400 万美元来支付运动员的薪水，是否就会赢？

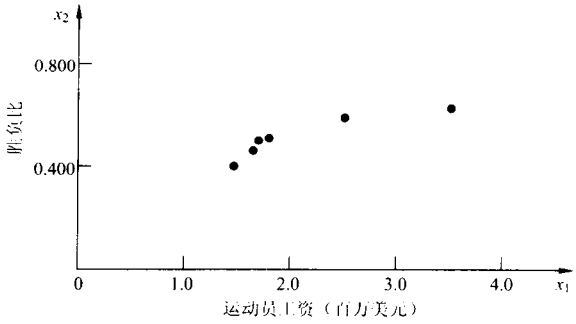


图 1.4　从表 1.1 得到的工资和胜负比

为了构造散布图，例如图 1.4，我们把表 1.1 中的 6 对观测值看作是二维空间中 6 个点的坐标。此图让我们直观地检查相对于工资总额和胜负比的分组方法。

例 1.5　（关于纸张强度观测结果的多重散布图）

纸是由几英尺宽的连续薄片制成的。由于纸中纤维的方向性，沿着机器造纸的方向测量的纸的强度，不同于沿着与机器造纸方向交叉或成直角的方向测量的结果。表 1.2 列出了下列变量的测量值。

x_1 ＝ 密度（克 / 立方厘米）

x_2 ＝ 强度（磅）：沿机器方向

x_3 ＝ 强度（磅）：沿交叉方向

一种新颖的图形用来表示这些数据，见图 1.5。散布图作为协方差阵列的非对角线元素，而盒形图作为对角线元素。用这一方法后者有不同的标度。故我们只用总的形状对称性给出信息，并为每个单独的特性提供可能的离群值。可就图形和异常的观测值来观察散布图。在图 1.5 中，有一个异常的观测值：样本 25 的密度。某些散布图表明，其观测值是相互分离的两簇。阵列的这些散布图将在下一节中新的图解方法的讨论中还会涉及。

在一般的多种响应的情况下，p 个变量同时进行 n 项记录。应该为几对重要的变量作散布图，并且如果工作量没有大到得不偿失，应该对每一对变量作图。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 1.2　纸张性能测量结果

标本	密度	强度	
		机器方向	交叉方向
1	0.801	121.41	70.42
2	0.824	127.70	72.47
3	0.841	129.20	78.20
4	0.816	131.80	74.89
5	0.840	135.10	71.21
6	0.842	131.50	78.39
7	0.820	126.70	69.02
8	0.802	115.10	73.10
9	0.828	130.80	79.28
10	0.819	124.60	76.48
11	0.826	118.31	70.25
12	0.802	114.20	72.88
13	0.810	120.30	68.23
14	0.802	115.70	68.12
15	0.832	117.51	71.62
16	0.796	109.81	53.10
17	0.759	109.10	50.85
18	0.770	115.10	51.68
19	0.759	118.31	50.60
20	0.772	112.60	53.51
21	0.806	116.20	56.53
22	0.803	118.00	70.70
23	0.845	131.00	74.35
24	0.822	125.70	68.29
25	0.971	126.10	72.10
26	0.816	125.80	70.64
27	0.836	125.50	76.33
28	0.815	127.80	76.75
29	0.822	130.50	80.33
30	0.822	127.90	75.68
31	0.843	123.90	78.54
32	0.824	124.10	71.91
33	0.788	120.80	68.22
34	0.782	107.40	54.42
35	0.795	120.70	70.41
36	0.805	121.91	73.68
37	0.836	122.31	74.93
38	0.788	110.60	53.52
39	0.772	103.51	48.93
40	0.776	110.71	53.67
41	0.758	113.80	52.42

资料来源：数据经 SONOCO 制造公司许可使用。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

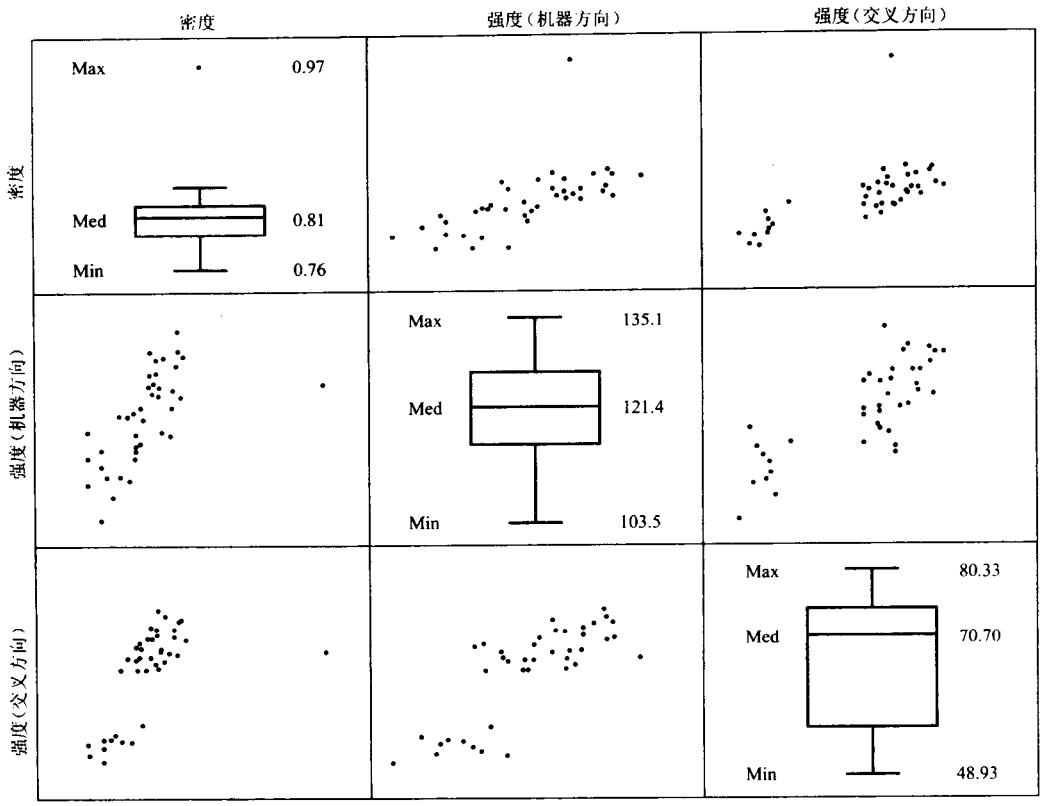


图 1.5　来自表 1.2 的纸张性能数据的散布图和盒形图

由于我们被限定在一个三维世界，我们经常无法描述整个的数据集合。然而，两种进一步的数据几何表示为观察多元统计方法提供了一个重要的概念框架。假如在三维空间捕捉到数据的本质是可能的，就可以用实际图形表示。

***p* 维空间中的 *n* 个点(*p* 维散布图)**　考虑将散布图自然地扩展到 p 维空间，其中 p 个观测结果

$$(x_{j1}, x_{j2}, \cdots, x_{jp})$$

表示一个点在 p 维空间中的坐标在第 j 项的值。每个坐标轴与变量相对应，则第 j 个点沿着第一个坐标轴是 x_{j1}个单位，沿第二个坐标轴是 x_{j2}个单位，…，沿第 p 个坐标轴是 x_{jp}个单位的点。由此得到的有 n 个点的结果的图形不仅显示了变异性的总的模型，而且会显示出 n 项中的相似(和不同)之处。**项目**的分组会在这个表象中表现出来。

***n* 维空间中 *p* 个点**　p 个变量的 n 个观测结果也可看作是 n 维空间中的 p 个点。**X** 的每一列确定其中的一个点。由第 i 个变量的所有 n 个观测值组成的第 i 列确定了第 i 个点

$$\begin{bmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ \vdots \\ x_{ni} \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在第 3 章中，我们将介绍 n 维空间中点的封闭性如何与相关变量之间联合的测量相联系。

1.4 数据的展示及图表示

强大的个人电脑与工作站的迅速发展，导致为数据分析和图解法而设计的复杂统计软件的增加。例如，坐在书桌前就能通过灵巧的计算机生成的图片来观察多维数据的本质，这已是可能的。这些图片对于了解数据极有帮助，并常常防止许多错误的出现以及随后的推理上的问题。

正如我们将在第 8 章和第 12 章看到的，有许多方法企图用不多的维数表示 p 维观测值，使得每对观测值的初始距离（或相似性）几乎保持不变。一般地，如果多维观测值可以表现在二维空间中，则离群值、各种关系及可辨别的分组常常可以用眼睛辨别。我们将讨论并说明几种在二维空间中显示多元数据的方法。关于对图解法的更多讨论的好的初始资料是[12]。

二维散布图的多种联系

在许多令人兴奋的新的图解法中，有一种是用计算机来联系众多二维散布图。

例 1.6 （散布图的联系及刷亮）

参看表 1.2 的纸张性能数据，我们来说明二维散布图的联系。这些数据表示了三个变量的测量值 x_1＝密度，x_2＝沿机器方向的强度；x_3＝与机器交叉方向的强度。图 1.6 显示了一个 3×3 阵列，由每对变量作成的二维散布图组成。例如，图中左上角那个图片是由 (x_1, x_3) 这一对观测值作成的散布图。即，x_1 的值是沿着水平坐标轴绘图，而 x_3 的值则沿

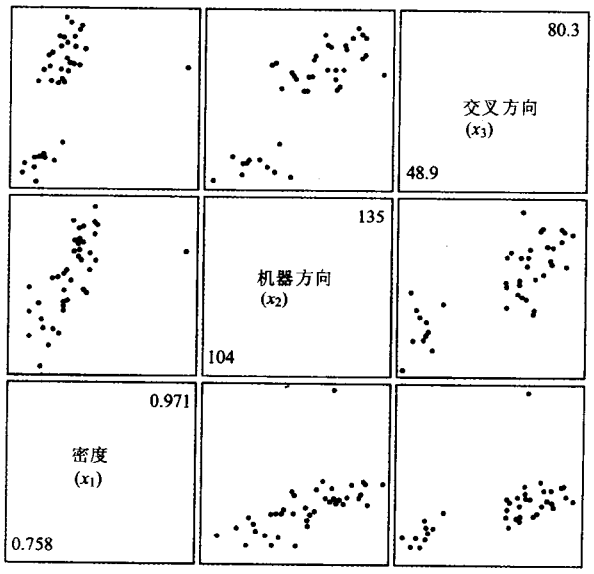


图 1.6 表 1.2 纸张性能数据散布图

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

着垂直坐标轴绘图。图中右下角的散布图是由(x_3,x_1)这对观测值作成的，将坐标轴颠倒一下即成。图中其他散布图的相应说明也成立。注意变量及它们的三维排列在框图中表示时是沿着西南-东北对角线方向的。将图 1.6 的(x_1,x_3)散布图中明显的离群值做出标记(选择出)，产生了图 1.7(a)，离群值被标为样本 25，同一个数据点在所有的散布图中被突出标示。可发现样本 25 也以离群值出现在(x_1,x_2)的散布图中，但不是(x_2,x_3)的散布图的离群值。删掉这个样本形成改变后的见图 1.7(b)散布图。

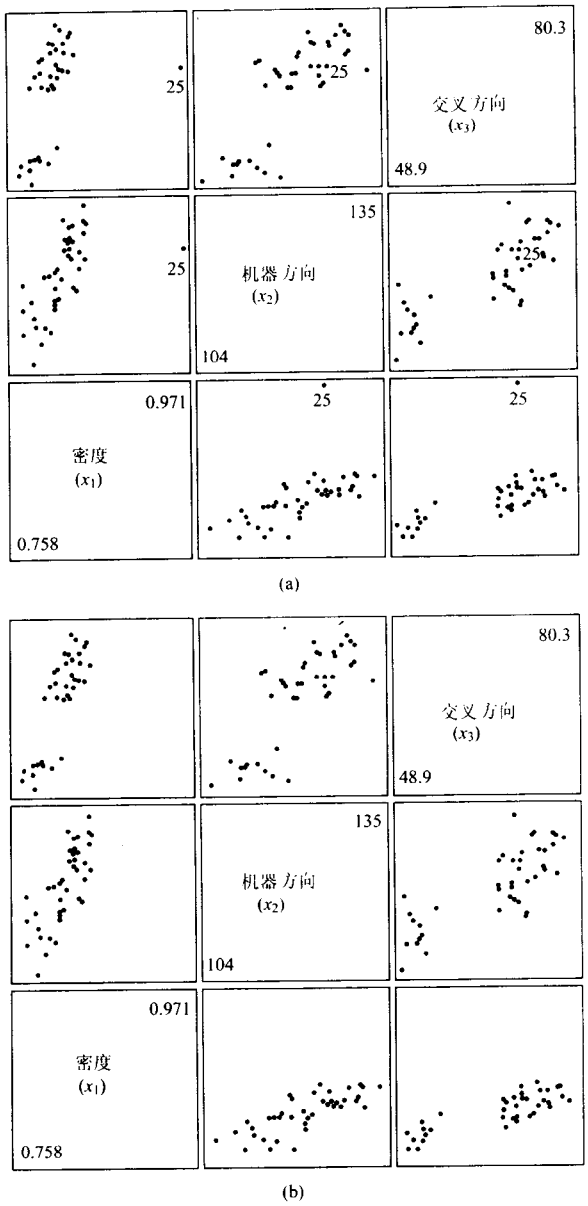
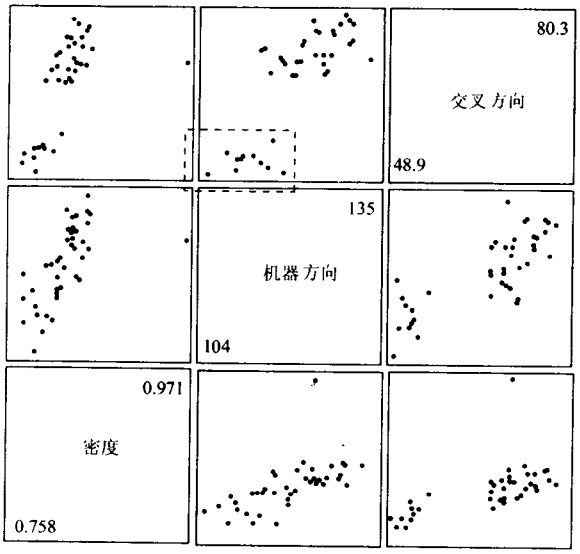


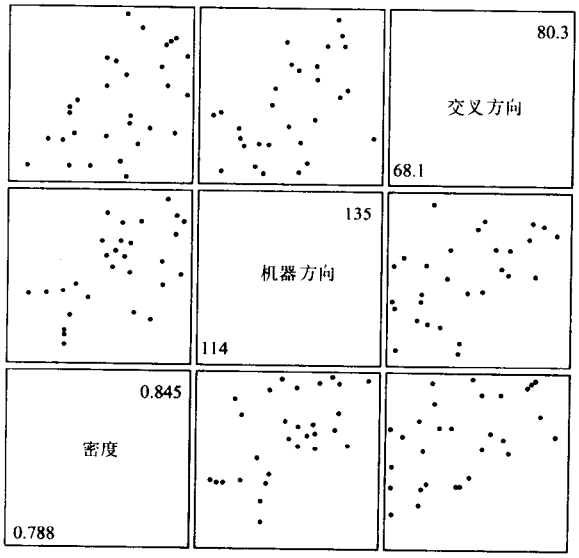
图 1.7　纸张性能数据的改进散布图：
(a) 选择离群值(25)；(b) 删除离群值(25)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

从图 1.7 中，我们注意到，在(x_2,x_3)散布图中一些点看起来与其他的点没有联系。用一个虚线矩形框将这些点框起，在其他所有散布图中高亮显示这些选中的点，如图 1.8(a)所示。进一步检查显示出样本 16～21，样本 34 及样本 38～41 实际上是从一卷旧纸中选取的样本，它们是为了使生产的卡纸板有足够的厚度。删除离群值及与旧纸相关的点，调整剩下的观测值的排列，得到图 1.8(b)中的散布图。



(a)



(b)

图 1.8　改进的散布图对(a)选择的点的组和(b)删去标本 25 在内的诸点，并重画散布图

高亮显示对应于一个变量散布图中被选中的区域的点，称为**刷亮**。刷亮可以从一个矩形开始，如图 1.8(a)，然后，刷子可以移动给出一个高亮显示点的序列。这个过程可在任

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

何时候停止，以得到一个当前情况的瞬态。

像例 1.6 中的那种散布图对数据分析非常有帮助。另一个新的重要的图解法使用了计算机软件，使数据分析者可用种种不同的三维透视图来观察高维数据。这可以动态地持续地进行直到获得足够的信息。关于动态图解法的全面讨论可参见[1]。关于与主机联在一起工作的多元探测图解分析的一个策略可见[31]，该策略的动机是为了得到一个可寻找多元数据结构的常规程序。

例 1.7 （在三维空间作图）

第 4 章中的表 4.3 给出了木材硬度的四个不同测量值。在例 4.13 中，样本(木板)16 及可能样本(木板)9 被标为异常观测值。图 1.9(a)，(b)和(c)显示出硬度数据在 x_1, x_2, x_3 空间上的透视图。这些视图是通过连续地旋转及转换三维坐标轴得到的。旋转坐标轴我们可得到对数据的三维外观的更好的了解。图 1.9(d)给出硬度数据在 x_2, x_3, x_4 空间的图片。注意到图 1.9(a)和(d)清楚地证实了样本 9 和 16 像是离群值。样本 9 的数值在所有的三维坐标中都非常大。把图 1.9(a)的坐标轴逆时针旋转得到图 1.9(b)，两个异常的观测值在这个视图中被屏蔽了。进一步旋转坐标轴 x_2, x_3 得到图 1.9(c)；此时离群值之一样本 16 隐藏起来。

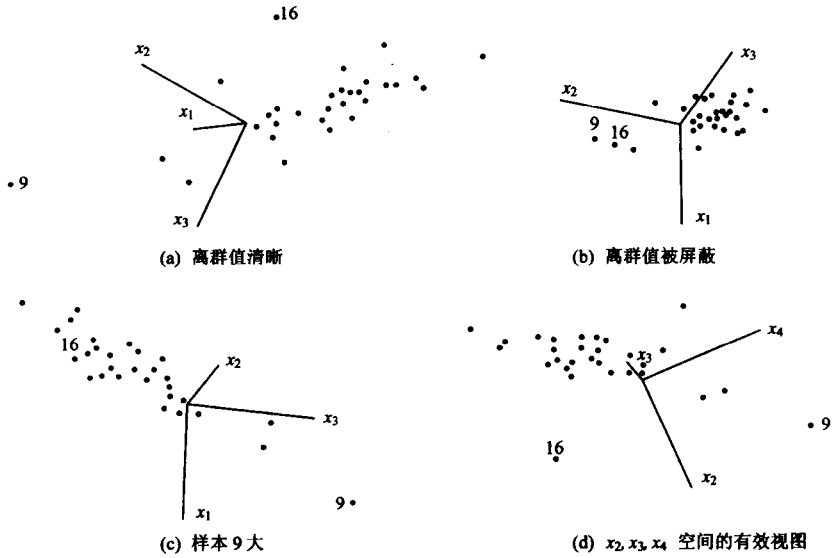


图 1.9 对木材硬度数据的三维透视

通过对这些缓慢旋转的数据进行目测有时可获得额外的认识。统计学家们对这种动态的方式刚刚才开始了解和利用。

像图 1.9 这样的图使我们可以迅速地识别出那些与其他数据不一致的观测值和可能会严重影响到基于标准数据生成模型所得推论的观测值。

现在我们转向多元数据在二维空间中的两个常见的图示表示法：星形和切尔诺夫脸。

星形

假设每个数据单元由 $p \geqslant 2$ 个变量的非负观测值组成。在二维空间中，我们可构造具

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

有固定(参照)半径的圆,从圆心引出 p 条等距的射线,这些射线的长度代表变量的数值,以直线连结射线的端点即形成一个星形。每个星形代表一个多元观测值,这些星形可根据它们(主观的)的相似性分组。

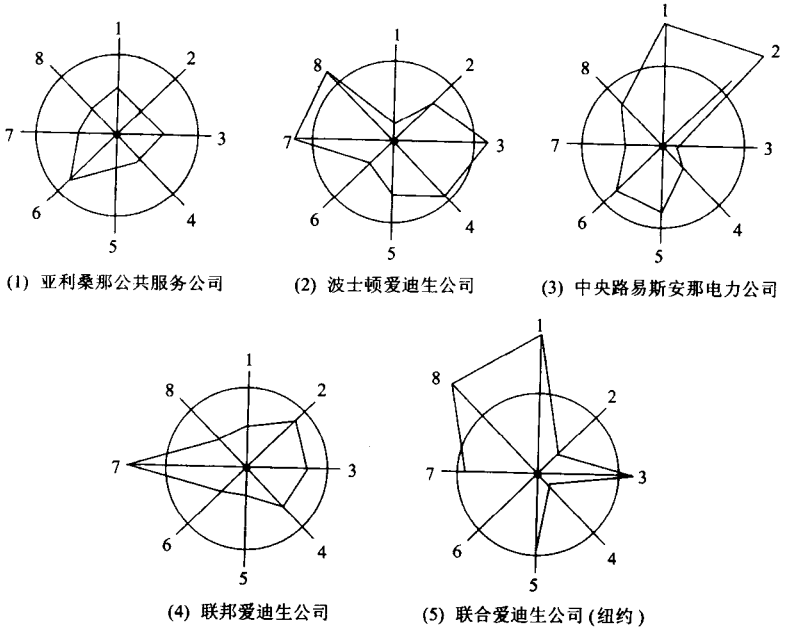
在构造星形时,将观测值标准化常常会有所帮助。在这种情况下,一些观测值会是负数。观测值可以重新表示,使得圆心代表整个数据集中的最小标准化观测值。

例 1.8 (星形的实用数据)

图 1.10 给出 5 个星形图。它们代表第 12 章表 12.5 所列出的 22 个公用事业公司中的前 5 个公司的观测值。共有 8 个变量,因此,这些星形是变形的八边形。

所有变量的观测值都是经过标准化的。在这前 5 个公司中,对任何变量最小的标准化观测值是 -1.6。将这个值作为零点,沿着从圆心引出的 8 条等角射线以相同的比例画出 8 个变量,这些变量以 12 点钟的位置为起点,按顺时针方向排序。

初看起来,这些公司中没有一个与其他任何一个是相似的。由于星形的构造方法,不管怎样,每个变量在感观上权数是相等的。如果我们仔细观察变量 6(以每年使用千瓦小时为单位的销售额总量)和变量 8(以美分/千瓦小时为单位的总的燃料费用),则发现,波士顿爱迪生和联合爱迪生是相似的(小变量 6,大变量 8),以及亚利桑那公共服务公司、中央路易斯安那电力公司和联邦爱迪生公司是相似的(中等变量 6 和中等变量 8)。



(1) 亚利桑那公共服务公司　(2) 波士顿爱迪生公司　(3) 中央路易斯安那电力公司

(4) 联邦爱迪生公司　(5) 联合爱迪生公司(纽约)

图 1.10　前 5 家公用事业公司的星形

切尔诺夫脸

人们的反应表现在脸上。切尔诺夫[6]假定用二维平面的脸来表示 p 维观测结果,脸的特征(如脸的形状,嘴的弯曲率,鼻子的长度,眼睛的大小,瞳孔的位置等等)是由 p 个

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

变量的测量值所决定的。

按照最初的设计，切尔诺夫脸可处理多达 18 个变量。脸部容貌对应的变量的分配是由实验者完成的，不同选择会产生不同的结果。为了取得令人满意的表示常常需要一些重复步骤。

切尔诺夫脸对核实以下两点很有帮助：(1) 由题材知识和直觉知识提出的最初的分组；(2) 由聚类算法产生的最终的分组。

例 1.9 （切尔诺夫脸的实用数据）

根据表 12.5 中的数据，22 家公用事业公司的观测值用切尔诺夫脸表示出来。我们得到以下的对应关系：

变　　量		面部特征
x_1：固定费用保障比率	↔	脸的半高度
x_2：资本回报率	↔	脸的宽度
x_3：每千瓦负载量的费用	↔	嘴中心的位置
x_4：每年负载因子	↔	眼睛的倾斜
x_5：从 1974 年起高峰期千瓦小时需求的增长量	↔	眼睛的离心率(高/宽)
x_6：销售额总量(每年使用千瓦小时)	↔	眼睛的半长
x_7：核的百分比	↔	嘴的曲率
x_8：总的燃料费用(美分/千瓦小时)	↔	鼻子长度

图 1.11 给出了切尔诺夫脸。我们已主观地将“相似的”脸分为 7 组。如果需要组的数

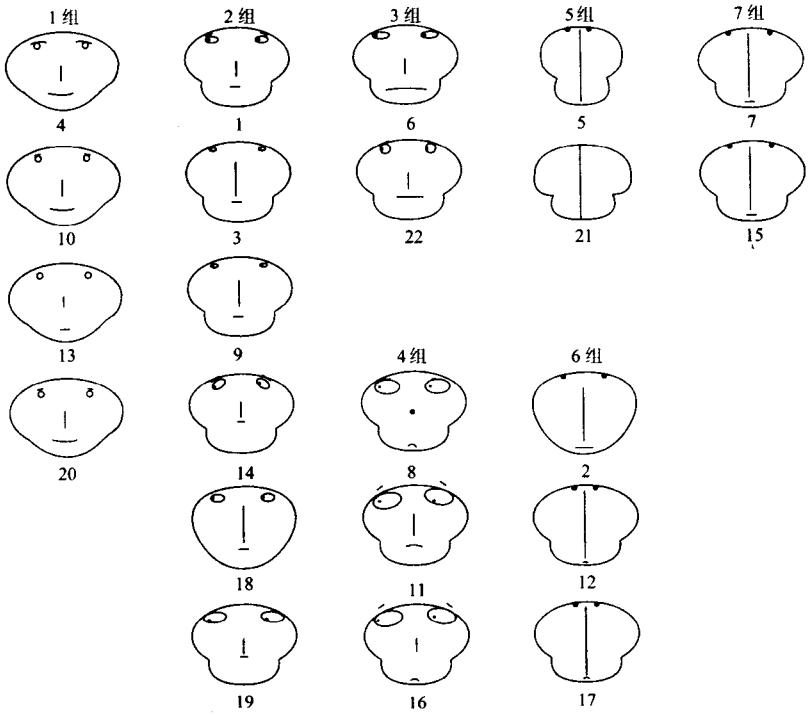


图 1.11　22 项公共事业的切尔诺夫脸

00982273

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

目更少一些，我们可组合 5，6 和 7 组，甚至可将 2 和 3 组合并最终得到 4 或 5 个组。由于我们对与脸部容貌对应的变量的分配，公司的分组很大程度是依据地理位置。

完成构造切尔诺夫脸的工作必须有计算机的帮助。为了确定脸部特征的位置、尺寸和方向，在计算机程序中，通常把数据标准化作为过程的一部分。经过一些练习，我们可用切尔诺夫脸来传达相似性或不相似性，如下面的例子所说明的。

例 1.10 （利用切尔诺夫脸表示整个时期的变化）

图 1.12 显示了切尔诺夫脸的额外的用法（参见[23]。）在图中，脸被用来追踪一个公司在整个时期内的财务情况。如前面所说，每个脸部特征代表一个独立的经济指标，而这些指标的纵向变化是如此地明显。

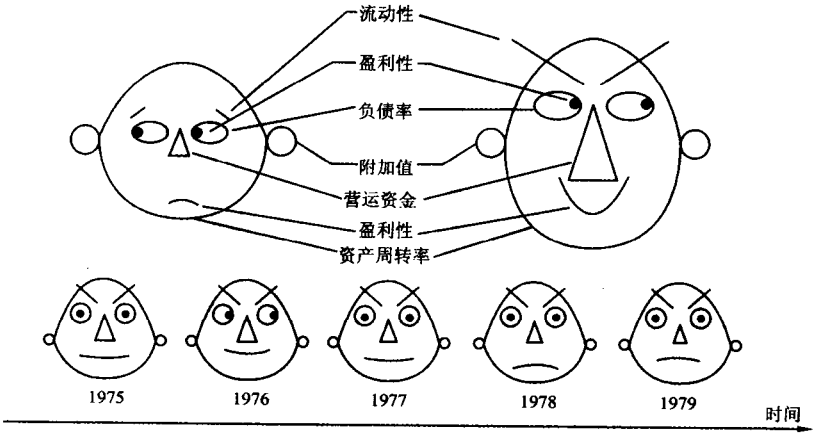


图 1.12　整个时期的切尔诺夫脸

切尔诺夫脸也被用来显示多元观测值在二维空间中的差异。例如，二维空间的坐标轴可表示经度和纬度（地理位置），脸图可以表示几个美国城市的多元测量值。这一类的其他例子在[29]中讨论。

有许多灵巧的方法可以在二维空间中为多元数据作图。我们已介绍其中几种，利用先进的计算机作图可能而且几乎一定会取得更大的进展。

1.5　距离

尽管距离最初显得很难，但大多数多元方法都基于简单的距离概念。直线或欧几里得距离是我们所熟悉的。如果我们考虑平面上的点 $P(x_1,x_2)$，从 P 点到原点 $O(0,0)$ 的直线距离 $d(O,P)$，根据勾股定理，是

$$d(O,P)=\sqrt{x_1^2+x_2^2} \tag{1-9}$$

这种情况用图 1.13 说明。一般地，若点 P 有 p 个坐

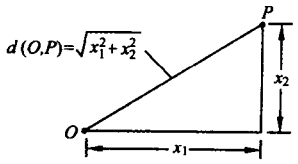


图 1.13　由勾股定理给出的距离

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

标，则 $P=(x_1,x_2,\cdots,x_p)$，P 到原点 $O=(0,0,\cdots,0)$ 的直线距离为

$$d(O,P)=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_p^2} \tag{1-10}$$

（参见第 2 章。）离原点有常数距离的平方（例如 c^2）的所有点 $(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 满足方程

$$d^2(O,P)=x_1^2+x_2^2+\cdots+x_p^2=c^2 \tag{1-11}$$

由于这是一个超球面的方程（当 $p=2$ 时是个圆），与原点等距的点都在超球面上。

坐标为 $P=(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 和 $Q=(y_1,y_2,\cdots,y_p)$ 的任意两个点 P 和 Q 的直线距离为

$$d(P,Q)=\sqrt{(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+\cdots+(x_p-y_p)^2} \tag{1-12}$$

直线或欧几里得距离对大多数的统计目的是不合用的。这是因为每个坐标对于计算欧几里得距离起着相等的作用。当坐标被用来表示不同随机波动幅度的测量值时，经常需要对那些可变性大的坐标加权大大少于对没有很大变化性的坐标的加权，这就需要一个距离的不同的度量。

我们现在的目的是导出一个“统计的”距离。这是由于考虑到变差的不同以及相关性的存在。由于我们的选择取决于样本方差及协方差，在这一点上我们用术语**统计距离**来将它与通常的欧几里得距离区分开。统计距离正是多元分析的基础。

开始，我们把作出 p 维散布图的观测值集合看作是固定的。根据这些我们将构造从原点到一点 $P=(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 的距离的度量。在我们的论证中，P 的坐标 $(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 可以变化以产生该点的不同位置。然而，确定距离的数据仍然保持固定。

为举例说明，假设我们有两个变量的 n 对测量值，称两个变量为 x_1 和 x_2 并假定变量 x_1 的测量值关于 x_2 的测量值独立地变化①。此外，假设 x_1 测量结果的可变性大于 x_2 的测量结果的可变性。数据的散布图看上去有点像图 1.14 中的图片。

观察图 1.14，我们发现，从原点出发向 x_1 的方向给定的偏差的值不像从原点向 x_2 方向等距离的值那样“惊人”或“不正常”。这是因为 x_1 方向内在的可变性大于 x_2 方向的可变性。因此，大的 x_1 坐标（用绝对值）不像大的 x_2 坐标那样意外。当计算到原点的“距离”时，为 x_2 坐标加权比为相同数值的 x_1 坐标加权大一些，看起来是合理的。

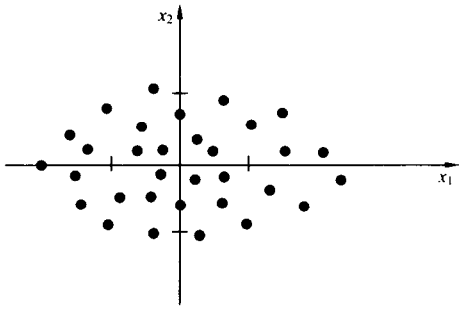


图 1.14　在 x_1 方向上比在 x_2 方向上变化性更大的散布图

接下来采用的方法是用样本标准差去除每个坐标。因此，被标准差除之后，得到“标准化”坐标 $x_1^*=x_1/\sqrt{s_{11}}$ 和 $x_2^*=x_2/\sqrt{s_{22}}$。现在这些标准化的坐标相互是在一个等同的基础上。在考虑变异性方面的不同后，我们利用标准欧几里得公式确定距离。

因此，从原点 $O=(0,0)$ 到点 $P=(x_1,x_2)$ 的统计距离可以由它的标准化坐标 $x_1^*=$

① 在这方面，“独立地”意指 x_2 测量结果不能以任何的精确度预言来自 x_1 的测量结果，反之亦然。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$x_1/\sqrt{s_{11}}$ 和 $x_2^* = x_2/\sqrt{s_{22}}$ 计算出来。

$$d(O,P) = \sqrt{(x_1^*)^2 + (x_2^*)^2}$$

$$= \sqrt{\left(\frac{x_1}{\sqrt{s_{11}}}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{\sqrt{s_{22}}}\right)^2} = \sqrt{\frac{x_1^2}{s_{11}} + \frac{x_2^2}{s_{22}}} \tag{1-13}$$

比较式(1-13)和式(1-9)，我们发现两式的不同是由于式(1-13)中为 x_1^2 和 x_2^2 增加了权数 $k_1 = 1/s_{11}$ 和 $k_2 = 1/s_{22}$。注意，若样本方差是相同的，$k_1 = k_2$，则 x_1^2 和 x_2^2 将得到相同的权数。当权数相同时，忽略公因子，使用普通的欧几里得距离公式是很合适的。换而言之，如果 x_1 方向的变异性与 x_2 方向的相同，并且 x_1 值的变化不依赖于 x_2 的值，欧几里得距离是适用的。

使用式(1-13)，我们看到所有到原点的距离的平方为常数 c^2 的点，设坐标为 (x_1, x_2)，都满足

$$\frac{x_1^2}{s_{11}} + \frac{x_2^2}{s_{22}} = c^2 \tag{1-14}$$

式(1-14)是一个椭圆方程，该椭圆以原点为中心，长轴和短轴分别与坐标轴重合。也就是说，式(1-13)中统计距离的含义是，到原点距离为某常数的所有点的轨迹组成一椭圆。图 1.15表示了这种一般情况。

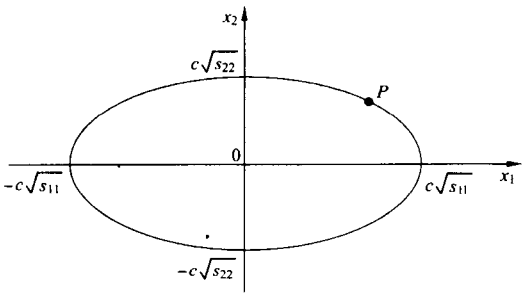


图 1.15　常数统计距离的椭圆

$d^2(O,P) = x_1^2/s_{11} + x_2^2/s_{22} = c^2$

例 1.11　(计算统计距离)

两个变量的一组测量值 (x_1, x_2) 得出 $\bar{x}_1 = \bar{x}_2 = 0$，$s_{11} = 4$ 和 $s_{22} = 1$。假设测量值 x_1 与测量值 x_2 无关，即一对测量值中任一个量的变化都不依赖于另一个。由于样本方差不相等，我们用

$$d^2(O,P) = \frac{x_1^2}{4} + \frac{x_2^2}{1}$$

度量任意点 $P = (x_1, x_2)$ 到原点 $O = (0,0)$ 的距离平方。所有到原点固定距离为 1 的点 (x_1, x_2) 满足方程

$$\frac{x_1^2}{4} + \frac{x_2^2}{1} = 1$$

距离原点 1 个单位的一些点的坐标如下表所示：

方程 $x_1^2/4 + x_2^2/1 = 1$ 的图形是一个中心在(0,0)的椭圆，它的长轴沿着 x_1 坐标轴，短

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

轴则沿着 x_2 坐标轴。长轴与短轴的半轴长分别为 $\sqrt{4}=2$ 和 $\sqrt{1}=1$。单位距离的椭圆在图 1.16 中画出。椭圆上的所有点到原点有相等的统计距离。在此例中，距离为 1。

坐标：(x_1,x_2)	距离：$\frac{x_1^2}{4}+\frac{x_2^2}{1}=1$
$(0,1)$	$\frac{0^2}{4}+\frac{1^2}{1}=1$
$(0,-1)$	$\frac{0^2}{4}+\frac{(-1)^2}{1}=1$
$(2,0)$	$\frac{2^2}{4}+\frac{0^2}{1}=1$
$(1,\sqrt{3}/2)$	$\frac{1^2}{4}+\frac{(\sqrt{3}/2)^2}{1}=1$

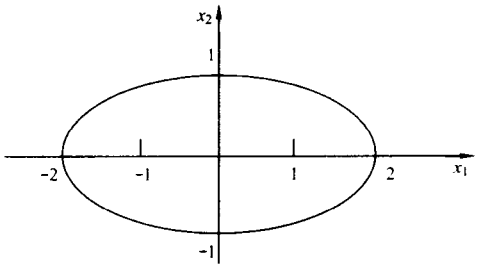


图 1.16　单位距离的椭圆 $\frac{x_1^2}{4}+\frac{x_2^2}{1}=1$

式(1-13)可以加以引申来适应计算任意一点 $P=(x_1,x_2)$ 到任何固定点 $Q=(y_1,y_2)$ 的统计距离。如果我们假定一个变量坐标的变化独立于另一个，则 P 到 Q 的距离为

$$d(P,Q)=\sqrt{\frac{(x_1-y_1)^2}{s_{11}}+\frac{(x_2-y_2)^2}{s_{22}}} \tag{1-15}$$

这一统计距离公式可直接推广到大于二维的空间中。令点 P 和 Q 含有 p 个坐标，即 $P=(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 和 $Q=(y_1,y_2,\cdots,y_p)$。假设 Q 是一固定点[它可以是原点 $O=(0,0,\cdots,0)$]且变量坐标的变化相互独立。令 $s_{11},s_{22},\cdots,s_{pp}$ 分别是由 $x_1,x_2,\cdots,x_p$ 的 n 个测量值构造的样本方差，则从 P 到 Q 的统计距离是

$$d(P,Q)=\sqrt{\frac{(x_1-y_1)^2}{s_{11}}+\frac{(x_2-y_2)^2}{s_{22}}+\cdots+\frac{(x_p-y_p)^2}{s_{pp}}} \tag{1-16}$$

所有到 Q 的距离平方为某定值的点 P 分布在一个超椭球面上，其中心为 Q，长轴及短轴平行于坐标轴。我们应注意下列几点：

1. 要得到 P 到原点 O 的距离，需对式(1-16)设 $y_1=y_2=\cdots=y_p=0$。

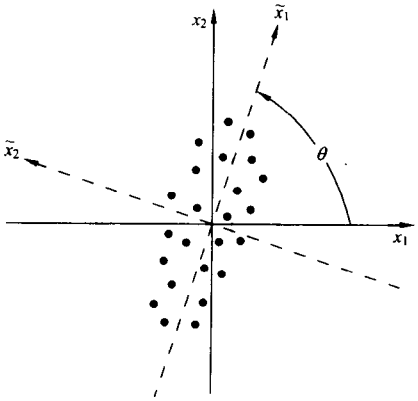


图 1.17　对正相关测量值和一个旋转坐标系的散布图

2. 如果 $s_{11}=s_{22}=\cdots=s_{pp}$，式(1-12)中的欧几里得距离公式是适用的。

由于假设坐标是独立的，式(1-16)中的距离公式仍未包括我们将要遇到的许多重要情况。图 1.17 的散布图描述了一个二维空间中 x_1 的测量值的变化依赖于 x_2 的情况。实际上，这一对变量 (x_1,x_2) 的坐标显示出同大或同小的趋势，并且样本相关系数是正的。此外，x_2 方向的可变性大于 x_1 方向的可变性。

当 x_1 方向的可变性与 x_2 方向的可变性不同并且变量 x_1 与 x_2 相关时，什么是有意义的距离的度量？实际上，只要我们用正确的方法观察事

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

物，我们就可以利用已介绍过的方法。从图 1.17，我们发现如果在保持散布不变的基础上，将原始的坐标系旋转 θ 角并标出旋转过的坐标轴 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$，在新坐标轴下的散布图看起来非常像图 1.14 中所画的。(你可以将书旋转，使 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 轴回到它们通常的位置。)假设我们用 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 坐标计算样本方差，用式(1-13)度量距离。即，根据 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 轴，我们把点 $P=(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2)$ 到原点 $O=(0,0)$ 的距离定义为

$$d(O,P)=\sqrt{\frac{\tilde{x}_1^2}{\tilde{s}_{11}}+\frac{\tilde{x}_2^2}{\tilde{s}_{22}}} \tag{1-17}$$

其中 $\tilde{s}_{11}$ 和 $\tilde{s}_{22}$ 分别表示由 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 的测量值计算出的样本方差。

原始坐标 (x_1,x_2) 与旋转后所得坐标 $(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2)$ 之间的关系如下

$$\begin{aligned}\tilde{x}_1&=x_1\cos(\theta)+x_2\sin(\theta)\\ \tilde{x}_2&=-x_1\sin(\theta)+x_2\cos(\theta)\end{aligned} \tag{1-18}$$

根据式(1-18)给出的关系式，我们可以替换式(1-17)中的 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$，用原来的坐标来表示距离。

经过一些简单的代数变换，从 $P=(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2)$ 到原点 $O=(0,0)$ 的距离可以用 P 的原始坐标 x_1 和 x_2 表示为

$$d(O,P)=\sqrt{a_{11}x_1^2+2a_{12}x_1x_2+a_{22}x_2^2} \tag{1-19}$$

其中 a 为使得 x_1 和 x_2 取所有可能取值时，距离都为非负数的数。这里，a_{11}，a_{12} 和 a_{22} 由角 θ 决定，且 s_{11}，s_{12} 和 s_{22} 是由原始数据计算出来的。[①]此处 a_{11}，a_{12} 和 a_{22} 的特定形式并不重要的。重要的是非零相关系数 r_{12} 所需要的交叉乘积项 $2a_{12}x_1x_2$ 的出现。

比较式(1-13)与式(1-19)，式(1-13)可看作是式(1-19)在 $a_{11}=1/s_{11}$，$a_{22}=1/s_{22}$ 及 $a_{12}=0$ 时的特殊情况。

一般地，在变量相关的情况下，从固定点 $Q=(y_1,y_2)$ 到点 $P=(x_1,x_2)$ 的统计距离的一般形式为

$$d(P,Q)=\sqrt{a_{11}(x_1-y_1)^2+2a_{12}(x_1-y_1)(x_2-y_2)+a_{22}(x_2-y_2)^2} \tag{1-20}$$

且当 a_{11}，a_{12} 及 a_{22} 为已知时，距离总是可计算出来的。此外，所有与 Q 的距离平方为常数 c^2 的点 $p=(x_1,x_2)$ 的坐标满足

$$a_{11}(x_1-y_1)^2+2a_{12}(x_1-y_1)(x_2-y_2)+a_{22}(x_2-y_2)^2=c^2 \tag{1-21}$$

按照定义，这是一个中心在 Q 的椭圆方程。方程的图形如图 1.18 所示。长轴与短轴被标出来了，它们分别平行于 $\tilde{x}_1$ 轴与 $\tilde{x}_2$ 轴。由于选择了脚注中的 a_{11}，a_{12} 及 a_{22}，$\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 轴相对于 x_1 和 x_2 轴成 θ 角。

---

① 具体地，

$$a_{11}=\frac{\cos^2(\theta)}{\cos^2(\theta)s_{11}+2\sin(\theta)\cos(\theta)s_{12}+\sin^2(\theta)s_{22}}+\frac{\sin^2(\theta)}{\cos^2(\theta)s_{22}-2\sin(\theta)\cos(\theta)s_{12}+\sin^2(\theta)s_{11}}$$

$$a_{22}=\frac{\sin^2(\theta)}{\cos^2(\theta)s_{11}+2\sin(\theta)\cos(\theta)s_{12}+\sin^2(\theta)s_{22}}+\frac{\cos^2(\theta)}{\cos^2(\theta)s_{22}-2\sin(\theta)\cos(\theta)s_{12}+\sin^2(\theta)s_{11}}$$

$$a_{12}=\frac{\cos(\theta)\sin(\theta)}{\cos^2(\theta)s_{11}+2\sin(\theta)\cos(\theta)s_{12}+\sin^2(\theta)s_{22}}-\frac{\sin(\theta)\cos(\theta)}{\cos^2(\theta)s_{22}-2\sin(\theta)\cos(\theta)s_{12}+\sin^2(\theta)s_{11}}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

式(1-19)及式(1-20)的距离公式可直接推广到 p 维空间。设 $P=(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 为一点，其坐标表示一组相关且服从内在可变性的变量。$O=(0,0,\cdots,0)$ 表示原点，$Q=(y_1,y_2,\cdots,y_p)$ 为一指定的固定点，则 P 到 O 和 P 到 Q 的距离具有一般形式

$$d(O,P)$$

$$=\sqrt{a_{11}x_1^2+a_{22}x_2^2+\cdots+a_{pp}x_p^2+2a_{12}x_1x_2+2a_{13}x_1x_3+\cdots+2a_{p-1,p}x_{p-1}x_p} \tag{1-22}$$

和

$$d(P,Q)$$

$$=[a_{11}(x_1-y_1)^2+a_{22}(x_2-y_2)^2+\cdots+a_{pp}(x_p-y_p)^2+2a_{12}(x_1-y_1)(x_2-y_2)$$
$$+2a_{13}(x_1-y_1)(x_3-y_3)+\cdots+2a_{p-1,p}(x_{p-1}-y_{p-1})(x_p-y_p)]^{1/2} \tag{1-23}$$

其中 a 为使得距离总为非负的数①。

我们注意到式(1-22)及式(1-23)中的距离完全由系数(权数)a_{ik}，$i=1,2,\cdots,p$，$k=1,2,\cdots,p$，决定。这些系数可在一矩形阵列中表示出来

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1p} & a_{2p} & \cdots & a_{pp} \end{bmatrix} \tag{1-24}$$

其中系数 $a_{ik}(i\neq k)$ 出现了两次，这是因为它们在距离公式中被乘了 2。因此，这个阵列中的元素确定距离函数。a_{ik} 不能是任意数值，它们必须使得计算出的每一对点的距离都为非负数(参见练习 1.10)。

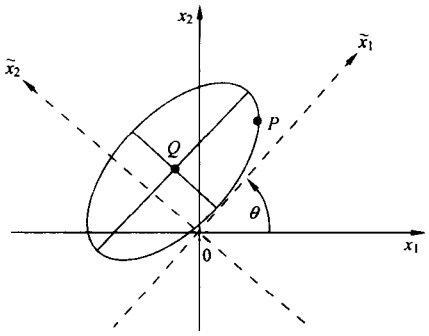


图 1.18　到点 Q 为常数距离的点的椭圆

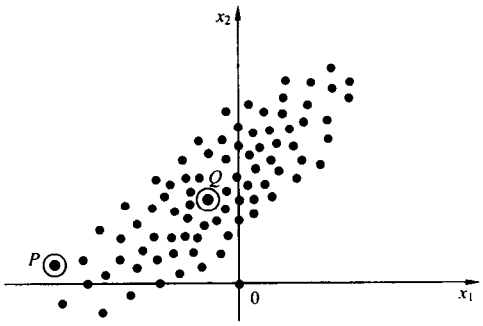


图 1.19　相对于点 P 和原点的一组点

由式(1-22)和式(1-23)计算出的定常数距离的轮廓线是一超椭球面，当 $p=3$ 时，超椭球面像一个橄榄球；超过三维时，对其形象化是不可能的。

图 1.19 启发性地说明了需要考虑统计距离而不是欧几里得距离。图 1.19 描述了重心(样本均值)在点 Q 的一组点。考虑从点 Q 到点 P 和到原点 O 的欧几里得距离。Q 到 P 的欧几里得距离大于 Q 到 O 的欧几里得距离。然而，P 点比原点显得更像是属于这一组

① 式(1-22)和式(1-23)中的距离平方的代数表达式被称为二次型，具体被称为正定二次型。用矩阵以一简单形式表示这些二次型是可能的，我们将在第 2 章的 2.3 节中叙述。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

点内的点。如果我们考虑到这一组点的可变性，并用式(1-20)的统计距离来度量距离，则 Q 距离 P 比距离 O 要近。这个结果看来合理地给出了散布的本质。

还有一些其他的距离的度量方法(参见练习 1.12)。有时，考虑不涉及圆或椭圆的距离是有益的。P 和 Q 两点之间的任何距离度量 $d(P,Q)$ 如果满足下面的性质，都是有效的，其中 R 是任一个其他中间点：

$$\begin{aligned} &d(P,Q)=d(Q,P) \\ &d(P,Q)>0,\ 若\ P\neq Q \\ &d(P,Q)=0,\ 若\ P=Q \\ &d(P,Q)\leqslant d(P,R)+d(R,Q) \qquad (三角不等式) \end{aligned} \tag{1-25}$$

1.6 最终评注

我们试图推动多元分析的研究，并为您提供一些组织、概括及展示数据的基本而重要的方法。此外，还介绍了一个一般性的距离概念，在后面的章节将会反复用到它。

练　　习

1.1　考虑图 1.1 中所画的 7 对测量值(x_1,x_2)：

x_1	3	4	2	6	8	2	5
x_2	5	5.5	4	7	10	5	7.5

计算样本均值 $\bar{x}_1$ 和 $\bar{x}_2$，样本方差 s_{11} 和 s_{22} 及样本协方差 s_{12}。

1.2　一家晨报列出一种外国小轿车的二手车价格，车龄 x_1 以年度量，销售价格 x_2 以千美元度量：

x_1	3	5	5	7	7	7	8	9	10	11
x_2	2.30	1.90	1.00	0.70	0.30	1.00	1.05	0.45	0.70	0.30

(a) 作数据的散布图及边缘点图。

(b) 根据散布图推断样本协方差的正负号。

(c) 计算样本均值 $\bar{x}_1$ 和 $\bar{x}_2$ 及样本方差 s_{11} 和 s_{22}。计算样本协方差 s_{12} 和样本相关系数 r_{12}。解释这些参数。

(d) 利用式(1-8)写出样本均值阵列 $\bar{\mathbf{x}}$，样本方差-协方差阵列 $\mathbf{S}_n$ 和样本相关阵列 $\mathbf{R}$。

1.3　下面是变量 x_1,x_2 和 x_3 的 5 个测量值：

x_1	9	2	6	5	8
x_2	12	8	6	4	10
x_3	3	4	0	2	1

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

求阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。

1.4　美国 10 家最大的工业公司提供以下数据：

公　　司	x_1=销售总额（百万美元）	x_2=利润（百万美元）	x_3=资产（百万美元）
通用汽车	126 974	4 224	173 297
福特	96 933	3 835	160 893
埃克森	86 656	3 510	83 219
IBM	63 438	3 758	77 734
通用电气	55 264	3 939	128 344
美孚	50 976	1 809	39 080
菲利浦·莫利斯	39 069	2 946	38 528
克莱斯勒	36 156	359	51 038
杜邦	35 209	2 480	34 715
德士古	32 416	2 413	25 636

资料来源："财富 500"，《财富》，121(April 23，1990)，346－367。

(a) 为变量 x_1 和 x_2 作散布图及边缘点图，并加以解释。

(b) 计算 $\bar{x}_1$，$\bar{x}_2$，s_{11}，s_{22}，s_{12}和 r_{12}。解释 r_{12}。

1.5　利用练习 1.4 中的数据

(a) 画出(x_2，x_3)和(x_1，x_3)的散布图和边缘点图。解释这些图形。

(b) 计算(x_1，x_2，x_3)的阵列 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。

1.6　表 1.3 中的数据是对洛杉矶地区空气污染变量的 42 个测量值的记录，这些测量值是在不同日子的中午 12 点采集的(可参见数据磁盘上的空气污染数据。)。

表 1.3　空气污染数据

风(x_1)	日光辐射(x_2)	CO(x_3)	NO(x_4)	NO_2(x_5)	O_3(x_6)	HC(x_7)
8	98	7	2	12	8	2
7	107	4	3	9	5	3
7	103	4	3	5	6	3
10	88	5	2	8	15	4
6	91	4	2	8	10	3
8	90	5	2	12	12	4
9	84	7	4	12	15	5
5	72	6	4	21	14	4
7	82	5	1	11	11	3
8	64	5	2	13	9	4
6	71	5	4	10	3	3
6	91	4	2	12	7	3
7	72	7	4	18	10	3
10	70	4	2	11	7	3
10	72	4	1	8	10	3
9	77	4	1	9	10	3

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

风(x_1)	日光辐射(x_2)	CO(x_3)	NO(x_4)	NO_2(x_5)	O_3(x_6)	HC(x_7)
8	76	4	1	7	7	3
8	71	5	3	16	4	4
9	67	4	2	13	2	3
9	69	3	3	9	5	3
10	62	5	3	14	4	4
9	88	4	2	7	6	3
8	80	4	2	13	11	4
5	30	3	3	5	2	3
6	83	5	1	10	23	4
8	84	3	2	7	6	3
6	78	4	2	11	11	3
8	79	2	1	7	10	3
6	62	4	3	9	8	3
10	37	3	1	7	2	3
8	71	4	1	10	7	3
7	52	4	1	12	8	4
5	48	6	5	8	4	3
6	75	4	1	10	24	3
10	35	4	1	6	9	2
8	85	4	1	9	10	2
5	86	3	1	6	12	2
5	86	7	2	13	18	2
7	79	7	4	9	25	3
7	79	5	2	8	6	2
6	68	6	2	11	14	3
8	40	4	3	6	5	2

资料来源：数据经 G. C. Tiao 教授许可使用。

(a) 为所有变量作边缘点图。

(b) 构造阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 并对 $\mathbf{R}$ 中元素做解释。

1.7　下面给出对 $p=2$ 个变量的 $n=3$ 个观测值：

$$\text{变量 1：}\quad x_{11}=2 \quad x_{21}=3 \quad x_{31}=4$$

$$\text{变量 2：}\quad x_{12}=1 \quad x_{22}=2 \quad x_{32}=4$$

(a) 为每对观测值在二维“变量空间”作图，即构造数据的二维散布图。

(b) 在三维“项目空间”中将数据作为两点标出。

1.8　用式(1-12)的欧几里得距离公式，取 $p=2$ 及用式(1-20)的统计距离公式，取 $a_{11}=1/3$，$a_{22}=4/27$，$a_{12}=1/9$。计算点 $P=(-1,1)$ 到点 $Q=(1,0)$ 的距离。画出到点 Q 的统计距离平方为常数 1 的点的轨迹。

1.9　考虑下面两个变量 x_1 和 x_2 的 8 对测量值：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

x_1	-6	-3	-2	1	2	5	6	8
x_2	-2	-3	1	-1	2	1	5	3

(a) 画出数据的散布图，并计算 s_{11}，s_{22}及 s_{12}。

(b) 假定将原始坐标轴旋转角度 $\theta=26°$[已知 $\cos(26°)=0.899$ 和 $\sin(26°)=0.438$]。利用式(1-18)计算与变量 $\tilde{x}_1$，$\tilde{x}_2$ 对应的测量值。

(c) 根据(b)中求出的 $\tilde{x}_1$，$\tilde{x}_2$ 的测量值，计算样本方差 $\tilde{s}_{11}$及 $\tilde{s}_{22}$。

(d) 设一对新的测量值$(x_1,x_2)=(4,-2)$。用式(1-18)将它们变换为 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 的测量值，并用式(1-17)计算原点 $O=(0,0)$到新点 $P=(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2)$的距离 $d(O,P)$。

注意：需要用到(c)中求出的 $\tilde{s}_{11}$和 $\tilde{s}_{22}$。

(e) 用式(1-19)及脚注②给出的关于 a_{11}，a_{22}及 a_{12}的表达式，计算点 $P=(4,-2)$到原点 $O=(0,0)$的距离。

注意：需用到(a)中求出的 s_{11}，s_{22}及 s_{12}。将这一计算出的距离和(d)中用 $\tilde{x}_1$ 和 $\tilde{x}_2$ 的值算出的距离进行比较(在舍入误差范围内，数值应是相同的。)。

1.10　下面的距离函数对于计算从原点出发的距离是否有效？试解释。

(a) $x_1^2+4x_2^2+x_1x_2=(\text{距离})^2$

(b) $x_1^2-2x_2^2=(\text{距离})^2$

1.11　设 $a_{11}=4$，$a_{22}=1$ 和 $a_{12}=-1$，证明式(1-20)定义的距离满足式(1-25)中的前三个条件。(三角不等式较难证明)

1.12　定义从点 $P=(x_1,x_2)$到原点 $O=(0,0)$的距离为

$$d(O,P)=\max(|x_1|,|x_2|)$$

(a) 计算从点 $P=(-3,4)$到原点的距离。

(b) 画出到原点的距离平方为 1 的点的轨迹。

(c) 将上述距离公式推广到 p 维空间中的点。

1.13　一个大城市的主要道路被设计成网格形，如下图所示。街道 1 至 5 的方向为从北至南(NS)，街道 A 至 E 方向为从东至西(EW)。假设在交点$(A,2)$，$(E,3)$和$(C,5)$上有零售商店。又假定在一条街上两个交点之间的距离不论是南北方向还是东西方向都为 1 个单位。网格上任何两个交点(点)间的距离称为“城市街区”距离。(例如交点$(D,1)$和$(C,2)$间的距离，我们可以称之为 $d((D,1),(C,2))$，可以这样算出 $d((D,1),(C,2))=d((D,1),(D,2))+d((D,2),(C,2))=1+1=2$，或是 $d((D,1),(C,2))=d((D,1),(C,1))+d((C,1),(C,2))=1+1=2$。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在一个交点上设置一个供应机构(仓库),使得从仓库到 3 个零售商店的距离总和最小。

以下的练习包含相当大的数据集合。或许需要一台计算机来完成所需的计算。

1.14　表 1.4 包含一些在 1.2 节中讨论过的未处理的数据(可见于磁盘上的多发性硬化数据),两种不同的视觉刺激($S1$ 和 $S2$)对研究人群中实验对象的左眼(L)和右眼(R)都产生影响。表中记录的值包括 x_1(参加实验者的年龄);x_2(刺激 $S1$ 对两眼总影响,即 $S1L+S1R$);x_3(刺激 $S1$ 对两眼影响之差,即 $|S1L-S1R|$);如此类推。

表 1.4　多发性硬化数据

非多发性硬化人群数据					
实验对象序号	x_1 (年龄)	x_2 ($S1L+S1R$)	x_3 $\|S1L-S1R\|$	x_4 ($S2L+S2R$)	x_5 $\|S2L-S2R\|$
1	18	152.0	1.6	198.4	0.0
2	19	138.0	0.4	180.8	1.6
3	20	144.0	0.0	186.4	0.8
4	20	143.6	3.2	194.8	0.0
5	20	148.8	0.0	217.6	0.0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
65	67	154.4	2.4	205.2	6.0
66	69	171.2	1.6	210.4	0.8
67	73	157.2	0.4	204.8	0.0
68	74	175.2	5.6	235.6	0.4
69	79	155.0	1.4	204.4	0.0
多发性硬化人群数据					
实验对象序号	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	23	148.0	0.8	205.4	0.6
2	25	195.2	3.2	262.8	0.4
3	25	158.0	8.0	209.8	12.2
4	28	134.4	0.0	198.4	3.2
5	29	190.2	14.2	243.8	10.6
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
25	57	165.6	16.8	229.2	15.6
26	58	238.4	8.0	304.4	6.0
27	58	164.0	0.8	216.8	0.8
28	58	169.8	0.0	219.2	1.6
29	59	199.8	4.6	250.2	1.0

资料来源:数据经 G. G. Celeisa 博士许可使用。

(a) 画出多发性硬化人群关于变量 x_2 和 x_4 的二元散布图,并加以说明。

(b) 对非多发性硬化和多发性硬化人群分别计算阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。

1.15　表 1.5 中所列数据是 4.2 节中描述的 98 个测量值的一部分。(见磁盘上放射

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

疗法数据。)数据包括病人接受放射性治疗整个过程的平均评价。所测变量包括 x_1(症状次数,如喉咙疼痛或恶心);x_2(活动量,分为 1～5 个等级);x_3(睡眠量,分为 1～5 个等级);x_4(食物摄取量,分为 1～3 个等级);x_5(食欲,分为 1～5 个等级)和 x_6(皮肤反应,分为 0～3 个等级)。

表 1.5　放射疗法数据

x_1 症状	x_2 运动	x_3 睡眠	x_4 食物摄取	x_5 食欲	x_6 皮肤反应
0.889	1.389	1.555	2.222	1.945	1.000
2.813	1.437	0.999	2.312	2.312	2.000
1.454	1.091	2.364	2.455	2.909	3.000
0.294	0.941	1.059	2.000	1.000	1.000
2.727	2.545	2.819	2.727	4.091	0.000
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
4.100	1.900	2.800	2.000	2.600	2.000
0.125	1.062	1.437	1.875	1.563	0.000
6.231	2.769	1.462	2.385	4.000	2.000
3.000	1.455	2.090	2.273	3.272	2.000
0.889	1.000	1.000	2.000	1.000	2.000

资料来源:以上数据由 Annette Tealey,R. N. 夫人提供。x_2 和 x_3 的值小于 1.0 是由于数据收集过程的误差引起的。包含小于 1.0 的 x_2 和 x_3 值的行可忽略。

(a) 画出关于变量 x_2 和 x_3 的二维散布图和边缘点图(或直方图)。x_3 数据中有错误吗?

(b) 计算阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。解释两两的相关性。

1.16　某项研究的目的为确定老年妇女是进行体育锻练还是增加营养会减缓骨骼损坏。在研究之初,一名研究者用光子吸收法测量了骨骼中无机物含量。对三根骨头主侧和非主侧记录了测量值并列于表 1.6 中。(见磁盘中的无机物含量数据。)

计算阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$,解释两两的相关性。

表 1.6　骨骼中无机物含量

受实验者序号	主侧的桡骨	桡骨	主侧的肱骨	肱骨	主侧的尺骨	尺骨
1	1.103	1.052	2.139	2.238	0.873	0.872
2	0.842	0.859	1.873	1.741	0.590	0.744
3	0.925	0.873	1.887	1.809	0.767	0.713
4	0.857	0.744	1.739	1.547	0.706	0.674
5	0.795	0.809	1.734	1.715	0.549	0.654
6	0.787	0.779	1.509	1.474	0.782	0.571
7	0.933	0.880	1.695	1.656	0.737	0.803
8	0.799	0.851	1.740	1.777	0.618	0.682
9	0.945	0.876	1.811	1.759	0.853	0.777

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

受实验者序号	主侧的桡骨	桡骨	主侧的肱骨	肱骨	主侧的尺骨	尺骨
10	0.921	0.906	1.954	2.009	0.823	0.765
11	0.792	0.825	1.624	1.657	0.686	0.668
12	0.815	0.751	2.204	1.846	0.678	0.546
13	0.755	0.724	1.508	1.458	0.662	0.595
14	0.880	0.866	1.786	1.811	0.810	0.819
15	0.900	0.838	1.902	1.606	0.723	0.677
16	0.764	0.757	1.743	1.794	0.586	0.541
17	0.733	0.748	1.863	1.869	0.672	0.752
18	0.932	0.898	2.028	2.032	0.836	0.805
19	0.856	0.786	1.390	1.324	0.578	0.610
20	0.890	0.950	2.187	2.087	0.758	0.718
21	0.688	0.532	1.650	1.378	0.533	0.482
22	0.940	0.850	2.334	2.225	0.757	0.731
23	0.493	0.616	1.037	1.268	0.546	0.615
24	0.835	0.752	1.509	1.422	0.618	0.664
25	0.915	0.936	1.971	1.869	0.869	0.868

资料来源：数据经 Everett Smith 许可使用。

1.17　表 1.7 中所列数据是 1.2 节中描述过的部分数据。(见于数据磁盘中的国家和地区径赛记录。)55 个国家和地区的女子径赛记录可以用来研究赛跑项目间的关系。计算阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。当你从短跑(100 米)转到长跑(马拉松)时，注意相关系数的大小，解释这些两两相关关系。

1.18　把表 1.7 中所列的女子国家和地区的径赛记录换算为以米/秒来度量的速度。例如阿根廷女子 100 米短跑全国速度记录为 100 米/11.61 秒＝8.613 米/秒。注意，800 米、1500 米、3000 米和马拉松赛跑的记录是用分度量的。马拉松全程为 26.2 英里或 42 195 米。计算阵列 $\bar{\mathbf{x}}$,$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。当你从短跑(100 米)转到长跑(马拉松)时，注意相关系数的大小，解释这些两两相关性。试比较本题结果与练习 1.17 的结果。

表 1.7　女子径赛运动记录

国家和地区	100 m (s)	200 m (s)	400 m (s)	800 m (min)	1500 m (min)	3000 m (min)	马拉松 (min)
阿根廷	11.61	22.94	54.50	2.15	4.43	9.79	178.52
澳大利亚	11.20	22.35	51.08	1.98	4.13	9.08	152.37
奥地利	11.43	23.09	50.62	1.99	4.22	9.34	159.37
比利时	11.41	23.04	52.00	2.00	4.14	8.88	157.85
百慕大群岛	11.46	23.05	53.30	2.16	4.58	9.81	169.98
巴西	11.31	23.17	52.80	2.10	4.49	9.77	168.75
缅甸	12.14	24.47	55.00	2.18	4.45	9.51	191.02
加拿大	11.00	22.25	50.06	2.00	4.06	8.81	149.45
智利	12.00	24.52	54.90	2.05	4.23	9.37	171.38
中国	11.95	24.41	54.97	2.08	4.33	9.31	168.48

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

国家和地区	100 m (s)	200 m (s)	400 m (s)	800 m (min)	1500 m (min)	3000 m (min)	马拉松 (min)
哥伦比亚	11.60	24.00	53.26	2.11	4.35	9.46	165.42
库科岛	12.90	27.10	60.40	2.30	4.84	11.10	233.22
哥斯达黎加	11.96	24.60	58.25	2.21	4.68	10.43	171.80
捷克斯洛伐克	11.09	21.97	47.99	1.89	4.14	8.92	158.85
丹麦	11.42	23.52	53.60	2.03	4.18	8.71	151.75
多米尼加共和国	11.79	24.05	56.05	2.24	4.74	9.89	203.88
芬兰	11.13	22.39	50.14	2.03	4.10	8.92	154.23
法国	11.15	22.59	51.73	2.00	4.14	8.98	155.27
民主德国	10.81	21.71	48.16	1.93	3.96	8.75	157.68
联邦德国	11.01	22.39	49.75	1.95	4.03	8.59	148.53
英国	11.00	22.13	50.46	1.98	4.03	8.62	149.72
希腊	11.79	24.08	54.93	2.07	4.35	9.87	182.20
危地马拉	11.84	24.54	56.09	2.28	4.86	10.54	215.08
匈牙利	11.45	23.06	51.50	2.01	4.14	8.98	156.37
印度	11.95	24.28	53.60	2.10	4.32	9.98	188.03
印度尼西亚	11.85	24.24	55.34	2.22	4.61	10.02	201.28
爱尔兰	11.43	23.51	53.24	2.05	4.11	8.89	149.38
以色列	11.45	23.57	54.90	2.10	4.25	9.37	160.48
意大利	11.29	23.00	52.01	1.96	3.98	8.63	151.82
日本	11.73	24.00	53.73	2.09	4.35	9.20	150.50
肯尼亚	11.73	23.88	52.70	2.00	4.15	9.20	181.05
韩国	11.96	24.49	55.70	2.15	4.42	9.62	164.65
朝鲜	12.25	25.78	51.20	1.97	4.25	9.35	179.17
卢森堡	12.03	24.96	56.10	2.07	4.38	9.64	174.68
马来西亚	12.23	24.21	55.09	2.19	4.69	10.46	182.17
毛里求斯	11.76	25.08	58.10	2.27	4.79	10.90	261.13
墨西哥	11.89	23.62	53.76	2.04	4.25	9.59	158.53
荷兰	11.25	22.81	52.38	1.99	4.06	9.01	152.48
新西兰	11.55	23.13	51.60	2.02	4.18	8.76	145.48
挪威	11.58	23.31	53.12	2.03	4.01	8.53	145.48
巴布亚新几内亚	12.25	25.07	56.96	2.24	4.84	10.69	233.00
菲律宾	11.76	23.54	54.60	2.19	4.60	10.16	200.37
波兰	11.13	22.21	49.29	1.95	3.99	8.97	160.82
葡萄牙	11.81	24.22	54.30	2.09	4.16	8.84	151.20
罗马尼亚	11.44	23.46	51.20	1.92	3.96	8.53	165.45
新加坡	12.30	25.00	55.08	2.12	4.52	9.94	182.77
西班牙	11.80	23.98	53.59	2.05	4.14	9.02	162.60
瑞典	11.16	22.82	51.79	2.02	4.12	8.84	154.48
瑞士	11.45	23.31	53.11	2.02	4.07	8.77	153.42
台湾	11.22	22.62	52.50	2.10	4.38	9.63	177.87
泰国	11.75	24.46	55.80	2.20	4.72	10.28	168.45
土耳其	11.98	24.44	56.45	2.15	4.37	9.38	201.08
美国	10.79	21.83	50.62	1.96	3.95	8.50	142.72
苏联	11.06	22.19	49.19	1.89	3.87	8.45	151.22
西萨摩亚	12.74	25.85	58.73	2.33	5.81	13.04	306.00

资料来源：*IAAF/ATFS Track and Field Statistics Handbook for the* 1984 *Los Angeles Olympics.*

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

1.19　对以下数据画出类似图 1.5 的散布图和盒形图

(a) 表 1.6 中无机物含量数据。

(b) 表 1.7 中国家和地区径赛记录数据。

1.20　参看第 11 章表 11.4 的破产数据和磁盘上的数据。利用适当的计算机软件：

(a) 观察 x_1, x_2, x_3 空间中的全部数据集。向不同的方向旋转坐标轴。检查异常观测值。

(b) 高亮显示破产公司对应的点集。检查各种三维透视图，存在能辨别破产公司和非破产公司的三维空间的某些方向性吗？根据数据计算出样本均值、样本方差和样本协方差，以得出划分破产公司与非破产公司的规律。在这两类公司中是否有观测值会对该规律有重大影响？(参见练习 11.24。)

1.21　参考第 6 章表 6.8 的牛奶运输费用数据和磁盘上的数据，用适当的计算机软件：

(a) 观察三维空间中的全部数据集。在不同的方向旋转坐标轴，检查异常观测值。

(b) 高亮显示汽油卡车对应的点集。汽油卡车对应点中是否有多元离群值？(参见练习 6.17。)是否存在 x_1, x_2, x_3 空间的某些方向能很快地区分汽油卡车对应的点集与柴油卡车对应的点集？

1.22　参看第 6 章表 6.10 耗氧量数据和磁盘上的数据。用适当的计算机软件：

(a) 运用三个变量不同组合表示坐标轴，在三维空间中观察全部数据。从 x_1, x_2, x_3 空间开始。

(b) 检查数据集合的离群值。

1.23　参看第 11 章表 11.9 的数据和磁盘上的数据，用以下每种方法表示谷类。

(a) 星形。

(b) 切尔诺夫脸。(试着将变量分配给面部特征。)

1.24　用第 12 章表 12.5 的公用事业公司数据和磁盘上的数据，将公用事业公司表示为切尔诺夫脸。把变量分配给面部特征时采用与例 1.9 中不同的分配方法。比较这次的脸和图 1.11 中的切尔诺夫脸，是否显示出不同的分组？

1.25　根据表 12.5 中的数据和磁盘上的数据，用星形表示 22 个公用事业公司，用观察把 22 个公司分成 4 类或 5 类。

1.26　表 1.8 列出了(参见数据磁盘上的公牛数据)拍卖的 76 头小公牛(小于 2 岁的公牛)所测量的特征数据。表中还包括这些公牛的售价。栏目的标题(变量)定义如下：

$$\text{Breed}=\text{品种}=\begin{cases}1 & \text{Angus}\\ 5 & \text{Hereford}\\ 8 & \text{Simental}\end{cases}\qquad \text{YrHgt}=\text{小牛肩膀高度(英寸)}$$

FtFrBody＝无脂肪身体(磅)　PrctFFB＝无脂肪身体的百分比

Frame＝从 1(小)至 8(大)的重量　BkFat＝脊背脂肪(英寸)

SaleHt＝卖出时的肩膀高度(英寸)　SaleWt＝卖出时的重量(磅)

(a) 计算阵列 $\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$。解释两两的相关性。这些变量的某些是否显示出区分一个品种与另一个品种？

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(b) 用变量 Breed，Frame 和 BkFat 观察三维空间中的数据。旋转坐标轴到不同的方向，检查离群值。在这个坐标系中各品种是否完全分开？

(c) 用变量 Breed，FtFrBody 和 SaleHt 重复做(b)。哪种三维透视图看起来好像把三种公牛最好地区分开？

表 1.8 关于公牛的数据

Breed	SalePr	YrHgt	FtFrBody	PrctFFB	Frame	BkFat	SaleHt	SaleWt
1	2200	51.0	1128	70.9	7	0.25	54.8	1720
1	2250	51.9	1108	72.1	7	0.25	55.3	1575
1	1625	49.9	1011	71.6	6	0.15	53.1	1410
1	4600	53.1	993	68.9	8	0.35	56.4	1595
1	2150	51.2	996	68.6	7	0.25	55.0	1488
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
8	1450	51.4	997	73.4	7	0.10	55.2	1454
8	1200	49.8	991	70.8	6	0.15	54.6	1475
8	1425	50.0	928	70.8	6	0.10	53.9	1375
8	1250	50.1	990	71.0	6	0.10	54.9	1564
8	1500	51.7	992	70.6	7	0.15	55.1	1458

资料来源：数据经 Mark Ellersieck 许可使用。

参 考 文 献

1. Becker, R. A., W. S. Cleveland, and A. R. Wilks. "Dynamic Graphics for Data Analysis." *Statistical Science*, 2, no. 4(1987), 355～395.
2. Benjamin, Y., and M. Igbaria. "Clustering Categories for Better Prediction of Computer Resources Utilization." *Applied Statistics*, 40, no. 2(1991), 295～307.
3. Bhattacharyya, G. K., and R. A. Johnson. *Statistical Concepts and Methods*. New York: John Wiley, 1977.
4. Bliss, C. I. "Statistics in Biology," *Statistical Methods for Research in the Natural Sciences*, vol. 2. New York: McGraw-Hill, 1967.
5. Capon, N., J. Farley, D. Lehman, and J. Hulbert. "Profiles of Product Innovators among Large U. S. Manufactureers." Management Science, 38, no. 2(1992), 157～169.
6. Chernoff, H. "Using Faces to Represent Points in *K*-Dimensional Space Graphically." *Journal of the American Statistical Association*, 68, no. 342(1973), 361～368.
7. Cochran, W. G. *Sampling Techniques*(3d ed.). New York: John Wiley, 1977.
8. Cochran, W. G., and G. M. Cox. *Experimental Designs*(2d ed.). New York: John Wiley, 1957.
9. Davis, J. C. "Information Contained in Sediment Size Analysis." *Mathematical Geology*, 2, no. 2 (1970), 105～112.
10. Dawkins, B. "Multivariate Analysis of National Track Records." *The American Statistician*, 43, no. 2 (1989), 110～115.
11. Dunham, R. B., and D. J. Kravetz. "Canonical Correlation Analysis in a Predictive System." *Journal*

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

of Experimental Education, 43, no. 4(1975), 35～42.

12. Everitt, B. *Graphical Techniques for Multivariate Data*. New York: North-Holland. 1978.
13. Gable, G. G. "A Multidimensional Model of Client Success when Engaging External Consultants." *Management Science*, 42, no. 8(1996)1175～1198.
14. Halinar, J. C. "Principal Component Analysis in Plant Breeding." Unpublished report based on data collected by Dr. F. A. Bliss, University of Wisconsin, 1979.
15. Kim, L., and Y. Kim. "Innovation in a Newly Industrializing Country: A Multiple Discriminant Analysis." *Management Science*, 31, no. 3(1985)312～322.
16. Klatzky, S. R., and R. W. Hodge. "A Canonical Correlation Analysis of Occupational Mobility." *Journal of the American Statistical Association*, 66, no. 333(1971), 16～22.
17. Linden. M. "Factor Analytic Study of Olympic Decathlon Data." *Research Quarterly*, 48, no. 3(Oct. 1977), 562～568.
18. MacCrimmon, K., and D. Wehrung. "Characteristics of Risk Taking Executives." *Management Science*, 36, no. 4(1990), 422～435.
19. Marriott, F. H. C. *The Interpretation of Multiple Observations*. London: Academic Press 1974.
20. Mather, P. M. "Study of Factors Influencing Variation in Size Characteristics in Fluvioglacial Sediments." *Mathematical Geology*, 4, no. 3(1972), 219～234.
21. Naik, D. N., and R. Khattree. "Revisiting Olympic Track Records: Some Practical Considerations in the Principal Component Analysis." *The American Statistician*, 50, no. 2(1996), 140～144.
22. Nason, G. "Three-dimensional Projection Pursuit." *Applied Statistics*, 44, no. 4(1995), 411～430.
23. Smith, M., and R. Taffler. "Improving the Communication Function of Published Accounting Statements." *Accounting and Business Research*, 14, no. 54(1984), 139～146.
24. Spenner, K. I. "From Generation to Generation: The Transmission of Occupation." Ph. D. dissertation, University of Wisconsin, 1977.
25. Tabakoff, B., et al. "Differences in Platelet Enzyme Activity between Alcoholics and Nonalcoholics." *New England Journal of Medicine*, 318, no. 3(1988), 134～139.
26. Timm, N. H. *Multivariate Analysis with Applications in Education and Psychology*. Monterey, CA: Brooks/Cole, 1975.
27. Trieschmann, J. S., and G. E. Pinches. "A Multivariate Model for Predicting Financially Distressed P-L Insurers." *Journal of Risk and Insurance*, 40, no. 3(1973), 327～338.
28. Tukey, J. W. Exploratory *Data Analysis. Reading*, MA: Addison-Wesley, 1977.
29. Wainer, H. and D Thissen. "Graphical Data Analysis." *Annual Review of Psychology*, 32, (1981), 191～241.
30. Wartzman, R. "Don't Wave a Red Flag at the IRS." *The Wall Street Journal*, (February 24, 1993), C1, C15.
31. Weihs, C., and H. Schmidli. "OMEGA (On Line Multivariate Exploratory Graphical Analysis): Routine Searching for Structure." *Statistical Science*, 5, no. 2(1990), 175～226.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

2.1 引言

在第 1 章中我们看到，多元数据能方便地用一个数字阵列来表示。一般地，一个 n 行 p 列的矩形数字阵列称为 $n\times p$ 维**矩阵**。矩阵代数的应用将给多元方法的研究带来很多便利。

本章所提供的一些矩阵代数结论将使我们能简明地表述统计模型。此外，用矩阵表示的各种关系很容易在计算机上编程，从而使一些重要统计量的计算可由程序来完成。

我们从引入一些极基本的概念开始，这对以后的一些统计方法的几何解释和代数说明是必不可少的。如果以前没有接触过基本的矩阵代数知识，可以先学习本章 2.2 节和补充 2A 中所提供的材料，前者简明扼要，后者比较详细。

2.2 矩阵和向量代数基础

向量

由 n 个实数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 组成的一个数组 $\mathbf{x}$ 称为向量，写作

$$\mathbf{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}\quad 或\quad \mathbf{x}'=[x_1,x_2,\cdots,x_n]$$

其中字母右上角的撇(′)表示将列变换成行的转置运算。

向量 $\mathbf{x}$ 在几何上可表示为一个 n 维有向线段，它沿第一个轴的分量为 x_1，沿第二个轴的分量为 $x_2,\cdots$，沿第 n 个轴的分量为 x_n。对 $n=3$ 的情形，可用图 2.1 说明。

向量可通过乘一个常数 c 来实现**伸长**或**缩短**。具体地说，我们定义向量 $c\mathbf{x}$ 为

$$c\mathbf{x}=\begin{bmatrix}cx_1\\cx_2\\\vdots\\cx_n\end{bmatrix}$$

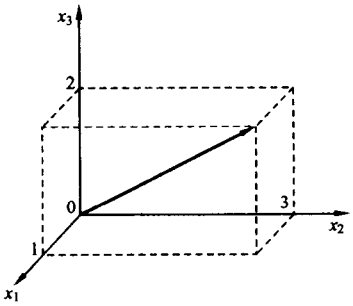
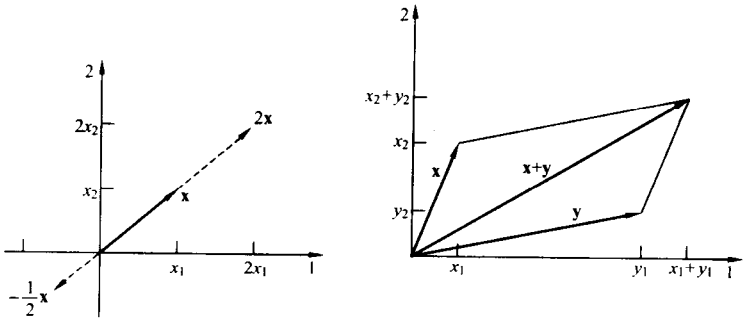


图 2.1　向量 $\mathbf{x}'=[1,3,2]$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

即 $c\mathbf{x}$ 是用 c 去乘 $\mathbf{x}$ 的每个元素而得到的向量。[见图 2.2(a)。]



(a) (b)

图 2.2 标量乘法与向量加法

两个向量可以相加。$\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 的加法定义为

$$\mathbf{x}+\mathbf{y}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}y_1\\y_2\\\vdots\\y_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_1+y_1\\x_2+y_2\\\vdots\\x_n+y_n\end{bmatrix}$$

因此，$\mathbf{x}+\mathbf{y}$ 是一个向量，其第 i 个元素为 x_i+y_i。

两个从坐标原点出发的向量之和，是以这两个向量为邻边所构成的平行四边形的对角线，其几何解释见图 2.2(b)。

一个向量既有方向又有长度。考虑 $n=2$ 维情形下的向量

$$\mathbf{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}$$

$\mathbf{x}$ 的长度记作 $L_{\mathbf{x}}$，其定义为

$$L_{\mathbf{x}}=\sqrt{x_1^2+x_2^2}$$

一个二维向量的长度在几何上可视作直角三角形斜边的长度，如图 2.3 所示。

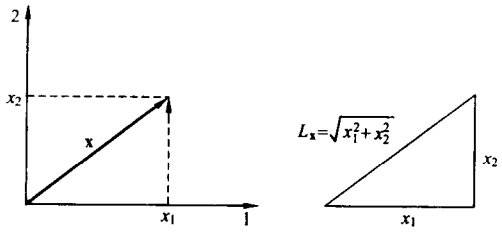


图 2.3 $L_{\mathbf{x}}=\sqrt{x_1^2+x_2^2}$的长度

有 n 个分量的向量 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2,\cdots,x_n]$的长度可用下式定义：

$$L_{\mathbf{x}}=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2} \tag{2-1}$$

向量 $\mathbf{x}$ 乘以标量 c 之后其长度发生改变。由式(2-1)可知：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$L_{c\mathbf{x}} = \sqrt{c^2x_1^2 + c^2x_2^2 + \cdots + c^2x_n^2}$$
$$= |c|\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = |c|L_{\mathbf{x}}$$

若 $c>0$，则用 c 乘向量 $\mathbf{x}$ 不改变 $\mathbf{x}$ 的方向。然而用负数 c 乘 $\mathbf{x}$ 则产生一个与 $\mathbf{x}$ 方向相反的向量。从

$$L_{c\mathbf{x}} = |c|L_{\mathbf{x}} \tag{2-2}$$

看得很清楚：若 $|c|>1$，则 $\mathbf{x}$ 延长；若 $0<|c|<1$，则 $\mathbf{x}$ 缩短[回顾图 2.2(a)。]选取 $c=L_{\mathbf{x}}^{-1}$，便得到长度为 1 且与 $\mathbf{x}$ 同方向的**单位向量** $L_{\mathbf{x}}^{-1}\mathbf{x}$。

第二个几何概念是**角**。考虑平面内两个向量以及它们之间的夹角 θ，如图 2.4 所示。由图可见，θ 可表示成这两个向量分别同第一坐标轴的夹角 θ_1 和 θ_2 之差。因为，根据定义，

$$\cos(\theta_1) = \frac{x_1}{L_{\mathbf{x}}} \qquad \cos(\theta_2) = \frac{y_1}{L_{\mathbf{y}}}$$

$$\sin(\theta_1) = \frac{x_2}{L_{\mathbf{x}}} \qquad \sin(\theta_2) = \frac{y_2}{L_{\mathbf{y}}}$$

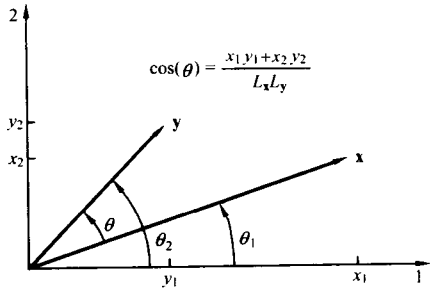


图 2.4　$\mathbf{x}'=[x_1,x_2]$与 $\mathbf{y}'=[y_1,y_2]$之间的夹角 θ

因而

$$\cos(\theta) = \cos(\theta_2 - \theta_1) = \cos(\theta_2)\cos(\theta_1) + \sin(\theta_2)\sin(\theta_1)$$

两个向量 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2]$和 $\mathbf{y}'=[y_1,y_2]$之间的夹角 θ 由下式确定：

$$\cos(\theta) = \cos(\theta_2 - \theta_1) = \left(\frac{y_1}{L_{\mathbf{y}}}\right)\left(\frac{x_1}{L_{\mathbf{x}}}\right) + \left(\frac{y_2}{L_{\mathbf{y}}}\right)\left(\frac{x_2}{L_{\mathbf{x}}}\right) = \frac{x_1y_1 + x_2y_2}{L_{\mathbf{x}}L_{\mathbf{y}}} \tag{2-3}$$

我们发现引进两个向量的内积是方便的。对于 $n=2$ 维情形，$\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 的内积为

$$\mathbf{x}'\mathbf{y} = x_1y_1 + x_2y_2$$

根据这个定义和式(2-3)，有

$$L_{\mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \qquad \cos(\theta) = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{L_{\mathbf{x}}L_{\mathbf{y}}} = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}\sqrt{\mathbf{y}'\mathbf{y}}}$$

因为 $\cos(90°)=\cos(270°)=0$，且仅当 $\mathbf{x}'\mathbf{y}=0$ 时 $\cos(\theta)=0$，所以当 $\mathbf{x}'\mathbf{y}=0$ 时 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 互相垂直。

对任意维数 n，定义 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 的内积如下：

$$\mathbf{x}'\mathbf{y} = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n \tag{2-4}$$

内积用 $\mathbf{x}'\mathbf{y}$ 或 $\mathbf{y}'\mathbf{x}$ 表示。

利用内积，就能将 n 个分量的向量的长度和夹角自然地推广为

$$L_{\mathbf{x}} = \mathbf{x}\text{ 的长度} = \sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}} \tag{2-5}$$

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{L_{\mathbf{x}}L_{\mathbf{y}}} = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}\sqrt{\mathbf{y}'\mathbf{y}}} \tag{2-6}$$

还是因为仅当 $\mathbf{x}'\mathbf{y}=0$ 时 $\cos(\theta)=0$，所以我们说，当 $\mathbf{x}'\mathbf{y}=0$ 时 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 互相**垂直**。

例 2.1　（计算向量的长度和它们之间的夹角）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

给定向量 $\mathbf{x}'=[1,3,2]$ 和 $\mathbf{y}'=[-2,1,-1]$，求 $3\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}+\mathbf{y}$。然后确定 $\mathbf{x}$ 的长度，$\mathbf{y}$ 的长度以及 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 之间的夹角。最后检验 $3\mathbf{x}$ 的长度是 $\mathbf{x}$ 长度的 3 倍。

首先，

$$3\mathbf{x}=3\begin{bmatrix}1\\3\\2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\9\\6\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}+\mathbf{y}=\begin{bmatrix}1\\3\\2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-2\\1\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1-2\\3+1\\2-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1\\4\\1\end{bmatrix}$$

其次，由 $\mathbf{x}'\mathbf{x}=1^2+3^2+2^2=14$， $\mathbf{y}'\mathbf{y}=(-2)^2+1^2+(-1)^2=6$，以及 $\mathbf{x}'\mathbf{y}=1\times(-2)+3\times1+2\times(-1)=-1$，有

$$L_{\mathbf{x}}=\sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}=\sqrt{14}=3.742 \qquad L_{\mathbf{y}}=\sqrt{\mathbf{y}'\mathbf{y}}=\sqrt{6}=2.449$$

和

$$\cos(\theta)=\frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{L_{\mathbf{x}}L_{\mathbf{y}}}=\frac{-1}{3.742\times2.449}=-0.109$$

于是 $\theta=96.3°$。最后

$$L_{3\mathbf{x}}=\sqrt{3^2+9^2+6^2}=\sqrt{126}, \quad 3L_{\mathbf{x}}=3\sqrt{14}=\sqrt{126}$$

可见 $L_{3\mathbf{x}}=3L_{\mathbf{x}}$。

一对同维向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$，如果存在两个不全为零的常数 c_1 和 c_2，满足

$$c_1\mathbf{x}+c_2\mathbf{y}=\mathbf{0}$$

就说这对向量**线性相关**。一组向量 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_k$，如果存在不全为零的常数 $c_1,c_2,\cdots,c_k$，使得

$$c_1\mathbf{x}_1+c_2\mathbf{x}_2+\cdots+c_k\mathbf{x}_k=\mathbf{0} \tag{2-7}$$

就说这组向量**线性相关**。

线性相关意味着：这组向量中至少有一个向量能写成其余向量的线性组合。如果几个同维向量并不线性相关，就说它们**线性无关**。

例 2.2 （识别线性无关向量）

考虑向量组

$$\mathbf{x}_1=\begin{bmatrix}1\\2\\1\end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}_2=\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}_3=\begin{bmatrix}1\\-2\\1\end{bmatrix}$$

令

$$c_1\mathbf{x}_1+c_2\mathbf{x}_2+c_3\mathbf{x}_3=\mathbf{0}$$

可推出

$$\begin{aligned}c_1+c_2+c_3&=0\\2c_1\qquad-2c_3&=0\\c_1-c_2+c_3&=0\end{aligned}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

有惟一解 $c_1=c_2=c_3=0$。由于找不到不全为零的常数 c_1，c_2 和 c_3，使得 $c_1\mathbf{x}_1+c_2\mathbf{x}_2+c_3\mathbf{x}_3=\mathbf{0}$，因而向量 $\mathbf{x}_1$，$\mathbf{x}_2$ 和 $\mathbf{x}_3$ **线性无关**。

向量 $\mathbf{x}$ 在向量 $\mathbf{y}$ 上的**投影**(或影子)为

$$\mathbf{x}\text{ 在 }\mathbf{y}\text{ 上的投影}=\frac{(\mathbf{x}'\mathbf{y})}{\mathbf{y}'\mathbf{y}}\mathbf{y}=\frac{(\mathbf{x}'\mathbf{y})}{L_{\mathbf{y}}}\frac{1}{L_{\mathbf{y}}}\mathbf{y}\qquad(2\text{-}8)$$

其中向量 $L_{\mathbf{y}}^{-1}\mathbf{y}$ 的长度为 1。投影的**长度**为

$$\text{投影的长度}=\frac{|\mathbf{x}'\mathbf{y}|}{L_{\mathbf{y}}}=L_{\mathbf{x}}\left|\frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{L_{\mathbf{x}}L_{\mathbf{y}}}\right|=L_{\mathbf{x}}|\cos(\theta)|\qquad(2\text{-}9)$$

其中 θ 是 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 间的夹角(见图 2.5)。

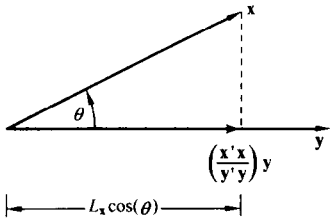


图 2.5　$\mathbf{x}$ 在 $\mathbf{y}$ 上的投影

矩阵

由实数组成的任何矩形数表称为**矩阵**。我们将一个 n 行 p 列的任意数表表示成

$$\underset{(n\times p)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{np}\end{bmatrix}$$

刚才引进的许多向量概念可直接推广到矩阵。

矩阵的转置运算 $\mathbf{A}'$ 把列变成行。这样变换后，$\mathbf{A}$ 的第一列成为 $\mathbf{A}'$ 的第一行，第二列成为第二行，依此类推。

例 2.3　(矩阵的转置)

如果

$$\underset{(2\times 3)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}3 & -1 & 2\\ 1 & 5 & 4\end{bmatrix}$$

则

$$\underset{(3\times 2)}{\mathbf{A}'}=\begin{bmatrix}3 & 1\\ -1 & 5\\ 2 & 4\end{bmatrix}$$

矩阵也可乘以常数 c。乘积 $c\mathbf{A}$ 也是矩阵，其元素为矩阵 $\mathbf{A}$ 的每个元素乘 c 后所得之结果，即

$$\underset{(n\times p)}{c\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}ca_{11} & ca_{12} & \cdots & ca_{1p}\\ ca_{21} & ca_{22} & \cdots & ca_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ ca_{n1} & ca_{n2} & \cdots & ca_{np}\end{bmatrix}$$

相同维数的两个矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 可以相加。矩阵和 $\mathbf{A}+\mathbf{B}$ 的第 (i,j) 个元素为 $a_{ij}+b_{ij}$。

例 2.4　(两矩阵之和及矩阵与常数之积)

如果

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\underset{(2\times3)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}0 & 3 & 1\\ 1 & -1 & 1\end{bmatrix} \quad 和 \quad \underset{(2\times3)}{\mathbf{B}}=\begin{bmatrix}1 & -2 & -3\\ 2 & 5 & 1\end{bmatrix}$$

则

$$\underset{(2\times3)}{4\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}0 & 12 & 4\\ 4 & -4 & 4\end{bmatrix}和$$

$$\underset{(2\times3)}{\mathbf{A}}+\underset{(2\times3)}{\mathbf{B}}=\begin{bmatrix}0+1 & 3-2 & 1-3\\ 1+2 & -1+5 & 1+1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1 & -2\\ 3 & 4 & 2\end{bmatrix}$$

如果两个矩阵的维数符合下面的要求，也可定义两个矩阵的乘法：当 **A** 为$(n\times k)$时，**B** 为$(k\times p)$矩阵。就是说，当 **A** 的行元素个数与 **B** 的列元素个数相同时，就可以构造矩阵的乘积 **AB**。新矩阵 **AB** 的元素由 **A** 的每一行与 **B** 的每一列的内积构成。

矩阵乘积 AB 为

$\underset{(n\times k)(k\times p)}{\mathbf{A}\ \mathbf{B}}=(n\times p)$矩阵，其中第 i 行第 j 列元素是 **A** 的第 i 行与 **B** 的第 j 列的内积

或

$$\mathbf{AB}\text{ 的第}(i,j)\text{ 元素}=a_{i1}b_{1j}+a_{i2}b_{2j}+\cdots+a_{ik}b_{kj}=\sum_{l=1}^{k}a_{il}b_{lj} \tag{2-10}$$

当 $k=4$ 时，矩阵 **AB** 中的每一元素便是 4 项乘积之和。因此，

$$\underset{(n\times4)(4\times p)}{\mathbf{A}\ \mathbf{B}}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \boxed{a_{i1} \quad a_{i2} \quad a_{i3} \quad a_{i4}}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & a_{n4}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_{11} & \cdots & b_{1j} & \cdots & b_{1p}\\ b_{21} & \cdots & b_{2j} & \cdots & b_{2p}\\ b_{31} & \cdots & b_{3j} & \cdots & b_{3p}\\ b_{41} & \cdots & b_{4j} & \cdots & b_{4p}\end{bmatrix}$$

$$=\text{行}i\begin{array}{c}\text{列}\\ j\\ \vdots\\ \begin{bmatrix}\cdots(a_{i1}b_{1j}+a_{i2}b_{2j}+a_{i3}b_{3j}+a_{i4}b_{4j})\cdots\end{bmatrix}\\ \vdots\end{array}$$

例 2.5 （矩阵乘法）

如果

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}3 & -1 & 2\\ 1 & 5 & 4\end{bmatrix},\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}-2\\ 7\\ 9\end{bmatrix} \quad 和 \quad \mathbf{C}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 1 & -1\end{bmatrix}$$

则

$$\underset{(2\times3)(3\times1)}{\mathbf{A}\ \mathbf{B}}=\begin{bmatrix}3 & -1 & 2\\ 1 & 5 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-2\\ 7\\ 9\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\times(-2)+(-1)\times7+2\times9\\ 1\times(-2)+5\times7\quad\quad+4\times9\end{bmatrix}=\underset{(2\times1)}{\begin{bmatrix}5\\ 69\end{bmatrix}}$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\underset{(2\times2)}{\mathbf{C}}\ \underset{(2\times3)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}2 & 0\\1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3 & -1 & 2\\1 & 5 & 4\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}2\times3+0\times1 & 2\times(-1)+0\times5 & 2\times2+0\times4\\1\times3-1\times1 & 1\times(-1)-1\times5 & 1\times2-1\times4\end{bmatrix}$$

$$=\underset{(2\times3)}{\begin{bmatrix}6 & -2 & 4\\2 & -6 & -2\end{bmatrix}}$$

当矩阵 **B** 由一列组成时，通常采用小写的向量符号 **b**。

例 2.6 （某些典型的乘积以及它们的维数）

设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & -2 & 3\\2 & 4 & -1\end{bmatrix}\qquad \mathbf{b}=\begin{bmatrix}7\\-3\\6\end{bmatrix}\qquad \mathbf{c}=\begin{bmatrix}5\\8\\-4\end{bmatrix}\qquad \mathbf{d}=\begin{bmatrix}2\\9\end{bmatrix}$$

此时 $\mathbf{Ab}$，$\mathbf{bc}'$，$\mathbf{b}'\mathbf{c}$ 和 $\mathbf{d}'\mathbf{Ab}$ 为典型的乘积。

$$\mathbf{Ab}=\begin{bmatrix}1 & -2 & 3\\2 & 4 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}7\\-3\\6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}31\\-4\end{bmatrix}$$

乘积 $\mathbf{Ab}$ 是一个向量，其维数等于 **A** 的行数。

$$\mathbf{b}'\mathbf{c}=\begin{bmatrix}7 & -3 & 6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5\\8\\-4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-13\end{bmatrix}$$

乘积 $\mathbf{b}'\mathbf{c}$ 是一个 1×1 向量或一个数，在这里等于 -13。

$$\mathbf{bc}'=\begin{bmatrix}7\\-3\\6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5 & 8 & -4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}35 & 56 & -28\\-15 & -24 & 12\\30 & 48 & -24\end{bmatrix}$$

乘积 $\mathbf{bc}'$ 是一矩阵，其行数等于 **b** 的维数，列数等于 **c** 的维数。这个积与 $\mathbf{b}'\mathbf{c}$ 不同，$\mathbf{b}'\mathbf{c}$ 是一个数。

$$\mathbf{d}'\mathbf{Ab}=\begin{bmatrix}2 & 9\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -2 & 3\\2 & 4 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}7\\-3\\6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}26\end{bmatrix}$$

乘积 $\mathbf{d}'\mathbf{Ab}$ 是一个 1×1 向量或一个数，在这里等于 26。

方阵在统计方法的开发中将具有特殊的重要性。对一个方阵，如果 $\mathbf{A}=\mathbf{A}'$ 或对所有 i 和 j，$a_{ij}=a_{ji}$，则称此方阵为**对称阵**。

例 2.7 （对称阵）

矩阵

$$\begin{bmatrix}3 & 5\\5 & -2\end{bmatrix}$$

是对称阵；矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\begin{bmatrix} 3 & 6 \\ 4 & -2 \end{bmatrix}$$

则不是对称阵。

当两个方阵 **A** 和 **B** 维数相同时，两个乘积 **AB** 和 **BA** 均有定义，尽管它们未必相等。(见补充 2A。)若以 **I** 表示主对角线上元素均为 1，其余元素均为 0 的方阵，则按照矩阵乘法的定义，**AI** 的第(i,j)个元素为 $a_{i1}\times 0+\cdots+a_{i,j-1}\times 0+a_{ij}\times 1+a_{i,j+1}\times 0+\cdots+a_{ik}\times 0=a_{ij}$，于是 **AI**=**A**。类似有 **IA**=**A**。因此，对任何 $\underset{(k\times k)}{\mathbf{A}}$ 有

$$\underset{(k\times k)}{\mathbf{I}}\ \underset{(k\times k)}{\mathbf{A}} = \underset{(k\times k)}{\mathbf{A}}\ \underset{(k\times k)}{\mathbf{I}} = \underset{(k\times k)}{\mathbf{A}} \tag{2-11}$$

矩阵 **I** 就像数字 1 在普通乘法中所起的作用一样($1\cdot a=a\cdot 1=a$)，因此称为**单位矩阵**。

如果 $a\neq 0$，就存在一个倒数 a^{-1}，能使 $a^{-1}a=aa^{-1}=1$，这个基本的数量关系在矩阵代数中有如下推广：如果存在矩阵 **B**，使得

$$\underset{(k\times k)}{\mathbf{B}}\ \underset{(k\times k)}{\mathbf{A}} = \underset{(k\times k)}{\mathbf{A}}\ \underset{(k\times k)}{\mathbf{B}} = \underset{(k\times k)}{\mathbf{I}}$$

则称 **B** 为 **A** 的**逆矩阵**，并记作 $\mathbf{A}^{-1}$。

存在逆矩阵的条件是：**A** 的 k 个列 $\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots,\mathbf{a}_k$ 线性无关。就是说，$\mathbf{A}^{-1}$的存在等价于

$$c_1\mathbf{a}_1+c_2\mathbf{a}_2+\cdots+c_k\mathbf{a}_k=\mathbf{0} \quad 仅当 \quad c_1=\cdots=c_k=0\ 时 \tag{2-12}$$

(见补充 2A 中结论 2A.9。)

例 2.8 (逆矩阵的存在性)

对于

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}$$

可以验证

$$\begin{bmatrix} -0.2 & 0.4 \\ 0.8 & -0.6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} (-0.2)\times 3+0.4\times 4 & (-2)\times 2+0.4\times 1 \\ 0.8\times 3+(-0.6)\times 4 & 0.8\times 2+(-0.6)\times 1 \end{bmatrix}$$

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

于是

$$\begin{bmatrix} -0.2 & 0.4 \\ 0.8 & -0.6 \end{bmatrix}$$

便是 $\mathbf{A}^{-1}$。注意到

$$c_1\begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix}+c_2\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

意味着 $c_1=c_2=0$，所以 **A** 的诸列线性无关。这证实了式(2-12)中所说的条件。

当逆矩阵存在时，其计算方法见补充 2A。这些冗长的程式化计算，通常由计算机完成，尤其当维数大于 3 时更是这样。即使如此，还是必须预先警告：如果对某些常数 $c_1,c_2,\cdots,c_k$ 来说式(2-12)中的列和**接近**于 **0**，由于舍入误差极大，计算机会产生错误的逆。因此当 $\mathbf{A}^{-1}$由一个计算机软件包所产生时，最好用乘积 $\mathbf{AA}^{-1}$和 $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$ 是否等于 **I** 作一下检验。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

（见练习 2.10。）

有逆的对角阵很容易计算。例如，如果所有 $a_{ii}\neq 0$，则

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{55} \end{bmatrix} \quad \text{有逆矩阵} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_{33}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a_{44}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a_{55}} \end{bmatrix}$$

我们要熟悉的另一类特殊方阵是正交矩阵，其特征为

$$\mathbf{QQ}' = \mathbf{Q}'\mathbf{Q} = \mathbf{I} \quad \text{或} \quad \mathbf{Q}' = \mathbf{Q}^{-1} \tag{2-13}$$

正交矩阵的名称来自其性质，即如果 $\mathbf{Q}$ 的第 i 行是 $\mathbf{q}_i'$，则 $\mathbf{QQ}'=\mathbf{I}$ 意味着 $\mathbf{q}_i'\mathbf{q}_i=1$ 和 $\mathbf{q}_i'\mathbf{q}_j=0(i\neq j)$，因此，每一行均具有单位长度且行与行之间互相垂直（正交）。根据条件 $\mathbf{Q}'\mathbf{Q}=\mathbf{I}$ 列也有同样的性质。

在结束对矩阵代数原理的简单介绍时，我们引入一个多元统计分析的基本概念。一个方阵 $\mathbf{A}$，如果有

$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x} \tag{2-14}$$

则说方阵 $\mathbf{A}$ 具有**特征值** λ 和对应的**特征向量** $\mathbf{x}\neq 0$。通常，将 $\mathbf{x}$ 标准化使其具有单位长度，即 $1=\mathbf{x}'\mathbf{x}$。为方便起见，在下文中用 $\mathbf{e}$ 表示标准化的特征向量。我们省去详细的推导过程（见[1]），给出如下的基本结论：

> 设 $\mathbf{A}$ 是 $k\times k$ 对称方阵，则 $\mathbf{A}$ 有 k 对特征值和特征向量，即
>
> $$\lambda_1, \mathbf{e}_1, \quad \lambda_2, \mathbf{e}_2 \quad \cdots \quad \lambda_k, \mathbf{e}_k \tag{2-15}$$
>
> 可以选择特征向量，使其满足 $1=\mathbf{e}'_1\mathbf{e}_1=\cdots=\mathbf{e}'_k\mathbf{e}_k$ 且互相垂直。除非两个或多个特征值是相等的，对应特征值的特征向量是惟一的。

例 2.9 （检验特征值和特征向量）

设

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -5 \\ -5 & 1 \end{bmatrix}$$

则，因为

$$\begin{bmatrix} 1 & -5 \\ -5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 6 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

所以 $\lambda_1=6$ 是一个特征值，且

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

是 λ_1 对应的标准化特征向量。可以证明还有一对特征值-特征向量是 $\lambda_2=-4$，$\mathbf{e}'_2=[1/\sqrt{2},1/\sqrt{2}]$。

在补充 2A 中，给出了计算 λ 和 $\mathbf{e}$ 的一种方法。当方阵维数大于 2 或 3 时，通常要依靠计算机计算。可以做几个实例计算来理解该方法，这是有好处的。

2.3 正定矩阵

研究多元数据中的变量及其相互关系时，通常以距离和数据多元正态分布假设为基础。距离的平方（见第 1 章）和多元正态密度可以用称为**二次型**（见第 4 章）的矩阵乘积来表示。因此，毫不奇怪，在多元分析中二次型起着重要作用。在本节中，我们考虑总是非负的二次型及相关联的**正定矩阵**。

涉及二次型和对称矩阵的许多结论，在多数情况下，可直接由对称阵的称为**谱分解**的展开式得出。一个 $k\times k$ 对称阵 $\mathbf{A}$ 的谱分解由式(2-16)给出①。

$$\underset{(k\times k)}{\mathbf{A}}=\lambda_1\underset{(k\times 1)}{\mathbf{e}_1}\underset{(1\times k)}{\mathbf{e}'_1}+\lambda_2\underset{(k\times 1)}{\mathbf{e}_2}\underset{(1\times k)}{\mathbf{e}'_2}+\cdots+\lambda_k\underset{(k\times 1)}{\mathbf{e}_k}\underset{(1\times k)}{\mathbf{e}'_k} \tag{2-16}$$

其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k$ 是 $\mathbf{A}$ 的特征值，$\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_k$ 是相对应的标准化特征向量。（参考补充 2A 中 2A.14 结论。）因此有，$\mathbf{e}'_i\mathbf{e}_i=1,i=1,2,\cdots,k$，且对 $i\neq j$，$\mathbf{e}'_i\mathbf{e}_j=0$。

例 2.10 （矩阵的谱分解）

考虑对称矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}13 & -4 & 2\\ -4 & 13 & -2\\ 2 & -2 & 10\end{bmatrix}$$

从特征方程 $|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$ 得到的特征值是 $\lambda_1=9,\lambda_2=9$ 和 $\lambda_3=18$（定义 2A.30）。对应的特征向量 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2$ 和 $\mathbf{e}_3$ 是方程 $\mathbf{A}\mathbf{e}_i=\lambda_i\mathbf{e}_i(i=1,2,3)$ 的（标准化）解。因此，由 $\mathbf{A}\mathbf{e}_1=\lambda\mathbf{e}_1$ 有

$$\begin{bmatrix}13 & -4 & 2\\ -4 & 13 & -2\\ 2 & -2 & 10\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e_{11}\\ e_{21}\\ e_{31}\end{bmatrix}=9\begin{bmatrix}e_{11}\\ e_{21}\\ e_{31}\end{bmatrix}$$

或

$$\begin{aligned}13e_{11}-4e_{21}+2e_{31}&=9e_{11}\\ -4e_{11}+13e_{21}-2e_{31}&=9e_{21}\\ 2e_{11}-2e_{21}+10e_{31}&=9e_{31}\end{aligned}$$

把等号右边的项移至左边得到三个含三个未知数的齐次方程，其中两个方程是重复的。选择其中的一个方程并任意设 $e_{11}=1$ 及 $e_{21}=1$，求得 $e_{31}=0$。由于标准化特征向量各元素的平方和是 1，因此，标准化特征向量为

$$\mathbf{e}'_1=[1/\sqrt{1^2+1^2+0^2},1/\sqrt{1^2+1^2+0^2},0/\sqrt{1^2+1^2+0^2}]=[1/\sqrt{2},1/\sqrt{2},0]$$

① 式(2-16)的证明超出本书范围。有兴趣的读者可以在第 8 章中[5]找到证明方法。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

可以证明 $\mathbf{e}'_2=[1/\sqrt{18},-1/\sqrt{18},-4/\sqrt{18}]$也是 $\lambda_2=9$ 的标准化特征向量，$\mathbf{e}'_3=[2/3,-2/3,1/3]$是特征值 $\lambda_3=18$ 相应的标准化特征向量。而且，对 $i\neq j$，$\mathbf{e}'_i\mathbf{e}_j=0$。

容易证明，**A** 的谱分解是

$$\mathbf{A}=\lambda_1\mathbf{e}_1\mathbf{e}'_1+\lambda_2\mathbf{e}_2\mathbf{e}'_2+\lambda_3\mathbf{e}_3\mathbf{e}'_3$$

或

$$\begin{bmatrix}13 & -4 & 2\\ -4 & 13 & -2\\ 2 & -2 & 10\end{bmatrix}=9\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}$$

$$+9\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{18}}\\ \frac{-1}{\sqrt{18}}\\ \frac{-4}{\sqrt{18}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{-1}{\sqrt{18}} & \frac{-4}{\sqrt{18}}\end{bmatrix}+18\begin{bmatrix}\frac{2}{3}\\ -\frac{2}{3}\\ \frac{1}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3}\end{bmatrix}$$

$$=9\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}+9\begin{bmatrix}\frac{1}{18} & -\frac{1}{18} & -\frac{4}{18}\\ -\frac{1}{18} & \frac{1}{18} & \frac{4}{18}\\ -\frac{4}{18} & \frac{4}{18} & \frac{16}{18}\end{bmatrix}$$

$$+18\begin{bmatrix}\frac{4}{9} & -\frac{4}{9} & \frac{2}{9}\\ -\frac{4}{9} & \frac{4}{9} & -\frac{2}{9}\\ \frac{2}{9} & -\frac{2}{9} & \frac{1}{9}\end{bmatrix}$$

谱分解是一种重要的分析工具，利用它可以顺利地论证某些统计学结论。首先，我们研究距离的矩阵解释。

设 $k\times k$ 对称矩阵 **A** 对于一切 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2,\cdots,x_k]$，满足

$$0\leqslant\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} \tag{2-17}$$

则称 **A** 是**非负定**的。若仅当向量 $\mathbf{x}'=[0,0,\cdots,0]$时，式(2-17)中等号才成立，则称 **A** 是**正定**的。换而言之，如果对一切 $\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$ 的向量，有

$$0<\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} \tag{2-18}$$

则称 **A** 是正定的。因为 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ 中只含有平方项 x_i^2 及乘积项 x_ix_k，故称为**二次型**。

例 2.11 （正定二次型）

证明以下二次型是正定的：

$$3x_1^2+2x_2^2-2\sqrt{2}\,x_1x_2$$

为了说明一般方法，首先写出二次型的矩阵表示形式

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$[x_1 \quad x_2]\begin{bmatrix} 3 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$$

由定义 2A.30，$\mathbf{A}$ 的特征值是方程 $|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$ 或 $(3-\lambda)(2-\lambda)-2=0$ 的解。求解得，$\lambda_1=4,\lambda_2=1$。利用式(2-16)的谱分解，有

$$\underset{(2\times2)}{\mathbf{A}} = \lambda_1 \underset{(2\times1)}{\mathbf{e}_1}\underset{(1\times2)}{\mathbf{e}'_1} + \lambda_2 \underset{(2\times1)}{\mathbf{e}_2}\underset{(1\times2)}{\mathbf{e}'_2}$$
$$= 4\underset{(2\times1)}{\mathbf{e}_1}\underset{(1\times2)}{\mathbf{e}'_1} + \underset{(2\times1)}{\mathbf{e}_2}\underset{(1\times2)}{\mathbf{e}'_2}$$

其中 $\mathbf{e}_1$ 和 $\mathbf{e}_2$ 是分别对应于特征值 $\lambda_1=4$ 和 $\lambda_2=1$ 的标准化的正交的特征向量。因为 4 和 1 是标量，用 $\mathbf{x}'$ 和 $\mathbf{x}$ 分别左乘和右乘 $\mathbf{A}$，其中 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2]$ 是任一非零向量，得

$$\underset{(1\times2)}{\mathbf{x}'}\underset{(2\times2)}{\mathbf{A}}\underset{(2\times1)}{\mathbf{x}} = 4\underset{(1\times2)}{\mathbf{x}'}\underset{(2\times1)}{\mathbf{e}_1}\underset{(1\times2)}{\mathbf{e}'_1}\underset{(2\times1)}{\mathbf{x}} + \underset{(1\times2)}{\mathbf{x}'}\underset{(2\times1)}{\mathbf{e}_2}\underset{(1\times2)}{\mathbf{e}'_2}\underset{(2\times1)}{\mathbf{x}}$$
$$= 4y_1^2 + y_2^2 \geqslant 0$$

其中

$$y_1 = \mathbf{x}'\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}'_1\mathbf{x} \quad 和 \quad y_2 = \mathbf{x}'\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}'_2\mathbf{x}$$

这表明，y_1 和 y_2 不全为零，因此，$\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}=4y_1^2+y_2^2>0$，即 $\mathbf{A}$ 是正定的。

从 y_1 和 y_2 的定义，有

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}'_1 \\ \mathbf{e}'_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

或

$$\underset{(2\times1)}{\mathbf{y}} = \underset{(2\times2)}{\mathbf{E}}\underset{(2\times1)}{\mathbf{x}}$$

现在 $\mathbf{E}$ 是正交阵，因而有逆矩阵 $\mathbf{E}'$。于是，$\mathbf{x}=\mathbf{E}'\mathbf{y}$。$\mathbf{x}$ 是非零向量，则 $\mathbf{0}\neq\mathbf{x}=\mathbf{E}'\mathbf{y}$ 意味着 $\mathbf{y}\neq\mathbf{0}$。

运用谱分解，很容易证明，当且仅当 $\mathbf{A}$ 的所有特征值均大于零时，$k\times k$ 对称阵 $\mathbf{A}$ 是正定矩阵。(参考练习 2.17。)当且仅当 $\mathbf{A}$ 的所有特征值大于或等于零时，$\mathbf{A}$ 是非负定阵。

现在假定向量 $\mathbf{x}$ 的 p 个元素 $x_1,x_2,\cdots,x_p$ 被视为 p 个随机变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$。正如第 1 章中指出的，可以把这些元素当作 p 维空间中一个点的坐标；在这种情况下，点 $(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 到原点的"距离"应当利用单位标准偏差来表示。这样，我们可以解释观察结果中所固有的不定性(变化性)。具有相同的"不定性"的点，可以看成与原点的距离相同。

利用第 1 章中介绍的距离公式[参见式(1-22)]，假定对所有的 $[x_1,x_2,\cdots,x_p]\neq[0,0,\cdots,0]$，有(距离)$^2>0$，则到原点的距离满足一般公式

$$(距离)^2 = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \cdots + a_{pp}x_p^2$$
$$+ 2(a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + \cdots + a_{p-1,p}x_{p-1}x_p)$$

令 $a_{ij}=a_{ji},i\neq j,i=1,2,\cdots,p,j=1,2,\cdots,p$，有

$$0 < (距离)^2 = [x_1,x_2,\cdots,x_p]\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pp} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix}$$

或

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$0 < (\text{距离})^2 = \mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}, \text{ 对 } \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \tag{2-19}$$

从式(2-19)可见，$p \times p$ 对称阵 $\mathbf{A}$ 是正定的。总之，距离是由一正定二次型 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ 所确定的。反过来，一个正定二次型可以解释为一个距离平方。

评注 设点 $\mathbf{x}' = [x_1, x_2, \cdots, x_p]$ 到原点的距离平方由 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ 给出，其中 $\mathbf{A}$ 是 $p \times p$ 对称正定矩阵，则从 $\mathbf{x}$ 到任意一固定点 $\boldsymbol{\mu}' = [\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_p]$ 的距离平方由一般表达式 $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{A}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$ 给出。

用一个正定二次型的平方根表示距离，使我们给出一个基于矩阵 $\mathbf{A}$ 的特征值和特征向量的几何解释。例如，设 $p=2$，则到原点的距离为常数 c 的点 $\mathbf{x}' = [x_1, x_2]$，满足

$$\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + 2a_{12}x_1x_2 = c^2$$

如例 2.11 中，按照谱分解

$$\mathbf{A} = \lambda_1\mathbf{e}_1\mathbf{e}'_1 + \lambda_2\mathbf{e}_2\mathbf{e}'_2 \quad \text{所以} \quad \mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda_1(\mathbf{x}'\mathbf{e}_1)^2 + \lambda_2(\mathbf{x}'\mathbf{e}_2)^2$$

现在，令 $y_1 = \mathbf{x}'\mathbf{e}_1, y_2 = \mathbf{x}'\mathbf{e}_2, c^2 = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2$ 是一个椭圆，因为当 $\mathbf{A}$ 为正定时 $\lambda_1, \lambda_2 > 0$。(参见练习 2.17。)易证 $\mathbf{x} = c\lambda_1^{-1/2}\mathbf{e}_1$ 满足 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda_1(c\lambda_1^{-1/2}\mathbf{e}'_1\mathbf{e}_1)^2 = c^2$。同样地，$\mathbf{x} = c\lambda_2^{-1/2}\mathbf{e}_2$ 给出了沿 $\mathbf{e}_2$ 方向的适当的距离。因此，距离为 c 的点落在椭圆上，它的轴由 $\mathbf{A}$ 的特征向量给出，其长度与特征值的平方根的倒数成比例，比例常数就是 c。其位置如图 2.6 所示。

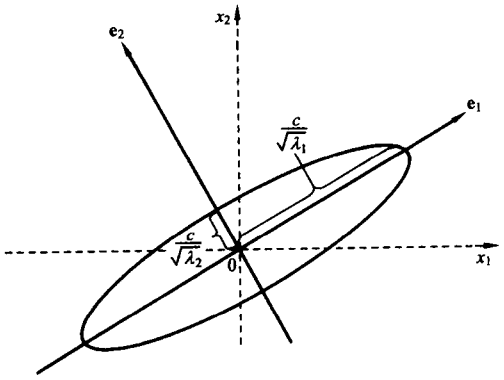


图 2.6 到原点距离为常数 c 的点($p=2, 1 \leqslant \lambda_1 < \lambda_2$)

如果 $p > 2$，到原点距离为常数 $c = \sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}}$ 的点 $\mathbf{x}' = [x_1, x_2, \cdots, x_p]$ 落在超椭球 $c^2 = \lambda_1(\mathbf{x}'\mathbf{e}_1)^2 + \cdots + \lambda_p(\mathbf{x}'\mathbf{e}_p)^2$ 上，其轴由 $\mathbf{A}$ 的特征向量给出。沿 $\mathbf{e}_i$ 方向的半轴长等于 $c/\sqrt{\lambda_i}$，$i = 1, 2, \cdots, p$，其中 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p$ 是 $\mathbf{A}$ 的特征值。

2.4 平方根矩阵

谱分解使我们可用方阵的特征值和特征向量来表示该方阵的逆，同时还带来一个有用的概念：**平方根矩阵**。

设 $\mathbf{A}$ 是 $k \times k$ 正定矩阵，有谱分解 $\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}'_i$。设标准化特征向量是另一矩阵的列

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

向量 $\mathbf{P}=[\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_k]$。于是有

$$\underset{(k\times k)}{\mathbf{A}} = \sum_{i=1}^{k}\lambda_i \underset{(k\times 1)}{\mathbf{e}_i}\underset{(1\times k)}{\mathbf{e}'_i} = \underset{(k\times k)}{\mathbf{P}}\underset{(k\times k)}{\mathbf{\Lambda}}\underset{(k\times k)}{\mathbf{P}'} \tag{2-20}$$

其中 $\mathbf{PP}'=\mathbf{P}'\mathbf{P}=\mathbf{I}$，且 $\mathbf{\Lambda}$ 为如下对角矩阵

$$\underset{(k\times k)}{\mathbf{\Lambda}} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_k \end{bmatrix} \quad \lambda_i > 0$$

因为 $(\mathbf{P\Lambda}^{-1}\mathbf{P}')\mathbf{P\Lambda P}'=\mathbf{P\Lambda P}'(\mathbf{P\Lambda}^{-1}\mathbf{P}')=\mathbf{PP}'=\mathbf{I}$，有

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{P\Lambda}^{-1}\mathrm{P}' = \sum_{i=1}^{k}\frac{1}{\lambda_i}\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i \tag{2-21}$$

接下来，令 $\mathbf{\Lambda}^{1/2}$ 为以 $\sqrt{\lambda_i}$ 为第 i 个对角元素的对角阵。矩阵 $\sum_{i=1}^{k}\sqrt{\lambda_i}\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i=\mathbf{P\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}'$ 称为 $\mathbf{A}$ 的平方根，用 $\mathbf{A}^{1/2}$ 表示。

平方根矩阵

$$\mathbf{A}^{1/2} = \sum_{i=1}^{k}\sqrt{\lambda_i}\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i = \mathbf{P\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}' \tag{2-22}$$

有下列性质：

1. $(\mathbf{A}^{1/2})'=\mathbf{A}^{1/2}$ （即 $\mathbf{A}^{1/2}$ 是对称的）。
2. $\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{A}^{1/2}=\mathbf{A}$。
3. $(\mathbf{A}^{1/2})^{-1} = \sum_{i=1}^{k}\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i = \mathbf{P\Lambda}^{-1/2}\mathbf{P}'$ 其中 $\mathbf{\Lambda}^{-1/2}$ 是以 $1/\sqrt{\lambda_i}$ 作为第 i 个对角线上元素的对角阵。
4. $\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{A}^{-1/2}=\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{A}^{1/2}=\mathbf{I}$，且 $\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{A}^{-1/2}=\mathbf{A}^{-1}$，其中 $\mathbf{A}^{-1/2}=(\mathbf{A}^{1/2})^{-1}$。

2.5 随机向量和矩阵

随机向量是元素为随机变量的向量。类似地，**随机矩阵**是元素为随机变量的矩阵。随机矩阵（或向量）的期望值是由它的每个元素的期望值组成的矩阵（向量）。具体地说，设 $\mathbf{X}=\{X_{ij}\}$ 是 $n\times p$ 随机矩阵。则 $\mathbf{X}$ 的期望值记作 $E(\mathbf{X})$，是数值为如下所示的 $n\times p$ 矩阵（如果它们存在）

$$E(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} E(X_{11}) & E(X_{12}) & \cdots & E(X_{1p}) \\ E(X_{21}) & E(X_{22}) & \cdots & E(X_{2p}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E(X_{n1}) & E(X_{n2}) & \cdots & E(X_{np}) \end{bmatrix} \tag{2-23}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

其中，矩阵的每个元素①

$$E(X_{ij})=\begin{cases}\int_{-\infty}^{\infty} x_{ij}f_{ij}(x_{ij})\mathrm{d}x_{ij} & \text{若 } X_{ij} \text{ 是概率密度函数为 } f_{ij}(x_{ij}) \text{ 的连续型随机变量}\\ \sum\limits_{\text{所有}x_{ij}} x_{ij}p_{ij}(x_{ij}) & \text{若 } X_{ij} \text{ 是概率函数为 } p_{ij}(x_{ij}) \text{ 的离散型随机变量}\end{cases}$$

例 2.12 （对离散型随机变量计算期望值）

设 $p=2$ 和 $n=1$，考虑随机向量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2]$。设离散型随机变量 X_1 的概率函数如下：

x_1	-1	0	0.1
$p_1(x_1)$	0.3	0.3	0.4

则 $$E(X_1)=\sum_{\text{一切}x_1} x_1p_1(x_1)=(-1)\times 0.3+0\times 0.3+1\times 0.4=0.1$$

类似地，设离散型随机变量 X_2 有概率函数

x_2	0	1
$p_2(x_2)$	0.8	0.2

则 $$E(X_2)=\sum_{\text{所有}x_2} x_2p_2(x_2)=0\times 0.8+1\times 0.2=0.2$$

因此

$$E(\mathbf{X})=\begin{bmatrix}E(X_1)\\E(X_2)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.1\\0.2\end{bmatrix}$$

直接由随机矩阵期望值的定义以及期望的性质 $E(X_1+Y_1)=E(X_1)+E(Y_1)$ 和 $E(cX_1)=cE(X_1)$，可得到关于矩阵的和的期望与乘积的期望的两个结论。设 $\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{Y}$ 是同维的随机矩阵，并令 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是常数的可相乘矩阵，则（参见练习 2.40）

$$\begin{aligned}E(\mathbf{X}+\mathbf{Y})&=E(\mathbf{X})+E(\mathbf{Y})\\ E(\mathbf{AXB})&=\mathbf{A}E(\mathbf{X})\mathbf{B}\end{aligned}\qquad(2\text{-}24)$$

2.6 均值向量和协方差矩阵

设 $\mathbf{X}=[X_1,X_2,\cdots,X_p]$ 是 $p\times 1$ 随机向量，则 $\mathbf{X}$ 的每个元素都是一个有着自己的边缘概率函数的随机变量。（参考例 2.12。）边缘均值 μ_i 和方差 σ_i^2 分别定义为 $\mu_i=E(X_i)$ 和 $\sigma_i^2=E(X_i-\mu_i)^2$，$i=1,2,\cdots$。具体地说，

① 如果不熟悉微积分，则应该注重对期望值和方差的理解。我们的研究主要是基于期望值的性质，而不是对连续型或离散型随机变量的具体计算。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mu_i = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} x_i f_i(x_i)\mathrm{d}x_i & \text{若 } X_i \text{ 是概率密度函数为 } f_i(x_i) \text{ 的连续型随机变量} \\ \sum_{\text{所有}x_i} x_i p_i(x_i) & \text{若 } X_i \text{ 是概率函数为 } p_i(x_i) \text{ 的离散型随机变量} \end{cases}$$

$$\sigma_i^2 = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} (x_i - \mu_i)^2 f_i(x_i)\mathrm{d}x_i & \text{若 } X_i \text{ 是概率密度函数为 } f_i(x_i) \text{ 的连续型随机变量} \\ \sum_{\text{所有}x_i} (x_i - \mu_i)^2 p_i(x_i) & \text{若 } X_i \text{ 是概率函数为 } p_i(x_i) \text{ 的离散型随机变量} \end{cases} \tag{2-25}$$

在以后的各节中，采用记号 σ_{ii} 而不是更传统的 σ_i^2 来表示边缘方差，较为方便。因此，我们将使用这一记号。

任何一对随机变量 X_i 和 X_k 的特性，可用它们的联合概率函数来描述。它们之间的线性联系的程度可用协方差来表示。

$$\sigma_{ik} = E(X_i - \mu_i)(X_k - \mu_k)$$

$$= \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} (x_i - \mu_i)(x_k - \mu_k) f_{ik}(x_i, x_k)\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k & \text{若 } X_i, X_k \text{ 是联合密度函数为 } f_{ik}(x_i, x_k) \text{ 的连续型随机变量} \\ \sum_{\text{所有}x_i}\sum_{\text{所有}x_k} (x_i - \mu_i)(x_k - \mu_k) p_{ik}(x_i, x_k) & \text{若 } X_i, X_k \text{ 是联合概率函数为 } p_{ik}(x_i, x_k) \text{ 的离散型随机变量} \end{cases} \tag{2-26}$$

其中 μ_i 和 $\mu_k (i, k = 1, 2, \cdots, p)$ 是边缘均值。当 $i = k$ 时，协方差变成边缘方差。

更一般地，p 个随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的集体特性或等价地，随机向量 $\mathbf{X} = [X_1, X_2, \cdots, X_p]'$ 的特性是通过联合概率密度函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_p) = f(\mathbf{x})$ 来描述。正如在本书中已经指出的，$f(\mathbf{x})$ 通常是多元正态密度函数。（参见第 4 章。）

如果联合概率 $P[X_i \leqslant x_i$ 和 $X_k \leqslant x_k]$，对一切 x_i, x_k，都能写成对应边缘概率之积，即

$$P[X_i \leqslant x_i \quad \text{和} \quad X_k \leqslant x_k] = P[X_i \leqslant x_i]P[X_k \leqslant x_k] \tag{2-27}$$

则称 X_i 和 X_k 是**统计独立**的。当 X_i 与 X_k 是联合密度为 $f_{ik}(x_i, x_k)$、边缘密度为 $f_i(x_i)$ 和 $f_k(x_k)$ 的连续型随机变量时，对各对 (x_i, x_k)，独立条件变为

$$f_{ik}(x_i, x_k) = f_i(x_i) f_k(x_k)$$

对于 p 个连续型随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$，如果对所有 p 元数组 $(x_1, x_2, \cdots, x_p)$，它们的联合密度函数能分解成

$$f_{12\cdots p}(x_1, x_2, \cdots, x_p) = f_1(x_1) f_2(x_2) \cdots f_p(x_p) \tag{2-28}$$

则称它们是**相互统计独立**的。

统计独立对于协方差有着重要意义。式(2-28)中的因式分解意味着 $\mathrm{Cov}(X_i, X_k) = 0$。因此，

$$\text{若 } X_i \text{ 与 } X_k \text{ 独立，则 } \mathrm{Cov}(X_i, X_k) = 0 \tag{2-29}$$

式(2-29)的逆命题并非普遍成立。在有些情况下，$\mathrm{Cov}(X_i, X_k) = 0$，而 X_i 与 X_k 却相关。（见[2]。）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$p\times 1$ 随机向量 $\mathbf{X}$ 的均值和协方差可以用矩阵形式表示。每个元素的期望值构成均值向量 $\boldsymbol{\mu}=E(\mathbf{X})$，$p$ 个方差 σ_{ii} 和 $p(p-1)/2$ 个不同的协方差 $\sigma_{ik}(i<k)$ 构成对称的方差-协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}=E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'$。具体地，

$$E(\mathbf{X})=\begin{bmatrix}E(X_1)\\E(X_2)\\\vdots\\E(X_p)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu_1\\\mu_2\\\vdots\\\mu_p\end{bmatrix}=\boldsymbol{\mu} \tag{2-30}$$

和

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}&=E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\\&=E\left(\begin{bmatrix}X_1-\mu_1\\X_2-\mu_2\\\vdots\\X_p-\mu_p\end{bmatrix}[X_1-\mu_1,X_2-\mu_2,\cdots,X_p-\mu_p]\right)\\&=E\begin{bmatrix}(X_1-\mu_1)^2&(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)&\cdots&(X_1-\mu_1)(X_p-\mu_p)\\(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1)&(X_2-\mu_2)^2&\cdots&(X_2-\mu_2)(X_p-\mu_p)\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\(X_p-\mu_p)(X_1-\mu_1)&(X_p-\mu_p)(X_2-\mu_2)&\cdots&(X_p-\mu_p)^2\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}E(X_1-\mu_1)^2&E(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)&\cdots&E(X_1-\mu_1)(X_p-\mu_p)\\E(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1)&E(X_2-\mu_2)^2&\cdots&E(X_2-\mu_2)(X_p-\mu_p)\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\E(X_p-\mu_p)(X_1-\mu_1)&E(X_p-\mu_p)(X_2-\mu_2)&\cdots&E(X_p-\mu_p)^2\end{bmatrix}\end{aligned}$$

或

$$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{Cov}(\mathbf{X})=\begin{bmatrix}\sigma_{11}&\sigma_{12}&\cdots&\sigma_{1p}\\\sigma_{21}&\sigma_{22}&\cdots&\sigma_{2p}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\\sigma_{p1}&\sigma_{p2}&\cdots&\sigma_{pp}\end{bmatrix} \tag{2-31}$$

例 2.13 （计算协方差矩阵）

例 2.12 中的两个随机变量 X_1 和 X_2，设其联合概率函数 $p_{12}(x_1,x_2)$ 如下表所示：

x_1 \ x_2	0	1	$p(x_1)$
−1	0.24	0.06	0.3
0	0.16	0.14	0.3
1	0.40	0.00	0.4
$p_2(x_2)$	0.8	0.2	1

求其协方差矩阵。

我们已经求出 $\mu_1=E(X_1)=0.1$ 和 $\mu_2=E(X_2)=0.2$。（参见例 2.12。）此外，

$$\sigma_{11}=E(X_1-\mu_1)^2=\sum_{\text{所有}x_1}(x_1-0.1)^2p_1(x_1)$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=(-1-0.1)^2\times 0.3+(0-0.1)^2\times 0.3+(1-0.1)^2\times 0.4=0.69$$

$$\sigma_{22}=E(X_2-\mu_2)^2=\sum_{所有x_2}(x_2-0.2)^2p_2(x_2)$$

$$=(0-0.2)^2\times 0.8+(1-0.2)^2\times 0.2=0.16$$

$$\sigma_{12}=E(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)=\sum_{所有(x_1,x_2)}(x_1-0.1)(x_2-0.2)p_{12}(x_1,x_2)$$

$$=(-1-0.1)(0-0.2)\times 0.24+(-1-0.1)(1-0.2)\times 0.06$$
$$+\cdots+(1-0.1)(1-0.2)\times 0.00=-0.08$$

$$\sigma_{21}=E(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1)=E(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)=\sigma_{12}=-0.08$$

因此，由 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2]$ 有

$$\boldsymbol{\mu}=E(\mathbf{X})=\begin{bmatrix}E(X_1)\\E(X_2)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu_1\\\mu_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.1\\0.2\end{bmatrix}$$

和

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}&=E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\\&=E\begin{bmatrix}(X_1-\mu_1)^2 & (X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)\\(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1) & (X_2-\mu_2)^2\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}E(X_1-\mu_1)^2 & E(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)\\E(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1) & E(X_2-\mu_2)^2\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\\sigma_{21} & \sigma_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.69 & -0.08\\-0.08 & 0.16\end{bmatrix}\end{aligned}$$

我们注意到离散型随机变量的均值、方差和协方差的计算涉及到累加（如例 2.12 和例 2.13），而对连续型随机变量类似的计算则涉及到积分。

因为 $\sigma_{ik}=E(X_i-\mu_i)(X_k-\mu_k)=\sigma_{ki}$，可以方便地把式(2-31)中的矩阵写成

$$\boldsymbol{\Sigma}=E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'=\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p}\\\sigma_{12} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2p}\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\\sigma_{1p} & \sigma_{2p} & \cdots & \sigma_{pp}\end{bmatrix}\tag{2-32}$$

$\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 可分别称为**总体均值**（向量）和**总体方差-协方差**（矩阵）。

多元正态分布在均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 和方差-协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 给定的情况下是完全确定的（见第 4 章），因而这些量在许多多元方法中起着重要作用。

把包含在方差 σ_{ii} 中的信息，与包含在关联性度量，尤其正被称为**总体相关系数** ρ_{ik} 的关联性度量中的信息分离，常常能提供更多的信息。相关系数 ρ_{ik} 可用协方差 σ_{ik} 和方差 σ_{ii} 和 σ_{kk} 定义为

$$\rho_{ik}=\frac{\sigma_{ik}}{\sqrt{\sigma_{ii}}\sqrt{\sigma_{kk}}}\tag{2-33}$$

相关系数度量随机变量 X_i 和 X_k 之间线性联系的程度。（可参见[2]。）

设总体相关矩阵是 $p\times p$ 对称阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{11}}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{11}}} & \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}} & \cdots & \frac{\sigma_{1p}}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{pp}}} \\ \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}} & \frac{\sigma_{22}}{\sqrt{\sigma_{22}}\sqrt{\sigma_{22}}} & \cdots & \frac{\sigma_{2p}}{\sqrt{\sigma_{22}}\sqrt{\sigma_{pp}}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\sigma_{1p}}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{pp}}} & \frac{\sigma_{2p}}{\sqrt{\sigma_{22}}\sqrt{\sigma_{pp}}} & \cdots & \frac{\sigma_{pp}}{\sqrt{\sigma_{pp}}\sqrt{\sigma_{pp}}} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1p} \\ \rho_{12} & 1 & \cdots & \rho_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{1p} & \rho_{2p} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{2-34}$$

并设 $p \times p$ 标准差矩阵是

$$\mathbf{V}^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{\sigma_{11}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\sigma_{22}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\sigma_{pp}} \end{bmatrix} \tag{2-35}$$

则易证(参见练习 2.23)

$$\mathbf{V}^{1/2}\rho\mathbf{V}^{1/2} = \Sigma \tag{2-36}$$

与

$$\rho = (\mathbf{V}^{1/2})^{-1}\Sigma(\mathbf{V}^{1/2})^{-1} \tag{2-37}$$

即 Σ 可由 $\mathbf{V}^{1/2}$和 ρ 得到,反之 ρ 可由 Σ 得到。而且,用矩阵来表达这些关系式,就可以方便地在计算机上进行计算。

例 2.14 (从协方差矩阵计算相关阵)

设

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 9 & -3 \\ 2 & -3 & 25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

求 $\mathbf{V}^{1/2}$和 ρ。

这里

$$\mathbf{V}^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{\sigma_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\sigma_{22}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\sigma_{33}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{3} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{5}\end{bmatrix}$$

因此，从式(2-37)，相关阵 $\boldsymbol{\rho}$ 由下式给出

$$(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{3} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{5}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 & 1 & 2\\ 1 & 9 & -3\\ 2 & -3 & 25\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{3} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{5}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{6} & \frac{1}{5}\\ \frac{1}{6} & 1 & -\frac{1}{5}\\ \frac{1}{5} & -\frac{1}{5} & 1\end{bmatrix}$$

分块协方差矩阵

通常，在单个试验中测得的特征会自然地分成两个或更多的类。例如，考虑表示消耗和收入的变量的测量结果或代表人的性格和身体特征的变量的测量结果。处理这些情况的一种方法就是，规定区分不同类别的特性是全体特性集合的子集。如果全体集合用 $p\times 1$ 维随机向量 $\mathbf{X}$ 表示，子集可以看作是 $\mathbf{X}$ 的分量并可用划分 $\mathbf{X}$ 的方法来分类。

一般地说，可把含有 p 个特征的 $p\times 1$ 维随机向量 $\mathbf{X}$ 划分成大小分别为 q 和 $p-q$ 的两类。例如，可以写成

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}X_1\\ \vdots\\ X_q\\ \cdots\cdots\\ X_{q+1}\\ \vdots\\ X_p\end{bmatrix}\begin{matrix}\left.\begin{matrix}\\ \\ \\ \end{matrix}\right\}q\\ \left.\begin{matrix}\\ \\ \\ \end{matrix}\right\}p-q\end{matrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}^{(1)}\\ \cdots\cdots\\ \mathbf{X}^{(2)}\end{bmatrix}\quad 和\quad \boldsymbol{\mu}=E(\mathbf{X})=\begin{bmatrix}\mu_1\\ \vdots\\ \mu_q\\ \cdots\cdots\\ \mu_{q+1}\\ \vdots\\ \mu_p\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\mu}^{(1)}\\ \cdots\cdots\\ \boldsymbol{\mu}^{(2)}\end{bmatrix}\tag{2-38}$$

由转置和矩阵乘法定义有

$$(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'$$

$$=\begin{bmatrix}X_1-\mu_1\\ X_2-\mu_2\\ \vdots\\ X_q-\mu_q\end{bmatrix}[X_{q+1}-\mu_{q+1},X_{q+2}-\mu_{q+2},\cdots,X_p-\mu_p]$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=\begin{bmatrix}(X_1-\mu_1)(X_{q+1}-\mu_{q+1}) & (X_1-\mu_1)(X_{q+2}-\mu_{q+2}) & \cdots & (X_1-\mu_1)(X_p-\mu_p)\\(X_2-\mu_2)(X_{q+1}-\mu_{q+1}) & (X_2-\mu_2)(X_{q+2}-\mu_{q+2}) & \cdots & (X_2-\mu_2)(X_p-\mu_p)\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\(X_q-\mu_q)(X_{q+1}-\mu_{q+1}) & (X_q-\mu_q)(X_{q+2}-\mu_{q+2}) & \cdots & (X_q-\mu_q)(X_p-\mu_p)\end{bmatrix}$$

对矩阵$(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'$取期望，得

$$E(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'=\begin{bmatrix}\sigma_{1,q+1} & \sigma_{1,q+2} & \cdots & \sigma_{1p}\\\sigma_{2,q+1} & \sigma_{2,q+2} & \cdots & \sigma_{2p}\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\\sigma_{q,q+1} & \sigma_{q,q+2} & \cdots & \sigma_{qp}\end{bmatrix}=\boldsymbol{\Sigma}_{12} \tag{2-39}$$

式(2-39)给出了$\mathbf{X}^{(1)}$的分量与$\mathbf{X}^{(2)}$的分量之间的所有的协方差，σ_{ij}，$i=1,2,\cdots,q$，$j=q+1,q+2,\cdots,p$。注意，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}$不必是对称的，甚至不必是方阵。

利用式(2-38)的分块，容易证明

$$(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'$$

$$=\begin{bmatrix}\underset{(q\times 1)}{(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})}\underset{(1\times q)}{(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})'} & \underset{(q\times 1)}{(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})}\underset{(1\times(p-q))}{(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'}\\\underset{((p-q)\times 1)}{(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})}\underset{(1\times q)}{(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})'} & \underset{((p-q)\times 1)}{(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})}\underset{(1\times(p-q))}{(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})'}\end{bmatrix}$$

因此，

$$\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}}=E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'=\begin{array}{c c}& \begin{array}{cc}q & p-q\end{array}\\ \begin{array}{c}q\\p-q\end{array} & \underset{(p\times p)}{\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\\\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{bmatrix}}\end{array} \tag{2-40}$$

$$=\left[\begin{array}{ccc:ccc}\sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1q} & \sigma_{1,q+1} & \cdots & \sigma_{1p}\\\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\\sigma_{q1} & \cdots & \sigma_{qq} & \sigma_{q,q+1} & \cdots & \sigma_{qp}\\\hdashline\sigma_{q+1,1} & \cdots & \sigma_{q+1,q} & \sigma_{q+1,q+1} & \cdots & \sigma_{q+1,p}\\\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\\sigma_{p1} & \cdots & \sigma_{pq} & \sigma_{p,q+1} & \cdots & \sigma_{pp}\end{array}\right]$$

注意有$\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\boldsymbol{\Sigma}'_{21}$。$\mathbf{X}^{(1)}$的协方差阵是$\boldsymbol{\Sigma}_{11}$，$\mathbf{X}^{(2)}$的是$\boldsymbol{\Sigma}_{22}$，且来自$\mathbf{X}^{(1)}$和$\mathbf{X}^{(2)}$元素的协方差阵是$\boldsymbol{\Sigma}_{12}$(或$\boldsymbol{\Sigma}_{21}$)。

随机变量的线性组合的均值向量和协方差阵

如果单个随机变量，如X_1，乘以一个常数c，则有

$$E(cX_1)=cE(X_1)=c\mu_1$$

和

$$\mathrm{Var}(cX_1)=E(cX_1-c\mu_1)^2=c^2\mathrm{Var}(X_1)=c^2\sigma_{11}$$

如果X_2是另一个随机变量且a,b为常数，则利用期望的可加性，有

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(aX_1,bX_2)&=E(aX_1-a\mu_1)(bX_2-b\mu_2)\\&=abE(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)\\&=ab\mathrm{Cov}(X_1,X_2)=ab\sigma_{12}\end{aligned}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

最后，对于线性组合 aX_1+bX_2，有

$$
\begin{aligned}
E(aX_1+bX_2) &= aE(X_1)+bE(X_2)=a\mu_1+b\mu_2 \\
\mathrm{Var}(aX_1+bX_2) &= E[(aX_1+bX_2)-(a\mu_1+b\mu_2)]^2 \\
&= E[a(X_1-\mu_1)+b(X_2-\mu_2)]^2 \\
&= E[a^2(X_1-\mu_1)^2+b^2(X_2-\mu_2)^2+2ab(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)] \\
&= a^2\mathrm{Var}(X_1)+b^2\mathrm{Var}(X_2)+2ab\mathrm{Cov}(X_1,X_2) \\
&= a^2\sigma_{11}+b^2\sigma_{22}+2ab\sigma_{12}
\end{aligned}
\tag{2-41}
$$

引入 $\mathbf{c}'=[a,b]$，aX_1+bX_2 可写为

$$[a \quad b]\begin{bmatrix}X_1\\X_2\end{bmatrix}=\mathbf{c}'\mathbf{X}$$

类似地，$E(aX_1+bX_2)=a\mu_1+b\mu_2$ 可表示为

$$[a \quad b]\begin{bmatrix}\mu_1\\\mu_2\end{bmatrix}=\mathbf{c}'\boldsymbol{\mu}$$

如果设

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\\sigma_{12} & \sigma_{22}\end{bmatrix}$$

是 $\mathbf{X}$ 的方差-协方差矩阵，由于

$$\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{c}=[a \quad b]\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\\sigma_{12} & \sigma_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=a^2\sigma_{11}+2ab\sigma_{12}+b^2\sigma_{22}$$

式(2-41)变为

$$\mathrm{Var}(aX_1+bX_2)=\mathrm{Var}(\mathbf{c}'\mathbf{X})=\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{c} \tag{2-42}$$

上述结论可推广到 p 个随机变量的线性组合：

> 线性组合 $\mathbf{c}'\mathbf{X}=c_1X_1+\cdots+c_pX_p$ 有
>
> $$\begin{aligned}\text{均值} &= E(\mathbf{c}'\mathbf{X})=\mathbf{c}'\boldsymbol{\mu}\\ \text{方差} &= \mathrm{Var}(\mathbf{c}'\mathbf{X})=\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{c}\end{aligned} \tag{2-43}$$
>
> 其中 $\boldsymbol{\mu}=E(\mathbf{X})$，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{Cov}(\mathbf{X})$。

一般地，考虑 p 个随机变量 $X_1,\cdots,X_p$ 的 q 个线性组合：

$$
\begin{aligned}
Z_1 &= c_{11}X_1+c_{12}X_2+\cdots+c_{1p}X_p\\
Z_2 &= c_{21}X_1+c_{22}X_2+\cdots+c_{2p}X_p\\
&\vdots \qquad\qquad\qquad \vdots\\
Z_q &= c_{q1}X_1+c_{q2}X_2+\cdots+c_{qp}X_p
\end{aligned}
$$

或

$$\mathbf{Z}=\underset{(q\times 1)}{\begin{bmatrix}Z_1\\Z_2\\\vdots\\Z_q\end{bmatrix}}=\underset{(q\times p)}{\begin{bmatrix}c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p}\\c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p}\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\c_{q1} & c_{q2} & \cdots & c_{qp}\end{bmatrix}}=\underset{(p\times 1)}{\begin{bmatrix}X_1\\X_2\\\vdots\\X_p\end{bmatrix}}=\mathbf{CX} \tag{2-44}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

线性组合 $\mathbf{Z}=\mathbf{CX}$ 有

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}=E(\mathbf{Z})=E(\mathbf{CX})=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{Z}}=\mathrm{Cov}(\mathbf{Z})=\mathrm{Cov}(\mathbf{CX})=\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}\mathbf{C}' \tag{2-45}$$

其中 $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}$ 分别是 $\mathbf{X}$ 的均值向量和方差-协方差矩阵。(参考练习 2.28 对于 $\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}\mathbf{C}'$ 中非对角线上的项的计算。)

在后面第 8 章和第 9 章中讨论关于主成分分析和因子分析时，我们将主要根据式(2-45)的结论。

例 2.15 (线性组合的均值和协方差)

设 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2]$是一随机向量，其均值向量 $\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{X}}=[\mu_1,\mu_2]$，方差-协方差矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}=\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22}\end{bmatrix}$$

利用 $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}$，求线性组合 $\begin{matrix}Z_1=X_1-X_2\\ Z_2=X_1+X_2\end{matrix}$ 或 $\mathbf{Z}=\begin{bmatrix}Z_1\\ Z_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}X_1\\ X_2\end{bmatrix}=\mathbf{CX}$ 的均值向量和协方差矩阵。

这里

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}=E(\mathbf{Z})=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mu_1\\ \mu_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu_1-\mu_2\\ \mu_1+\mu_2\end{bmatrix}$$

且

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{Z}}=\mathrm{Cov}(\mathbf{Z})=\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}\mathbf{C}'=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\sigma_{11}-2\sigma_{12}+\sigma_{22} & \sigma_{11}-\sigma_{22}\\ \sigma_{11}-\sigma_{22} & \sigma_{11}+2\sigma_{12}+\sigma_{22}\end{bmatrix}$$

注意，若 $\sigma_{11}=\sigma_{22}$——即 X_1 与 X_2 方差相等——$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{Z}}$ 中的非对角线元素等于零。这说明了一个众所周知的结论，方差相等的两个随机变量的和与差是不相关的。

分块样本均值向量和协方差矩阵

本节中，矩阵的许多结论已经用总体均值和方差(协方差)来表示。如果总体量由合理定义的样本量取代，式(2-36)，(2-37)，(2-38)和(2-40)中的结论也成立。

设 $\bar{\mathbf{x}}'=[\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots,\bar{x}_p]$是由 p 个变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的 n 个观察结果所构成的样本均值向量，并设

$$\mathbf{S}_n=\begin{bmatrix}s_{11} & \cdots & s_{1p}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ s_{1p} & \cdots & s_{pp}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{j1}-\bar{x}_1)^2 & \cdots & \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{jp}-\bar{x}_p)\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{j1}-\bar{x}_1)(x_{jp}-\bar{x}_p) & \cdots & \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{jp}-\bar{x}_p)^2\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

是对应的样本方差-协方差矩阵。

样本均值向量和协方差矩阵可以分块，以便区分对应各类变量的量。因此，

$$\underset{(p\times 1)}{\bar{\mathbf{x}}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \vdots \\ \bar{x}_q \\ \cdots\cdots \\ \bar{x}_{q+1} \\ \vdots \\ \bar{x}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{x}}^{(1)} \\ \cdots\cdots \\ \bar{\mathbf{x}}^{(2)} \end{bmatrix} \tag{2-46}$$

和

$$\underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_n} = \left[\begin{array}{ccc:ccc} s_{11} & \cdots & s_{1q} & s_{1,q+1} & \cdots & s_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{q1} & \cdots & s_{qq} & s_{q,q+1} & \cdots & s_{qp} \\ \hdashline s_{q+1,1} & \cdots & s_{q+1,q} & s_{q+1,q+1} & \cdots & s_{q+1,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & \cdots & s_{pq} & s_{p,q+1} & \cdots & s_{pp} \end{array}\right]$$

$$= \begin{array}{c} \\ q \\ p-q \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} q & p-q \end{array} \\ \left[\begin{array}{c:c} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \hdashline \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{array}\right] \end{array} \tag{2-47}$$

其中 $\bar{\mathbf{x}}^{(1)}$ 和 $\bar{\mathbf{x}}^{(2)}$ 是分别由观测值 $\mathbf{x}^{(1)}=[x_1,\cdots,x_q]'$ 和 $\mathbf{x}^{(2)}=[x_{q+1},\cdots,x_p]'$ 构成的样本均值向量；$\mathbf{S}_{11}$ 是由观测值 $x^{(1)}$ 计算的样本协方差阵；$\mathbf{S}_{22}$ 是由观测值 $\mathbf{x}^{(2)}$ 计算的样本协方差阵；且 $\mathbf{S}_{12}=\mathbf{S}'_{21}$ 是关于 $\mathbf{x}^{(1)}$ 和 $\mathbf{x}^{(2)}$ 的元素间的样本协方差矩阵。

2.7 矩阵不等式和极大化

极大化原理在多种多元方法中起着重要作用。例如，线性判别分析就涉及把诸多观察结果分配到预定的聚类。通常，分配的规则是测量值的一个线性函数，它使得聚类的分离相对于聚类内的差异性达到最大。又如，主成分是有最大变异性的测量值的线性组合。

本节中介绍的矩阵不等式，使我们容易推导出在以后章节将要用到的某些极大化结论。

柯西-施瓦茨(Cauchy-Schwarz)不等式 设 $\mathbf{b}$ 和 $\mathbf{d}$ 是任意两个 $p\times 1$ 向量，则当且仅当对某个常数 c 有 $\mathbf{b}=c\mathbf{d}$(或 $\mathbf{d}=c\mathbf{b}$)时，

$$(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2 \leqslant (\mathbf{b}'\mathbf{b})(\mathbf{d}'\mathbf{d}) \tag{2-48}$$

中的等号成立。

证明 如果 $\mathbf{b}=\mathbf{0}$ 或 $\mathbf{d}=\mathbf{0}$，不等式显然成立。排除这种可能后，考虑向量 $\mathbf{b}-x\mathbf{d}$，其中 x 是任意标量。由于对于 $\mathbf{b}-x\mathbf{d}\neq\mathbf{0}$，$\mathbf{b}-x\mathbf{d}$ 的长度为正，在此情况下，

$$0 < (\mathbf{b}-x\mathbf{d})'(\mathbf{b}-x\mathbf{d}) = \mathbf{b}'\mathbf{b} - x\mathbf{d}'\mathbf{b} - \mathbf{b}'(x\mathbf{d}) + x^2\mathbf{d}'\mathbf{d}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=\mathbf{b}'\mathbf{b}-2x(\mathbf{b}'\mathbf{d})+x^2(\mathbf{d}'\mathbf{d})$$

这最后的表达式是 x 的二次式，若加上和减去标量 $(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2/\mathbf{d}'\mathbf{d}$，使之完全平方，得到

$$0<\mathbf{b}'\mathbf{b}-\frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}}+\frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}}-2x(\mathbf{b}'\mathbf{d})+x^2(\mathbf{d}'\mathbf{d})$$

$$=\mathbf{b}'\mathbf{b}-\frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}}+(\mathbf{d}'\mathbf{d})\left(x-\frac{\mathbf{b}'\mathbf{d}}{\mathbf{d}'\mathbf{d}}\right)^2$$

若取 $x=\mathbf{b}'\mathbf{d}/\mathbf{d}'\mathbf{d}$，则括号中的项为零，由此得出结论

$$0<\mathbf{b}'\mathbf{b}-\frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}}$$

若对某个 x，$\mathbf{b}\neq x\mathbf{d}$，则有 $(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2<(\mathbf{b}'\mathbf{b})(\mathbf{d}'\mathbf{d})$。

注意，若 $\mathbf{b}=c\mathbf{d}$，$0=(\mathbf{b}-c\mathbf{d})'(\mathbf{b}-c\mathbf{d})$，同样的论证可得 $(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2=(\mathbf{b}'\mathbf{b})(\mathbf{d}'\mathbf{d})$。

下面是柯西-施瓦茨不等式的一个简单而重要的推广。

广义柯西-施瓦茨不等式 令 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{b}}$ 和 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{d}}$ 是任意两个向量，$\underset{(p\times p)}{\mathbf{B}}$ 是正定矩阵，则当且仅当对某个常数 c 有 $\mathbf{b}=c\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d}$（或 $\mathbf{d}=c\mathbf{B}\mathbf{b}$）时，

$$(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2\leqslant(\mathbf{b}'\mathbf{B}\mathbf{b})(\mathbf{d}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d}) \tag{2-49}$$

中的等号成立。

证明 当 $\mathbf{b}=\mathbf{0}$ 或 $\mathbf{d}=\mathbf{0}$ 时，不等式显然成立。对其他情况，考虑平方根矩阵 $\mathbf{B}^{1/2}$，它以其特征值 λ_i 和标准化特征向量 $\mathbf{e}_i$ 定义为 $\mathbf{B}^{1/2}=\sum_{i=1}^{p}\sqrt{\lambda_i}\,\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i$。如果我们令[见式(2-22)]

$$\mathbf{B}^{-1/2}=\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i$$

由此得出

$$\mathbf{b}'\mathbf{d}=\mathbf{b}'\mathbf{I}\mathbf{d}=\mathbf{b}'\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{d}=(\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{b})'(\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{d})$$

把柯西-施瓦茨不等式运用到向量 $(\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{b})$ 和 $(\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{d})$ 上，证明即可完成。

广义柯西-施瓦茨不等式导致下面的极大化结论。

极大化引理 令 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{B}}$ 为正定矩阵且 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{d}}$ 为给定向量，则对任意非零向量 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{x}}$ 有

$$\max_{\mathbf{x}\neq 0}\frac{(\mathbf{x}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}=\mathbf{d}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d} \tag{2-50}$$

对任意非零常数 c，当 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{x}}=c\underset{(p\times p)}{\mathbf{B}^{-1}}\underset{(p\times 1)}{\mathbf{d}}$ 时，达到最大值。

证明 由广义柯西-施瓦茨不等式，有 $(\mathbf{x}'\mathbf{d})^2\leqslant(\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x})(\mathbf{d}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d})$。因为 $\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$ 且 $\mathbf{B}$ 为正定，$\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}>0$。用正标量 $\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}$ 除以不等式两边，得出上界

$$\frac{(\mathbf{x}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}\leqslant\mathbf{d}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d}$$

由于 $\mathbf{x}=c\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d}$ 时达到上界，因此，通过此 $\mathbf{x}$ 取得最大值，得出式(2-50)。

最后一个极大化结论可提供对特征值的一种解释。

单位球面上的点的二次型的极大化 令 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{B}}$ 是正定矩阵，它的特征值是 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_p\geqslant 0$，其相应的标准化特征向量是 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p$。则

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = \lambda_1 \quad (\text{当 } \mathbf{x} = \mathbf{e}_1 \text{ 时达到})$$
$$\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = \lambda_p \quad (\text{当 } \mathbf{x} = \mathbf{e}_p \text{ 时达到}) \tag{2-51}$$

更进一步，

$$\max_{\mathbf{x}\perp\mathbf{e}_1,\cdots,\mathbf{e}_k} \frac{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = \lambda_{k+1} \quad (\text{当 } \mathbf{x} = \mathbf{e}_{k+1}, k = 1,2,\cdots,p-1 \text{ 时达到}) \tag{2-52}$$

其中符号⊥读作“垂直于”。

证明 令 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{P}}$ 是正交阵，其列是特征向量 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p$，且 $\mathbf{\Lambda}$ 是由特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 沿主对角线排列的对角阵。令 $\mathbf{B}^{1/2}=\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}'$[见式(2-22)]且 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{y}} = \underset{(p\times p)}{\mathbf{P}'}\underset{(p\times 1)}{\mathbf{x}}$。因此，$\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$ 意味着 $\mathbf{y}\neq\mathbf{0}$。于是，

$$\frac{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{x}}{\mathbf{x}'\underbrace{\mathbf{P}\mathbf{P}'}_{\substack{\mathbf{I}\\(p\times p)}}\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}'\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}'\mathbf{x}}{\mathbf{y}'\mathbf{y}} = \frac{\mathbf{y}'\mathbf{\Lambda}\mathbf{y}}{\mathbf{y}'\mathbf{y}}$$
$$= \frac{\sum_{i=1}^{p}\lambda_i y_i^2}{\sum_{i=1}^{p} y_i^2} \leqslant \lambda_1 \frac{\sum_{i=1}^{p} y_i^2}{\sum_{i=1}^{p} y_i^2} = \lambda_1 \tag{2-53}$$

令 $\mathbf{x}=\mathbf{e}_1$，

由于

$$\mathbf{e}'_k\mathbf{e}_1 = \begin{cases} 1, & k = 1 \\ 0, & k \neq 1 \end{cases}$$

有

$$\mathbf{y} = \mathbf{P}'\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

对 $\mathbf{x}$ 的这种选择，有 $\mathbf{y}'\mathbf{\Lambda}\mathbf{y}/\mathbf{y}'\mathbf{y}=\lambda_1/1=\lambda_1$，或

$$\frac{\mathbf{e}'_1\mathbf{B}\mathbf{e}_1}{\mathbf{e}'_1\mathbf{e}_1} = \mathbf{e}'_1\mathbf{B}\mathbf{e}_1 = \lambda_1 \tag{2-54}$$

类似的证明可得出式(2-51)的第二部分。

现在，$\mathbf{x}=\mathbf{P}\mathbf{y}=y_1\mathbf{e}_1+y_2\mathbf{e}_2+\cdots+y_p\mathbf{e}_p$，因此 $\mathbf{x}\perp\mathbf{e}_1,\cdots,\mathbf{e}_k$，这条件蕴含了

$$0 = \mathbf{e}'_i\mathbf{x} = y_1\mathbf{e}'_i\mathbf{e}_1 + y_2\mathbf{e}'_i\mathbf{e}_2 + \cdots + y_p\mathbf{e}'_i\mathbf{e}_p = y_i,\ i \leqslant k$$

所以，在 $\mathbf{x}$ 垂直于前 k 个特征向量 $\mathbf{e}_i$ 的情况下，式(2-53)的右边变为

$$\frac{\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}}{\mathbf{x}'\mathbf{x}} = \frac{\sum_{i=k+1}^{p}\lambda_i y_i^2}{\sum_{i=k+1}^{p} y_i^2}$$

取 $y_{k+1}=1, y_{k+2}=\cdots=y_p=0$，得出所求的最大值。

对于一个固定的 $\mathbf{x}_0\neq 0$，$\mathbf{x}'_0\mathbf{B}\mathbf{x}_0/\mathbf{x}'_0\mathbf{x}_0$ 有与 $\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}$ 相同的值，这里 $\mathbf{x}'=\mathbf{x}'_0\Big/\sqrt{\mathbf{x}'_0\mathbf{x}_0}$ 是单

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

位向量。因此，式(2-51)表明，对于到原点距离为单位长度的一切点 $\mathbf{x}$ 来说，最大特征值 λ_1 是二次型 $\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}$ 的最大值。类似地，对于到原点距离为一个单位的所有点 $\mathbf{x}$ 来说，λ_p 是二次型的最小值。对单位球面上的点来说，最大和最小特征值表示 $\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x}$ 的极值。当进一步限制 $\mathbf{x}$，使其垂直于先前选择的向量时，$p\times p$ 正定矩阵 $\mathbf{B}$ 的"中间"特征值也有一个如同极值的解释。

补充 2A　向量与矩阵：基本概念

向量

许多概念，例如人的健康、智力或个性，不可能适当地量化为一个单一数字。相反，需要用若干不同的测量结果 $x_1, x_2, \cdots, x_m$ 来描述。

定义 2A.1　含 m 元实数的数组 $(x_1, x_2, \cdots, x_m)$ 排列成一列，称为一个**向量**。

下面是几个实例。

$$\mathbf{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix},\quad \mathbf{a}=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},\quad \mathbf{b}=\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix},\quad \mathbf{y}=\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

若两个向量中对应元素相同，则这两个向量相等。

定义 2A.2　（标量乘法）　设 c 是任意常数，则乘积 $c\mathbf{x}$ 是一个向量，其第 i 个元素为 cx_i。

为了说明标量乘法，取 $c_1=5$ 和 $c_2=-1.2$，则

$$c_1\mathbf{y}=5\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5 \\ 10 \\ -10 \end{bmatrix}\quad 和\quad c_2\mathbf{y}=(-1.2)\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -1.2 \\ -2.4 \\ 2.4 \end{bmatrix}$$

定义 2A.3　（向量加法）　设两个向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 的元素个数相同，则 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 的和为向量 $\mathbf{z}=\mathbf{x}+\mathbf{y}$，其第 i 个元素 $z_i=x_i+y_i$。

因此，

$$\begin{bmatrix} 3 \\ -1 \\ 4 \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}\quad+\quad\mathbf{y}\quad=\quad\mathbf{z}$$

取零向量 $\mathbf{0}$ 是 m 元数组 $(0,0,\cdots,0)$ 且向量 $-\mathbf{x}$ 是 m 元数组 $(-x_1,-x_2,\cdots,-x_m)$。标量乘法和向量加法这两种运算可以以一种有用的方式进行组合。

定义 2A.4　具有刚才定义的标量乘法和向量加法的一切 m 元实数组的空间叫做一个**向量空间**。

定义 2A.5　向量 $\mathbf{y}=a_1\mathbf{x}_1+a_2\mathbf{x}_2+\cdots+a_k\mathbf{x}_k$ 是向量 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k$ 的一个**线性组合**。$\mathbf{x}_1$，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_k$ 的一切线性组合的集合叫做它们的**线性生成**。

定义 2A.6 如果存在 k 个不全为零的数 $(a_1,a_2,\cdots,a_k)$，使得

$$a_1\mathbf{x}_1+a_2\mathbf{x}_2+\cdots+a_k\mathbf{x}_k=\mathbf{0}$$

则称向量集 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_k$ 是**线性相关**的。否则，向量集是**线性无关**的。

如果向量中的一个，如 $\mathbf{x}_i$，是 $\mathbf{0}$，则向量集是线性相关的。(令 a_i 是定义 2A.6 中惟一的非零系数。)

只有一个元素是 1，而别处是零的向量集是线性无关的。如 $m=4$ 时，

$$\mathbf{x}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad \mathbf{x}_2=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \mathbf{x}_3=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad \mathbf{x}_4=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

因此，

$$\mathbf{0}=a_1\mathbf{x}_1+a_2\mathbf{x}_2+a_3\mathbf{x}_3+a_4\mathbf{x}_4=\begin{bmatrix}a_1\cdot 1+a_2\cdot 0+a_3\cdot 0+a_4\cdot 0\\a_1\cdot 0+a_2\cdot 1+a_3\cdot 0+a_4\cdot 0\\a_1\cdot 0+a_2\cdot 0+a_3\cdot 1+a_4\cdot 0\\a_1\cdot 0+a_2\cdot 0+a_3\cdot 0+a_4\cdot 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\\a_4\end{bmatrix}$$

意味着 $a_1=a_2=a_3=a_4=0$。

又如，令 $k=3$ 和 $m=3$ 且设

$$\mathbf{x}_1=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix},\quad \mathbf{x}_2=\begin{bmatrix}2\\5\\-1\end{bmatrix},\quad \mathbf{x}_3=\begin{bmatrix}0\\1\\-1\end{bmatrix}$$

则

$$2\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2+3\mathbf{x}_3=\mathbf{0}$$

因此，$\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_3$ 是一个线性相关的向量集，因为其中的任何一个都可以表示成其他向量的线性组合(例如 $\mathbf{x}_2=2\mathbf{x}_1+3\mathbf{x}_3$)。

定义 2A.7 任意 m 个线性无关的向量集合称为由所有 m 元实数构成的向量空间的一组**基**。

结论 2A.1 每一个向量可以表示成一组固定基的一个惟一的线性组合。

对于 $m=4$，通常选择的基是

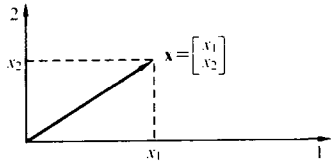
$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

已经证明这四个向量是线性无关的。任一向量 $\mathbf{x}$ 可以惟一地表示为

$$x_1\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}+x_2\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}+x_3\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}+x_4\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\end{bmatrix}=\mathbf{x}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

由 m 个元素组成的一个向量在几何上可以认为是 m 维空间中的一个点。例如，当 $m=2$，可以认为向量 $\mathbf{x}$ 是平面上坐标为 x_1 和 x_2 的点。



向量有长度和方向等几何性质。

定义 2A.8 一个从原点射出的含 m 个元素的向量的**长度**由勾股定理公式给出：

$$\mathbf{x}\text{ 的长度} = L_{\mathbf{x}} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_m^2}$$

定义 2A.9 分别含 m 个元素的两个向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 之间的**夹角** θ，定义为

$$\cos(\theta) = \frac{(x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_my_m)}{L_{\mathbf{x}}L_{\mathbf{y}}}$$

其中 $L_{\mathbf{x}}=\mathbf{x}$ 的长度，$L_{\mathbf{y}}=\mathbf{y}$ 的长度，$x_1, x_2, \cdots, x_m$ 是 $\mathbf{x}$ 的元素，$y_1, y_2, \cdots, y_m$ 是 $\mathbf{y}$ 的元素。

令

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} -1 \\ 5 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 4 \\ -3 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

则 $\mathbf{x}$ 的长度、$\mathbf{y}$ 的长度及两向量之间夹角的余弦为

$$\mathbf{x}\text{ 的长度} = \sqrt{(-1)^2 + 5^2 + 2^2 + (-2)^2} = \sqrt{34} = 5.83$$

$$\mathbf{y}\text{ 的长度} = \sqrt{4^2 + (-3)^2 + 0^2 + 1^2} = \sqrt{26} = 5.10$$

及

$$\begin{aligned}\cos(\theta) &= \frac{1}{L_{\mathbf{x}}}\frac{1}{L_{\mathbf{y}}}[x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3 + x_4y_4] \\ &= \frac{1}{\sqrt{34}} \times \frac{1}{\sqrt{26}}[(-1) \times 4 + 5 \times (-3) + 2 \times 0 + (-2) \times 1] \\ &= \frac{1}{5.83 \times 5.10} \times (-21) = -0.706\end{aligned}$$

因此，$\theta=135°$。

定义 2A.10 元素个数相同的两个向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 的内(或点)积定义为分量积之和：

$$x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_my_m$$

我们用符号 $\mathbf{x}'\mathbf{y}$ 或 $\mathbf{y}'\mathbf{x}$ 表示这个内积。

用符号 $\mathbf{x}'\mathbf{y}$，可以表示向量的长度以及两向量之间夹角的余弦，如：

$$L_{\mathbf{x}} = \mathbf{x}\text{ 的长度} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_m^2} = \sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}$$

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{x}'\mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{y}}\ \sqrt{\mathbf{y}'\mathbf{y}}}$$

定义 2A.11 当两个向量 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 之间的夹角 $\theta=90°$ 或 $270°$ 时，就说 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 是垂直的。

由于仅当 $\theta=90°$ 或 $270°$ 时，$\cos(\theta)=0$，这条件变为

若 $\mathbf{x}'\mathbf{y} = 0$，$\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 是**垂直**的

我们写作 $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

基向量

$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

是互相垂直的，而且每个都为单位长度。对任意元素个数 m，同样的结构成立。

结论 2A.2

(a) 当且仅当 $\mathbf{z}=\mathbf{0}$ 时，$\mathbf{z}$ 垂直于每个向量。

(b) 如果 $\mathbf{z}$ 垂直于每个向量 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_k$，则 $\mathbf{z}$ 垂直于由它们所生成的子空间。

(c) 互相垂直的向量是线性无关的。

定义 2A.12 向量 $\mathbf{x}$ 在向量 $\mathbf{y}$ 上的**投影**(或**影子**)为

$$\mathbf{x}\text{ 在 }\mathbf{y}\text{ 上的投影}=\frac{(\mathbf{x}'\mathbf{y})}{L_{\mathbf{y}}^2}=\mathbf{y}$$

如果 $\mathbf{y}$ 为单位长度即 $L_{\mathbf{y}}=1$，则

$$\mathbf{x}\text{ 与 }\mathbf{y}\text{ 上的投影}=(\mathbf{x}'\mathbf{y})\mathbf{y}$$

结论 2A.3 (格拉姆-施密特(Gram-Schmidt)方法) 给定线性无关向量 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_k$，在同一个生成子空间上存在互相垂直向量 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_k$。这些向量可以用以下方法逐个地构造出来。

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_1&=\mathbf{x}_1\\
\mathbf{u}_2&=\mathbf{x}_2-\frac{(\mathbf{x}'_2\mathbf{u}_1)}{\mathbf{u}'_1\mathbf{u}_1}\mathbf{u}_1\\
&\vdots\qquad\qquad\vdots\\
\mathbf{u}_k&=\mathbf{x}_k-\frac{(\mathbf{x}'_k\mathbf{u}_1)}{\mathbf{u}'_1\mathbf{u}_1}\mathbf{u}_1-\cdots-\frac{(\mathbf{x}'_k\mathbf{u}_{k-1})}{\mathbf{u}'_{k-1}\mathbf{u}_{k-1}}\mathbf{u}_{k-1}
\end{aligned}$$

也可以通过令 $\mathbf{z}_j=\mathbf{u}_j\Big/\sqrt{\mathbf{u}'_j\mathbf{u}_j}$ 把 $\mathbf{u}$ 转换为单位长度。在此结构中，$(\mathbf{x}'_k\mathbf{z}_j)\mathbf{z}_j$ 是 $\mathbf{x}_k$ 在 $\mathbf{z}_j$ 上的投影且 $\sum_{j=1}^{k-1}(\mathbf{x}'_k\mathbf{z}_j)\mathbf{z}_j$ 是 $\mathbf{x}_k$ 在 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_{k-1}$ 所生成的线性子空间上的投影。

例如，由

$$\mathbf{x}_1=\begin{bmatrix}4\\0\\0\\2\end{bmatrix}\quad\text{和}\quad\mathbf{x}_2=\begin{bmatrix}3\\1\\0\\-1\end{bmatrix}$$

构成垂直向量。

取

$$\mathbf{u}_1=\mathbf{x}_1=\begin{bmatrix}4\\0\\0\\2\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

于是

$$\mathbf{u}'_1\mathbf{u}_1 = 4^2 + 0^2 + 0^2 + 2^2 = 20$$

和

$$\mathbf{x}'_2\mathbf{u}_1 = 3 \times 4 + 1 \times 0 + 0 \times 0 - 1 \times 2 = 10$$

因此

$$\mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} - \frac{10}{20}\begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \quad 和 \quad \mathbf{z}_1 = \frac{1}{\sqrt{20}}\begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}$$

矩阵

定义 2A.13 一个 $m \times k$ 矩阵是 m 行 k 列个元素组成的矩形阵列。

下面给出几个矩阵实例。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -7 & 2 \\ 0 & 1 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} x & 3 & 0 \\ 4 & -2 & 1/x \end{bmatrix}, \quad I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0.7 & -0.3 \\ 0.7 & 2 & 1 \\ -0.3 & 1 & 8 \end{bmatrix}, \quad E = [e_1]$$

在本书中，矩阵元素是实数或取值为实数的函数。

定义 2A.14 一个 $m \times k$ 矩阵的**维数**(缩写为 dim)是有序对(m,k)；m 是行维，k 是列维。通常一个矩阵的维数记在代表矩阵的字母下方的括号中。如 $m \times k$ 矩阵 $\mathbf{A}$ 用 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}$ 表示。在上述的例子中，矩阵 Σ 的维数是 3×3，可以表示成 $\underset{(3\times 3)}{\Sigma}$。

一个任意常数组成的 $m \times k$ 矩阵 $\mathbf{A}$，可写作

$$\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mk} \end{bmatrix}$$

或更简洁地记作 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}} = \{a_{ij}\}$，其中符号 i 代表行，符号 j 代表列。

一个 $m \times 1$ 矩阵叫做列向量。$1 \times k$ 矩阵叫做行向量。由于矩阵可以看作由向量排列组成，因此可以自然地定义数乘和两个同维数的矩阵的加法。

定义 2A.15 如果 $a_{ij} = b_{ij}, i = 1,2,\cdots,m, j = 1,2,\cdots,k$，则两个矩阵 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}} = \{a_{ij}\}$ 和 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{B}} = \{b_{ij}\}$ 相等，记作 $\mathbf{A} = \mathbf{B}$。即如果：

(a) 它们的维数相同，

(b) 各对相应元素相同，

则称两矩阵相等。

定义 2A.16 (矩阵加法) 设矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是两个 $m \times k$ 维的矩阵，其任意元素分别

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

为 a_{ij} 和 b_{ij}，$i=1,2,\cdots,m$，$j=1,2,\cdots,k$。矩阵 **A** 与 **B** 的和是一个 $m\times k$ 矩阵 **C**，记作 **C**=**A**+**B**，**C** 的任意元素满足

$$c_{ij}=a_{ij}+b_{ij}\quad i=1,2,\cdots,m,j=1,2,\cdots,k$$

注意矩阵加法仅对同维数的矩阵定义。

例如，

$$\begin{bmatrix}3 & 2 & 3\\4 & 1 & 1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}3 & 6 & 7\\2 & -1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}6 & 8 & 10\\6 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}\quad+\quad\mathbf{B}\quad=\quad\mathbf{C}$$

定义 2A.17 （标量乘法） 设 c 为任一标量，$\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}=\{a_{ij}\}$，则 $c\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}=\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}c=\underset{(m\times k)}{\mathbf{B}}=\{b_{ij}\}$，其中 $b_{ij}=ca_{ij}=a_{ij}c$，$i=1,2,\cdots,m$，$j=1,2,\cdots,k$。

矩阵的数乘生成一新矩阵，其元素是用这个数去乘原来矩阵的每个元素。

例如，如果 $c=2$，

$$2\begin{bmatrix}3 & -4\\2 & 6\\0 & 5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3 & -4\\2 & 6\\0 & 5\end{bmatrix}2=\begin{bmatrix}6 & -8\\4 & 12\\0 & 10\end{bmatrix}$$

$$c\mathbf{A}\quad=\quad\mathbf{A}c\quad=\quad\mathbf{B}$$

定义 2A.18 （矩阵减法） 设 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}=\{a_{ij}\}$ 和 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{B}}=\{b_{ij}\}$ 是两个维数相等的矩阵。则 **A** 与 **B** 的差写作 **A**−**B**，是一个 $m\times k$ 矩阵 $\mathbf{C}=\{c_{ij}\}$，由下式给出

$$\mathbf{C}=\mathbf{A}-\mathbf{B}=\mathbf{A}+(-1)\mathbf{B}$$

即 $$c_{ij}=a_{ij}+(-1)b_{ij}=a_{ij}-b_{ij},i=1,2,\cdots,m,j=1,2,\cdots,k。$$

定义 2A.19 考虑 $m\times k$ 矩阵 **A**，其任意元素为 a_{ij}，$i=1,2,\cdots,m$，$j=1,2,\cdots,k$。矩阵 **A** 的**转置**，记作 **A**′，是 $k\times m$ 矩阵，它的元素为 a_{ji}，$j=1,2,\cdots,k$，$i=1,2,\cdots,m$。即矩阵 **A** 的转置是由 **A** 的行与列互换得到的。

例，如果

$$\underset{(2\times 3)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}2 & 1 & 3\\7 & -4 & 6\end{bmatrix},\quad 则\quad \underset{(3\times 2)}{\mathbf{A}'}=\begin{bmatrix}2 & 7\\1 & -4\\3 & 6\end{bmatrix}$$

结论 2A.4 对所有的矩阵 **A**，**B** 和 **C**（维数相等）以及标量 c 和 d，以下性质成立：

(a) (**A**+**B**)+**C**=**A**+(**B**+**C**)

(b) **A**+**B**=**B**+**A**

(c) c(**A**+**B**)=c**A**+c**B**

(d) ($c+d$)**A**=c**A**+d**A**

(e) (**A**+**B**)′=**A**′+**B**′ （即和的转置等于转置的和）

(f) (cd)**A**=c(d**A**)

(g) (c**A**)′=c**A**′

定义 2A.20 如果任一矩阵 **A** 的行数与列数相同，则称 **A** 是方阵。在定义 2A.13 之

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

后给出的 $\mathbf{\Sigma}$,$\mathbf{I}$ 和 $\mathbf{E}$ 都是方阵。

定义 2A.21 设 $\mathbf{A}$ 是 $k\times k$(方)阵。如果 $\mathbf{A}=\mathbf{A}'$,则称 $\mathbf{A}$ 是**对称**的。即当 $a_{ij}=a_{ji}$,$i=1,2,\cdots,k$,$j=1,2,\cdots,k$ 时,$\mathbf{A}$ 是对称的。

以下为几个对称矩阵。

$$\underset{(3\times3)}{\mathbf{I}}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},\quad \underset{(2\times2)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}2&4\\4&1\end{bmatrix},\quad \underset{(4\times4)}{\mathbf{B}}=\begin{bmatrix}a&c&e&f\\c&b&g&d\\e&g&c&a\\f&d&a&d\end{bmatrix}$$

定义 2A.22 $k\times k$ **单位**矩阵用 $\underset{(k\times k)}{\mathbf{I}}$ 表示,它是主对角线左上方至右下方元素为 1,其他元素为零的方阵。

定义 2A.23 (矩阵乘法) 设一个 $m\times n$ 矩阵 $\mathbf{A}=\{a_{ij}\}$ 和一个 $n\times k$ 矩阵 $\mathbf{B}=\{b_{ij}\}$ 的乘积 $\mathbf{AB}$ 是 $m\times k$ 矩阵 $\mathbf{C}$,它的元素是

$$c_{ij}=\sum_{l=1}^{n}a_{il}b_{lj}\quad i=1,2,\cdots,m\quad j=1,2,\cdots,k$$

注意关于乘积 $\mathbf{AB}$ 的定义,要求 $\mathbf{A}$ 的列维必须等于 $\mathbf{B}$ 的行维。在此条件下,所得 $\mathbf{AB}$ 的行维等于 $\mathbf{A}$ 的行维,$\mathbf{AB}$ 的列维等于 $\mathbf{B}$ 的列维。

例如,设

$$\underset{(2\times3)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}3&-1&2\\4&0&5\end{bmatrix}\quad 和\quad \underset{(3\times2)}{\mathbf{B}}=\begin{bmatrix}3&4\\6&-2\\4&3\end{bmatrix}$$

则

$$\underset{(2\times3)}{\begin{bmatrix}3&-1&2\\4&0&5\end{bmatrix}}\underset{(3\times2)}{\begin{bmatrix}3&4\\6&-2\\4&3\end{bmatrix}}=\underset{(2\times2)}{\begin{bmatrix}11&20\\32&31\end{bmatrix}}=\begin{bmatrix}c_{11}&c_{21}\\c_{21}&c_{22}\end{bmatrix}$$

其中

$$\begin{aligned}c_{11}&=3\times3+(-1)\times6+2\times4=11\\c_{12}&=3\times4+(-1)\times(-2)+2\times3=20\\c_{21}&=4\times3+0\times6+5\times4=32\\c_{22}&=4\times4+0\times(-2)+5\times3=31\end{aligned}$$

再举一个例子,考虑两个向量的乘积,设

$$\mathbf{x}=\begin{bmatrix}1\\0\\-2\\3\end{bmatrix}\quad 和\quad \mathbf{y}=\begin{bmatrix}2\\-3\\-1\\-8\end{bmatrix}$$

则 $\mathbf{x}'=[1\quad 0\quad -2\quad 3]$ 且

$$\mathbf{x}'\mathbf{y}=[1\quad 0\quad -2\quad 3]\begin{bmatrix}2\\-3\\-1\\-8\end{bmatrix}=[-20]=[2\quad -3\quad -1\quad -8]\begin{bmatrix}1\\0\\-2\\3\end{bmatrix}=\mathbf{y}'\mathbf{x}$$

注意:乘积 $\mathbf{xy}$ 是无意义的。因为 $\mathbf{x}$ 是 4×1 矩阵,$\mathbf{y}$ 是 4×1 矩阵,故 $\mathbf{x}$ 的列维 1 不等于 $\mathbf{y}$ 的行维 4。如果 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{y}$ 是同维向量,如 $n\times1$,乘积 $\mathbf{x}'\mathbf{y}$ 和 $\mathbf{xy}'$ 两者都有意义。具体地,$\mathbf{y}'\mathbf{x}=\mathbf{x}'\mathbf{y}$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$=x_1y_1+x_2y_2+\cdots+x_ny_n$，而 $\mathbf{xy}'$ 是一个 $n\times n$ 矩阵，其第 i,j 个元素为 x_iy_j。

结论 2A.5 对于所有矩阵 $\mathbf{A}$，$\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{C}$（其维数符合乘法规定）和一标量 c，

(a) $c(\mathbf{AB})=(c\mathbf{A})\mathbf{B}$

(b) $\mathbf{A}(\mathbf{BC})=(\mathbf{AB})\mathbf{C}$

(c) $\mathbf{A}(\mathbf{B}+\mathbf{C})=\mathbf{AB}+\mathbf{AC}$

(d) $(\mathbf{B}+\mathbf{C})\mathbf{A}=\mathbf{BA}+\mathbf{CA}$

(e) $(\mathbf{AB})'=\mathbf{B}'\mathbf{A}'$

一般地，对任何使得 $\mathbf{Ax}_j$ 有定义的 $\mathbf{x}_j$，有

(f) $\sum_{j=1}^{n}\mathbf{Ax}_j=\mathbf{A}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j$

(g) $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{Ax}_j)(\mathbf{Ax}_j)'=\mathbf{A}\left(\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j\mathbf{x}'_j\right)\mathbf{A}'$

矩阵代数与实数代数之间有若干重要差别。其中两点如下所述：

1. 一般地说，矩阵乘法没有交换律，即一般地有 $\mathbf{AB}\neq\mathbf{BA}$。下面几个例子将说明对矩阵交换律是不成立的。

$$\begin{bmatrix}3 & -1\\4 & 7\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2\\14\end{bmatrix}$$

而

$$\begin{bmatrix}0\\2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3 & -1\\4 & 7\end{bmatrix}$$

是没有定义的。

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\2 & -3 & 6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}7 & 6\\-3 & 1\\2 & 4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}9 & 10\\35 & 33\end{bmatrix}$$

而

$$\begin{bmatrix}7 & 6\\-3 & 1\\2 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\2 & -3 & 6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}19 & -18 & 43\\-1 & -3 & 3\\10 & -12 & 26\end{bmatrix}$$

又

$$\begin{bmatrix}4 & -1\\0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 1\\-3 & 4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}11 & 0\\-3 & 4\end{bmatrix}$$

而

$$\begin{bmatrix}2 & 1\\-3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 & -1\\0 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8 & -1\\-12 & 7\end{bmatrix}$$

2. 设 $\mathbf{0}$ 为零矩阵，即每个元素都为零的矩阵。在实数代数中，若两个数的乘积 ab 是零，则 $a=0$ 或 $b=0$。然而，在矩阵代数中，两个非零矩阵的乘积可以是零矩阵。因此，

$$\underset{(m\times n)(n\times k)}{\mathbf{AB}}=\underset{(m\times k)}{\mathbf{0}}$$

并不意味着 $\mathbf{A}=\mathbf{0}$ 或 $\mathbf{B}=\mathbf{0}$。例如

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\begin{bmatrix}3 & 1 & 3\\1 & 2 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4\\3\\-5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}$$

然而，当 $\underset{(m\times n)}{\mathbf{A}}=\underset{(m\times n)}{\mathbf{0}}$ 或 $\underset{(n\times k)}{\mathbf{B}}=\underset{(n\times k)}{\mathbf{0}}$，则 $\underset{(m\times n)(n\times k)}{\mathbf{A}\ \mathbf{B}}=\underset{(m\times k)}{\mathbf{0}}$，这是成立的。

定义 2A.24 $k\times k$ 方阵 $\mathbf{A}=\{a_{ij}\}$ 的**行列式**记作 $|\mathbf{A}|$，它是一个标量。

$$|\mathbf{A}|=a_{11} \qquad \text{如果 } k=1$$

$$|\mathbf{A}|=\sum_{j=1}^{k}a_{1j}|\mathbf{A}_{1j}|(-1)^{1+j} \qquad \text{如果 } k>1$$

其中 $\mathbf{A}_{1j}$ 是除去 $\mathbf{A}$ 的第 1 行和第 j 列而得到的 $(k-1)\times(k-1)$ 矩阵。若除去第 i 行而不是第 1 行，则有 $|\mathbf{A}|=\sum_{j=1}^{k}a_{ij}|\mathbf{A}_{ij}|(-1)^{i+j}$。

下面举出行列式的实例(利用定义 2A.24 计算)

$$\begin{vmatrix}1 & 3\\6 & 4\end{vmatrix}=1\times|4|\times(-1)^2+3\times|6|\times(-1)^3=1\times4+3\times6\times(-1)=-14$$

一般地，

$$\begin{vmatrix}a_{11} & a_{12}\\a_{21} & a_{22}\end{vmatrix}=a_{11}a_{22}(-1)^2+a_{12}a_{21}(-1)^3=a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}$$

$$\begin{vmatrix}3 & 1 & 6\\7 & 4 & 5\\2 & -7 & 1\end{vmatrix}=3\begin{vmatrix}4 & 5\\-7 & 1\end{vmatrix}(-1)^2+1\begin{vmatrix}7 & 5\\2 & 1\end{vmatrix}(-1)^3+6\begin{vmatrix}7 & 4\\2 & -7\end{vmatrix}(-1)^4$$

$$=3\times39-1\times(-3)+6\times(-57)=-222$$

$$\begin{vmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{vmatrix}=1\begin{vmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{vmatrix}(-1)^2+0\begin{vmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{vmatrix}(-1)^3+0\begin{vmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{vmatrix}(-1)^4$$

$$=1\times1=1$$

如果 $\mathbf{I}$ 是 $k\times k$ 单位矩阵，则 $|\mathbf{I}|=1$。

$$\begin{vmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13}\\a_{21} & a_{22} & a_{23}\\a_{31} & a_{32} & a_{33}\end{vmatrix}$$

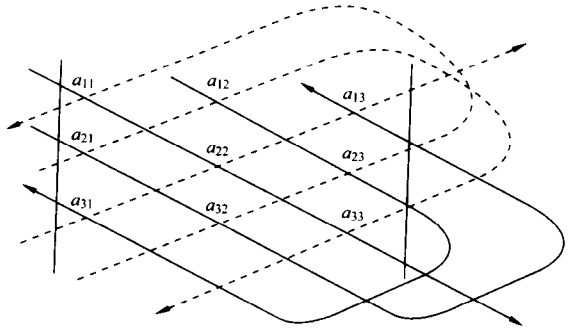
$$=a_{11}\begin{vmatrix}a_{22} & a_{23}\\a_{32} & a_{33}\end{vmatrix}(-1)^2+a_{12}\begin{vmatrix}a_{21} & a_{23}\\a_{31} & a_{33}\end{vmatrix}(-1)^3+a_{13}\begin{vmatrix}a_{21} & a_{22}\\a_{31} & a_{32}\end{vmatrix}(-1)^4$$

$$=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{21}a_{32}a_{13}-a_{31}a_{22}a_{13}-a_{21}a_{12}a_{33}-a_{32}a_{23}a_{11}$$

任一 3×3 矩阵的行列式可按下页图形计算，即沿实线方向的元素乘积相加，再减去沿虚线方向的元素乘积。这种方法对更高维数的矩阵不成立。不过，一般可利用定义 2A.24 来计算更高维数的情况。

下面我们将要陈述的结论描述了行列式的一些性质。但是，必须先引入与逆矩阵有关的概念。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com



定义 2A.25 如果把一个矩阵的行看成向量(即行向量),矩阵的**行秩**就是线性无关的行的最大数目。如果把矩阵的列看成向量,一个矩阵的**列秩**是它的列集合的秩。

例如,设矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 2 & 5 & -1\\ 0 & 1 & -1\end{bmatrix}$$

把 **A** 的行写成向量形式,定义 2A.6 后的例子已证明它们是线性相关的。注意 **A** 的列秩也是 2,因为

$$-2\begin{bmatrix}1\\2\\0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1\\5\\1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1\\-1\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

而第 1 列和第 2 列是线性无关的。正如下面结论所指出的,这并非巧合。

结论 2A.6 一个矩阵的行秩和列秩是相等的。

因此,一个**矩阵的秩**既是行秩也是列秩。

定义 2A.26 对方阵 $\underset{(k\times k)}{\mathbf{A}}$,如果 $\underset{(k\times k)(k\times 1)}{\mathbf{A}\ \mathbf{x}}=\underset{(k\times 1)}{\mathbf{0}}$ 意味着 $\underset{(k\times 1)}{\mathbf{x}}=\underset{(k\times 1)}{\mathbf{0}}$,则称此方阵是**非奇异的**。如果一个矩阵不是非奇异的,则称它是**奇异的**。等价地说,如果一个方阵的秩等于它的行(或列)数,则此方阵是非奇异的。

注意 $\mathbf{Ax}=x_1\mathbf{a}_1+x_2\mathbf{a}_2+\cdots+x_k\mathbf{a}_k$,其中 $\mathbf{a}_i$ 是 **A** 的第 i 列,于是 **A** 是非奇异的条件恰好就是 **A** 的列向量线性无关。

结论 2A.7 设 **A** 是一个非奇异的 $k\times k$ 维方阵,则存在惟一的 $k\times k$ 矩阵 **B**,使得

$$\mathbf{AB}=\mathbf{BA}=\mathbf{I}$$

其中 **I** 是 $k\times k$ 单位矩阵。

定义 2A.27 若 **B** 满足 $\mathbf{AB}=\mathbf{BA}=\mathbf{I}$,称 **B** 为 **A** 的逆并用 $\mathbf{A}^{-1}$表示。事实上,如果 $\mathbf{BA}=\mathbf{I}$ 或 $\mathbf{AB}=\mathbf{I}$,则 $\mathbf{B}=\mathbf{A}^{-1}$,且两个乘积必定等于 **I**。

例如,

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}2 & 3\\ 1 & 5\end{bmatrix}\quad 有\quad \mathbf{A}^{-1}=\begin{bmatrix}\frac{5}{7} & -\frac{3}{7}\\ -\frac{1}{7} & \frac{2}{7}\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

因为

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{5}{7} & -\frac{3}{7} \\ -\frac{1}{7} & \frac{2}{7} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{7} & -\frac{3}{7} \\ -\frac{1}{7} & \frac{2}{7} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

结论 2A.8

(a) 任一 2×2 矩阵

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

的逆是

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{A}|}\begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$$

(b) 任一 3×3 矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

的逆是

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{A}|}\begin{bmatrix} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} \\ -\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{21} & a_{23} \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \end{bmatrix}$$

在(a)和(b)中，如果逆存在，显然 $|\mathbf{A}|\neq 0$。

(c) 一般地，$\mathbf{A}^{-1}$的第 j,i 个元素为$[|\mathbf{A}_{ij}|/|\mathbf{A}|](-1)^{i+j}$，其中 $\mathbf{A}_{ij}$是从 $\mathbf{A}$ 中除去第 i 行和第 j 列后得到的矩阵。

结论 2A.9 对一个 $k\times k$ 维的方阵 $\mathbf{A}$，有如下等价表述：

(a) $\underset{(k\times k)}{\mathbf{A}}\underset{(k\times 1)}{\mathbf{x}} = \underset{(k\times 1)}{\mathbf{0}}$ 意味着 $\underset{(k\times 1)}{\mathbf{x}} = \underset{(k\times 1)}{\mathbf{0}}$ ($\mathbf{A}$ 是非奇异的)。

(b) $|\mathbf{A}|\neq 0$。

(c) 存在一个矩阵 $\mathbf{A}^{-1}$，使得 $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}=\underset{(k\times k)}{\mathbf{I}}$。

结论 2A.10 设 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是同维数方阵，且存在逆矩阵，则如下性质成立：

(a) $(\mathbf{A}^{-1})'=(\mathbf{A}')^{-1}$

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

行列式具有如下性质。

结论 2A.11 设 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是 $k\times k$ 方阵。

(a) $|\mathbf{A}|=|\mathbf{A}'|$

(b) 若 $\mathbf{A}$ 中一行(列)的每一元素均为零，则 $|\mathbf{A}|=0$

(c) 若 $\mathbf{A}$ 的任两行(列)相同，则 $|\mathbf{A}|=0$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(d) 若 $\mathbf{A}$ 是非奇异的，则 $|\mathbf{A}|=1/|\mathbf{A}^{-1}|$，即 $|\mathbf{A}||\mathbf{A}^{-1}|=1$。

(e) $|\mathbf{AB}|=|\mathbf{A}||\mathbf{B}|$

(f) $|c\mathbf{A}|=c^k|\mathbf{A}|$，其中 c 为标量。

结论 2A.9 和 2A.11 的部分证明参看[5]，这些证明有的相当复杂，超出了本书的范围。

定义 2A.28 设 $\mathbf{A}=\{a_{ij}\}$ 是 $k\times k$ 方阵，矩阵 $\mathbf{A}$ 的**迹**记作 $\mathrm{tr}(\mathbf{A})$，它是对角线上元素的和，即

$$\mathrm{tr}(\mathbf{A})=\sum_{i=1}^{k}a_{ii}$$

结论 2A.12 设 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是 $k\times k$ 矩阵且 c 为标量。

(a) $\mathrm{tr}(c\mathbf{A})=c\mathrm{tr}(\mathbf{A})$

(b) $\mathrm{tr}(\mathbf{A}\pm\mathbf{B})=\mathrm{tr}(\mathbf{A})\pm\mathrm{tr}(\mathbf{B})$

(c) $\mathrm{tr}(\mathbf{AB})=\mathrm{tr}(\mathbf{BA})$

(d) $\mathrm{tr}(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{AB})=\mathrm{tr}(\mathbf{A})$

(e) $\mathrm{tr}(\mathbf{AA}')=\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{k}a_{ij}^2$

定义 2A.29 把方阵 $\mathbf{A}$ 的行看成是向量，若行与行互相垂直且都为单位长度，则说 $\mathbf{A}$ 是**正交**的，即 $\mathbf{AA}'=\mathbf{I}$。

结论 2A.13 当且仅当 $\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{A}'$ 时，矩阵 $\mathbf{A}$ 是正交的。对于一个正交矩阵，$\mathbf{AA}'=\mathbf{A}'\mathbf{A}=\mathbf{I}$，因此，列向量互相垂直且为单位长度。

下面是正交矩阵的一个例子

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

显然，$\mathbf{A}=\mathbf{A}'$，因此，$\mathbf{AA}'=\mathbf{A}'\mathbf{A}=\mathbf{AA}$。我们验证 $\mathbf{AA}=\mathbf{I}=\mathbf{AA}'=\mathbf{A}'\mathbf{A}$，或

$$\underbrace{\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}}_{\mathbf{A}}\underbrace{\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}}_{\mathbf{A}}=\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{bmatrix}}_{\mathbf{I}}$$

于是 $\mathbf{A}'=\mathbf{A}^{-1}$，且 $\mathbf{A}$ 必定是一个正交阵。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

通过特征值和特征向量等量，可以最充分地理解方阵。

定义 2A.30 设 $\mathbf{A}$ 是 $k\times k$ 方阵，$\mathbf{I}$ 是 $k\times k$ 单位阵，则满足多项式方程 $|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$ 的标量 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k$ 称为矩阵 $\mathbf{A}$ 的**特征值**(或**特征根**)。方程 $|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$($\lambda$ 的函数)称为**特征方程**。

例如，设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 3\end{bmatrix}$$

则

$$\begin{aligned}|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}| &= \left|\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 3\end{bmatrix}-\lambda\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right|\\ &= \begin{vmatrix}1-\lambda & 0\\ 1 & 3-\lambda\end{vmatrix}=(1-\lambda)(3-\lambda)=0\end{aligned}$$

意味着有两个根，$\lambda_1=1$ 和 $\lambda_2=3$。$\mathbf{A}$ 的特征值是 3 和 1。设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}13 & -4 & 2\\ -4 & 13 & -2\\ 2 & -2 & 10\end{bmatrix}$$

则方程

$$|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=\begin{vmatrix}13-\lambda & -4 & 2\\ -4 & 13-\lambda & -2\\ 2 & -2 & 10-\lambda\end{vmatrix}=-\lambda^3+36\lambda^2-405\lambda+1458=0$$

有三个根：$\lambda_1=9,\lambda_2=9$ 和 $\lambda_3=18$；即 9，9 和 18 是 $\mathbf{A}$ 的特征值。

定义 2A.31 设 $\mathbf{A}$ 是一个 $k\times k$ 维矩阵，λ 是 $\mathbf{A}$ 的一个特征值。如果**非零向量** $\underset{(k\times 1)}{\mathbf{x}}$ ($\underset{(k\times 1)}{\mathbf{x}}\neq\underset{(k\times 1)}{\mathbf{0}}$)满足

$$\mathbf{Ax}=\lambda\mathbf{x}$$

则称 $\mathbf{x}$ 是矩阵 $\mathbf{A}$ 的相应于**特征值** λ 的**特征向量**。

λ 是特征值-特征向量方程的解的一个等价条件是 $|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$。这是因为，对于某个 λ 和 $\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$，$\mathbf{Ax}=\lambda\mathbf{x}$ 意味着

$$\mathbf{0}=(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})\mathbf{x}=x_1\cdot\text{列}_1(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})+\cdots+x_k\cdot\text{列}_k(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})$$

也就是说，$\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}$ 的列向量是线性相关的，故由结论 2A.9(b)可断言 $|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$。按照定义 2A.30，我们指出

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 3\end{bmatrix}$$

的特征值是 $\lambda_1=1$ 和 $\lambda_2=3$。对应于这些特征值的特征向量可以通过解下述方程来确定：

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=1\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Ax}=\lambda_1\mathbf{x}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=3\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{Ax} = \lambda_2 \mathbf{x}$$

从第一式

$$x_1 = x_1$$
$$x_1 + 3x_2 = x_2$$

或

$$x_1 = -2x_2$$

可求出 x_1 和 x_2 的许多解。

令 $x_2=1$(任意的),得出 $x_1=-2$,因此,

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

是对应于特征值 1 的一个特征向量。从第二式,

$$x_1 = 3x_1$$
$$x_1 + 3x_2 = 3x_2$$

可以推出 $x_1=0$ 和 $x_2=1$(任意地),因此,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

是特征值 3 对应的特征向量。通常习惯于确定一个特征向量使它为单位长度。即,如果 $\mathbf{Ax}=\lambda\mathbf{x}$,取 $\mathbf{e}=\mathbf{x}/\sqrt{\mathbf{x}'\mathbf{x}}$作为 λ 对应的特征向量。例如,$\lambda_1=1$ 时其特征向量为$[-2/\sqrt{5}, 1/\sqrt{5}]'$。

定义 2A.32 k 个变量 $x_1,x_2,\cdots,x_k$ 的**二次型** $Q(\mathbf{x})$为 $Q(\mathbf{x})=\mathbf{x}'\mathbf{Ax}$,其中 $\mathbf{x}'=[x_1, x_2,\cdots,x_k]$,且 $\mathbf{A}$ 是一个 $k\times k$ 对称矩阵。

注意二次型可以写作 $Q(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{k} a_{ij}x_ix_j$。例如,

$$Q(\mathbf{x}) = [x_1 \quad x_2]\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

$$Q(\mathbf{x}) = [x_1 \quad x_2 \quad x_3]\begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 3 & -1 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = x_1^2 + 6x_1x_2 - x_2^2 - 4x_2x_3 + 2x_3^2$$

任何对称方阵可以由它的特征值和特征向量重构。这个特殊的表达式揭示了依据特征值的相对大小和特征向量的方向,每一个特征值-特征向量对的相对重要性。

结论 2A.14 谱分解 设 $\mathbf{A}$ 是 $k\times k$ 对称矩阵,则 $\mathbf{A}$ 可用它的 k 个特征值-特征向量对$(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$表示为

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}'_i$$

假如,设

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2.2 & 0.4 \\ 0.4 & 2.8 \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

则

$$|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}| = \lambda^2 - 5\lambda + 6.16 - 0.16 = (\lambda-3)(\lambda-2)$$

因此 $\mathbf{A}$ 的特征值 $\lambda_1=3$ 和 $\lambda_2=2$。相应的特征向量分别为 $\mathbf{e}'_1=[1/\sqrt{5},2/\sqrt{5}]$和 $\mathbf{e}'_2=[2/\sqrt{5},-1/\sqrt{5}]$。于是，

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}2.2 & 0.4\\ 0.4 & 2.8\end{bmatrix}=3\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\\ \frac{2}{\sqrt{5}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}}\end{bmatrix}+2\begin{bmatrix}\frac{2}{\sqrt{5}}\\ \frac{-1}{\sqrt{5}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{-1}{\sqrt{5}}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}0.6 & 1.2\\ 1.2 & 2.4\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1.6 & -0.8\\ -0.8 & 0.4\end{bmatrix}$$

谱分解的思想可以推广到给出长方阵而不只是方阵的分解。若 $\mathbf{A}$ 是一个长方阵，则 $\mathbf{A}$ 的展开式中的向量分别是方阵 $\mathbf{AA}'$ 和 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 的特征向量。

结论 2A.15　奇异值分解　设 $\mathbf{A}$ 是 $m\times k$ 的实数矩阵，则存在一个 $m\times m$ 正交阵 $\mathbf{U}$ 和一个 $k\times k$ 正交阵 $\mathbf{V}$ 使得

$$\mathbf{A}=\mathbf{U\Lambda V}'$$

此处 $m\times k$ 矩阵$\mathbf{\Lambda}$ 中，(i,i)元素 $\lambda_i\geqslant 0, i=1,2,\cdots,\min(m,k)$，其他元素是零。正数 λ_i 称为 $\mathbf{A}$ 的**奇异值**。

奇异值分解也能表示为一个基于 $\mathbf{A}$ 的秩 r 的矩阵展开式。具体地说，存在 r 个正数 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r$，$r$ 个正交 $m\times 1$ 单位向量 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r$ 和 r 个正交 $k\times 1$ 单位向量 $\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\cdots,\mathbf{v}_r$，使得

$$\mathbf{A}=\sum_{i=1}^{r}\lambda_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}'_i=\mathbf{U}_r\mathbf{\Lambda}_r\mathbf{V}'_r$$

其中 $\mathbf{U}_r=[\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r]$，$\mathbf{V}_r=[\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\cdots,\mathbf{v}_r]$，而$\mathbf{\Lambda}_r$是一个对角元素为 λ_i 的 $r\times r$ 对角阵。

这里 $\mathbf{AA}'$ 有特征值-特征向量对$(\lambda_i^2,\mathbf{u}_i)$，于是，

$$\mathbf{AA}'\mathbf{u}_i=\lambda_i^2\mathbf{u}_i$$

且 $\lambda_1^2,\lambda_2^2,\cdots,\lambda_r^2>0=\lambda_{r+1}^2,\lambda_{r+2}^2,\cdots,\lambda_m^2$(对 $m>k$)。因而，$\mathbf{v}_i=\lambda_i^{-1}\mathbf{A}'\mathbf{u}_i$。换言之，$\mathbf{v}_i$ 是 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 的对应于同一个非零特征值 λ_i^2 的特征向量。

奇异值分解的矩阵展开式用满维矩阵 $\mathbf{U},\mathbf{V},\mathbf{\Lambda}$ 可写为

$$\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}=\underset{(m\times m)}{\mathbf{U}}\ \underset{(m\times k)}{\mathbf{\Lambda}}\ \underset{(k\times k)}{\mathbf{V}'}$$

其中 $\mathbf{U}$ 的列为 $\mathbf{AA}'$ 的 m 个正交特征向量，V 的列为 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 的 k 个正交特征向量，$\mathbf{\Lambda}$ 如结论 2A.15 中所示。

设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}3 & 1 & 1\\ -1 & 3 & 1\end{bmatrix}$$

则

$$\mathbf{AA}'=\begin{bmatrix}3 & 1 & 1\\ -1 & 3 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3 & -1\\ 1 & 3\\ 1 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}11 & 1\\ 1 & 11\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

可以验证 $\mathbf{AA}'$ 的特征值 $\gamma=\lambda^2$ 满足方程 $\gamma^2-22\gamma+120=(\gamma-12)(\gamma-10)$，因此，特征值是 $\gamma_1=\lambda_1^2=12$ 和 $\gamma_2=\lambda_2^2=10$，对应的特征向量分别是 $\mathbf{u}'_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$ 和 $\mathbf{u}'_2=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$。

又

$$\mathbf{A}'\mathbf{A}=\begin{bmatrix}3 & -1\\ 1 & 3\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3 & 1 & 1\\ -1 & 3 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}10 & 0 & 2\\ 0 & 10 & 4\\ 2 & 4 & 2\end{bmatrix}$$

所以 $|\mathbf{A}'\mathbf{A}-\gamma\mathbf{I}|=-\gamma^3-22\gamma^2-120\gamma=-\gamma(\gamma-12)(\gamma-10)$，且特征值为 $\gamma_1=\lambda_1^2=12$，$\gamma_2=\lambda_2^2=10$ 及 $\gamma_3=\lambda_3^2=0$。非零特征值与 $\mathbf{AA}'$ 的非零特征值是相同的。用计算机算出特征向量为 $\mathbf{v}'_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\end{bmatrix}$，$\mathbf{v}'_2=\begin{bmatrix}\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{-1}{\sqrt{5}} & 0\end{bmatrix}$ 及 $\mathbf{v}'_3=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{30}} & \frac{2}{\sqrt{30}} & \frac{-5}{\sqrt{30}}\end{bmatrix}$。对特征向量 $\mathbf{v}_1$ 和 $\mathbf{v}_2$ 可以进行检验：

$$\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{v}_1=\begin{bmatrix}10 & 0 & 2\\ 0 & 10 & 4\\ 2 & 4 & 2\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\times\begin{bmatrix}1\\ 2\\ 1\end{bmatrix}=12\times\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix}1\\ 2\\ 1\end{bmatrix}=\lambda_1^2\mathbf{v}_1$$

$$\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{v}_2=\begin{bmatrix}10 & 0 & 2\\ 0 & 10 & 4\\ 2 & 4 & 2\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}2\\ -1\\ 0\end{bmatrix}=10\times\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}2\\ -1\\ 0\end{bmatrix}=\lambda_2^2\mathbf{v}_2$$

选取 $\lambda_1=\sqrt{12}$ 和 $\lambda_2=\sqrt{10}$，我们求得 $\mathbf{A}$ 的奇异值分解是

$$\begin{aligned}\mathbf{A}&=\begin{bmatrix}3 & 1 & 1\\ -1 & 3 & 1\end{bmatrix}\\ &=\sqrt{12}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\end{bmatrix}+\sqrt{10}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{-1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{-1}{\sqrt{5}} & 0\end{bmatrix}\end{aligned}$$

可以完成右边的计算来检验该等式。

练　　习

2.1　设 $\mathbf{x}'=[5,1,3]$ 和 $\mathbf{y}'=[-1,3,1]$。

(a) 画两个向量的图形。

(b) 求(i)$\mathbf{x}$ 的长度，(ii)$\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 之间的夹角，(iii)$\mathbf{y}$ 在 $\mathbf{x}$ 上的投影。

(c) 因为 $\bar{x}=3$ 和 $\bar{y}=1$，画出 $[5-3,1-3,3-3]=[2,-2,0]$ 和 $[-1-1,3-1,1-1]=[-2,2,0]$。

2.2　已知矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}-1 & 3\\ 4 & 2\end{bmatrix},\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}4 & -3\\ 1 & -2\\ -2 & 0\end{bmatrix}\text{及}\ \mathbf{C}=\begin{bmatrix}5\\ -4\\ 2\end{bmatrix}$$

做下述指定的乘法。

(a) $5\mathbf{A}$

(b) $\mathbf{BA}$

(c) $\mathbf{A}'\mathbf{B}'$

(d) $\mathbf{C}'\mathbf{B}$

(e) $\mathbf{AB}$ 有定义吗?

2.3 当

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}2 & 1\\ 1 & 3\end{bmatrix},\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & 4 & 2\\ 5 & 0 & 3\end{bmatrix}\text{及}\ \mathbf{C}=\begin{bmatrix}1 & 4\\ 3 & 2\end{bmatrix}$$

时,证明转置的下列性质:

(a) $(\mathbf{A}')'=\mathbf{A}$

(b) $(\mathbf{C}')^{-1}=(\mathbf{C}^{-1})'$

(c) $(\mathbf{AB})'=\mathbf{B}'\mathbf{A}'$

(d) 对一般的 $\underset{(m\times k)}{\mathbf{A}}$ 和 $\underset{(k\times l)}{\mathbf{B}}$,$(\mathbf{AB})'=\mathbf{B}'\mathbf{A}'$。

2.4 当 $\mathbf{A}^{-1}$和 $\mathbf{B}^{-1}$存在时,证明下列性质:

(a) $(\mathbf{A}')^{-1}=(\mathbf{A}^{-1})'$

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

提示:由 $\mathbf{AA}^{-1}=\mathbf{I}$,$\mathbf{I}=\mathbf{I}'$及 $(\mathbf{AA}^{-1})'=(\mathbf{A}^{-1})'\mathbf{A}'$可证明(a). 由 $(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1})\mathbf{AB}=\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A})\mathbf{B}=\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}=\mathbf{I}$ 可证明(b)。

2.5 检验

$$\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\frac{5}{13} & \frac{12}{13}\\ -\frac{12}{13} & \frac{5}{13}\end{bmatrix}$$

是一个正交矩阵。

2.6 设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}9 & -2\\ -2 & 6\end{bmatrix}$$

(a) $\mathbf{A}$ 是对称的吗?

(b) 证明 $\mathbf{A}$ 是正定的。

2.7 设 $\mathbf{A}$ 是练习 2.6 中所给出的矩阵。

(a) 确定 $\mathbf{A}$ 的特征值和特征向量。

(b) 写出 $\mathbf{A}$ 的谱分解。

(c) 求 $\mathbf{A}^{-1}$。

(d) 求 $\mathbf{A}^{-1}$的特征值和特征向量。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

2.8　给定矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & -2\end{bmatrix}$$

求特征值 λ_1 和 λ_2，并求相应的标准化特征向量 $\mathbf{e}_1$ 和 $\mathbf{e}_2$。确定 $\mathbf{A}$ 的谱分解(2-16)。

2.9　设 $\mathbf{A}$ 是练习 2.8 中的矩阵。

(a) 求 $\mathbf{A}^{-1}$。

(b) 计算 $\mathbf{A}^{-1}$的特征值和特征向量。

(c) 写出 $\mathbf{A}^{-1}$的谱分解，并与练习 2.8 中 $\mathbf{A}$ 的谱分解比较。

2.10　考虑矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}4 & 4.001\\ 4.001 & 4.002\end{bmatrix}\quad 和\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}4 & 4.001\\ 4.001 & 4.002001\end{bmatrix}$$

此二矩阵除了在(2,2)位置上有小的差别外是相等的，而且 $\mathbf{A}$(和 $\mathbf{B}$)的列差不多是线性相关的。证明 $\mathbf{A}^{-1}\doteq(-3)\mathbf{B}^{-1}$。因此，小的变化——也许是由于舍入的原因——可能得出明显不同的逆。

2.11　证明 $p\times p$ 对角阵 $\mathbf{A}=\{a_{ij}\}$，其中 $a_{ij}=0, i\neq j$ 的行列式是由对角线元素的乘积给出，即 $|\mathbf{A}|=a_{11}a_{22}\cdots a_{pp}$。

提示：由定义 2A.24，$|\mathbf{A}|=a_{11}|\mathbf{A}_{11}|+0+\cdots+0$。$\mathbf{A}_{11}$是除去 $\mathbf{A}$ 的第 1 行和第 1 列元素而得到的子矩阵。对 $|\mathbf{A}_{11}|$重复上述过程。

2.12　证明 $p\times p$ 对称方阵 $\mathbf{A}$ 的行列式可表示成其特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 的乘积，即 $|\mathbf{A}|=\prod_{i=1}^{p}\lambda_i$。

提示：由式(2-16)和式(2-20)，$\mathbf{A}=\mathbf{P}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}'$，其中 $\mathbf{P}'\mathbf{P}=\mathbf{I}$。由结论 2A.11(e)，$|\mathbf{A}|=|\mathbf{P}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}'|=|\mathbf{P}||\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}'|=|\mathbf{P}||\boldsymbol{\Lambda}||\mathbf{P}'|=|\boldsymbol{\Lambda}||\mathbf{I}|$，因为 $|\mathbf{I}|=|\mathbf{P}'\mathbf{P}|=|\mathbf{P}'||\mathbf{P}|$。运用练习 2.11 的结论。

2.13　若 $\mathbf{Q}$ 是 $p\times p$ 正交阵，证明 $|\mathbf{Q}|=+1$ 或 -1。

提示：$|\mathbf{Q}\mathbf{Q}'|=|\mathbf{I}|$。又从结论 2A.11，$|\mathbf{Q}\mathbf{Q}'|=|\mathbf{Q}||\mathbf{Q}'|=|\mathbf{Q}|^2$。这样，$|\mathbf{Q}|^2=|\mathbf{I}|$。现在利用练习 2.11 的结论。

2.14　如果 $\mathbf{Q}$ 是正交阵，证明 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{Q}'}\underset{(p\times p)}{\mathbf{A}}\underset{(p\times p)}{\mathbf{Q}}$ 和 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{A}}$ 有相同的特征值。

提示：设 λ 是 $\mathbf{A}$ 的一个特征值，则 $0=|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|$。由练习 2.13 和结论 2A.11(e)，因为 $\mathbf{Q}'\mathbf{Q}=\mathbf{I}$，可有 $0=|\mathbf{Q}'||\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}||\mathbf{Q}|=|\mathbf{Q}'\mathbf{A}\mathbf{Q}-\lambda\mathbf{I}|$。

2.15　如果矩阵 $\mathbf{A}$ 是正定的，则说二次型 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ 是正定的。二次型 $3x_1^2+3x_2^2-2x_1x_2$ 是否正定？

2.16　设任一 $n\times p$ 矩阵 $\mathbf{A}$，则 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 是一 $p\times p$ 对称矩阵。证明 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 必是非负定的。

提示：令 $\mathbf{y}=\mathbf{A}\mathbf{x}$，因而 $\mathbf{y}'\mathbf{y}=\mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{x}$。

2.17　证明 $k\times k$ 正定矩阵 $\mathbf{A}$ 的每个特征值都是正的。

提示：考虑特征值定义，其中 $\mathbf{A}\mathbf{e}=\lambda\mathbf{e}$。用 $\mathbf{e}'$左乘，从而有 $\mathbf{e}'\mathbf{A}\mathbf{e}=\lambda\mathbf{e}'\mathbf{e}$。

2.18　考虑点(x_1,x_2)的集合，对于 $c^2=1$ 和 $c^2=4$ 从原点到该点的“距离”由下式给出

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$c^2 = 4x_1^2 + 3x_2^2 - 2\sqrt{2}x_1x_2$$

确定常数距离椭圆的长短轴及其相应的长度。画其草图并注明位置。当 c^2 增大时会怎样？

2.19 设 $\underset{(m\times m)}{\mathbf{A}^{1/2}} = \sum_{i=1}^{m}\sqrt{\lambda_i}\mathbf{e}_i\mathbf{e}'_i = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}'$，其中 $\mathbf{PP}' = \mathbf{P}'\mathbf{P} = \mathbf{I}$。($\lambda_i$ 和 $\mathbf{e}_i$ 是矩阵 $\mathbf{A}$ 的特征值和对应的标准化特征向量。) 证明式(2-22) 中平方根矩阵的性质(1) ～ (4)。

2.20 利用练习 2.3 中的矩阵 $\mathbf{A}$，确定平方根矩阵 $\mathbf{A}^{1/2}$ 及 $\mathbf{A}^{-1/2}$，并证明 $\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{A}^{-1/2} = \mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{A}^{1/2} = \mathbf{I}$。

2.21 (参见结论 2A.15)利用矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

(a) 计算 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 及其特征值和特征向量。

(b) 计算 $\mathbf{AA}'$ 及其特征值和特征向量。核对非零特征值与(a)中是否一样。

(c) 求出 $\mathbf{A}$ 的奇异值分解。

2.22 (参见结论 2A.15)利用矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 8 & 8 \\ 3 & 6 & -9 \end{bmatrix}$$

(a) 计算 $\mathbf{AA}'$ 及其特征值和特征向量。

(b) 计算 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ 及其特征值和特征向量。该对非零特征值与(a)中是否一样。

(c) 求出 $\mathbf{A}$ 的奇异值分解。

2.23 设 $\mathbf{\Sigma}$ 是 $p\times p$ 总体协方差矩阵[式(2-32)]，$\boldsymbol{\rho}$ 是 $p\times p$ 总体相关矩阵[式(2-34)]和 $\mathbf{V}^{1/2}$ 是总体标准差矩阵[式(2-35)]。证明关系式 $\mathbf{V}^{1/2}\boldsymbol{\rho}\mathbf{V}^{1/2} = \mathbf{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{\rho} = (\mathbf{V}^{1/2})^{-1}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}$。

2.24 设 $\mathbf{X}$ 有协方差矩阵

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

求

(a) $\mathbf{\Sigma}^{-1}$。

(b) $\mathbf{\Sigma}$ 的特征值和特征向量。

(c) $\mathbf{\Sigma}^{-1}$的特征值和特征向量。

2.25 设 $\mathbf{X}$ 有协方差矩阵

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 25 & -2 & 4 \\ -2 & 4 & 1 \\ 4 & 1 & 9 \end{bmatrix}$$

(a) 确定 $\boldsymbol{\rho}$ 和 $\mathbf{V}^{1/2}$。

(b) 用矩阵乘法验证关系式 $\mathbf{V}^{1/2}\boldsymbol{\rho}\mathbf{V}^{1/2} = \mathbf{\Sigma}$。

2.26 利用练习 2.25 中所给的 $\mathbf{\Sigma}$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(a) 求 ρ_{13}。

(b) 求 X_1 与 $\frac{1}{2}X_2+\frac{1}{2}X_3$ 之间的相关关系。

2.27 利用随机变量 X_1, X_2 和 X_3 的均值和方差推导下列线性组合的均值和方差的表达式。

(a) X_1-2X_2

(b) $-X_1+3X_2$

(c) $X_1+X_2+X_3$

(e) $X_1+2X_2-X_3$

(f) $3X_1-4X_2$(若 X_1 和 X_2 是独立的随机变量)。

2.28 证明

$$\mathrm{Cov}(c_{11}X_1+c_{12}X_2+\cdots+c_{1p}X_p, c_{21}X_1+c_{22}X_2+\cdots+c_{2p}X_p=\mathbf{c}'_1\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}\mathbf{c}_2$$

其中 $\mathbf{c}'_1=[c_{11}, c_{12}, \cdots, c_{1p}]$ 及 $\mathbf{c}'_2=[c_{21}, c_{22}, \cdots, c_{2p}]$。这可以验证如果 $\mathbf{c}_1=\mathbf{c}_2$ 式(2-45)中的 $\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}}\mathbf{C}'$ 的非对角线元素或 $\mathbf{c}_1=\mathbf{c}_2$ 时对角线元素是正确的。

提示：由式(2-43)，$Z_1-E(Z_1)=c_{11}(X_1-\mu_1)+\cdots+c_{1p}(X_p-\mu_p)$ 和 $Z_2-E(Z_2)=c_{21}(X_1-\mu_1)+\cdots+c_{2p}(X_p-\mu_p)$。因此，

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(Z_1,Z_2)=E[(Z_1-E(Z_1))(Z_2-E(Z_2))]=E[(c_{11}(X_1-\mu_1)+\cdots\\+c_{1p}(X_p-\mu_p))[c_{21}(X_1-\mu_1)+c_{22}(X_2-\mu_2)+\cdots+c_{2p}(X_p-\mu_p))]\end{aligned}$$

乘积

$$\begin{aligned}&(c_{11}(X_1-\mu_1)+c_{12}(X_2-\mu_2)+\cdots\\&\quad+c_{1p}(X_p-\mu_p))(c_{21}(X_1-\mu_1)+c_{22}(X_2-\mu_2)+\cdots+c_{2p}(X_p-\mu_p))\\&=\Big(\sum_{l=1}^{p}c_{1l}(X_l-\mu_l)\Big)\Big(\sum_{m=1}^{p}c_{2m}(X_m-\mu_m)\Big)\\&=\sum_{l=1}^{p}\sum_{m=1}^{p}c_{1l}c_{2m}(X_l-\mu_l)(X_m-\mu_m)\end{aligned}$$

有期望值

$$\sum_{l=1}^{p}\sum_{m=1}^{p}c_{1l}c_{2m}\sigma_{lm}=[c_{11},\cdots,c_{1p}]\boldsymbol{\Sigma}[c_{21},\cdots,c_{2p}]'$$

根据矩阵乘法的定义证明最后一步。对所有元素相同步骤成立。

2.29 考虑任意随机向量 $\mathbf{X}=[X_1,X_2,X_3,X_4,X_5]'$ 和均值向量 $\boldsymbol{\mu}=[\mu_1,\mu_2,\mu_3,\mu_4,\mu_5]'$。划分 $\mathbf{X}$ 为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}^{(1)}\\ \cdots\cdots\\ \mathbf{X}^{(2)}\end{bmatrix}$$

其中

$$\mathbf{X}^{(1)}=\begin{bmatrix}X_1\\X_2\end{bmatrix}\quad 和\quad \mathbf{X}^{(2)}=\begin{bmatrix}X_3\\X_4\\X_5\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

设 $\mathbf{\Sigma}$ 是 $\mathbf{X}$ 的协方差矩阵，一般元素为 σ_{ik}。划分 $\mathbf{\Sigma}$ 为 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 的协方差矩阵，以及 $\mathbf{X}^{(1)}$ 的一个元素和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 的一个元素的协方差矩阵。

2.30　给出随机向量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,X_3,X_4]$，均值向量 $\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{X}}=[4,3,2,1]$ 以及方差-协方差矩阵

$$\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{X}}=\begin{bmatrix}3 & 0 & 2 & 2\\ 0 & 1 & 1 & 0\\ 2 & 1 & 9 & -2\\ 2 & 0 & -2 & 4\end{bmatrix}$$

$\mathbf{X}$ 划分为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}X_1\\ X_2\\ \cdots\cdots\\ X_3\\ X_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}^{(1)}\\ \cdots\cdots\\ \mathbf{X}^{(2)}\end{bmatrix}$$

令

$$\mathbf{A}=[1\quad 2]\quad 和\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & -2\\ 2 & -1\end{bmatrix}$$

考虑 $\mathbf{AX}^{(1)}$ 和 $\mathbf{BX}^{(2)}$ 的线性组合，求

(a) $E(\mathbf{X}^{(1)})$

(b) $E(\mathbf{AX}^{(1)})$

(c) $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})$

(d) $\mathrm{Cov}(\mathbf{AX}^{(1)})$

(e) $E(\mathbf{X}^{(2)})$

(f) $E(\mathbf{BX}^{(2)})$

(g) $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})$

(h) $\mathrm{Cov}(\mathbf{BX}^{(2)})$

(i) $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)})$

(j) $\mathrm{Cov}(\mathbf{AX}^{(1)},\mathbf{BX}^{(2)})$

2.31　重复练习 2.30，但 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 变换为

$$\mathbf{A}=[1\quad -1]\quad 和\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}2 & -1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

2.32　给定随机向量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,\cdots,X_5]$，均值向量 $\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{X}}=[2,4,-1,3,0]$ 及方差-协方差矩阵

$$\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{X}}=\begin{bmatrix}4 & -1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ -1 & 3 & 1 & -1 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 6 & 1 & -1\\ -\frac{1}{2} & -1 & 1 & 4 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0 & 2\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\mathbf{X}$ 划分为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}X_1\\X_2\\\cdots\cdots\\X_3\\X_4\\X_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}^{(1)}\\\cdots\cdots\\\mathbf{X}^{(2)}\end{bmatrix}$$

设

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1&-1\\1&1\end{bmatrix}\quad 和\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}1&1&1\\1&1&-2\end{bmatrix}$$

考虑 $\mathbf{AX}^{(1)}$ 和 $\mathbf{BX}^{(2)}$ 的线性组合，求

(a) $E(\mathbf{X}^{(1)})$

(b) $E(\mathbf{AX}^{(1)})$

(c) $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})$

(d) $\mathrm{Cov}(\mathbf{AX}^{(1)})$

(e) $E(\mathbf{X}^{(2)})$

(f) $E(\mathbf{BX}^{(2)})$

(g) $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})$

(h) $\mathrm{Cov}(\mathbf{BX}^{(2)})$

(i) $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)})$

(j) $\mathrm{Cov}(\mathbf{AX}^{(1)},\mathbf{BX}^{(2)})$

2.33　重复练习 2.32，但 $\mathbf{X}$ 划分为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}X_1\\X_2\\X_3\\\cdots\cdots\\X_4\\X_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}^{(1)}\\\cdots\cdots\\\mathbf{X}^{(2)}\end{bmatrix}$$

$\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 变为

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}2&-1&0\\1&1&3\end{bmatrix}\quad 和\quad \mathbf{B}=\begin{bmatrix}1&2\\1&-1\end{bmatrix}$$

2.34　设向量 $\mathbf{b}'=[2,-1,4,0]$ 和 $\mathbf{d}'=[-1,3,-2,1]$，验证柯西-施瓦茨不等式 $(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2\leqslant(\mathbf{b}'\mathbf{b})(\mathbf{d}'\mathbf{d})$。

2.35　利用向量 $\mathbf{b}'=[-4,3]$ 和 $\mathbf{d}'=[1,1]$，又若矩阵

$$\mathbf{B}=\begin{bmatrix}2&-2\\-2&5\end{bmatrix}$$

验证广义柯西-施瓦茨不等式 $(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2\leqslant(\mathbf{b}'\mathbf{B}\mathbf{b})(\mathbf{d}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d})$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

2.36　对所有满足 $\mathbf{x}'\mathbf{x}=1$ 的点 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2]$，求二次型 $4x_1^2+4x_2^2+6x_1x_2$ 的最大值和最小值。

2.37　给定练习 2.6 中的 $\mathbf{A}$，对于 $\mathbf{x}'\mathbf{x}=1$，求 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ 的最大值。

2.38　如果

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 13 & -4 & 2 \\ -4 & 13 & -2 \\ 2 & -2 & 10 \end{bmatrix}$$

对任何非零向量 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2,x_3]$，求比率 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}/\mathbf{x}'\mathbf{x}$ 的最大值和最小值。

2.39　证明

$$\underset{(r\times s)}{\mathbf{A}}\ \underset{(s\times t)}{\mathbf{B}}\ \underset{(t\times v)}{\mathbf{C}} \text{ 的第}(i,j)\text{ 个元素为}\sum_{l=1}^{s}\sum_{k=1}^{t}a_{il}b_{lk}c_{kj}。$$

提示：$\mathbf{BC}$ 的第(l,j)个元素为 $\sum_{k=1}^{t}b_{lk}c_{kj}=d_{lj}$。因此，$\mathbf{A}(\mathbf{BC})$ 的第(i,j) 个元素为

$$a_{i1}d_{1j}+a_{i2}d_{2j}+\cdots+a_{is}d_{sj}=\sum_{l=1}^{s}a_{il}\Big(\sum_{k=1}^{t}b_{lk}c_{kj}\Big)=\sum_{l=1}^{s}\sum_{k=1}^{t}a_{il}b_{lk}c_{kj}$$

2.40　证明式(2-24)：$E(\mathbf{X}+\mathbf{Y})=E(\mathbf{X})+E(\mathbf{Y})$和 $E(\mathbf{AXB})=\mathbf{A}E(\mathbf{X})\mathbf{B}$。

提示：$\mathbf{X}+\mathbf{Y}$ 的第(i,j)个元素为 $X_{ij}+Y_{ij}$，由期望的性质有 $E(X_{ij}+Y_{ij})=E(X_{ij})+E(Y_{ij})$ 量 $E(X_{ij})+E(Y_{ij})$是 $E(\mathbf{X})+E(\mathbf{Y})$的第$(i,j)$个元素。接下来(参考练习 2.39)，$\mathbf{AXB}$ 的第(i,j)个元素是 $\sum_l\sum_k a_{il}X_{lk}b_{kj}$，由期望的加法性质，

$$E\Big(\sum_l\sum_k a_{il}X_{lk}b_{kj}\Big)=\sum_l\sum_k a_{il}E(X_{lk})b_{kj}$$

这是 $\mathbf{A}E(\mathbf{X})\mathbf{B}$ 的第(i,j)个元素。

参 考 文 献

1. Bellman, R. *Introduction to Matrix Analysis* (2d ed.) New York: McGraw-Hill, 1970.
2. Bhattacharyya, G. K., and R. A. Johnson. *Statistical Concepts and Methods*. New York: John Wiley, 1977.
3. Graybill, F. A. *Introduction to Matrices with Applications in Statistics*. Belmont, CA: Wadsworth, 1969.
4. Halmos, P. R. *Finite Dimensional Vector Spaces* (2d ed.). Princeton, NJ: D. Van Nostrand, 1958.
5. Noble, B., and J. W. Daniel. *Applied Linear Algebra* (3d ed.). Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1988.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第3章 [illegible]何与随[illegible]

3.1 引言

用前一章中介绍的向量概念，现在可以较深入地研究描述性统计量 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 的几何解释；在 3.2 节中我们的许多解释采用把 $\mathbf{X}$ 的列表示成 p 个 n 维向量的方法。在 3.3 节中我们引入一个假设：把观测结果组成一个随机样本。简单地说，随机抽样的意思是，(1)不同项(或试验)的观测结果是互不相关的，(2) 所有 p 个变量的联合分布对所有项保持相同。最后，正是随机样本的构造证明了距离的一个特殊的选择是正确的并且决定用几何形式表示 n 维数据。此外，当数据可以作为一个随机样本处理时，统计推断是建立在坚实的基础上的。

返回到 3.4 节中的几何解释，我们引入一个用来描述变化性的单一的数，称为**广义方差**。方差的推广是构成多元均值比较不可缺少的部分。在随后几节我们利用矩阵代数提供关于矩阵积与和的简明表达式，以使我们能直接从数据矩阵 $\mathbf{X}$ 计算 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}_n$。利用矩阵乘积的概念也清楚地刻划了 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}_n$ 以及变量的线性组合的均值和协方差之间的联系。

3.2 样本几何

单个的多元观测值是取自同一项目或试验的 p 个不同变量的测量结果的聚集。正如在第 1 章中，若获得了 n 个观测值，把全体数据集放在一个 $n\times p$ 的阵列(矩阵)中：

$$\underset{(n\times p)}{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

$\mathbf{X}$ 的每一行表示一个多元观测值。因为测量结果全体的集合通常是可以观察到的结果的一个具体实现，我们说数据是来自 p 个变量的“总体”的大小为 n 的一个**样本**，当样本由 n 个测量结果组成时，其中的每一个有 p 个分量。

如我们已看到的，数据可以用两种不同的方法划分。对 p 维散布图而言，$\mathbf{X}$ 的行表示 p 维空间中的 n 个点。可以写为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\underset{(n\times p)}{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1' \\ \mathbf{x}_2' \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n' \end{bmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{第一个(多元)观测值} \\ \\ \\ \leftarrow \text{第 } n \text{ 个(多元)观测值} \end{matrix} \tag{3-1}$$

行向量 $\mathbf{x}_j'$，表示第 j 个观测值，它表示第 j 个点的坐标。

在 p 维空间中，n 个点的散布图提供出这些点的位置和变化性方面的信息。如果把这些点当作实心球，由式(1-8)所给出的样本均值向量 $\bar{\mathbf{x}}$ 是平衡中心。在一个以上方向上出现的变化性，用样本方差-协方差矩阵 $\mathbf{S}_n$ 来量化。变化性的单一数值量度由样本方差-协方差矩阵的行列式给出。当 p 大于 3 时，实际上不能用图形显示这个散布图。不过，把数据看成 p 维的 n 个点所能提供的信息，是不能从代数表达方法中轻易得到的。此外，对于 $p=2$ 或 $p=3$ 时阐明的概念对其他情况仍然是有效的。

例 3.1 （计算均值向量）

从数据矩阵计算均值向量 $\bar{\mathbf{x}}$。

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -1 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}$$

在 $p=2$ 空间画 $n=3$ 个数据点的散布图，在所得到的图上定位 $\bar{\mathbf{x}}$。

第一个点 $\mathbf{x}_1$ 坐标为 $\mathbf{x}_1'=[4,1]$，类似地，其余两点是 $\mathbf{x}_2'=[-1,3]$ 和 $\mathbf{x}_3'=[3,5]$。最后，

$$\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \dfrac{4-1+3}{3} \\ \dfrac{1+3+5}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

图 3.1 表明 $\bar{\mathbf{x}}$ 是散布图的平衡点(重心)。

另一种几何表示法是通过把数据看作 n 维空间中的 p 个向量来构造的。这里，选取数据矩阵的列的元素作为向量的坐标。令

$$\underset{(n\times p)}{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix} = [\mathbf{y}_1 \vdots \mathbf{y}_2 \vdots \cdots \vdots \mathbf{y}_p] \tag{3-2}$$

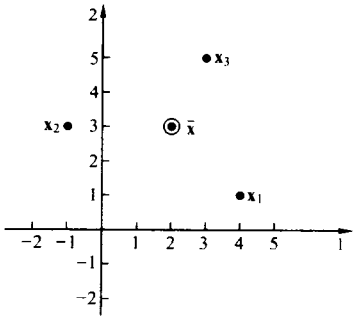


图 3.1 在 $p=2$ 维空间中 $n=3$ 个点的数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的散布图

则第一个点的坐标 $\mathbf{y}_1'=[x_{11},x_{21},\cdots,x_{n1}]$ 是第一个变量的 n 个测量结果。一般地，第 i 个点的坐标 $\mathbf{y}'_i=[x_{1i},x_{2i},\cdots,x_{ni}]$ 是由第 i 个变量的所有 n 个测量值所确定。在这一几何表示中，$\mathbf{y}_1,\mathbf{y}_2,\cdots,\mathbf{y}_p$ 是作为向量而不是作为 p 维散布图的点来描述的。我们马上将利用第 2 章中讨论的向量代数来运用这些量。

例 3.2 （把数据当作 n 维的 p 个向量）

将如下数据作为 $n=3$ 维空间中的 $p=2$ 个向量来作图：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}4 & 1\\ -1 & 3\\ 3 & 5\end{bmatrix}$$

这里，$\mathbf{y}_1'=[4,-1,3]$和$\mathbf{y}_2'=[1,3,5]$。这些向量如图 3.2 所示。

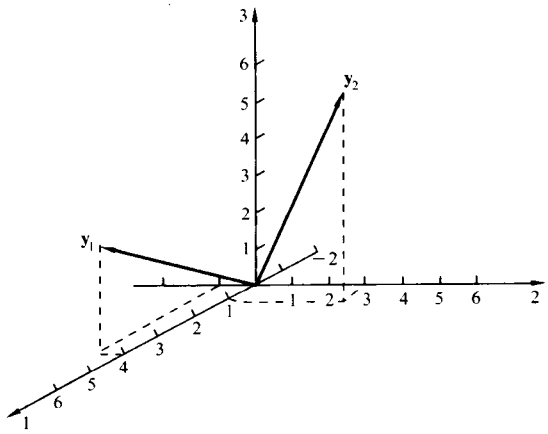


图 3.2　数据矩阵 $\mathbf{X}$ 作为 $n=3$ 维空间中 $p=2$ 个向量的图形

在多元分析中，我们将遇到许多代数表达式可以与长度、角度以及体积等几何概念联系起来。这是很重要的，因为通常几何表示能促进和加深理解。

可惜，我们局限于只能在三维中使对象形象化，因此，数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的 n 维表示法对于 $n>3$ 似乎不会是特别有用。然而，对任何 3 个向量描述的几何关系和相联系的统计概念，不论它们的维数是多少仍然是有效的。这是因为，3 个向量，即使是 n 维的，可以生成不超过 3 维的空间，正如任意多个分量的 2 个向量必定在一个平面中。通过选择一个适当的三维透视——即 n 维空间中包含 3 个感兴趣向量的那一部分——得到了保持其长度和角度的一个视图。这样，在正确选择了轴的情况下，利用任意维数 n 的 2 个或 3 个向量，说明某些代数统计概念是可能的。由于轴的具体选择与几何形状是不相关的，我们总是标明坐标轴 1，2 和 3。

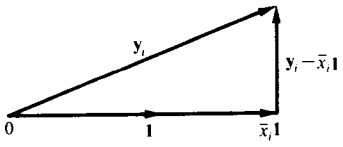
给出求样本均值方法的几何解释是可能的。首先，定义 $n\times 1$ 向量 $\mathbf{1}_n'=[1,1,\cdots,1]$。(为了简化符号，当向量 $\mathbf{1}_n$ 的维数从上下文可以清楚看出时，下标 n 可省略。)向量 $\mathbf{1}$ 与 n 个坐标轴的每一个形成等角，这样向量$(1/\sqrt{n})\mathbf{1}$ 在等角方向上为单位长度。设向量 $\mathbf{y}_i'=[x_{1i},x_{2i},\cdots,x_{ni}]$。由式(2-18)，$\mathbf{y}_i$ 在单位向量$(1/\sqrt{n})\mathbf{1}$ 上的投影是，

$$\mathbf{y}_i'\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{1}\right)\frac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{1}=\frac{x_{1i}+x_{2i}+\cdots+x_{ni}}{n}\mathbf{1}=\bar{x}_i\mathbf{1} \tag{3-3}$$

即样本均值 $\bar{x}_i=(x_{1i}+x_{2i}+\cdots+x_{ni})/n=\mathbf{y}_i'\mathbf{1}/n$ 对应于 $\mathbf{1}$ 的倍数，该倍数给出 $\mathbf{y}_i$ 在由 $\mathbf{1}$ 确定的直线方向上的投影。

更进一步，对每个 $\mathbf{y}_i$，有分解

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com



其中 $\bar{x}_i\mathbf{1}$ 垂直于 $\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1}$。偏差(或均值修正)向量为

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i - \bar{x}_i\mathbf{1} = \begin{bmatrix} x_{1i} - \bar{x}_i \\ x_{2i} - \bar{x}_i \\ \vdots \\ x_{ni} - \bar{x}_i \end{bmatrix} \tag{3-4}$$

$\mathbf{d}_i$ 的元素是第 i 个变量的测量值与样本均值的偏差。图 3.3 显示了 $p=3$ 和 $n=3$ 时，$\mathbf{y}_i$ 向量分解成均值分量和偏差分量。

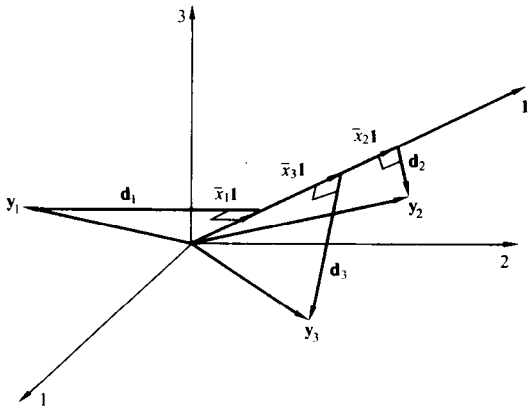


图 3.3　$\mathbf{y}_i$ 分解为一个 $\bar{x}_i\mathbf{1}$ 分量和一个偏差分量 $\mathbf{d}_i=\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1}, i=1,2,3$

例 3.3　(把一个向量分解成均值分量和偏差分量)

对例 3.2 中所给数据 $\mathbf{X}=\begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -1 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}$，把 $\mathbf{y}_i$ 分解为 $\bar{x}_i\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{d}_i=\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1}, i=1,2$。

这里 $\bar{x}_1=(4-1+3)/3=2, \bar{x}_2=(1+3+5)/3=3$，因此，

$$\bar{x}_1\mathbf{1} = 2\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \bar{x}_2\mathbf{1} = 3\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}$$

所以，

$$\mathbf{d}_1 = \mathbf{y}_1 - \bar{x}_1\mathbf{1} = \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{d}_2 = \mathbf{y}_2 - \bar{x}_2\mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

注意，因为

$$(\bar{x}_1\mathbf{1})'(\mathbf{y}_1 - \bar{x}_1\mathbf{1}) = [2 \quad 2 \quad 2]\begin{bmatrix} 2 \\ -3 \\ 1 \end{bmatrix} = 4 - 6 + 2 = 0$$

所以 $\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $d_1 = y_1 - \bar{x}_1\mathbf{1}$ 是垂直的。

对于 $\bar{x}_2\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{d}_2 = \mathbf{y}_2 - \bar{x}_2\mathbf{1}$，类似的结论成立。分解式为

$$\mathbf{y}_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

目前我们感兴趣的是偏差(或剩余)向量 $\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i - \bar{x}_i\mathbf{1}$。在图 3.4 中给出了图 3.3 中的偏差向量图。我们在不改变偏差向量的长度和方向的情况下，把它们平移到原点。

现在考虑偏差向量的长度的平方。利用式(2-5)和式(3-4)，得到

$$L_{\mathbf{d}_i}^2 = \mathbf{d}_i'\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)^2 \qquad (3\text{-}5)$$

(偏差向量长度)^2 = 偏差的平方和

从式(1-3)可见，长度的平方是与第 i 个变量的测量值的方差成比例的。等价地，长度是与标准差成比例的。较长的向量比较短的向量表现出更多的变化性。

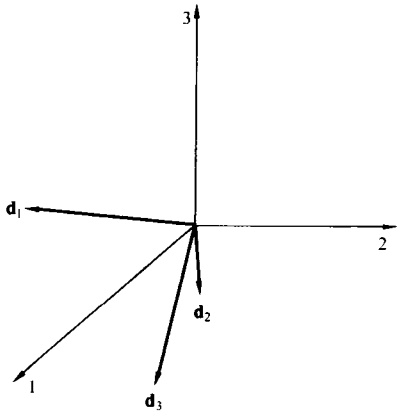


图 3.4　图 3.3 中的偏差向量 $\mathbf{d}_i$

对于任何两个偏差向量 $\mathbf{d}_i$ 和 $\mathbf{d}_k$，

$$\mathbf{d}_i'\mathbf{d}_k = \sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)(x_{jk} - \bar{x}_k) \qquad (3\text{-}6)$$

令 θ_{ik} 表示向量 $\mathbf{d}_i$ 和 $\mathbf{d}_k$ 所成的角。从式(2-6)，得到

$$\mathbf{d}_i'\mathbf{d}_k = L_{\mathbf{d}_i}L_{\mathbf{d}_k}\cos(\theta_{ik})$$

或利用式(3-5)和式(3-6)，得到

$$\sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)(x_{jk} - \bar{x}_k) = \sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{ji} - \bar{x}_i)^2}\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{jk} - \bar{x}_k)^2}\cos(\theta_{ik})$$

因此[参见式(1-5)]，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$r_{ik} = \frac{s_{ik}}{\sqrt{s_{ii}}\sqrt{s_{kk}}} = \cos(\theta_{ik}) \tag{3-7}$$

夹角的余弦是样本相关系数。若两个偏差向量几乎方向相同，其样本相关系数将接近于1。若两个向量几乎是垂直的，其样本相关系数将接近零。若两个向量几乎是相反方向的，其样本相关系数将接近于-1。

例 3.4 （由偏差向量计算 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$）

给定例 3.3 中的偏差向量，利用刚刚介绍过的几何概念计算样本方差-协方差矩阵 $\boldsymbol{S}_n$ 和样本相关矩阵 $\mathbf{R}$。

由例 3.3，

$$\mathbf{d}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \\ 1 \end{bmatrix} \quad 和 \quad \mathbf{d}_2 = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

这两个向量平移到原点后，如图 3.5 所示。现在

$$\mathbf{d}_1'\mathbf{d}_1 = [2 \quad -3 \quad 1]\begin{bmatrix} 2 \\ -3 \\ 1 \end{bmatrix} = 14 = 3s_{11}$$

即 $s_{11}=14/3$。又

$$\mathbf{d}_2'\mathbf{d}_2 = [-2 \quad 0 \quad 2]\begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} = 8 = 3s_{22}$$

即 $s_{22}=8/3$。最后，

$$\mathbf{d}_1'\mathbf{d}_2 = [2 \quad -3 \quad 1]\begin{bmatrix} -2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} = -2 = 3s_{12}$$

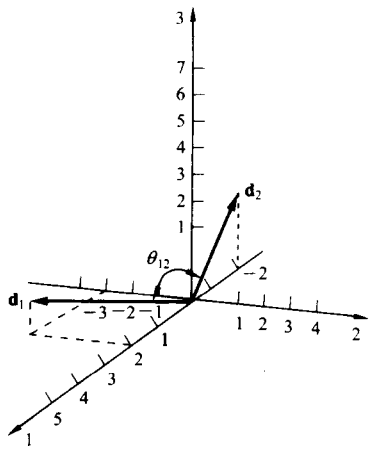


图 3.5 偏差向量 $\mathbf{d}_1$ 和 $\mathbf{d}_2$

即 $s_{12}=-2/3$。因此，

$$r_{12} = \frac{s_{12}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}} = \frac{-\frac{2}{3}}{\sqrt{\frac{14}{3}} \times \sqrt{\frac{8}{3}}} = -0.189$$

和

$$\mathbf{S}_n = \begin{bmatrix} \frac{14}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{8}{3} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & -0.189 \\ -0.189 & 1 \end{bmatrix}$$

长度、角度和投影的概念已经给我们提供了样本的几何解释，可概述如下：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

样本的几何解释

1. 数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的一列 $\mathbf{y}_i$ 在等角向量 $\mathbf{1}$ 上的投影是向量 $\bar{x}_i\mathbf{1}$，向量 $\bar{x}_i\mathbf{1}$ 的长度为 $\sqrt{n}\,|\bar{x}_i|$。因此，第 i 个样本均值 $\bar{x}_i$ 与 $\mathbf{y}_i$ 在 $\mathbf{1}$ 上的投影的长度有关。

2. 从偏差向量 $\mathbf{d}_i=\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1}=[x_{1i}-\bar{x}_i,x_{2i}-\bar{x}_i,\cdots,x_{ni}-\bar{x}_i]'$ 可得到 $\mathbf{S}_n$ 的有关信息。$\mathbf{d}_i$ 长度的平方是 ns_{ii}，且 $\mathbf{d}_i$ 和 $\mathbf{d}_k$ 的(内)积是 ns_{ik}①。

3. 样本相关系数 r_{ik} 是 $\mathbf{d}_i$ 和 $\mathbf{d}_k$ 之间夹角的余弦。

3.3 随机样本以及样本均值和协方差矩阵的期望值

为了研究诸如 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}_n$ 等统计量的抽样变异性，以便最终做出推断，我们必须对其观测值构成数据集 $\mathbf{X}$ 的变量做出假设。

假定，数据还没有观测，但我们想要对 p 个变量收集 n 组测量结果。在测量之前，通常不能准确地预计它们的值。因此，把它们当作随机变量来处理。本书中令数据矩阵中第 (j,k) 个元素代表随机变量 X_{jk}。p 个变量的每组测量结果 $\mathbf{X}_j$ 是一个随机向量，且有随机矩阵

$$\underset{(n\times p)}{\mathbf{X}}=\begin{bmatrix}X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p}\\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}_1'\\ \mathbf{X}_2'\\ \vdots\\ \mathbf{X}_n'\end{bmatrix} \tag{3-8}$$

现在就来定义**随机样本**。

如果式(3-8)中的行向量 $\mathbf{X}_1',\mathbf{X}_2',\cdots,\mathbf{X}_n'$ 代表来自密度函数为 $f(\mathbf{x})=f(x_1,x_2,\cdots,x_p)$ 的一个**公共**联合分布的**独立**观测值，则称 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 构成一个来自 $f(\mathbf{x})$ 的**随机样本**。在数学上，若 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 的联合密度函数由乘积 $f(\mathbf{x}_1)f(\mathbf{x}_2)\cdots f(\mathbf{x}_n)$ 给出，其中 $f(\mathbf{x}_j)=f(x_{j1},x_{j2},\cdots,x_{jp})$ 是第 j 个行向量的密度函数，则称它们构成一个随机样本。

对随机样本的定义有两点特别值得注意：

1. 在单个试验中，p 个变量的测量结果，例如 $\mathbf{X}_j'=[X_{j1},X_{j2},\cdots,X_{jp}]$，常常是相关的。的确，我们期望这是事实。然而，从**不同**试验得到的测量结果必须是独立的。

2. 当变量可能会随时间缓慢地变化时，例如 p 种股票价格或 p 个经济指标构成的集合，各次试验的测量结果的独立性可能不成立。违背独立性的临时假设对统计推断的性质会有严重影响。

下列例子将说明这些道理。

例 3.5 （选择一个随机样本）

为了设计一种准入制度使野外划舟区不致于太拥挤，一位自然资源经理首先对客户

① 当因子 $n-1$ 用于样本方差和协方差的定义中时，长度的平方以及内积分别是 $(n-1)s_{ii}$ 和 $(n-1)s_{ik}$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

进行了调查。整个野外区域被分成许多子区域，并要求应答者给出有关访问区域、逗留时间及其他变量的信息。

接下来的办法是，在特定一周内对进入该野外区域的所有人进行随机抽选(可以利用随机数表)。所有人员以等可能的机会被选为样本，因此，划舟者的比例越大表示进入此区域的人越多。

这里，我们会期望样本观测值严格符合用户或潜在用户总体的随机样本的标准。另一方面，如果一个取样者等待在深入区域内部的营地，并仅调查到达该地的划舟者，那么相继的观测结果不会是独立的。例如，停留时间会趋向于较长。

例 3.6 (非随机样本)

由于关注未来如何对固体废品进行处理，因而对美国每年产生的固体废品的总重量进行了研究("美国 1960—2000 年间城市固体废品的特征"弗朗克林联合有限公司)。表 3.1 给出了所选年份中 x_1=废纸及废记录纸和 x_2=塑料废品(按百万吨计算)的估计总量。$\mathbf{X}'=[X_1,X_2]$中的这些观测结果可否作为一个 $n=6$ 的随机样本来处理？不！其实这两个变量是随时间而增加的。各年的值是来自同一分布的独立观测值，这种情况是很少的。

表 3.1 固体废品

年	1960	1965	1970	1975	1980	1985
x_1(纸)	29.8	37.9	43.9	42.6	53.9	61.7
x_2(塑料)	0.4	1.4	3.0	4.4	7.6	9.8

在第 1 章中，我们初步讨论过，统计独立的概念对测量距离有重要的意义。若向量的分量之间是独立的并有相同的方差，欧几里得距离是合适的。假定我们考虑作为 n 维空间中一点的 $\mathbf{X}$ 的第 k 列$\mathbf{Y}_k'=[X_{1k},X_{2k},\cdots,X_{nk}]$的位置。该点的位置是由联合分布 $f(\mathbf{y}_k)=f(x_{1k},x_{2k},\cdots,x_{nk})$确定的。当测量结果 $X_{1k},X_{2k},\cdots,X_{nk}$是一随机样本时，$f(\mathbf{y}_k)=f(x_{1k},x_{2k},\cdots,x_{nk})=f_k(x_{1k})f_k(x_{2k})\cdots f_k(x_{nk})$。因此，每个坐标 x_{jk}通过相同的边缘分布 $f_k(x_{jk})$同等地影响着位置。

若 n 个分量不是独立的或边缘分布是不相同的，单个的观测结果(坐标)对位置的影响是不对称的。因此，应考虑一个距离函数，其中不同的坐标将不相等地加权，如同第 1 和第 2 章中介绍的"统计"距离或二次型。

在不对变量的基本联合分布的形式作更多假定的情况下，可以得到关于 $\bar{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}_n$ 的抽样分布的某些结论。具体地说，我们可以看到 $\bar{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}_n$ 如何作为相应的总体均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的点估计。

结论 3.1 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是来自均值向量为 $\boldsymbol{\mu}$，协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的联合分布的一个随机样本，则 $\bar{\mathbf{X}}$ 是 $\boldsymbol{\mu}$ 的一个**无偏**估计量，它的协方差矩阵是

$$\frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma}$$

即

$$\begin{aligned} E(\bar{\mathbf{X}}) &= \boldsymbol{\mu} \quad \text{(总体均值向量)} \\ \mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}) &= \frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma} \quad \text{(总体方差-协方差矩阵除以样本大小)} \end{aligned} \tag{3-9}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

对协方差矩阵 $\mathbf{S}_n$，

$$E(\mathbf{S}_n) = \frac{n-1}{n}\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma} - \frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma}$$

因此，

$$E\left(\frac{n}{n-1}\mathbf{S}_n\right) = \boldsymbol{\Sigma} \tag{3-10}$$

所以$[n/(n-1)]\mathbf{S}_n$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的**无偏**估计量，而 $\mathbf{S}_n$ 是**有偏**估计量，偏差$=E(\mathbf{S}_n)-\boldsymbol{\Sigma}=-(1/n)\boldsymbol{\Sigma}$。

证明 现在，$\bar{\mathbf{X}}=(\mathbf{X}_1+\mathbf{X}_2+\cdots+\mathbf{X}_n)/n$。对两个向量重复利用式(2-24)中期望的性质，得出

$$\begin{aligned}
E(\bar{\mathbf{X}}) &= E\left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_1 + \frac{1}{n}\mathbf{X}_2 + \cdots + \frac{1}{n}\mathbf{X}_n\right) \\
&= E\left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_1\right) + E\left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_2\right) + \cdots + E\left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_n\right) \\
&= \frac{1}{n}E(\mathbf{X}_1) + \frac{1}{n}E(\mathbf{X}_2) + \cdots + \frac{1}{n}E(\mathbf{X}_n) = \frac{1}{n}\boldsymbol{\mu} + \frac{1}{n}\boldsymbol{\mu} + \cdots + \frac{1}{n}\boldsymbol{\mu} \\
&= \boldsymbol{\mu}
\end{aligned}$$

接下来，

$$\begin{aligned}
(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})' &= \left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})\right)\left(\frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n}(\mathbf{X}_l-\boldsymbol{\mu})\right)' \\
&= \frac{1}{n^2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}_l-\boldsymbol{\mu})'
\end{aligned}$$

因此，

$$\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}) = E(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})' = \frac{1}{n^2}\left(\sum_{j=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}E(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}_l-\boldsymbol{\mu})'\right)$$

对于 $j\neq l$，由于 $\mathbf{X}_j$ 的分量与 $\mathbf{X}_l$ 的分量之间是相互独立的，其间的协方差是零，所以 $E(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}_l-\boldsymbol{\mu})'$中的每一项都是零。[参考练习 3.17 和式(2-29)。]

因此，

$$\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}) = \frac{1}{n^2}\left(\sum_{j=1}^{n}E(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})'\right)$$

由于 $\boldsymbol{\Sigma}=E(\mathbf{X}_j-\mu)(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})'$为每个 $\mathbf{X}_j$ 的共同的总体协方差矩阵，我们有

$$\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}) &= \frac{1}{n^2}\left(\sum_{j=1}^{n}E(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu})'\right) = \frac{1}{n^2}\underbrace{(\boldsymbol{\Sigma}+\boldsymbol{\Sigma}+\cdots+\boldsymbol{\Sigma})}_{n\text{项}} \\
&= \frac{1}{n^2}(n\boldsymbol{\Sigma}) = \left(\frac{1}{n}\right)\boldsymbol{\Sigma}
\end{aligned}$$

为了得到 $\mathbf{S}_n$ 的期望值，首先注意到$(X_{ji}-\bar{X}_i)(X_{jk}-\bar{X}_k)$是$(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})'$的第$(i,k)$个元素。由于 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})=\mathbf{0}$ 和 $n\bar{\mathbf{X}}'=\sum_{i=1}^{n}\mathbf{X}_j'$，代表平方和与交叉乘积的矩阵可以写作

$$\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})' = \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})\mathbf{X}_j' + \left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})\right)(-\bar{\mathbf{X}})'$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= \sum_{j=1}^{n} \mathbf{X}_j \mathbf{X}_j' - n\bar{\mathbf{X}}\,\bar{\mathbf{X}}'$$

因此，它的期望值是

$$E\left(\sum_{j=1}^{n} \mathbf{X}_j \mathbf{X}_j' - n\bar{\mathbf{X}}\,\bar{\mathbf{X}}\right) = \sum_{j=1}^{n} E(\mathbf{X}_j \mathbf{X}_j') - nE(\bar{\mathbf{X}}\,\bar{\mathbf{X}}')$$

对任何随机向量 $\mathbf{V}$，$E(\mathbf{V})=\boldsymbol{\mu}_V$ 和 $\mathrm{Cov}(\mathbf{V})=\boldsymbol{\Sigma}_V$，我们有 $E(\mathbf{V}\mathbf{V}')=\boldsymbol{\Sigma}_V+\boldsymbol{\mu}_V\boldsymbol{\mu}'_V$。（参考练习 3.16。）因此，

$$E(\mathbf{X}_j \mathbf{X}_j') = \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}' \quad 和 \quad \mathbf{E}(\bar{\mathbf{X}}\,\bar{\mathbf{X}}') = \frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}'$$

利用这些结论，我们得到

$$\sum_{j=1}^{n} E(\mathbf{X}_j \mathbf{X}_j') - nE(\bar{\mathbf{X}}\,\bar{\mathbf{X}}') = n\boldsymbol{\Sigma} + n\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}' - n\left(\frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}'\right) = (n-1)\boldsymbol{\Sigma}$$

又因为 $\mathbf{S}_n = (1/n)\left(\sum_{j=1}^{n} \mathbf{X}_j \mathbf{X}_j' - n\bar{\mathbf{X}}\,\bar{\mathbf{X}}'\right)$，因此立即得到

$$E(\mathbf{S}_n) = \frac{(n-1)}{n}\boldsymbol{\Sigma}$$

结论 3.1 指出，$[n/(n-1)]\mathbf{S}_n$ 的第(i,k)项 $(n-1)^{-1}\sum_{j=1}^{n}(X_{ji}-\bar{X}_i)(X_{jk}-\bar{X}_k)$ 是 σ_{ik} 的一个无偏估计量。然而，无论是用 n 或用 $n-1$ 作除数计算得到的单个的样本标准差 $\sqrt{s_{ii}}$ 都不是对应的总体量 $\sqrt{\sigma_{ii}}$ 的无偏估计量。而且，相关系数 r_{ik} 不是总体量 ρ_{ik} 的无偏估计量。不过，若样本容量 n 适当大，偏差 $E(\sqrt{s_{ii}})-\sqrt{\sigma_{ii}}$ 或 $E(r_{ik})-\rho_{ik}$ 通常是可以忽略。

考虑偏差后，对样本方差-协方差矩阵定义需要进行一个微小的修改。结论 3.1 提供了 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的无偏估计量 $\mathbf{S}$：

（无偏）样本方差-协方差矩阵

$$\mathbf{S} = \left(\frac{n}{n-1}\right)\mathbf{S}_n = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j - \bar{\mathbf{X}})' \tag{3-11}$$

此处 $\mathbf{S}$ 没有下标，其第(i,k)项为 $(n-1)^{-1}\sum_{j=1}^{n}(X_{ji}-\bar{X}_i)(X_{jk}-\bar{X}_k)$。样本协方差的这一定义在许多多元检验统计中被普遍使用。因此，在本书后面的许多地方，$\mathbf{S}$ 将取代 $\mathbf{S}_n$ 作为样本协方差矩阵。

3.4 广义方差

在单变量情形下，样本方差通常用来描述该变量的观测值变差的程度。当在每组观测到 p 个变量时，变差是用样本方差-协方差矩阵来描述。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{12} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{1p} & s_{2p} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix}=\left\{s_{ik}=\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_i)(x_{jk}-\bar{x}_k)\right\}$$

该样本协方差矩阵包含 p 个方差和$\frac{1}{2}p(p-1)$个可能不同的协方差。有时，希望对用 $\mathbf{S}$ 表示的变差能给定一数值。我们选择这一数值为 $\mathbf{S}$ 的行列式，当 $p=1$ 时它就是单一特征的一般样本方差。该行列式① 称为**广义样本方差**：

$$\text{广义样本方差}=|\mathbf{S}| \tag{3-12}$$

例 3.7 （计算广义方差）

美国 16 家最大的出版公司的雇员(x_1)和雇员人均利润(x_2)由图 1.3 给出。从 1990 年 4 月 30 日《福布斯》中的数据得到的样本协方差矩阵为

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix} 252.04 & -68.43 \\ -68.43 & 123.67 \end{bmatrix}$$

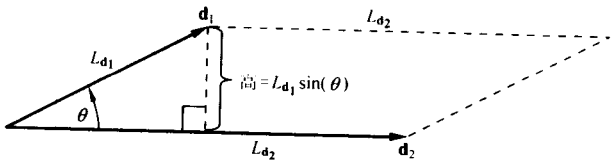
求广义方差的值。

这时，我们计算

$$|\mathbf{S}|=252.04\times 123.67-(-68.43)\times(-68.43)=26\ 487$$

广义样本方差提供一个方法，把所有方差和协方差的信息写成单个的数值。当然，在 $p>1$ 时，用这一方法会丢失样本的某些信息。$|\mathbf{S}|$的几何解释将帮助我们了解它作为一个描述性的概括量所具有的优点和缺点。

考虑由两个偏差向量 $\mathbf{d}_1=\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{d}_2=\mathbf{y}_2-\bar{x}_2\mathbf{1}$ 在平面内生成的一个区域。令 $L_{\mathbf{d}_1}$是 $\mathbf{d}_1$ 的长度，$L_{\mathbf{d}_2}$是 $\mathbf{d}_2$ 的长度。由初等几何学，有图



且此平行四边形的面积是$|L_{\mathbf{d}_1}\sin(\theta)|L_{\mathbf{d}_2}$。由 $\cos^2(\theta)+\sin^2(\theta)=1$，此面积可表示为

$$\text{面积}=L_{\mathbf{d}_1}L_{\mathbf{d}_2}\sqrt{1-\cos^2(\theta)}$$

式(3-5)和式(3-7)，

$$L_{\mathbf{d}_1}=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{j1}-\bar{x}_1)^2}=\sqrt{(n-1)s_{11}}$$

$$L_{\mathbf{d}_2}=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{j2}-\bar{x}_2)^2}=\sqrt{(n-1)s_{22}}$$

① 补充 2A.24 定义了“行列式”，并指明了计算行列式的值的方法。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

和

$$\cos(\theta) = r_{12}$$

因此，

$$\text{面积} = (n-1)\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}\sqrt{1-r_{12}^2} = (n-1)\sqrt{s_{11}s_{22}(1-r_{12}^2)} \tag{3-13}$$

又

$$|\mathbf{S}| = \left|\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{22} \end{bmatrix}\right| = \left|\begin{bmatrix} s_{11} & \sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}r_{12} \\ \sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}r_{12} & s_{22} \end{bmatrix}\right|$$

$$= s_{11}s_{22} - s_{11}s_{22}r_{12}^2 = s_{11}s_{22}(1-r_{12}^2) \tag{3-14}$$

如果我们比较式(3-14)和式(3-13)，可见

$$|\mathbf{S}| = (\text{面积})^2/(n-1)^2$$

对于由 $p-1$ 个偏差向量 $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \cdots, \mathbf{d}_{p-1}$ 所产生的 n 维空间的体积，假定 $|\mathbf{S}| = (n-1)^{-(p-1)}(\text{体积})^2$ 成立，那么，对于 p 个偏差向量，由归纳法，我们可以确定以下一般性的结论(参见[1]。)：

$$\text{广义样本方差} = |\mathbf{S}| = (n-1)^{-p}(\text{体积})^2 \tag{3-15}$$

式(3-15)说明，对于一个固定的数据集合，广义样本方差是与由 p 个偏差向量① $\mathbf{d}_1 = \mathbf{y}_1 - \bar{x}_1\mathbf{1}, \mathbf{d}_2 = \mathbf{y}_2 - \bar{x}_2\mathbf{1}, \cdots, \mathbf{d}_p = \mathbf{y}_p - \bar{x}_p\mathbf{1}$ 生成的体积的平方成比例的。图 3.6(a)和(b)指出了由 $p=3$ 所对应的“大的”和“小的”广义方差的剩余向量生成的梯形区域。

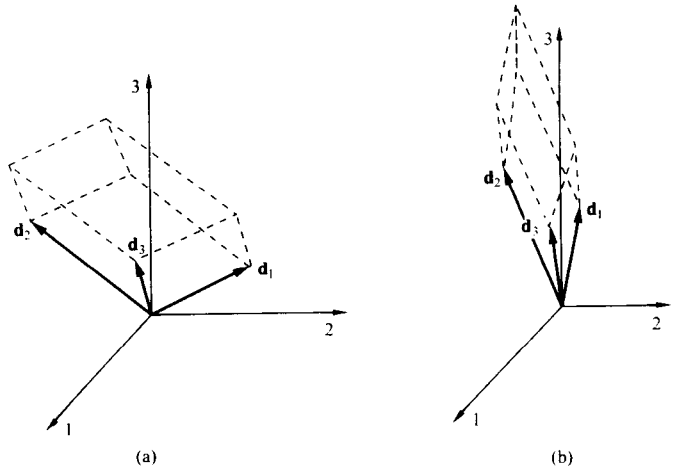


图 3.6 (a)对 $p=3$，“大的”广义样本方差
(b)对 $p=3$，“小的”广义样本方差

对于一个固定大小的样本，根据几何学，当任何 $\mathbf{d}_i = \mathbf{y}_i - \bar{x}_i\mathbf{1}$(或 $\sqrt{s_{ii}}$)的长度增加时，明显地体积或 $|\mathbf{S}|$ 也增加。另外，如果移动固定长度的剩余向量直到它们互相成直角为止

① 如果广义方差是用样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_n = [(n-1)/n]\mathbf{S}$ 定义，则利用结论 2A.11，$|\mathbf{S}_n| = |[(n-1)/n]\mathbf{I}_p\mathbf{S}| = |[(n-1)/n]\mathbf{I}_p||\mathbf{S}| = [(n-1)/n]^p|\mathbf{S}|$。因此，利用式(3-15)，我们也可以有：广义样本方差 $= |\mathbf{S}_n| = n^{-p}(\text{体积})^2$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

时，体积也将增加，如图 3.6(a)。另一方面，如果仅仅 s_{ii}的一个是小的，或者偏差向量之一几乎在由其他向量或两个向量构成的(超)平面中时，体积或$|\mathbf{S}|$将会是小的。在第二种情况中，不规则四边形在平面上有很小的高。这情况如图 3.6(b)所示，其中 $\mathbf{d}_3$ 几乎在由 $\mathbf{d}_1$ 和 $\mathbf{d}_2$ 所构成的平面内。

在 p 维空间广义方差也有解释，即数据的散布图表示法。大多数直观的解释涉及到关于样本均值点 $\bar{\mathbf{x}}'=(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots,\bar{x}_p)$的散布范围。考虑在式(2-19)下面的评注中所给出的距离的测度，$\bar{\mathbf{x}}$ 起不变的点 $\boldsymbol{\mu}$ 的作用，$\mathbf{S}^{-1}$起 $\mathbf{A}$ 的作用。做出选择后，距 $\bar{\mathbf{x}}$ 为常数距离 c 的点的坐标 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2,\cdots,x_p]$满足

$$(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})=c^2 \tag{3-16}$$

(当 $p=1$ 时，$((\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})=(x_1-\bar{x}_1)^2/s_{11}$是从 x_1 到 $\bar{x}_1$ 的单位标准差的距离平方。)

式(3-16)定义一个中心在 $\bar{\mathbf{x}}$ 的超椭球(如果 $p=2$，则为椭圆)。可以利用积分计算证明这个超椭球的体积与$|\mathbf{S}|$有关，具体地，

$$\{\mathbf{x}:(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})\leqslant c^2\}\text{ 的体积}=k_p|\mathbf{S}|^{1/2}c^p \tag{3-17}$$

或

$$(\text{椭球的体积})^2=(\text{常数})\times(\text{广义样本方差})$$

其中常数 k_p 很难计算① 一个大的体积对应于一个大的广义方差。

虽然广义方差有一些直观合意的几何解释，作为样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$ 的一个描述性概括量，它有一个基本缺点，如下例所示。

例 3.8 (解释广义方差)

图 3.7 给出三个相关模式很不同的散布图。全部三个数据集有 $\bar{\mathbf{x}}'=[1,2]$且协方差矩阵是

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}5&4\\4&5\end{bmatrix},r=0.8\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}3&0\\0&3\end{bmatrix},r=0\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}5&-4\\-4&5\end{bmatrix},r=-0.8$$

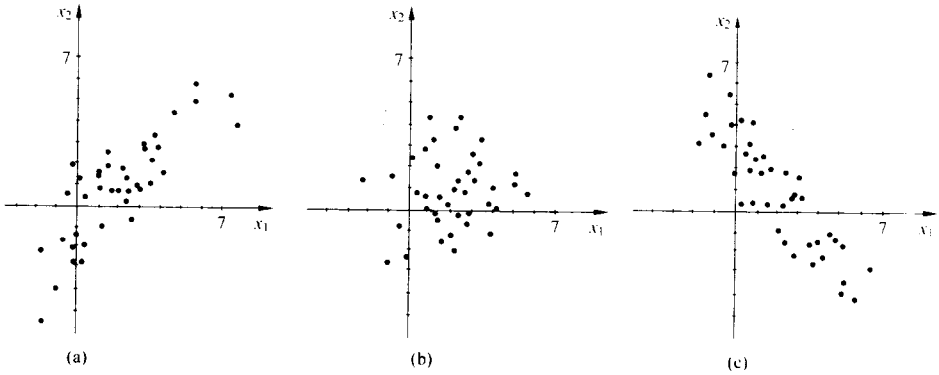


图 3.7 三个不同定向的散布图

① 对那些好奇的人，我们给出 $k_p=2\pi^{p/2}p\Gamma(p/2)$，其中 $\Gamma(z)$是在 z 处的伽马函数值。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

每个协方差矩阵 S 含有关于变量分量的可变性的信息，还含有计算相关系数所需的信息。在这个意义上，S 刻画了散布图的定向和大小。

从 S 计算出的特征值和特征向量可更进一步描述散布图中的模型。对于

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}5 & 4\\ 4 & 5\end{bmatrix},\ \text{特征值满足}\quad 0=(\lambda-5)^2-4^2=(\lambda-9)(\lambda-1)$$

确定特征值-特征向量对 $\lambda_1=9,\mathbf{e}_1'=[1/\sqrt{2},1/\sqrt{2}]$ 和 $\lambda_2=1,\mathbf{e}_2'=[1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2}]$。

对于所有三种情况，中心是 $\bar{\mathbf{x}}'=[1,2]$ 的均值中心椭圆是

$$(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})\leqslant c^2$$

为了如 2.3 节中用 $\mathbf{A}=\mathbf{S}^{-1}$ 来描述这个椭圆，我们注意到如果 $(\lambda,\mathbf{e})$ 是 S 的一个特征值-特征向量对，则 $(\lambda^{-1},\mathbf{e})$ 是 $\mathbf{S}^{-1}$ 的一个特征值-特征向量对。也就是说，如果 $\mathbf{Se}=\lambda\mathbf{e}$，则用 $\mathbf{S}^{-1}$ 左乘，得出 $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{Se}=\lambda\mathbf{S}^{-1}\mathbf{e}$ 或 $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{e}=\lambda^{-1}\mathbf{e}$。因此，利用 S 的特征值，我们知道从 $\bar{\mathbf{x}}$ 沿 $\mathbf{e}_i$ 的方向椭圆延伸为 $c\sqrt{\lambda_i}$。

当 $p=2$ 维时，选取 $c^2=5.99$ 产生一个椭圆，它包含着大约 95%的观测结果。向量 $3\sqrt{5.99}\mathbf{e}_1$ 和 $\sqrt{5.99}\mathbf{e}_2$ 如图 3.8(a)所示。注意方向是怎样成为椭圆的自然轴，并注意观察每个方向上这些换算过的特征向量的长度与模型的大小相差不大。

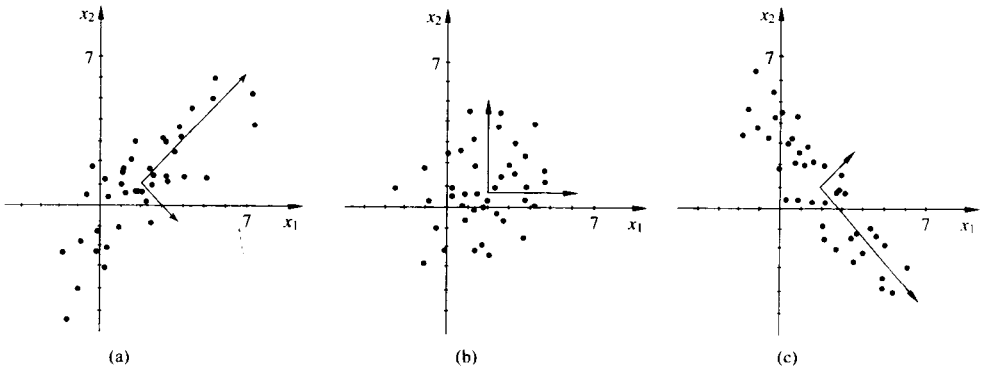


图 3.8　图 3.7 中散布图的 95%均值中心椭圆的轴

接下来，对于

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}3 & 0\\ 0 & 3\end{bmatrix},\ \text{特征值满足}\ 0=(\lambda-3)^2$$

我们任意地选择特征向量为 $\lambda_1=3,\mathbf{e}_1'=[1,0]$ 和 $\lambda_2=3,\mathbf{e}_2'=[0,1]$，向量 $\sqrt{3}\times\sqrt{5.99}\mathbf{e}_1$ 和 $\sqrt{3}\times\sqrt{5.99}\mathbf{e}_2$ 如图 3.8(b)所示。

最后，对于

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}5 & -4\\ -4 & 5\end{bmatrix},\text{特征值满足}\ 0=(\lambda-5)^2-(-4)^2=(\lambda-9)(\lambda-1)$$

我们确定特征值-特征向量对 $\lambda_1=9,\mathbf{e}_1'=[1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2}]$ 和 $\lambda_2=1,\mathbf{e}_2'=[1/\sqrt{2},1/\sqrt{2}]$。换算特征向量 $3\sqrt{5.99}\mathbf{e}_1$ 和 $\sqrt{5.99}\mathbf{e}_2$ 如图 3.8(c)所示。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在二维中，经常可以用眼睛看出均值中心椭圆的轴。然而，对于不能直观地检验的高维数据特征向量方法也有效。

注意：这里广义方差$|\mathbf{S}|$对所有三个模型给出同一值$|\mathbf{S}|=9$。但广义方差不包含有关图形定向的任何信息。当进行比较的两个或更多个样本（模型）有几乎相同的定向时，广义方差更容易解释。

注意到我们的三个散布图覆盖了大约相同的区域。由于所有的$|\mathbf{S}|=9$，因此概括变化性的椭圆

$$(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})\leqslant c^2$$

恰好有相同的区域[参见式(3-17)]。

正如例 3.8 所表明的，不能由$|\mathbf{S}|$发现不同的相关结构。对于 $p>2$ 的情况，甚至可能更加模糊。

因此，经常希望不仅仅用单一数$|\mathbf{S}|$作为 $\mathbf{S}$ 的一个概括量。从练习 2.12 可知，$|\mathbf{S}|$可以表示为 $\mathbf{S}$ 的特征值的乘积 $\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_p$。而且，基于$\mathbf{S}^{-1}$的均值中心椭球[参见式(3-16)]具有长度与 λ_i 的平方根成比例的轴。(参考 2.3 节)。因此，这些特征值提供了在 p 维空间中表现数据在所有方向上变化性的信息。所以，报告它们的个别值与它们的乘积一样是有用的。以后当我们讨论主成分时，将继续这个题目。

广义样本方差为零的情况

在某些情况中，广义样本方差将是零。在偏差矩阵

$$\begin{bmatrix}\mathbf{x}_1'-\bar{\mathbf{x}}'\\ \mathbf{x}_2'-\bar{\mathbf{x}}'\\ \vdots\\ \mathbf{x}_N'-\bar{x}'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_{11}-\bar{x}_1 & x_{12}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{1p}-\bar{x}_p\\ x_{21}-\bar{x}_1 & x_{22}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{2p}-\bar{x}_p\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n1}-\bar{x}_1 & x_{n2}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{np}-\bar{x}_p\end{bmatrix}$$

$$=\underset{(n\times p)}{\mathbf{X}}-\underset{(n\times 1)}{\mathbf{1}}\ \underset{(1\times p)}{\bar{\mathbf{x}}'} \tag{3-18}$$

至少有一列可表示为其他列的线性组合时，一个为零的广义方差表示极值退化。正如我们曾经从几何上说明过的，这是偏差向量之一——例如$\mathbf{d}_i'=[x_{1i}-\bar{x}_i,\cdots,x_{ni}-\bar{x}_i]$——位于由 $\mathbf{d}_1,\cdots,\mathbf{d}_{i-1},\mathbf{d}_{i+1},\cdots,\mathbf{d}_p$ 生成的(超)平面内。

结论 3.2 广义方差为零，当且仅当至少一个偏差向量位于由其他向量的所有线性组合形成的(超)平面内——也就是说，式(3-18)中的偏差矩阵的列线性相关。

证明 如果偏差矩阵$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')$的列是线性相关的，存在一个列的线性组合使得

$$\begin{aligned}\mathbf{0}&=a_1\cdot 列_1(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')+\cdots+a_p\cdot 列_p(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\\&=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}\quad 对某个\ \mathbf{a}\neq\mathbf{0}\end{aligned}$$

但是，正如可以证明$(n-1)\mathbf{S}=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')$和$(n-1)\mathbf{S}\mathbf{a}=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}=\mathbf{0}$一样，同样的 $\mathbf{a}$，在 $\mathbf{S}$ 的列中对应于一个线性相关性 $a_1\cdot 列_1(\mathbf{S})+\cdots+a_p\cdot 列_p(\mathbf{S})=\mathbf{S}\mathbf{a}=\mathbf{0}$。因此，由结论 2A.9，$|\mathbf{S}|=0$。

另一方面，如果$|\mathbf{S}|=0$，则存在 $\mathbf{S}$ 的列的某个线性组合 $\mathbf{S}\mathbf{a}$，使得 $\mathbf{S}\mathbf{a}=\mathbf{0}$，即 $\mathbf{0}=(n-1)\mathbf{S}\mathbf{a}=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}$。用 $\mathbf{a}'$左乘得

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$0 = \mathbf{a}'(\mathbf{X} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'(\mathbf{X} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a} = L^2_{(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}}$$

且因为长度等于零，必须有$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{a}=\mathbf{0}$。因此，$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')$的列是线性相关的。

例 3.9 （广义方差为零的一个实例）

对

$$\underset{(3\times 3)}{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 4 & 1 & 6 \\ 4 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

证明$|\mathbf{S}|=0$且确定退化。

这里$\bar{\mathbf{x}}'=[3,1,5]$，因此

$$\mathbf{X} - \mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}' = \begin{bmatrix} 1-3 & 2-1 & 5-5 \\ 4-3 & 1-1 & 6-5 \\ 4-3 & 0-1 & 4-5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

偏差（列）向量为$\mathbf{d}_1'=[-2,1,1]$，$\mathbf{d}_2'=[1,0,-1]$和$\mathbf{d}_3'=[0,1,-1]$。由于$\mathbf{d}_3=\mathbf{d}_1+2\mathbf{d}_2$，有列退化。（注意也有行退化。）这意味着偏差向量之一，例如$\mathbf{d}_3$，位于其他两个剩余向量生成的平面内。因此，三维体积是零。这情况如图 3.9 所示。并可以通过证明$|\mathbf{S}|=0$作代数检验。我们有

$$\underset{(3\times 3)}{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 3 & -\frac{3}{2} & 0 \\ -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

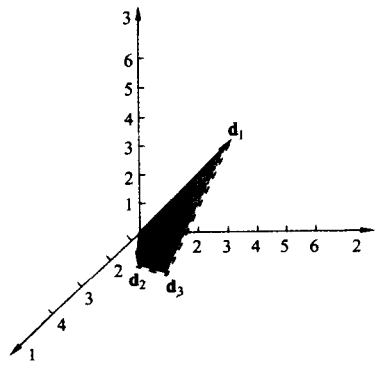


图 3.9　三维体积为零的一个实例（$|\mathbf{S}|=0$）

并从定义 2A.24，

$$|\mathbf{S}| = 3\begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix}(-1)^2 + \left(-\frac{3}{2}\right)\begin{vmatrix} -\frac{3}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 \end{vmatrix}(-1)^3 + 0\begin{vmatrix} -\frac{3}{2} & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{vmatrix}(-1)^4$$

$$= 3\times\left(1-\frac{1}{4}\right) + \frac{3}{2}\times\left(-\frac{3}{2}-0\right) + 0 = \frac{9}{4} - \frac{9}{4} = 0$$

当用电子仪器传送和接收大的数据集时，研究者有时会意外发现零广义方差的情况，使得 S 没有逆。我们曾遇到这样的情况，而且在未弄明情况以前会带来困难。例如，当数据是许多测验分数并且研究者已经把是其他变量之和的变量也包含进来时，一个奇异的协方差矩阵就出现了。比如说，代数分数与几何分数可以合起来给出一个总的数学分数，或随堂期中测验和期末测验分数加起来得到总成绩。再如，许多化学制品的总重量已包括了每个分量的重量。

由诸原始变量之和产生新变量，并把它们都包含在数据集中，这种常见作法会使我们失去了大量时间，因而必须强调这种后果。

例 3.10 （产生的新变量会导致零广义方差）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

考虑数据矩阵

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}1 & 9 & 10\\4 & 12 & 16\\2 & 10 & 12\\5 & 8 & 13\\3 & 11 & 14\end{bmatrix}$$

其中第三列是第一、二列之和。这些数据分别是钟点雇工和全时雇工每天成功的电话求职个数，这样，第三列是每天成功求职的总数。

证明广义方差$|\mathbf{S}|=0$，并确定数据的自然相关性。

我们求得每一项为$x_{ik}-\bar{x}_k$的被均值修正的数据矩阵，是

$$\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'=\begin{bmatrix}-2 & -1 & -3\\1 & 2 & 3\\-1 & 0 & -1\\2 & -2 & 0\\0 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

所得到的协方差矩阵是

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}2.5 & 0 & 2.5\\0 & 2.5 & 2.5\\2.5 & 2.5 & 5.0\end{bmatrix}$$

此时，我们证明广义方差为零即

$$|\mathbf{S}|=2.5^2\times 5+0+0-2.5^3-2.5^3-0=0$$

一般地，如果数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的三列满足线性约束 $a_1x_{j1}+a_2x_{j2}+a_3x_{j3}=c$ 对所有 j 为常数，则 $a_1\bar{x}_1+a_2\bar{x}_2+a_3\bar{x}_3=c$，因此，对所有 j，

有

$$a_1(x_{j1}-\bar{x}_1)+a_2(x_{j2}-\bar{x}_2)+a_3(x_{j3}-\bar{x}_3)=0$$

即

$$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}=\mathbf{0}$$

且被均值修正的数据矩阵的列是线性相关的。于是，把与第一、二个有线性关系的第三个变量包括进来，导致广义方差为零。只要当被均值修正的数据矩阵的列线性相关，

$$(n-1)\mathbf{Sa}=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{0}=\mathbf{0}$$

且 $\mathbf{Sa}=\mathbf{0}$ 确定了 $\mathbf{S}$ 的列的线性相关性。因此$|\mathbf{S}|=0$。

因为 $\mathbf{Sa}=\mathbf{0}=0\mathbf{a}$，可见，$\mathbf{a}$ 是 $\mathbf{S}$ 的一个与特征值零相对应的换算过的特征向量。这导致一个重要的诊断方法：如果我们没意识到任一多余变量是其余变量的线性组合，我们可通过计算 $\mathbf{S}$ 的特征向量并辨别出与零特征值相对应的那一个，找到它们。即如果我们没意识到此例中的相关性，由于

$$\mathbf{Sa}=\begin{bmatrix}2.5 & 0 & 2.5\\0 & 2.5 & 2.5\\2.5 & 2.5 & 5.0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\1\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}=0\begin{bmatrix}1\\1\\-1\end{bmatrix}$$

计算机计算会找到一个与特征向量 $\mathbf{a}'=[1,1,-1]$相应的特征值。

系数揭示了对所有 j 有

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$1(x_{j1}-\bar{x}_1)+1(x_{j2}-\bar{x}_2)+(-1)(x_{j3}-\bar{x}_3)=0$$

而且，对所有 n 个单位元前两个变量的和减第三个变量后是一常数 c。这里第三个变量实际上是前两个变量之和，所以原始数据矩阵的列满足 $c=0$ 时的一个线性约束。因为 $c=0$ 这一特殊情况，该约束确定了数据矩阵的列是线性相关这一事实。

我们对上述例子中讨论的广义方差为零的情况，可以总结出重要的等价条件。无论何时，只要非零向量 $\mathbf{a}$ 满足下列三个条件之一，它就满足所有三个条件：

(1) $\mathbf{Sa}=\mathbf{0}$	(2) $\mathbf{a}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})=\mathbf{0}$，对所有 j	(3) $\mathbf{a}'\mathbf{x}_j=c$，对所有 j $(c=\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}})$
$\mathbf{a}$是与特征值零对应的$\mathbf{S}$的一个换算过的特征向量。	利用$\mathbf{a}$，被均值修正的数据的线性组合为零。	利用$\mathbf{a}$，原始数据的线性组合是常数。

我们已证明，若满足条件(3)——即若一个变量的值可以用其余变量来表示——则由于 $\mathbf{S}$ 有一个零特征值，所以广义方差为零。另一方面，若条件(1)成立，则特征向量 $\mathbf{a}$ 对被均值修正的数据的线性相关性给出了系数。

在任何统计分析中，$|\mathbf{S}|=0$ 就数学计算而论，意味着某些变量的测量结果应从研究中除去。所得的对应数据矩阵将化为一个满秩的协方差矩阵，广义方差不为零。在退化的情况下哪些测量结果应除去，这一问题并不容易回答。在有选择时，我们应保留表示原因的(假定)变量，而不是那些次要特征变量的测量结果。在主分量的讨论中，将再次讲到这个问题。

此刻，我们暂时只描述 $\mathbf{S}$ 为满秩或降秩的一些简单条件。

结论 3.3 如果 $n\leqslant p$，即(样本大小)≤(变量的个数)，则对所有样本有 $|\mathbf{S}|=0$。

证明 我们必须证明 $\mathbf{S}$ 的秩小于或等于 p，然后应用结论 2A.9。

对任何固定样本，式(3-18)的 n 个行向量加起来是零向量。这个线性组合的存在，意味着 $\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'$ 的秩小于或等于 $n-1$，又因为 $n\leqslant p$，所以秩小于或等于 $p-1$。由于

$$(n-1)\underset{(p\times p)}{\mathbf{S}}=(\underset{(p\times n)}{\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'})'(\underset{(n\times p)}{\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'})$$

$\mathbf{S}$ 的第 k 列，列$_k(\mathbf{S})$，可写成$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'$的行的一个线性组合，具体地，

$$\begin{aligned}(n-1)\cdot 列_k(\mathbf{S})&=(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'\cdot 列_k(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\\&=(x_{1k}-\bar{x}_k)\cdot 行_1(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'+\cdots+(x_{nk}-\bar{x}_k)\cdot 行_n(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'\end{aligned}$$

由于$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'$的行向量加起来是零向量，我们可以把行$_1(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'$写为剩余行向量之和的负值。将它代入上述方程式的行$_1(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'$中，列$_k(\mathbf{S})$可表示为至多 $n-1$ 个线性独立的行向量行$_2(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'$，…，行$_n(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')'$的一个线性组合。因此，$\mathbf{S}$ 的秩小于或等于 $n-1$——如同在证明开始时所指明的——小于或等于 $p-1$，且 $\mathbf{S}$ 是奇异的。这就意味着，由结论 2A.9，$|\mathbf{S}|=0$。

结论 3.4 设行向量 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 是独立的随机向量 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 的实现，其中 $\mathbf{x}_j'$是数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的第 j 行。则

1. 若对于每个常数向量 $\mathbf{a}\neq\mathbf{0}$，线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_j$ 有正方差，则在 $p<n$ 时，$\mathbf{S}$ 以概率 1 满秩且 $|\mathbf{S}|>0$。

2. 若对所有 j，$\mathbf{a}'\mathbf{X}_j$ 以概率 1 为常数(例如，c)，则 $|\mathbf{S}|=0$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

证明 若以概率 1 有 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_j=\mathbf{a}_1X_{j1}+\mathbf{a}_2X_{j2}+\cdots+\mathbf{a}_pX_{jp}=c$，则对所有 j，$\mathbf{a}'\mathbf{x}_j=c$，且该线性组合的样本均值是 $c=\sum_{j=1}^{n}(a_1x_{j1}+a_2x_{j2}+\cdots+a_px_{jp})/n=a_1\bar{x}_1+a_2\bar{x}_2+\cdots+a_p\bar{x}_p=\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}$。那么，

$$(\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}')\mathbf{a}=a_1\begin{bmatrix}x_{11}-\bar{x}_1\\ \vdots\\ x_{n1}-\bar{x}_1\end{bmatrix}+\cdots+a_p\begin{bmatrix}x_{1p}-\bar{x}_p\\ \vdots\\ x_{np}-\bar{x}_p\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}_1'-\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}\\ \vdots\\ \mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}_n'-\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c-c\\ \vdots\\ c-c\end{bmatrix}=\mathbf{0}$$

表明线性相关；由结论 3.2 得出结论成立。

(1)的证明很困难，可以在[2]中找到。

由|R|确定广义方差及其几何解释

广义样本方差受到单个变量观测结果的变化性的过度影响。例如，假定某个 s_{ii} 或者大或者很小。从几何上看，对应的偏差向量 $\mathbf{d}_i=(\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1})$ 会很长或很短，因而在确定体积时很明显地是一个重要因素。因此，有时改变所有偏差向量的比例，使它们有相同的长度，是有用的。

改变剩余向量的比例，相当于对每一个原始的观测值 x_{jk} 用它的标准化值 $(x_{jk}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}}$ 替换。标准化变量的样本协方差矩阵就是 $\mathbf{R}$，即原始变量的样本相关阵(参考练习3.13)。我们定义

$$(\text{标准化变量的广义样本方差})=|\mathbf{R}| \tag{3-19}$$

由于所得到的向量

$$[(x_{1k}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}},(x_{2k}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}},\cdots,(x_{nk}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}}]=(\mathbf{y}_k-\bar{x}_k\mathbf{1})'/\sqrt{s_{kk}}$$

的长度都为 $\sqrt{n-1}$，当这些向量几乎正交时，标准化变量的广义样本方差较大，而当这些向量的两个或更多个几乎是同一方向时，广义样本方差较小。利用推导出式(3-7)的方法，容易求出 $(\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1})/\sqrt{s_{ii}}$ 和 $(\mathbf{y}_k-\bar{x}_k\mathbf{1})/\sqrt{s_{kk}}$ 之间夹角 θ_{ik} 的余弦是样本相关系数 r_{ik}。因此，我们可以做出结论：当所有 r_{ik} 接近零时，$|\mathbf{R}|$ 较大，而当 r_{ik} 中一个或多个是接近 1 或 -1 时，$|\mathbf{R}|$ 较小。

总而言之，有如下结论：设

$$\frac{(\mathbf{y}_i-\bar{x}_i\mathbf{1})}{\sqrt{s_{ii}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{x_{1i}-\bar{x}_i}{\sqrt{s_{ii}}}\\ \dfrac{x_{2i}-\bar{x}_i}{\sqrt{s_{ii}}}\\ \vdots\\ \dfrac{x_{ni}-\bar{x}_i}{\sqrt{s_{ii}}}\end{bmatrix},\quad i=1,2,\cdots,p$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

是标准化变量的偏差向量。这些偏差向量在 $\mathbf{d}_i$ 的方向上，而长度平方为 $n-1$。在 p 维空间中由偏差向量生成的体积，与广义样本方差有关。采用与推导式(3-15)同样的步骤，有：

$$\begin{pmatrix}\text{标准化变量的}\\ \text{广义样本方差}\end{pmatrix} = |\mathbf{R}| = (n-1)^{-p}(\text{体积})^2 \tag{3-20}$$

对于图 3.6 中的偏差向量，标准化变量的偏差向量所形成的体积，如图 3.10 所示。比较图 3.10 与图 3.6，显示出 $\mathbf{d}_2$ 向量(在 $\mathbf{x}_2$ 上较大的变化性)对体积平方 $|\mathbf{S}|$ 的影响比它对体积平方 $|\mathbf{R}|$ 的影响大得多。

量 $|\mathbf{S}|$ 和 $|\mathbf{R}|$ 通过关系

$$|\mathbf{S}| = (s_{11}s_{22}\cdots s_{pp})|\mathbf{R}| \tag{3-21}$$

相联系，因此

$$(n-1)^p|\mathbf{S}| = (n-1)^p(s_{11}s_{22}\cdots s_{pp})|\mathbf{R}| \tag{3-22}$$

[式(3-21)的证明作为练习 3.12，留给读者。]

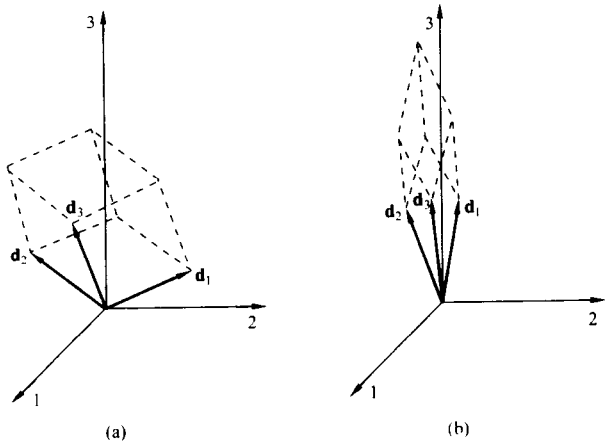


图 3.10　由标准化变量的等长度偏差向量生成的体积

用体积解释式(3-22)，从式(3-15)和式(3-20)可见，体积平方 $(n-1)^p|\mathbf{S}|$ 与体积平方 $(n-1)^p|\mathbf{R}|$ 成比例。比例常数是方差的乘积，而它同样也正比于 $\mathbf{d}_i$ 的长度 $(n-1)s_{ii}$ 的平方之积。式(3-21)从代数上说明了对 x_1 等量的标度的变化如何改变广义方差之间的关系。因为 $|\mathbf{R}|$ 是基于标准化测量值，它不会受到标度变化的影响。然而，每当乘积因子 s_{11} 变化时，$|\mathbf{S}|$ 的相对值将随之改变。

例 3.11　(说明 $|\mathbf{S}|$ 与 $|\mathbf{R}|$ 之间的关系)

让我们来说明当 $p=3$ 时，广义方差 $|\mathbf{S}|$ 与 $|\mathbf{R}|$ 在式(3-21)中的关系。设

$$\underset{(3\times 3)}{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix}4 & 3 & 1\\ 3 & 9 & 2\\ 1 & 2 & 1\end{bmatrix}$$

则 $s_{11}=4$，$s_{22}=9$ 和 $s_{33}=1$。而且，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}=\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{2}{3}\\ \frac{1}{2} & \frac{2}{3} & 1\end{bmatrix}$$

利用定义 2A.24，我们得到

$$\begin{aligned}|\mathbf{S}| &= 4\begin{vmatrix}9 & 2\\ 2 & 1\end{vmatrix}(-1)^2+3\begin{vmatrix}3 & 2\\ 1 & 1\end{vmatrix}(-1)^3+1\begin{vmatrix}3 & 9\\ 1 & 2\end{vmatrix}(-1)^4\\ &= 4\times(9-4)-3\times(3-2)+1\times(6-9)=14\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|\mathbf{R}| &= 1\begin{vmatrix}1 & \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3} & 1\end{vmatrix}(-1)^2+\frac{1}{2}\begin{vmatrix}\frac{1}{2} & \frac{2}{3}\\ \frac{1}{2} & 1\end{vmatrix}(-1)^3+\frac{1}{2}\begin{vmatrix}\frac{1}{2} & 1\\ \frac{1}{2} & \frac{2}{3}\end{vmatrix}(-1)^4\\ &= \left(1-\frac{4}{9}\right)-\frac{1}{2}\times\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{3}\right)+\frac{1}{2}\times\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2}\right)=\frac{7}{18}\end{aligned}$$

因此有

$$14=|\mathbf{S}|=s_{11}s_{22}s_{33}|\mathbf{R}|=4\times 9\times 1\times\frac{7}{18}=14\quad(\text{检验})$$

方差的其他推广

我们来叙述方差的另一推广形式来结束这一讨论。具体地，我们定义**总样本方差**作为样本方差-协方差矩阵 **S** 的对角线元素之和。这样

$$\text{总样本方差}=s_{11}+s_{22}+\cdots+s_{pp}\tag{3-23}$$

例 3.12 （计算总样本方差）

对于例 3.7 和例 3.9 中的方差-协方差矩阵 **S** 计算总样本方差。

从例 3.7，

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}252.04 & -68.43\\ -68.43 & 123.67\end{bmatrix}$$

且

总样本方差$=s_{11}+s_{22}=252.04+123.67=375.71$

从例 3.9，

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}3 & -\frac{3}{2} & 0\\ -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2}\\ 0 & \frac{1}{2} & 1\end{bmatrix}$$

且

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

总样本方差$=s_{11}+s_{22}+s_{33}=3+1+1=5$

从几何上看，总样本方差是 p 个偏差向量 $\mathbf{d}_1=(\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}),\cdots,\mathbf{d}_p=(\mathbf{y}_p-\bar{x}_p\mathbf{1})$ 的长度平方之和除以 $n-1$。总样本方差准则不涉及剩余向量的方向性(相关关系结构)。例如，它对图 3.6(a)和(b)中剩余向量的两个集合都给定相同的值。

3.5 作为矩阵运算的样本均值、协方差与相关系数

我们已提出了数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的几何解释，并导出了描述性统计量 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$。而且利用矩阵运算，把对 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的计算从代数上与 $\mathbf{X}$ 直接联系起来是可能的。简明地描述 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}$ 以及整个数据 $\mathbf{X}$ 之间关系的表达式，很容易在电子计算机上编程。我们有 $\bar{x}_i=(x_{1i}\cdot 1+x_{2i}\cdot 1+\cdots+x_{ni}\cdot 1)/n=\mathbf{y}_i'1/n$。因此

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}\bar{x}_1\\ \bar{x}_2\\ \vdots\\ \bar{x}_p\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{\mathbf{y}_{11}'}{n}\\ \frac{\mathbf{y}_{21}'}{n}\\ \vdots\\ \frac{\mathbf{y}_{p1}'}{n}\end{bmatrix}=\frac{1}{n}\begin{bmatrix}x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n}\\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{p1} & x_{p2} & \cdots & x_{pn}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\\ \vdots\\ 1\end{bmatrix}$$

或

$$\bar{\mathbf{x}}=\frac{1}{n}\mathbf{X}'\mathbf{1} \tag{3-24}$$

即 $\bar{\mathbf{x}}$ 是由转置数据矩阵右乘向量 $\mathbf{1}$ 后，再乘常数 $1/n$ 而得到的。

接下来，我们通过转置式(3-24)的两侧并用 $\mathbf{1}$ 左乘，建立一个 $n\times p$ **均值矩阵**，即，

$$\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'=\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_p\\ \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_p\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_p\end{bmatrix} \tag{3-25}$$

从 $\mathbf{X}$ 减去这一结果，产生 $n\times p$ **偏差(剩余)矩阵**

$$\mathbf{X}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{X}=\begin{bmatrix}x_{11}-\bar{x}_1 & x_{12}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{1p}-\bar{x}_p\\ x_{21}-\bar{x}_1 & x_{22}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{2p}-\bar{x}_p\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{n1}-\bar{x}_1 & x_{n2}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{np}-\bar{x}_p\end{bmatrix} \tag{3-26}$$

现在，代表平方和与交叉乘积之和的矩阵 $(n-1)\mathbf{S}$，恰好是式(3-26)矩阵的转置乘以它本身，或

$$(n-1)\mathbf{S}=\begin{bmatrix}x_{11}-\bar{x}_1 & x_{21}-\bar{x}_1 & \cdots & x_{n1}-\bar{x}_1\\ x_{12}-\bar{x}_2 & x_{22}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{n2}-\bar{x}_2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_{1p}-\bar{x}_p & x_{2p}-\bar{x}_p & \cdots & x_{np}-\bar{x}_p\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\times \begin{bmatrix} x_{11}-\bar{x}_1 & x_{12}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{1p}-\bar{x}_p \\ x_{21}-\bar{x}_1 & x_{22}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{2p}-\bar{x}_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1}-\bar{x}_1 & x_{n2}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{np}-\bar{x}_p \end{bmatrix}$$

$$=\left(\mathbf{X}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{X}\right)'\left(\mathbf{X}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{X}\right)=\mathbf{X}'\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\right)\mathbf{X}$$

由于

$$\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\right)'\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\right)=\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'+\frac{1}{n^2}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{1}\mathbf{1}'=\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'$$

概括起来，使 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 与数据集 $\mathbf{X}$ 相联系的矩阵表达式是

$$\bar{\mathbf{x}}=\frac{1}{n}\mathbf{X}'\mathbf{1}$$

$$\mathbf{S}=\frac{1}{n-1}\mathbf{X}'\left(\mathbf{I}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\right)\mathbf{X} \tag{3-27}$$

除了用 $1/n$ 代替作为第一因子的 $1/(n-1)$ 之外，对 $\mathbf{S}_n$ 的结论是同样的。

关系式(3-27)清楚地指出，对数据矩阵 $\mathbf{X}$ 的矩阵运算怎样推导出 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$。

一旦 $\mathbf{S}$ 被计算出来，它可以与样本相关矩阵 $\mathbf{R}$ 建立关系。所得到的表示式，也可以"颠倒"建立 $\mathbf{R}$ 与 $\mathbf{S}$ 的关系。我们首先定义 $p\times p$ **样本标准偏差矩阵** $\mathbf{D}^{1/2}$，并计算它的逆，$(\mathbf{D}^{1/2})^{-1}=\mathbf{D}^{-1/2}$。设

$$\underset{(p\times p)}{\mathbf{D}^{1/2}}=\begin{bmatrix} \sqrt{s_{11}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{s_{22}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{s_{pp}} \end{bmatrix} \tag{3-28}$$

则

$$\underset{(p\times p)}{\mathbf{D}^{-1/2}}=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{s_{11}}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{s_{22}}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\sqrt{s_{pp}}} \end{bmatrix}$$

由于

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{1p} & s_{2p} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix}$$

且

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}=\begin{bmatrix}\frac{s_{11}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{11}}} & \frac{s_{12}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}} & \cdots & \frac{s_{1p}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{pp}}}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{s_{1p}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{pp}}} & \frac{s_{2p}}{\sqrt{s_{22}}\sqrt{s_{pp}}} & \cdots & \frac{s_{pp}}{\sqrt{s_{pp}}\sqrt{s_{pp}}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & r_{12} & \cdots & r_{1p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ r_{1p} & r_{2p} & \cdots & 1\end{bmatrix}$$

我们有

$$\mathbf{R}=\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{S}\mathbf{D}^{-1/2} \tag{3-29}$$

在式(3-29)的两边用 $\mathbf{D}^{1/2}$ 右乘和左乘，并注意到 $\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{D}^{1/2}=\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{D}^{-1/2}=\mathbf{I}$，得出

$$\mathbf{S}=\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{R}\mathbf{D}^{1/2} \tag{3-30}$$

即 $\mathbf{R}$ 可以由 $\mathbf{S}$ 里信息得到，反之，$\mathbf{S}$ 可以由 $\mathbf{D}^{1/2}$ 和 $\mathbf{R}$ 得到。式(3-29)和式(3-30)是式(2-36)和式(2-37)的样本模拟量。

3.6 变量的线性组合的样本值

在 2.6 节中，我们已引入了 p 个变量的线性组合。在许多多元方法中，我们自然地会考虑一个形如

$$\mathbf{c}'\mathbf{X}=c_1X_1+c_2X_2+\cdots+c_pX_p$$

的线性组合，它在第 j 次试验中的观测值是

$$\mathbf{c}'\mathbf{x}_j=c_1x_{j1}+c_2x_{j2}+\cdots+c_px_{jp},\quad j=1,2,\cdots,n \tag{3-31}$$

从式(3-31)得到 n 个观测值，有

$$\begin{aligned}\text{样本均值}&=\frac{(\mathbf{c}'\mathbf{x}_1+\mathbf{c}'\mathbf{x}_2+\cdots+\mathbf{c}'\mathbf{x}_n)}{n}\\&=\mathbf{c}'(\mathbf{x}_1+\mathbf{x}_2+\cdots+\mathbf{x}_n)\frac{1}{n}=\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}}\end{aligned} \tag{3-32}$$

由于 $(\mathbf{c}'\mathbf{x}_j-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})^2=(\mathbf{c}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}))^2=\mathbf{c}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}$，我们有

$$\begin{aligned}\text{样本方差}&=\frac{(\mathbf{c}'\mathbf{x}_1-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})^2+(\mathbf{c}'\mathbf{x}_2-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})^2+\cdots+(\mathbf{c}'\mathbf{x}_n-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})^2}{n-1}\\&=\frac{\mathbf{c}'(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}+\mathbf{c}'(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}+\cdots+\mathbf{c}'(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}}{n-1}\\&=\mathbf{c}'\left[\frac{(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})'+(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})'+\cdots+(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})'}{n-1}\right]\mathbf{c}\end{aligned}$$

或

$$\mathbf{c}'\mathbf{X}\text{ 的样本方差}=\mathbf{c}'\mathbf{S}\mathbf{c} \tag{3-33}$$

式(3-32)和式(3-33)是式(2-43)的样本模拟量。它们把式(2-43)中的总体量 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 分别用样本量 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 代替。

现考虑另一个线性组合

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}=b_1X_1+b_2X_2+\cdots+b_pX_p$$

在第 j 次试验中观测值是

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{b}'\mathbf{x}_j = b_1x_{j1} + b_2x_{j2} + \cdots + b_px_{jp}, \quad j = 1,2,\cdots,n \tag{3-34}$$

由式(3-32)和式(3-33),所得的这些观测结果的样本均值和方差是

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 的样本均值} = \mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 的样本方差} = \mathbf{b}'\mathbf{S}\mathbf{b}$$

而且,由 $\mathbf{b}'\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的观测结果可计算出样本协方差

$$\begin{aligned}\text{样本协方差} &= \frac{(\mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}}_1-\mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{c}'\mathbf{x}_1-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})+(\mathbf{b}'\mathbf{x}_2-\mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{c}'\mathbf{x}_2-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})+\cdots+(\mathbf{b}'\mathbf{x}_n-\mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{c}'\mathbf{x}_n-\mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}})}{n-1}\\ &= \frac{\mathbf{b}'(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}+\mathbf{b}'(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}+\cdots+\mathbf{b}'(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{c}}{n-1}\\ &= \mathbf{b}'\left[\frac{(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})'+(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})'+\cdots+(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})'}{n-1}\right]\mathbf{c}\end{aligned}$$

或

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 和 }\mathbf{c}'\mathbf{X}\text{ 的样本协方差} = \mathbf{b}'\mathbf{S}\mathbf{c} \tag{3-35}$$

总之,我们有下列结论。

结论 3.5 线性组合

$$\mathbf{b}'\mathbf{X} = b_1X_1 + b_2X_2 + \cdots + b_pX_p$$

$$\mathbf{c}'\mathbf{X} = c_1X_1 + c_2X_2 + \cdots + c_pX_p$$

的样本均值、方差和协方差由下式与 $\bar{\mathbf{x}}$ 及 $\mathbf{S}$ 联系起来。

$$\begin{aligned}\mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 的样本均值} &= \mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}}\\ \mathbf{c}'\mathbf{X}\text{ 的样本均值} &= \mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}}\\ \mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 的样本方差} &= \mathbf{b}'\mathbf{S}\mathbf{b}\\ \mathbf{c}'\mathbf{X}\text{ 的样本方差} &= \mathbf{c}'\mathbf{S}\mathbf{c}\\ \mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 和 }\mathbf{c}'\mathbf{X}\text{ 的样本协方差} &= \mathbf{b}'\mathbf{S}\mathbf{c}\end{aligned} \tag{3-36}$$

例 3.13 (关于线性组合的均值和协方差)

我们考虑两个线性组合和它们的导出值,对于 $n=3$,利用例 3.9 中给出的观测值,为

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 4 & 1 & 6 \\ 4 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

考虑两个线性组合

$$\mathbf{b}'\mathbf{X} = [2 \quad 2 \quad -1]\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} = 2X_1 + 2X_2 - X_3$$

和

$$\mathbf{c}'\mathbf{X} = [1 \quad -1 \quad 3]\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{bmatrix} = X_1 - X_2 + 3X_3$$

先直接计算均值、方差与协方差的值,然后再用式(3-36)计算。

这些线性组合中的观测结果是通过用 X_1,X_2 和 X_3 的观测值替换而得到的。例如,$\mathbf{b}'\mathbf{X}$的 $n=3$ 个观测值是

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{b}'\mathbf{x}_1 = 2x_{11} + 2x_{12} - x_{13} = 2 \times 1 + 2 \times 2 - 5 = 1$$
$$\mathbf{b}'\mathbf{x}_2 = 2x_{21} + 2x_{22} - x_{23} = 2 \times 4 + 2 \times 1 - 6 = 4$$
$$\mathbf{b}'\mathbf{x}_3 = 2x_{31} + 2x_{32} - x_{33} = 2 \times 4 + 2 \times 0 - 4 = 4$$

这些值的样本均值和方差分别是

$$\text{样本均值} = \frac{1+4+4}{3} = 3$$
$$\text{样本方差} = \frac{(1-3)^2 + (4-3)^2 + (4-3)^2}{3-1} = 3$$

用同样的方法，$\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的 $n=3$ 个观测值是

$$\mathbf{c}'\mathbf{x}_1 = 1x_{11} - 1x_{12} + 3x_{13} = 1 \times 1 - 1 \times 2 + 3 \times 5 = 14$$
$$\mathbf{c}'\mathbf{x}_2 = 1 \times 4 - 1 \times 1 + 3 \times 6 = 21$$
$$\mathbf{c}'\mathbf{x}_3 = 1 \times 4 - 1 \times 0 + 3 \times 4 = 16$$

及

$$\text{样本均值} = \frac{14+21+16}{3} = 17$$
$$\text{样本方差} = \frac{(14-17)^2 + (21-17)^2 + (16-17)^2}{3-1} = 13$$

进而，由观测结果对$(\mathbf{b}'\mathbf{x}_1, \mathbf{c}'\mathbf{x}_1)$，$(\mathbf{b}'\mathbf{x}_2, \mathbf{c}'\mathbf{x}_2)$和$(\mathbf{b}'\mathbf{x}_3, \mathbf{c}'\mathbf{x}_3)$，计算得到的样本协方差是

$$\text{样本协方差} = \frac{(1-3)\times(14-17)+(4-3)\times(21-17)+(4-3)\times(16-17)}{3-1} = \frac{9}{2}$$

另一方面，我们利用由原始数据矩阵 $\mathbf{X}$ 推导出来的样本均值向量 $\bar{\mathbf{x}}$ 和样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$，计算线性组合的样本均值、方差与协方差。于是，若所关心的仅仅是描述性统计量，我们甚至不必去计算 $\mathbf{b}'\mathbf{x}_j$ 和 $\mathbf{c}'\mathbf{x}_j$ 的观测值。

从例 3.9，

$$\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix} \quad \text{和} \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 3 & -\frac{3}{2} & 0 \\ -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

因此，利用式(3-36)，对于导出的观测值我们求出两个样本均值为

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 的样本均值} = \mathbf{b}'\bar{\mathbf{x}} = [2 \quad 2 \quad -1]\begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix} = 3 \quad \text{（校验）}$$

$$\mathbf{c}'\mathbf{X}\text{ 的样本均值} = \mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}} = [1 \quad -1 \quad 3]\begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix} = 17 \quad \text{（校验）}$$

利用式(3-36)，还有

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}\text{ 的样本方差} = \mathbf{b}'\mathbf{S}\mathbf{b}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= [2 \quad 2 \quad -1]\begin{bmatrix} 3 & -\frac{3}{2} & 0 \\ -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$= [2 \quad 2 \quad -1]\begin{bmatrix} 3 \\ -\frac{3}{2} \\ 0 \end{bmatrix} = 3 \quad \text{（校验）}$$

$\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的样本方差 $= \mathbf{c}'\mathbf{S}\mathbf{c}$

$$= [1 \quad -1 \quad 3]\begin{bmatrix} 3 & -\frac{3}{2} & 0 \\ -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$= [1 \quad -1 \quad 3]\begin{bmatrix} \frac{9}{2} \\ -1 \\ \frac{5}{2} \end{bmatrix} = 13 \quad \text{（校验）}$$

$\mathbf{b}'\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的样本协方差 $= \mathbf{b}'\mathbf{S}\mathbf{c}$

$$= [2 \quad 2 \quad -1]\begin{bmatrix} 3 & -\frac{3}{2} & 0 \\ -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$= [2 \quad 2 \quad -1]\begin{bmatrix} \frac{9}{2} \\ -1 \\ \frac{5}{2} \end{bmatrix} = \frac{9}{2} \quad \text{（校验）}$$

正如已指出的，这些最后结果与用线性组合的观测结果直接计算对应的样本量的结果逐个校验无误。

结论 3.5 中的样本均值与协方差关系式适合于任意个数的线性组合。考虑 q 个线性组合

$$a_{i1}X_1 + a_{i2}X_2 + \cdots + a_{ip}X_p, \quad i = 1,2,\cdots,q \tag{3-37}$$

用矩阵记号可以表示为

$$\begin{bmatrix} a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \cdots + a_{1p}X_p \\ a_{21}X_1 + a_{22}X_2 + \cdots + a_{2p}X_p \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ a_{q1}X_1 + a_{q2}X_2 + \cdots + a_{qp}X_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{q1} & a_{q2} & \cdots & a_{qp} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_p \end{bmatrix} = \mathbf{AX} \tag{3-38}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

取 $\mathbf{A}$ 的第 i 行 $\mathbf{a}'_i$ 为 $\mathbf{b}'$，取 $\mathbf{A}$ 的第 k 行 $\mathbf{a}'_k$ 为 $\mathbf{c}'$，我们看到，式(3-36)意味着 $\mathbf{AX}$ 的第 i 行有样本均值 $\mathbf{a}'_i\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{AX}$ 的第 i 行和第 k 行有样本协方差 $\mathbf{a}'_i\mathbf{S}\mathbf{a}_k$。注意 $\mathbf{a}'_i\mathbf{S}\mathbf{a}_k$ 是 $\mathbf{ASA}'$ 的第 (i,k) 个元素。

结论 3.6 在式(3-38)中，q 个线性组合 $\mathbf{AX}$ 有样本均值向量 $\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}$ 和样本协方差矩阵 $\mathbf{ASA}'$。

练　　习

3.1 已知数据矩阵

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}9 & 1\\ 5 & 3\\ 1 & 2\end{bmatrix}$$

(a) 在 $p=2$ 维平面上作散布图，在图上定位样本均值。

(b) 在 $n=3$ 维空间中，画出数据表达式草图并画出偏差向量 $\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{y}_2-\bar{x}_2\mathbf{1}$。

(c) 作从原点出发的(b)中偏差向量草图，计算这些向量的长度和它们之间夹角的余弦。建立这些量与 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 的关系式。

3.2 已知数据矩阵

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}3 & 4\\ 6 & -2\\ 3 & 1\end{bmatrix}$$

(a) 在 $p=2$ 维平面上作散布图，在图上定位样本均值。

(b) 在 $n=3$ 维空间画出数据表示图，并画出偏差向量 $\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{y}_2-\bar{x}_2\mathbf{1}$。

(c) 作从原点出发的(b)中偏差向量草图，计算这些向量的长度和它们之间的夹角的余弦。建立这些量与 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{R}$ 的关系式。

3.3 利用例题 3.9 中数据矩阵的第一列将 $\mathbf{y}_1$ 分解为 $\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}$。

3.4 利用表 1.1 中变量 X_1 的 6 个观测值(以百万美元为单位)。

(a) 求在 $\mathbf{1}'=[1,1,1,1,1]$ 上的投影。

(b) 计算偏差向量 $\mathbf{y}_1-\bar{x}\mathbf{1}$，求出其长度与样本标准差的关系。

(c) 用 $\mathbf{y}_1$，$\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}$ 作三角形，并在图中区别每个分量的长度。

(d) 对表 1.1 中的变量 X_2 重复(a)～(c)部分。

(e) 作两个偏差向量 $\mathbf{y}_1-\bar{x}_1\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{y}_2-\bar{x}_2\mathbf{1}$ 的图形(按比例)，计算它们之间夹角的值。

3.5 对以下数据矩阵计算广义样本方差 $|\mathbf{S}|$：(a)练习 3.1 中数据矩阵 $\mathbf{X}$ 和(b)练习 3.2 中数据矩阵 $\mathbf{X}$。

3.6 设数据矩阵

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}-1 & 3 & -2\\ 2 & 4 & 2\\ 5 & 2 & 3\end{bmatrix}$$

(a) 计算偏差(剩余)矩阵 $\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'$。这是满秩矩阵吗？说明理由。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(b) 确定 $\mathbf{S}$ 并计算广义样本方差 $|\mathbf{S}|$，对 $|\mathbf{S}|$ 作几何解释。

(c) 利用(b)中结果，计算总样本方差[参看式(3-23)]。

3.7 对以下三个矩阵画实心椭球 $(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})\leqslant 1$ 的草图[参见式(3-16)]。

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}5 & 4\\ 4 & 5\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}5 & -4\\ -4 & 5\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}3 & 0\\ 0 & 3\end{bmatrix}$$

(注意这些矩阵有同样的广义方差 $|\mathbf{S}|$)

3.8 已知

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\quad 和\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1\end{bmatrix}$$

(a) 对每个 $\mathbf{S}$ 计算总样本方差并比较结果。

(b) 对每个 $\mathbf{S}$ 计算广义样本方差并比较结果。

找出若(a)和(b)之间存在差异，试评论。

3.9 下面的数据矩阵包含了考试的分数，其中 x_1=第一次考试的分数，x_2=第二次考试的分数和 x_3=两次考试的总分：

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}12 & 17 & 29\\ 18 & 20 & 38\\ 14 & 16 & 30\\ 20 & 18 & 38\\ 16 & 19 & 35\end{bmatrix}$$

(a) 求出被均值修正的数据矩阵，并证明它的列是线性相关的。确定一个向量 $\mathbf{a}'=[a_1,a_2,a_3]$，建立线性相关性。

(b) 求得样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$，并证明广义方差是零，再证明 $\mathbf{Sa}=\mathbf{0}$，所以 $\mathbf{a}$ 可以更改比例成为对应于零特征值的特征向量。

(c) 证明数据矩阵的第三列是前两列的和，即证明存在有 $a_1=1,a_2=1,a_3=-1$ 的线性相关关系。

3.10 当广义方差是零时，被均值修正的数据矩阵 $\mathbf{X}_c=\mathbf{X}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{x}}'$ 的列是线性相关的，而数据矩阵本身的列未必线性相关。已知数据

$$\begin{bmatrix}3 & 1 & 0\\ 6 & 4 & 6\\ 4 & 2 & 2\\ 7 & 0 & 3\\ 5 & 3 & 4\end{bmatrix}$$

(a) 求出被均值修正的数据矩阵，并证明列是线性相关的。确定一个向量 $\mathbf{a}'=[a_1,a_2,a_3]$，建立该相关性。

(b) 求出样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$，并证明广义方差是零。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(c) 证明数据矩阵的列在这种情况下不是线性无关的。

3.11　利用例 3.7 中所得到的样本协方差，证明式(3-29)和式(3-30)，即证明 $\mathbf{R}=\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{S}\mathbf{D}^{-1/2}$ 和 $\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{R}\mathbf{D}^{1/2}=\mathbf{S}$。

3.12　证明 $|\mathbf{S}|=(s_{11}s_{22}\cdots s_{pp})|\mathbf{R}|$。

提示：从式(3-30)，$\mathbf{S}=\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{R}\mathbf{D}^{1/2}$。取行列式得 $|\mathbf{S}|=|\mathbf{D}^{1/2}||\mathbf{R}||\mathbf{D}^{1/2}|$。(参考结论 2A.11)再检查 $|\mathbf{D}^{1/2}|$。

3.13　已知一数据矩阵 $\mathbf{X}$ 和所得到的样本相关矩阵 $\mathbf{R}$，考虑标准化观测值 $(x_{jk}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}}$，$k=1,2,\cdots,p$，$j=1,2,\cdots,n$。证明这些标准化量有样本协方差矩阵 $\mathbf{R}$。

3.14　设练习 3.1 中的数据矩阵 $\mathbf{X}$，对 $p=2$ 个变量 X_1 和 X_2 有 $n=3$ 个测量值。形成线性组合

$$\mathbf{c}'\mathbf{X}=\begin{bmatrix}-1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}X_1\\X_2\end{bmatrix}=-X_1+2X_2$$

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}=\begin{bmatrix}2 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}X_1\\X_2\end{bmatrix}=2X_1+3X_2$$

(a) 计算 $\mathbf{b}'\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的样本均值、方差与协方差，即计算 $\mathbf{b}'\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的观测值，然后利用样本均值、方差与协方差的公式。

(b) 利用式(3-36)计算 $\mathbf{b}'\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{c}'\mathbf{X}$ 的样本均值、方差与协方差。比较(a)和(b)中的结果。

3.15　利用数据矩阵

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}1 & 4 & 3\\6 & 2 & 6\\8 & 3 & 3\end{bmatrix}$$

及线性组合

$$\mathbf{b}'\mathbf{X}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}X_1\\X_2\\X_3\end{bmatrix}$$

和

$$\mathbf{c}'\mathbf{X}=\begin{bmatrix}1 & 2 & -3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}X_1\\X_2\\X_3\end{bmatrix}$$

重复练习 3.14。

3.16　设 $\mathbf{V}$ 是一个均值向量 $E(\mathbf{V})=\boldsymbol{\mu}_\mathbf{V}$ 和协方差矩阵 $E(\mathbf{V}-\boldsymbol{\mu}_\mathbf{V})(\mathbf{V}-\boldsymbol{\mu}_\mathbf{V})'=\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{V}$ 的随机向量。证明

$$E(\mathbf{V}\mathbf{V}')=\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{V}+\boldsymbol{\mu}_\mathbf{V}\boldsymbol{\mu}_\mathbf{V}'$$

3.17　证明如果 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}}$ 和 $\underset{(q\times 1)}{\mathbf{Z}}$ 是独立的，则 $\mathbf{X}$ 的每个分量与 $\mathbf{Z}$ 的每个分量也是独立的。

提示：由独立性

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$P[X_1 \leqslant x_1, X_2 \leqslant x_2, \cdots, X_p \leqslant x_p \text{ 和 } Z_1 \leqslant z_1, \cdots, Z_q \leqslant z_q]$$
$$= P[X_1 \leqslant x_1, X_2 \leqslant x_2, \cdots, X_p \leqslant x_p] \cdot P[Z_1 \leqslant z_1, \cdots, Z_q \leqslant z_q],$$

令 $x_2, \cdots, x_p$ 和 $z_2, \cdots, z_q$ 趋向无穷大，得到，对所有 x_i, z_1，

$$P[X_1 \leqslant x_1 \text{ 和 } Z_1 \leqslant z_1] = P[X_1 \leqslant x_1] \cdot P[Z_1 \leqslant z_1]$$

所以 X_1, Z_1 是独立的。对于其他对重复该过程。

参 考 文 献

1. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.
2. Eaton, M., and M. Perlman. "The Non-singularity of Generalized Sample Covariance Matrices." *Annals of Statistics*, 1(1973), 710～717.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第4章 多元正态分布

4.1 引言

把我们熟悉的钟形正态密度向多维推广，在多元分析中起着十分重要的作用。其实，在本书中所遇到的大多数方法都是基于数据从一个多元正态分布生成的假设。虽然实际的数据从来不会恰好是多元正态的，正态密度常常是“真实的”总体分布的一种有效的近似。

多元正态分布的一个优点来源于这个事实，即数学上的易处理和可以得到“良好的”结果。对于生成数据的其他分布，常常不是这样。当然，数学的吸引力对实际工作者本身用处不大。然而，正态分布在实践中是有用的，原因在于：第一，正态分布在有些情况中可充当一个真实的总体模型；第二，由于中心极限效应，不论母总体的类型，许多多元统计的抽样分布是近似正态的。

概括地说，现实世界许多问题自然地归入正态理论的范围内。正态分布的重要性在于它的双重作用，既可作为某些自然现象的总体模型，又可作为许多统计量近似的抽样分布。

4.2 多元正态密度及其性质

多元正态密度是一元正态密度向 $p\geqslant 2$ 维的推广。回想具有均值 μ 和方差 σ^2 的一元正态分布，有概率密度函数

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\mathrm{e}^{-[(x-\mu)/\sigma]^2/2}\qquad -\infty<x<\infty \tag{4-1}$$

该函数的图形可得出熟悉的钟形曲线，如图 4.1 所示。图中表示出，在均值的±1 标准差和±2 标准差的范围内曲线下的近似面积值。这些面积表示概率，于是，对于正态随机变量 X，

$$P(\mu-\sigma\leqslant X\leqslant\mu+\sigma)\doteq 0.68$$
$$P(\mu-2\sigma\leqslant X\leqslant\mu+2\sigma)\doteq 0.95$$

用 $N(\mu,\sigma^2)$ 表示具有均值 μ 和方差 σ^2 的正态密度函数是方便的。因此，$N(10,4)$ 表

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

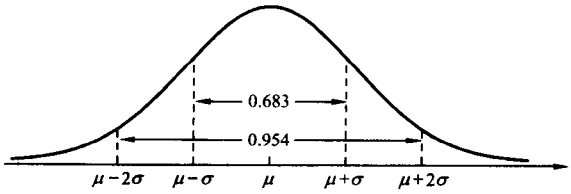


图 4.1　具有均值 μ 和方差 σ^2 的正态密度及曲线下选定的面积

明式(4-1)中的函数有 $\mu=10$ 和 $\sigma=2$。这个表示法将扩展到以后的多元情况。

在一元正态密度函数的指数中，以单位标准差测量从 x 到 μ 的距离的平方

$$\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2=(x-\mu)(\sigma^2)^{-1}(x-\mu) \tag{4-2}$$

这可以推广到根据若干个变量的观测结果的 $p\times1$ 向量 $\mathbf{x}$ 上，如

$$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) \tag{4-3}$$

$p\times1$ 向量 $\boldsymbol{\mu}$ 表示随机向量 $\mathbf{X}$ 的期望值，$p\times p$ 矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是 $\mathbf{X}$ 的方差-协方差矩阵。[参见式(2-30)和式(2-31)。]我们假定对称矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是正定的，所以表达式(4-3)是从 $\mathbf{x}$ 到 $\boldsymbol{\mu}$ 的广义距离的平方。

在式(4-1)的密度函数中，用式(4-3)的多元广义距离替换式(4-2)中一元距离，就得到多元正态密度。当这个替换完成时，一元标准化常数 $(2\pi)^{-1/2}(\sigma^2)^{-1/2}$ 必须变成一个更一般的常数，即使得对任何 p，多元密度函数表面下的体积为 1。这是必要的，因为在多元情况，概率是由 x_i 值的区间定义的区域上方表面下的体积表示。可以证明(参见[1])这个常数是 $(2\pi)^{-p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2}$，因此，对随机向量 $\mathbf{X}=[X_1,X_2,\cdots,X_p]'$，$p$ 维正态密度如下所示

$$f(\mathbf{x})=\frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}\mathrm{e}^{-(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})/2} \tag{4-4}$$

其中 $-\infty<x_i<\infty$，$i=1,2,\cdots,p$。类似于一元情况的正态密度，我们用 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 表示 p 维正态密度。

例 4.1　(二元正态密度)

根据参数 $\mu_1=E(X_1)$，$\mu_2=E(X_2)$，$\sigma_{11}=\mathrm{Var}(X_1)$，$\sigma_{22}=\mathrm{Var}(X_2)$ 和 $\rho_{12}=\sigma_{12}/(\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}})=\mathrm{Corr}(X_1,X_2)$，计算 $p=2$ 元正态密度。

利用结论 2A.8，我们求得协方差矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22}\end{bmatrix}$$

的逆是

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\frac{1}{\sigma_{11}\sigma_{22}-\sigma_{12}^2}\begin{bmatrix}\sigma_{22} & -\sigma_{12}\\ -\sigma_{12} & \sigma_{11}\end{bmatrix}$$

由 $\sigma_{12}=\rho_{12}\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}$，引入相关系数 ρ_{12}，我们得到 $\sigma_{11}\sigma_{22}-\sigma_{12}^2=\sigma_{11}\sigma_{22}(1-\rho_{12}^2)$，且距离平方变为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) \\
&= [x_1-\mu_1, x_2-\mu_2]\frac{1}{\sigma_{11}\sigma_{22}(1-\rho_{12}^2)}\begin{bmatrix} \sigma_{22} & -\rho_{12}\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}} \\ -\rho_{12}\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}} & \sigma_{11} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1-\mu_1 \\ x_2-\mu_2 \end{bmatrix} \\
&= \frac{\sigma_{22}(x_1-\mu_1)^2+\sigma_{11}(x_2-\mu_2)^2-2\rho_{12}\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sigma_{11}\sigma_{22}(1-\rho_{12}^2)} \\
&= \frac{1}{1-\rho_{12}^2}\left[\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}\right)^2+\left(\frac{x_2-\mu_2}{\sqrt{\sigma_{22}}}\right)^2-2\rho_{12}\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}\right)\left(\frac{x_2-\mu_2}{\sqrt{\sigma_{22}}}\right)\right] \qquad (4\text{-}5)
\end{aligned}
$$

最后表达式是依据标准化值$(x_1-\mu_1)/\sqrt{\sigma_{11}}$和$(x_2-\mu_2)/\sqrt{\sigma_{22}}$写出的。

接下来，由于$|\boldsymbol{\Sigma}|=\sigma_{11}\sigma_{22}-\sigma_{12}^2=\sigma_{11}\sigma_{22}(1-\rho_{12}^2)$，我们可以替换式(4-4)中的$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$和$|\boldsymbol{\Sigma}|$而得到包含各个参数$\mu_1,\mu_2,\sigma_{11},\sigma_{22}$和$\rho_{12}$的二元($p=2$)正态密度：

$$
\begin{aligned}
f(x_1,x_2) = &\frac{1}{2\pi\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}(1-\rho_{12}^2)}} \\
&\times \exp\left\{-\frac{1}{2(1-\rho_{12}^2)}\left[\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}\right)^2+\left(\frac{x_2-\mu_2}{\sqrt{\sigma_{22}}}\right)^2\right.\right. \\
&\left.\left.-2\rho_{12}\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sqrt{\sigma_{11}}}\right)\left(\frac{x_2-\mu_2}{\sqrt{\sigma_{22}}}\right)\right]\right\} \qquad (4\text{-}6)
\end{aligned}
$$

式(4-6)中的表达方法有点不便于使用，而式(4-4)中简洁通用的形式在许多方面提供信息更多。另一方面，式(4-6)中的表达方法对于讨论正态分布的某些性质是有用的。例如，若随机向量X_1和X_2不相关，则$\rho_{12}=0$，联合密度可以写作每个都如式(4-1)所示的两个一元正态密度之积，即$f(x_1,x_2)=f(x_1)f(x_2)$且X_1和X_2独立。[参见式(2-28)。]该结论在一般情况下是正确的。(参见结论 4.5。)

$\sigma_{11}=\sigma_{22}$的两个二元分布如图 4.2 所示。在图 4.2(a)中，X_1和X_2是独立的($\rho_{12}=0$)。在图 4.2(b)中，$\rho_{12}=0.75$。注意，(b)中由于相关性的存在，促使概率沿一直线集中。

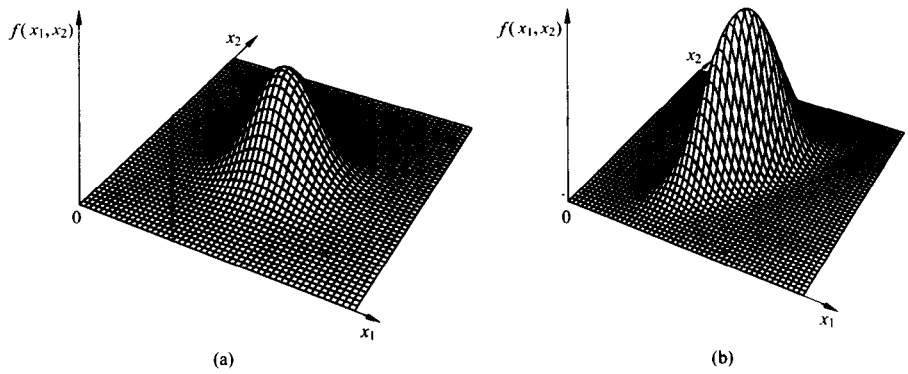


图 4.2　两个二元正态分布：

(a) $\sigma_{11}=\sigma_{22}$且$\rho_{12}=0$；(b) $\sigma_{11}=\sigma_{22}$且$\rho_{12}=0.75$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

考虑一个 p 维正态变量的密度，从式(4-4)很清楚，对于密度产生一个常高的 $\mathbf{x}$ 值的路线为椭球面。即在距离 $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$ 的平方为常数的表面上多元正态密度是常数。这些路线被称为**轮廓线**。

$$\textbf{常数概率密度轮廓线} = \{\text{满足}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) = c^2 \text{ 的所有 } \mathbf{x}\}$$
$$= \text{中心在 } \boldsymbol{\mu} \text{ 的椭球的表面}$$

常数密度的每个椭球面的轴在 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的特征向量的方向上，而且它们的长度是与 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的特征值的平方根的倒数成比例的。幸运的是，当确定轴时，我们可以避免计算 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$，因为这些椭球也是由 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值和特征向量所决定的。为了以后参考方便，我们正式地陈述相应内容。

结论 4.1 若 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是正定的，于是 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 存在，则

$$\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e} = \lambda\mathbf{e} \text{ 意味着 } \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{e} = \left(\frac{1}{\lambda}\right)\mathbf{e}$$

所以 $(\lambda,\mathbf{e})$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的一个特征值-特征向量对，对应于 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的特征值-特征向量对 $(1/\lambda,\mathbf{e})$。且 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 也是正定的。

证明 对于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 正定及一个特征向量 $\mathbf{e}\neq\mathbf{0}$，我们有 $0<\mathbf{e}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}=\mathbf{e}'(\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e})=\mathbf{e}'(\lambda\mathbf{e})=\lambda\mathbf{e}'\mathbf{e}=\lambda$。而且 $\mathbf{e}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e})=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\lambda\mathbf{e})$，或 $\mathbf{e}=\lambda\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{e}$，且用 $\lambda>0$ 除，得到 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{e}=(1/\lambda)\mathbf{e}$。于是，$(1/\lambda,\mathbf{e})$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的一对特征值-特征向量。又，对任何 $p\times 1$ 的 $\mathbf{x}$，因为每项 $\lambda_i^{-1}(\mathbf{x}'\mathbf{e}_i)^2$ 是非负的，由式(2-21)，有

$$\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} = \mathbf{x}'\left(\sum_{i=1}^{p}\left(\frac{1}{\lambda_i}\right)\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\right)\mathbf{x}$$
$$= \sum_{i=1}^{p}\left(\frac{1}{\lambda_i}\right)(\mathbf{x}'\mathbf{e}_i)^2 \geqslant 0$$

而且，对所有 i，仅当 $\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 时，$\mathbf{x}'\mathbf{e}_i=0$。因此，$\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$ 意味着 $\sum_{i=1}^{p}(1/\lambda_i)(\mathbf{x}'\mathbf{e}_i)^2>0$，由此得出 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 是正定的。

这些概念可总结如下：

> 对 p 维正态分布，常数密度的轮廓线是由 $\mathbf{x}$ 所确定的椭球面，满足
> $$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) = c^2 \tag{4-7}$$
> 这些椭球面的中心在 $\boldsymbol{\mu}$ 且轴为 $\pm c\sqrt{\lambda_i}\,\mathbf{e}_i$，其中 $\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i=\lambda_i\mathbf{e}_i$，对 $i=1,2,\cdots,p$。

对 $\sigma_{11}=\sigma_{22}$ 的二元正态分布，下例求出常数密度的轮廓线。

例 4.2 （二元正态密度的轮廓线）

对二元正态分布，当 $\sigma_{11}=\sigma_{22}$ 时，我们将得到常数概率密度轮廓线的轴。从式(4-7)，这些轴由 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值和特征向量给出。这里 $|\boldsymbol{\Sigma}-\lambda\mathbf{I}|=0$ 变为

$$0 = \begin{vmatrix} \sigma_{11}-\lambda & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{11}-\lambda \end{vmatrix} = (\sigma_{11}-\lambda)^2 - \sigma_{12}^2$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=(\lambda-\sigma_{11}-\sigma_{12})(\lambda-\sigma_{11}+\sigma_{12})$$

因此，特征值是 $\lambda_1=\sigma_{11}+\sigma_{12}$ 和 $\lambda_2=\sigma_{11}-\sigma_{12}$。特征向量 $\mathbf{e}_1$ 是由

$$\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\ \sigma_{12} & \sigma_{11}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e_1\\ e_2\end{bmatrix}=(\sigma_{11}+\sigma_{12})\begin{bmatrix}e_1\\ e_2\end{bmatrix}$$

或

$$\sigma_{11}e_1+\sigma_{12}e_2=(\sigma_{11}+\sigma_{12})e_1$$
$$\sigma_{12}e_1+\sigma_{11}e_2=(\sigma_{11}+\sigma_{12})e_2$$

确定的。这些等式意味着 $e_1=e_2$，在标准化之后，第一对特征值-特征向量为

$$\lambda_1=\sigma_{11}+\sigma_{12},\quad \mathbf{e}_1=\begin{bmatrix}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

同样地，$\lambda_2=\sigma_{11}-\sigma_{12}$ 得出特征向量 $\mathbf{e}_2'=[1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2}]$。

当协方差 σ_{12}（或相关系数 ρ_{12}）为正时，$\lambda_1=\sigma_{11}+\sigma_{12}$ 是最大特征值，它对应的特征向量 $\mathbf{e}_1'=[1/\sqrt{2},1/\sqrt{2}]$ 位于通过点 $\boldsymbol{\mu}'=[\mu_1,\mu_2]$ 的 45°线上。这对于协方差（相关系数）的任何正值都是正确的。由于常数密度椭圆的轴是由 $\pm c\sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1$ 和 $\pm c\sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2$（参见式(4-7)。）给出，且每个特征向量为单位长度，长轴将对应最大的特征值。对于正相关正态随机变量，则常数密度椭圆的长轴是在通过 $\boldsymbol{\mu}$ 点的 45°线上。（参见图 4.3。）当协方差（相关系数）是负值时，$\lambda_2=\sigma_{11}-\sigma_{12}$ 是最大的特征值，且常数密度椭圆的长轴在与过 $\boldsymbol{\mu}$ 点的 45°线相垂直的线上。（这些结论仅对 $\sigma_{11}=\sigma_{22}$ 是正确的。）

总之，对于 $\sigma_{11}=\sigma_{22}$ 的二元正态分布，常数密度椭圆的轴由下式确定

$$\pm c\sqrt{\sigma_{11}+\sigma_{12}}\begin{bmatrix}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\text{和}\pm c\sqrt{\sigma_{11}-\sigma_{12}}\begin{bmatrix}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\\ \dfrac{-1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

我们指出在结论 4.7 中，选择 $c^2=\chi_p^2(\alpha)$，这里 $\chi_p^2(\alpha)$ 是自由度为 p 的 χ^2 分布的上 (100α) 百分位数，将导致含概率 $(1-\alpha)100\%$ 的轮廓线。特别对 p 维正态分布，以下命题是正确的：

> 满足
>
> $$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\chi_p^2(\alpha)\tag{4-8}$$
>
> 的 $\mathbf{x}$ 值的实心椭球有概率 $1-\alpha$。

图 4.2 中二元正态的表面下包含概率 50%和 90%的常数密度轮廓线画于图 4.4 中。

当式(4-3)中的距离平方是零——即当 $\mathbf{x}=\boldsymbol{\mu}$ 时，式(4-4)中的 p 元正态密度有最大值。因此，$\boldsymbol{\mu}$ 是密度最大的点，或众数，也是 $\mathbf{X}$ 的期望值（或均值）。$\boldsymbol{\mu}$ 为多元正态分布的均值，这是由常数密度轮廓线所显示的对称性得出的：这些轮廓线中心在 $\boldsymbol{\mu}$ 或对称于 $\boldsymbol{\mu}$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

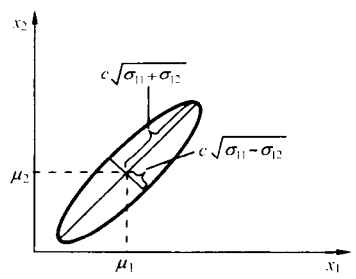


图 4.3　对于 $\sigma_{11}=\sigma_{22}$ 且 $\sigma_{12}>0$(或 $\rho_{12}>0$)的二元正态分布的常数密度轮廓线

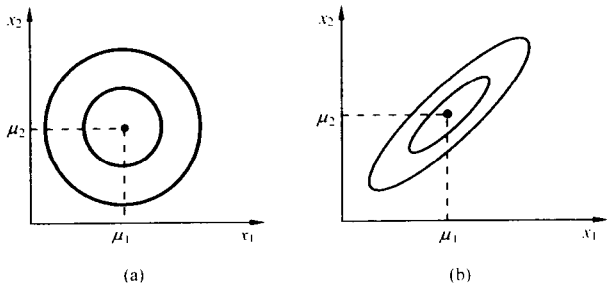


图 4.4　图 4.2 中的二元正态分布的 50%和 90%轮廓线

多元正态分布的可加性

在我们对于统计模型和方法的解释中，必需重复正态分布的一些性质。这些性质使我们有可能轻松熟练地使用正态分布，并且正如我们在 4.1 节所指出的，这些性质对正态分布的广泛运用起到了一部分作用。我们可以相当简洁地陈述主要性质，并很快从数学角度详细讨论。

对于具有多元正态分布的随机向量 **X**，下列性质是正确的：

1. **X** 的分量的线性组合是正态分布。
2. **X** 的分量的所有的子集有一个(多元)正态分布。
3. 零协方差意味着相应的分量是独立分布的。
4. 分量的条件分布是(多元)正态的。

这些性质在下面的结论中用数学方法重新表述。这些结论中的多数用例题来说明。所给出的证明有助于提高对矩阵运算的理解，并且促进对这些结论相继建立的方式的认识。

结论 4.2 可以用来作为正态分布的一个实用的定义。采用该定义，以后的性质几乎可以直接得到。结论 4.2 的部分的证明指出，一个正态密度的线性组合定义如何与式(4-4)中的多元密度相联系。

结论 4.2　若 **X** 的分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$，则多个变量的任何线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}=a_1X_1+a_2X_2+\cdots+a_pX_p$ 服从 $N(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}, \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a})$分布。而且，对每个 **a**，若 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$ 服从 $N(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu},\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a})$分布，则 **X** 必须是 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$。

证明　从式(2-43)得出 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$ 的期望值和方差。若 **X** 是多元正态的，证明 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$ 是正态分布会很困难。可以在[1]中找到证明。结论 4.2 的第二部分也在[1]中有证明。

例 4.3　(正态随机向量的分量的一个线性组合的分布)

考虑由选择 $\mathbf{a}'=[1,0,\cdots,0]$所确定的多元正态随机向量的线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$，由于

$$\mathbf{a}'\mathbf{X}=[1,0,\cdots,0]\begin{bmatrix}X_1\\X_2\\\vdots\\X_p\end{bmatrix}=X_1$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu} = [1,0,\cdots,0]\begin{bmatrix}\mu_1\\ \mu_2\\ \vdots\\ \mu_p\end{bmatrix} = \mu_1$$

我们有

$$\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a} = [1,0,\cdots,0]\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \sigma_{1p} & \sigma_{2p} & \cdots & \sigma_{pp}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix} = \sigma_{11}$$

且从结论 4.2 得出的 X_1 服从 $N(\mu_1,\sigma_{11})$分布。更一般地，$\mathbf{X}$ 的任何分量 X_i 的边缘分布是 $N(\mu_i,\ \sigma_{ii})$。

下面的结论考虑一个多元正态向量 $\mathbf{X}$ 的若干个线性组合。

结论 4.3 如果 $\mathbf{X}$ 服从 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$分布，$q$ 个线性组合

$$\underset{(q\times p)}{\mathbf{A}}\ \underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix}a_{11}X_1 + \cdots + a_{1p}X_p\\ a_{21}X_1 + \cdots + a_{2p}X_p\\ \vdots\\ a_{q1}X_1 + \cdots + a_{qp}X_p\end{bmatrix}$$

服从 $N_q(\mathbf{A}\boldsymbol{\mu},\ \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}')$分布。又，$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}} + \underset{(p\times 1)}{\mathbf{d}}$ 服从 $N_p(\boldsymbol{\mu}+\mathbf{d},\ \boldsymbol{\Sigma})$分布，其中 $\mathbf{d}$ 为常数向量。

证明 从式(2-45)得出 $\mathbf{AX}$ 的期望值 $E(\mathbf{AX})$和协方差矩阵。任何线性组合 $\mathbf{b}'(\mathbf{AX})$是 $\mathbf{X}$ 的形如 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$ 的一个线性组合，其中 $\mathbf{a}=\mathbf{A}'\mathbf{b}$。于是，从结论 4.2 直接得出关于 $\mathbf{AX}$ 的最后结论。

结论的第二部分通过考察 $\mathbf{a}'(\mathbf{X}+\mathbf{d})=\mathbf{a}'\mathbf{X}+(\mathbf{a}'\mathbf{d})$可以得到，其中 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$ 服从 $N(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu},\ \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a})$分布。从一元情况可知，加一个常数 $\mathbf{a}'\mathbf{d}$ 到随机变量 $\mathbf{a}'\mathbf{X}$ 上，方差不会变化，而均值变为 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}+\mathbf{a}'\mathbf{d}=\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}+\mathbf{d})$。由于 $\mathbf{a}$ 是任意的，$\mathbf{X}+\mathbf{d}$ 服从 $N_p(\boldsymbol{\mu}+\mathbf{d},\ \boldsymbol{\Sigma})$分布。

例 4.4 （正态随机向量的分量的两个线性组合的分布）

考虑 $\mathbf{X}$ 服从 $N_3(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\Sigma})$分布，求

$$\begin{bmatrix}X_1 - X_2\\ X_2 - X_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & -1 & 0\\ 0 & 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}X_1\\ X_2\\ X_3\end{bmatrix} = \mathbf{AX}$$

的分布。

由结论 4.3，$\mathbf{AX}$ 的分布为多元正态，其均值为

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix}1 & -1 & 0\\ 0 & 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mu_1\\ \mu_2\\ \mu_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mu_1 - \mu_2\\ \mu_2 - \mu_3\end{bmatrix}$$

协方差矩阵为

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}' = \begin{bmatrix}1 & -1 & 0\\ 0 & 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23}\\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ -1 & 1\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=\begin{bmatrix}\sigma_{11}-\sigma_{12} & \sigma_{12}-\sigma_{22} & \sigma_{13}-\sigma_{23}\\ \sigma_{12}-\sigma_{13} & \sigma_{22}-\sigma_{23} & \sigma_{23}-\sigma_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ -1 & 1\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\sigma_{11}-2\sigma_{12}+\sigma_{22} & \sigma_{12}+\sigma_{23}-\sigma_{22}-\sigma_{13}\\ \sigma_{12}+\sigma_{23}-\sigma_{22}-\sigma_{13} & \sigma_{22}-2\sigma_{23}+\sigma_{33}\end{bmatrix}$$

换而言之，通过直接计算两个随机变量 $Y_1=X_1-X_2$ 和 $Y_2=X_2-X_3$ 的均值和协方差可以验证均值向量 $\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵 $\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}'$。

我们提到过一个多元正态随机向量 $\mathbf{X}$ 的所有子集本身是正态的。在结论 4.4 中我们正式地描述这一性质。

结论 4.4 $\mathbf{X}$ 的所有子集是正态分布。若我们分别把 $\mathbf{X}$，其均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 划分为：

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}}=\begin{bmatrix}\underset{(q\times 1)}{\mathbf{X}_1}\\ \hdashline \underset{((p-q)\times 1)}{\mathbf{X}_2}\end{bmatrix}\qquad \underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\mu}}=\begin{bmatrix}\underset{(q\times 1)}{\boldsymbol{\mu}_1}\\ \hdashline \underset{((p-q)\times 1)}{\boldsymbol{\mu}_2}\end{bmatrix}$$

和

$$\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}}=\left[\begin{array}{c:c}\underset{(q\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}} & \underset{(q\times(p-q))}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}}\\ \hdashline \underset{((p-q)\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{21}} & \underset{((p-q)\times(p-q))}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}}\end{array}\right]$$

则 $\mathbf{X}_1$ 服从 $N_q(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma}_{11})$ 分布。

证明 令结论 4.3 中的 $\underset{(q\times p)}{\mathbf{A}}=\left[\underset{(q\times q)}{\mathbf{I}} \;\vdots\; \underset{(q\times(p-q))}{\mathbf{0}}\right]$，结论成立。至于把结论 4.4 应用于 $\mathbf{X}$ 的分量的任意子集，我们只需把感兴趣的子集重新标为 $\mathbf{X}_1$，并分别地选择相应的均值和协方差分量为 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$。

例 4.5 （正态随机向量的子集的分布）

若 $\mathbf{X}$ 服从 $N_5(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 分布，求 $\begin{bmatrix}X_2\\ X_4\end{bmatrix}$ 的分布。

设

$$\mathbf{X}_1=\begin{bmatrix}X_2\\ X_4\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\mu}_1=\begin{bmatrix}\mu_2\\ \mu_4\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\Sigma}_{11}=\begin{bmatrix}\sigma_{22} & \sigma_{24}\\ \sigma_{24} & \sigma_{44}\end{bmatrix}$$

且注意到，在该分配下，$\mathbf{X}$，$\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 分别可以重新排列和划分为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}X_2\\ X_4\\ \hdashline X_1\\ X_3\\ X_5\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\mu_2\\ \mu_4\\ \hdashline \mu_1\\ \mu_3\\ \mu_5\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\Sigma}=\left[\begin{array}{cc:ccc}\sigma_{22} & \sigma_{24} & \sigma_{12} & \sigma_{23} & \sigma_{25}\\ \sigma_{24} & \sigma_{44} & \sigma_{14} & \sigma_{34} & \sigma_{45}\\ \hdashline \sigma_{12} & \sigma_{14} & \sigma_{11} & \sigma_{13} & \sigma_{15}\\ \sigma_{23} & \sigma_{34} & \sigma_{13} & \sigma_{33} & \sigma_{35}\\ \sigma_{25} & \sigma_{45} & \sigma_{15} & \sigma_{35} & \sigma_{55}\end{array}\right]$$

或

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\underset{(2\times1)}{\mathbf{X}_1}\\ \cdots\\ \underset{(3\times1)}{\mathbf{X}_2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\underset{(2\times1)}{\boldsymbol{\mu}_1}\\ \cdots\\ \underset{(3\times1)}{\boldsymbol{\mu}_2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\underset{(2\times2)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}} & \underset{(2\times3)}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}}\\ \cdots & \cdots\\ \underset{(3\times2)}{\boldsymbol{\Sigma}_{21}} & \underset{(3\times3)}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}}\end{bmatrix}$$

于是，从结论 4.4，对于

$$\mathbf{X}_1=\begin{bmatrix}X_2\\ X_4\end{bmatrix}$$

我们有分布

$$N_2(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma}_{11})=N_2\left(\begin{bmatrix}\mu_2\\ \mu_4\end{bmatrix},\begin{bmatrix}\sigma_{22},\sigma_{24}\\ \sigma_{24},\sigma_{44}\end{bmatrix}\right)$$

从本例可清楚看出，对于任何子集正态分布可以通过仅仅从原来的 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 选择适当的均值和协方差来表示。形式上的重新标号和划分的过程是多余的。

现在我们能够指出，正态随机变量之间或正态随机变量的集合之间的零相关与统计独立是等价的。

结论 4.5 (a) 若 $\underset{(q_1\times1)}{\mathbf{X}_1}$ 和 $\underset{(q_2\times1)}{\mathbf{X}_2}$ 独立，则 $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2)=\mathbf{0}$，即一个 $q_1\times q_2$ 的零矩阵。

(b) 若 $\begin{bmatrix}\mathbf{X}_1\\ \cdots\\ \mathbf{X}_2\end{bmatrix}$ 为 $N_{q_1+q_2}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{\mu}_1\\ \cdots\\ \boldsymbol{\mu}_2\end{bmatrix},\left[\begin{array}{c:c}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\\ \hdashline \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{array}\right]\right)$，则当且仅当 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$ 时，$\mathbf{X}_1$ 和 $\mathbf{X}_2$ 独立。

(c) 若 $\mathbf{X}_1$ 和 $\mathbf{X}_2$ 独立且分别服从 $N_{q_1}(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma}_{11})$ 分布和 $N_{q_2}(\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma}_{22})$ 分布，则 $\begin{bmatrix}\mathbf{X}_1\\ \cdots\\ \mathbf{X}_2\end{bmatrix}$ 为多元正态分布

$$N_{q_1+q_2}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{\mu}_1\\ \cdots\\ \boldsymbol{\mu}_2\end{bmatrix},\left[\begin{array}{c:c}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \mathbf{0}\\ \hdashline \mathbf{0}' & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{array}\right]\right)$$

证明 (当 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$ 时，部分证明根据密度函数的因式分解，参见练习 4.14。)

例 4.6 (对于正态变量，零协方差与独立性等价)

设 $\underset{(3\times1)}{\mathbf{X}}$ 为 $N_3(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，其中

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}4 & 1 & 0\\ 1 & 3 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}$$

X_1 和 X_2 是否独立？(X_1,X_2) 和 X_3 是否独立？

因为 X_1 和 X_2 的协方差 $\sigma_{12}=1$，它们不是独立的。然而，$\mathbf{X}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 划分为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}X_1\\ X_2\\ \cdots\\ X_3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\Sigma}=\left[\begin{array}{cc:c}4 & 1 & 0\\ 1 & 3 & 0\\ \hdashline 0 & 0 & 2\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c:c}\underset{(2\times2)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}} & \underset{(2\times1)}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}}\\ \hdashline \underset{(1\times2)}{\boldsymbol{\Sigma}_{21}} & \underset{(1\times1)}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}}\end{array}\right]$$

我们看到 $\mathbf{X}_1=\begin{bmatrix}X_1\\ X_2\end{bmatrix}$ 和 X_3 的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$。因此，$(X_1,X_2)$ 和 X_3 根据结论 4.5 是独立的。这意味着 X_3 对 X_1 独立，对 X_2 也独立。

在二元正态分布的讨论中，我们已指出 $\rho_{12}=0$(零相关)意味着独立，这是因为联合密度函数[参见式(4-6)]可写成 X_1 和 X_2 的边缘(正态)密度之积。这种情况，只不过是结论

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

4.5 在 $q_1=q_2=1$ 时的一个特例，这一点可以直接证明。

结论 4.6 设 $\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}_1\\ \hline \mathbf{X}_2\end{bmatrix}$是服从 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$的分布，$\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\mu}_1\\ \boldsymbol{\mu}_2\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{\Sigma}=\left[\begin{array}{c|c}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\\ \hline \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{array}\right]$，且 $|\boldsymbol{\Sigma}_{22}|>0$。则给定 $\mathbf{X}_2=\mathbf{x}_2$ 时，$\mathbf{X}_1$ 的条件分布是正态的，并且

$$\text{均值}=\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$$

和

$$\text{协方差}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$$

注意协方差不取决于条件变量的值 $\mathbf{x}_2$。

证明 我们将给出一个间接的证明。(参见练习 4.13，其中直接利用密度。)取

$$\underset{(p\times p)}{\mathbf{A}}=\left[\begin{array}{c|c}\underset{(q\times q)}{\mathbf{I}} & \underset{q\times(p-q)}{-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}}\\ \hline \underset{(p-q)\times q}{\mathbf{0}} & \underset{(p-q)\times(p-q)}{\mathbf{I}}\end{array}\right]$$

于是

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})=\mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1\\ \hline \mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2)\\ \hline \mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2\end{bmatrix}$$

是联合正态的，协方差矩阵 $\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}'$ 由

$$\left[\begin{array}{c|c}\mathbf{I} & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\\ \hline \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{array}\right]\left[\begin{array}{c|c}\mathbf{I} & \mathbf{0}'\\ \hline (-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1})' & \mathbf{I}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c|c}\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{0}'\\ \hline \mathbf{0} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{array}\right]$$

给出。

由于 $\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$和 $\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2$ 有零协方差，它们独立。而且，量 $\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$服从 $N_q(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})$分布。给定 $\mathbf{X}_2=\mathbf{x}_2$，$\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$是一常数。因为 $\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$和 $\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2$ 独立，$\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$的条件分布与 $\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$的无条件分布是相同的。由于 $\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$服从 $N_q(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})$分布，因此，当 $\mathbf{X}_2$ 有特定值 $\mathbf{x}_2$ 时，随机向量 $\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$也是同一分布。等价地，给定 $\mathbf{X}_2=\mathbf{x}_2$ 时，$\mathbf{X}_1$ 服从 $N_q(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2),\ \boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})$分布。

例 4.7 (二元正态分布的条件密度)

对任何二元分布，在给定 $X_2=x_2$ 时，X_1 的条件密度被定义为

$$f(x_1|x_2)=\{\text{给定 } X_2=x_2,\ X_1 \text{ 的条件密度}\}=\frac{f(x_1,x_2)}{f(x_2)}$$

其中 $f(x_2)$是 X_2 的边缘分布。若 $f(x_1,x_2)$是二元正态密度，证明 $f(x_1|x_2)$为

$$N\left(\mu_1+\frac{\sigma_{12}}{\sigma_{22}}(x_2-\mu_2),\ \sigma_{11}-\frac{\sigma_{12}^2}{\sigma_{22}}\right)$$

这里 $\sigma_{11}-\sigma_{12}^2/\sigma_{22}=\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)$。在二元正态密度[参见式(4-6)]的指数中，除去相乘的常数 $-1/2(1-\rho_{12}^2)$以外，包含 $x_1-\mu_1$ 的两项变成

$$\frac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_{11}}-2\rho_{12}\frac{(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= \frac{1}{\sigma_{11}}\left[x_1 - \mu_1 - \rho_{12}\frac{\sqrt{\sigma_{11}}}{\sqrt{\sigma_{22}}}(x_2 - \mu_2)\right]^2 - \frac{\rho_{12}^2}{\sigma_{22}}(x_2 - \mu_2)^2$$

因为 $\rho_{12}=\sigma_{12}/\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}$ 或 $\rho_{12}\sqrt{\sigma_{11}}/\sqrt{\sigma_{22}}=\sigma_{12}/\sigma_{22}$，全指数是

$$\frac{-1}{2(1-\rho_{12}^2)}\left(\frac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_{11}} - 2\rho_{12}\frac{(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2)}{\sqrt{\sigma_{11}}\sqrt{\sigma_{22}}} + \frac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_{22}}\right)$$

$$= \frac{-1}{2\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)}\left[x_1 - \mu_1 - \rho_{12}\frac{\sqrt{\sigma_{11}}}{\sqrt{\sigma_{22}}}(x_2-\mu_2)\right]^2$$

$$- \frac{1}{2(1-\rho_{12}^2)}\left(\frac{1}{\sigma_{22}} - \frac{\rho_{12}^2}{\sigma_{22}}\right)(x_2-\mu_2)^2$$

$$= \frac{-1}{2\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)}\left(x_1 - \mu_1 - \frac{\sigma_{12}}{\sigma_{22}}(x_2-\mu_2)\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_{22}}$$

常数项 $2\pi\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22}(1-\rho_{12}^2)}$ 也分解为

$$\sqrt{2\pi}\sqrt{\sigma_{22}} \times \sqrt{2\pi}\sqrt{\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)}$$

用边缘密度

$$f(x_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\sigma_{22}}}e^{-(x_2-\mu_2)^2/2\sigma_{22}}$$

除 X_1 和 X_2 的联合密度，消去某些项得出条件密度

$$f(x_1|x_2) = \frac{f(x_1,x_2)}{f(x_2)}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)}}e^{-[x_1-\mu_1-(\sigma_{12}/\sigma_{22})(x_2-\mu_2)]^2/2\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)}, \quad -\infty < x_1 < \infty$$

于是，用我们通常的记号，在给定 $X_2=x_2$ 时 X_1 的条件分布是 $N(\mu_1+(\sigma_{12}/\sigma_{22})(x_2-\mu_2),\ \sigma_{11}(1-\rho_{12}^2))$。现在，$\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}=\sigma_{11}-\sigma_{12}^2/\sigma_{22}=\sigma_{11}(1-\rho_{12}^2)$，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}=\sigma_{12}/\sigma_{22}$，与通过间接方法得到的结论 4.6 一致。

对于多元正态情形，需要强调以下几点：

1. 所有的条件分布是(多元)正态的。
2. 条件均值的形式为

$$\begin{gathered}\mu_1 + \beta_{1,q+1}(x_{q+1}-\mu_{q+1}) + \cdots + \beta_{1,p}(x_p-\mu_p)\\ \vdots \\ \mu_q + \beta_{q,q+1}(x_{q+1}-\mu_{q+1}) + \cdots + \beta_{q,p}(x_p-\mu_p)\end{gathered} \tag{4-9}$$

其中 β 由下式定义

$$\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} = \begin{bmatrix}\beta_{1,q+1} & \beta_{1,q+2} & \cdots & \beta_{1,p}\\ \beta_{2,q+1} & \beta_{2,q+2} & \cdots & \beta_{2,p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \beta_{q,q+1} & \beta_{q,q+2} & \cdots & \beta_{q,p}\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

3. 条件协方差 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$，不取决于条件变量的值。

我们通过介绍多元正态随机向量的最后两个性质来结束本节。一个与常数密度的椭球面的概率含量有关，一个讨论另一种线性组合形式的分布。

对于从一元正态总体中抽取的样本，χ^2 分布确定样本方差 $s^2=s_{11}$ 的变化值。在多元情况中它也起基本的作用。

结论 4.7 设 $\mathbf{X}$ 分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$，且 $|\boldsymbol{\Sigma}|>0$，则

(a) $(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$ 的分布为 χ_p^2，其中 χ_p^2 表示自由度为 p 的卡方分布。

(b) $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 分布，给定属于椭球 $\{\mathbf{x}:(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\}\leqslant\chi_p^2(\alpha)\}$ 的概率为 $1-\alpha$，其中，$\chi_p^2(\alpha)$ 表示 χ_p^2 分布的上 (100α) 百分位数。

证明 已知 χ_p^2 定义为 $Z_1^2+Z_2^2+\cdots+Z_p^2$ 这一总和的分布，其中 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_p$ 是独立的 $N(0,1)$ 随机变量。接下来，由谱分解[参见式(2-16)和式(2-21)利用 $\mathbf{A}=\boldsymbol{\Sigma}$，并参见结论 4.1]，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\sum_{i=1}^{p}\frac{1}{\lambda_i}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'$，其中 $\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i=\lambda_i\mathbf{e}_i$，因此，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{e}_i=(1/\lambda_i)\mathbf{e}_i$。从而，$(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$ $=\sum_{i=1}^{p}(1/\lambda_i)(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})=\sum_{i=1}^{p}(1/\lambda_i)(\mathbf{e}_i'(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}))^2=\sum_{i=1}^{p}[(1/\sqrt{\lambda_i})\mathbf{e}_i'(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})]^2$ $=\sum_{i=1}^{p}Z_i^2$。现在，$\mathbf{Z}=\mathbf{A}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$，其中

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{Z}}=\begin{bmatrix}Z_1\\Z_2\\\vdots\\Z_p\end{bmatrix},\qquad \underset{(p\times p)}{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\mathbf{e}_1'\\\frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}\mathbf{e}_2'\\\vdots\\\frac{1}{\sqrt{\lambda_p}}\mathbf{e}_p'\end{bmatrix}$$

并且 $\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}$ 的分布为 $N_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$。所以，由结论 4.3，$\mathbf{Z}=\mathbf{A}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$ 的分布为 $N_p(\mathbf{0}, \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}')$，其中

$$\underset{(p\times p)}{\mathbf{A}}\ \underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}}\ \underset{(p\times p)}{\mathbf{A}'}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\mathbf{e}_1'\\\frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}\mathbf{e}_2'\\\vdots\\\frac{1}{\sqrt{\lambda_p}}\mathbf{e}_p'\end{bmatrix}\left[\sum_{i=1}^{p}\lambda_i\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\mathbf{e}_1\ \vdots\ \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}\mathbf{e}_2\ \vdots\ \cdots\ \vdots\ \frac{1}{\sqrt{\lambda_p}}\mathbf{e}_p\right]$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=\begin{bmatrix}\sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1'\\ \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2'\\ \vdots\\ \sqrt{\lambda_p}\mathbf{e}_p'\end{bmatrix}\left[\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\mathbf{e}_1 \;\vdots\; \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}\mathbf{e}_2 \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \frac{1}{\sqrt{\lambda_p}}\mathbf{e}_p\right]=\mathbf{I}$$

由结论 4.5，$Z_1,Z_2,\cdots,Z_p$ 是独立标准正态变量，并得出结论$(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$为 χ_p^2 分布。

对于(b)，注意 $P[(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})\leqslant c^2]$是由 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$密度所给定的属于椭球$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\leqslant c^2$ 下的概率。而由(a)，$P[(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\chi_p^2(\alpha)]=1-\alpha$，(b)成立。

评注 （统计距离的解释）

结论 4.7 给出了统计距离平方的一个解释。当 $\mathbf{X}$ 分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，

$$(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$$

是从 $\mathbf{X}$ 到总体均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 的统计距离平方。如果一个分量有比其他分量大得多的方差，它将对距离平方影响较小。再者，两个高度相关的随机变量比两个几乎不相关的变量影响更小。本质上，利用协方差矩阵的逆，(1) 使所有的变量标准化，(2) 消除相关的影响。从结论 4.7 的证明，

$$(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})=Z_1^2+Z_2^2+\cdots+Z_p^2$$

依据 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$(参见式(2-22))，$\mathbf{Z}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$有 $N_p(\mathbf{0},\mathbf{I}_p)$分布，且

$$\begin{aligned}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})&=(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})\\&=\mathbf{Z}'\mathbf{Z}=Z_1^2+Z_2^2+\cdots+Z_p^2\end{aligned}$$

统计距离平方似乎可以计算如下，首先，把随机向量 $\mathbf{X}$ 变换为 p 个独立的标准正态随机变量，然后应用通常的距离平方，即变量的平方和。

下面，考虑向量随机变量的线性组合

$$c_1\mathbf{X}_1+c_2\mathbf{X}_2+\cdots+c_n\mathbf{X}_n=[\mathbf{X}_1 \;\vdots\; \underset{(p\times n)}{\mathbf{X}_2} \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \mathbf{X}_n]\underset{(n\times 1)}{\mathbf{c}} \tag{4-10}$$

这个线性组合不同于以前考虑过的线性组合，原因在于：它定义的一个 $p\times 1$ 向量随机变量是向量的一个线性组合。以前，我们讨论过单一的随机变量能写成其他一元随机变量的线性组合。

结论 4.8 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是相互独立的，且 $\mathbf{X}_j$ 的分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu}_j,\boldsymbol{\Sigma})$。(注意，每个 $\mathbf{X}_j$ 有相同的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$。)则

$$\mathbf{V}_1=c_1\mathbf{X}_1+c_2\mathbf{X}_2+\cdots+c_n\mathbf{X}_n$$

服从 $N_p\left(\sum_{j=1}^n c_j\boldsymbol{\mu}_j,\left(\sum_{j=1}^n c_j^2\right)\boldsymbol{\Sigma}\right)$ 分布，而且 $\mathbf{V}_1$ 和 $\mathbf{V}_2=b_1\mathbf{X}_1+b_2\mathbf{X}_2+\cdots+b_n\mathbf{X}_n$ 是协方差矩阵为

$$\begin{bmatrix}\left(\sum_{j=1}^n c_j^2\right)\boldsymbol{\Sigma} & (\mathbf{b}'\mathbf{c})\boldsymbol{\Sigma}\\ (\mathbf{b}'\mathbf{c})\boldsymbol{\Sigma} & \left(\sum_{j=1}^n b_j^2\right)\boldsymbol{\Sigma}\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的联合多元正态。所以，若 $\mathbf{b}'\mathbf{c} = \sum_{j=1}^{n} c_j b_j = 0$，则 $\mathbf{V}_1$ 与 $\mathbf{V}_2$ 独立。

证明 由结论 4.5(c)，np 个分量向量

$$[X_{11}, \cdots, X_{1p}, X_{12}, \cdots, X_{2p}, \cdots, X_{np}] = [\mathbf{X}_1', \mathbf{X}_2', \cdots, \mathbf{X}_n'] = \underset{(1\times np)}{\mathbf{X}'}$$

为多元正态。特别地，$\underset{(np\times 1)}{\mathbf{X}}$ 服从 $N_{np}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}})$ 分布，其中

$$\underset{(np\times 1)}{\boldsymbol{\mu}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\mu}_n \end{bmatrix}, \qquad \underset{(np\times np)}{\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\Sigma} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}$$

选择

$$\underset{(2p\times np)}{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} c_1\mathbf{I} & c_2\mathbf{I} & \cdots & c_n\mathbf{I} \\ b_1\mathbf{I} & b_2\mathbf{I} & \cdots & b_n\mathbf{I} \end{bmatrix}$$

其中 $\mathbf{I}$ 是 $p\times p$ 单位矩阵，得到

$$\mathbf{AX} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n} c_j\mathbf{X}_j \\ \sum_{j=1}^{n} b_j\mathbf{X}_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{bmatrix}$$

且由结论 4.3，$\mathbf{AX}$ 是正态的 $N_{2p}(\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}\mathbf{A}')$。直接作矩阵分块乘法，得到 $\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}\mathbf{A}'$ 的第一个分块对角线项

$$[c_1\boldsymbol{\Sigma}, c_2\boldsymbol{\Sigma}, \cdots, c_n\boldsymbol{\Sigma}] \times [c_1\mathbf{I}, c_2\mathbf{I}, \cdots, c_n\mathbf{I}]' = \left(\sum_{j=1}^{n} c_j^2\right)\boldsymbol{\Sigma}$$

非对角线的项是

$$[c_1\boldsymbol{\Sigma}, c_2\boldsymbol{\Sigma}, \cdots, c_n\boldsymbol{\Sigma}][b_1\mathbf{I}, b_2\mathbf{I}, \cdots, b_n\mathbf{I}]' = \left(\sum_{j=1}^{n} c_j b_j\right)\boldsymbol{\Sigma}$$

该项是关于 $\mathbf{V}_1$，$\mathbf{V}_2$ 的协方差矩阵。因此，当 $\sum_{j=1}^{n} c_j b_j = \mathbf{b}'\mathbf{c} = 0$，于是 $\left(\sum_{j=1}^{n} c_j b_j\right)\boldsymbol{\Sigma} = \underset{(p\times p)}{\mathbf{0}}$，由结论 4.5(b)，$\mathbf{V}_1$ 和 $\mathbf{V}_2$ 是独立的。

对于式(4-10)中的类型的和，零相关性等价于要求系数向量 $\mathbf{b}$ 和 $\mathbf{c}$ 是正交的。

例 4.8 （随机向量的线性组合）

设 $\mathbf{X}_1$，$\mathbf{X}_2$，$\mathbf{X}_3$ 和 $\mathbf{X}_4$ 是独立同分布 3×1 随机向量，有

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

我们首先考虑 $\mathbf{X}_1$ 的三个分量的一个线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_1$。这是一个均值为

$$\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu} = 3a_1 - a_2 + a_3$$

方差为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a} = 3a_1^2 + a_2^2 + 2a_3^2 - 2a_1a_2 + 2a_1a_3$$

的随机变量。即一个随机向量分量的线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_1$，是由每个变量乘以常数后相加所组成的单一随机变量。这与随机向量的线性组合很不同，例如，

$$c_1\mathbf{X}_1 + c_2\mathbf{X}_2 + c_3\mathbf{X}_3 + c_4\mathbf{X}_4$$

它本身是一个随机向量。这里，和中的每一项是一个常数乘以一个随机向量。

现在考虑随机向量的两个线性组合

$$\frac{1}{2}\mathbf{X}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{X}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{X}_3 + \frac{1}{2}\mathbf{X}_4$$

和

$$\mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_2 + \mathbf{X}_3 - 3\mathbf{X}_4$$

对这些向量的每个线性组合求均值向量与协方差矩阵，并求它们两者之间的协方差。

由结论 4.8，且 $c_1=c_2=c_3=c_4=1/2$，第一个线性组合均值向量为

$$(c_1 + c_2 + c_3 + c_4)\boldsymbol{\mu} = 2\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 6 \\ -2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

协方差矩阵为

$$(c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2)\boldsymbol{\Sigma} = 1 \times \boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix} 3 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

对于随机向量的第二个线性组合，应用结论 4.8，且 $b_1=b_2=b_3=1$ 及 $b_4=-3$，得到均值向量

$$(b_1 + b_2 + b_3 + b_4)\boldsymbol{\mu} = 0\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

和协方差矩阵

$$(b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 + b_4^2)\boldsymbol{\Sigma} = 12 \times \boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix} 36 & -12 & 12 \\ -12 & 12 & 0 \\ 12 & 0 & 24 \end{bmatrix}$$

最后，对随机向量的两个线性组合，协方差矩阵为

$$(c_1b_1 + c_2b_2 + c_3b_3 + c_4b_4)\boldsymbol{\Sigma} = 0\boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

随机向量的第一个线性组合的每个分量与随机向量的第二个线性组合的每个分量有零协方差。

而且，若每个 $\mathbf{X}$ 有三元正态分布，则两个线性组合有一联合六元正态分布，且向量的两个线性组合是独立的。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

4.3 从多元正态分布抽样与极大似然估计

在第 3 章中，我们简短地讨论了抽样和简单随机样本。本节我们将涉及来自多元正态总体的样本——特别是 $\bar{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的抽样分布。

多元正态似然

假定 $p\times 1$ 向量 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_n$ 是一个来自均值向量为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的多元正态总体的随机样本。由于 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_n$ 是相互独立的，且每个为 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 分布，所有观测结果的联合密度函数是边缘正态密度之积：

$$\left\{\begin{matrix}\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_n \\ \text{的联合密度}\end{matrix}\right\} = \prod_{j=1}^{n}\left\{\frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}e^{-(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})/2}\right\}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{np/2}}\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}e^{-\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})/2} \tag{4-11}$$

当可得到观测结果的数值时，它们可以代入式(4-11)中的 $\mathbf{x}_j$。对于观测结果 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$ 固定的集合，所得表达式作为 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的一个函数，称为**似然函数**。

许多好的统计方法使用能“最好地”解释观测数据的总体参数值。“**最好**”的一个含意是，选择使得在该组观测值下所求出的联合密度值最大的参数值。这个方法称为**极大似然估计法**，使联合密度最大化的参数值称为**极大似然估计值**。

此处，我们将考虑对多元正态总体参数 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计。为此，我们取固定的观测值 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$，并考虑对这些值计算式(4-11)中的联合密度。其结果就是似然函数。为了简化问题，我们用另一形式重写似然函数。我们需要追加关于方阵的迹的某些性质。(一个矩阵的迹是它的对角线元素之和，迹的性质在定义 2A.28 和结论 2A.12 中已讨论。)

结论 4.9 设 $\mathbf{A}$ 为 $k\times k$ 对称矩阵且 $\mathbf{x}$ 为 $k\times 1$ 向量，则

(a) $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathrm{tr}(\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}) = \mathrm{tr}(\mathbf{A}\mathbf{x}\mathbf{x}')$。

(b) $\mathrm{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{k}\lambda_i$，其中 λ_i 是 $\mathbf{A}$ 的特征值。

证明 对于(a)，我们注意到 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x}$ 是一个标量，所以 $\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathrm{tr}(\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x})$。在结论 2A.12 中曾指出，对任何两个分别为 $m\times k$ 和 $k\times m$ 的矩阵 $\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{C}$，$\mathrm{tr}(\mathbf{BC}) = \mathrm{tr}(\mathbf{CB})$。这是因为 $\mathbf{BC}$ 有 $\sum_{j=1}^{k}b_{ij}c_{ji}$ 作为它的对角线上第 i 个元素，所以 $\mathrm{tr}(\mathbf{BC}) = \sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{k}b_{ij}c_{ji}\right)$。类似地，$\mathbf{CB}$ 的对角线上第 j 个元素是 $\sum_{i=1}^{m}c_{ji}b_{ij}$，所以 $\mathrm{tr}(\mathbf{CB}) = \sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{m}c_{ji}b_{ij}\right) = \sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{k}b_{ij}c_{ji}\right) = \mathrm{tr}(\mathbf{BC})$。设 $\mathbf{x}'$ 为 $m=1$ 的矩阵 $\mathbf{B}$，并设 $\mathbf{A}\mathbf{x}$ 起矩阵 $\mathbf{C}$ 的作用。于是，$\mathrm{tr}(\mathbf{x}'(\mathbf{A}\mathbf{x})) = \mathrm{tr}((\mathbf{A}\mathbf{x})\mathbf{x}')$，从而得到结论。

(b)利用式(2-20)的谱分解来证明，有 $\mathbf{A} = \mathbf{P}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}$，其中 $\mathbf{P}\mathbf{P}' = \mathbf{I}$，$\boldsymbol{\Lambda}$ 是元素为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots,$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

λ_k 的对角阵。因此，$\mathrm{tr}(\mathbf{A})=\mathrm{tr}(\mathbf{P}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}\mathbf{P}')=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda})=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_k$。

现在，在式(4-11)中，联合密度的指数可以简化。由结论 4.9(a)，

$$\begin{aligned}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}) &= \mathrm{tr}[(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})] \\ &= \mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'] \end{aligned} \tag{4-12}$$

接下来

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}) &= \sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})] \\ &= \sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'] \\ &= \mathrm{tr}\Big[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\Big(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'\Big)\Big] \end{aligned} \tag{4-13}$$

因为依照结论 2A.12(b)，矩阵和的迹等于矩阵迹的和。我们可以在 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})'$ 中的每一项$(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu})$里加上和减去 $\bar{\mathbf{x}}=(1/n)\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j$，得

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}+\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}+\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})' \\ &=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+\sum_{j=1}^{n}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})' \\ &=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})' \end{aligned} \tag{4-14}$$

这是因为交叉乘积项 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'$ 与 $\sum_{j=1}^{n}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$ 是两个零矩阵。(参见练习 4.15。)因此，利用式(4-13)和式(4-14)，我们把多元正态总体的一个随机样本的联合密度写为

$$\begin{aligned}&\{\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n\text{ 的联合密度}\}=(2\pi)^{-np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-n/2} \\ &\quad\times\exp\Big\{-\mathrm{tr}\Big[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\Big(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\Big)\Big]\Big/2\Big\} \end{aligned} \tag{4-15}$$

把观测值 $\mathbf{x}_1$，$\mathbf{x}_2$，…，$\mathbf{x}_n$ 代入到联合密度得出似然函数。用 $L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$表示这个函数，以强调它是(未知)总体参数 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的函数。因此，当向量 $\mathbf{x}_j$ 含有实际观测到的具体数值时，我们有

$$L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})=\frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}e^{-\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\right)\right]/2} \tag{4-16}$$

在本书后面的章节中，将可以方便地用不同形式表示似然函数(4-16)中的指数。特别地，我们利用恒等式

$$\begin{aligned}&\mathrm{tr}\Big[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\Big(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\Big)\Big] \\ &\quad=\mathrm{tr}\Big[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\Big(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\Big)\Big]+n\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'] \end{aligned}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= \mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right)\right]+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}) \qquad (4\text{-}17)$$

μ 和 Σ 的极大似然估计

下面的结论终于让我们得到 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计。

结论 4.10 已知一个 $p\times p$ 对称正定矩阵 $\mathbf{B}$ 和一个标量 $b>0$，对所有正定矩阵 $\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}}$，有

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^b}e^{-\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B})/2}\leqslant\frac{1}{|\mathbf{B}|^b}(2b)^{pb}e^{-bp}$$

仅当 $\boldsymbol{\Sigma}=(1/2b)\mathbf{B}$，等式成立。

证明 设 $\mathbf{B}^{1/2}$是对称矩阵 $\mathbf{B}$ 的平方根[参见式(2-22)]，因此，$\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{1/2}=\mathbf{B}$，$\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{-1/2}=\mathbf{I}$，$\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{B}^{-1/2}=\mathbf{B}^{-1}$。于是 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B})=\mathrm{tr}[(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2})\mathbf{B}^{1/2}]=\mathrm{tr}[\mathbf{B}^{1/2}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2})]$。令 η 是 $\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}$的特征值。因为若 $\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{y}\neq 0$ 或等价地 $\mathbf{y}\neq\mathbf{0}$，有 $\mathbf{y}'\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{y}=(\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{y})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{y})>0$，所以这个矩阵是正定的。于是，由练习 2.17 可知 $\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}$的特征值 η_i 为正。结论 4.9(b)给出

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B})=\mathrm{tr}(\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2})=\sum_{i=1}^{p}\eta_i$$

并且由练习 2.12 有 $|\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}|=\prod_{i=1}^{p}\eta_i$。从结论 2A.11 中行列式的性质，我们有

$$|\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}=|\mathbf{B}^{1/2}||\boldsymbol{\Sigma}^{-1}||\mathbf{B}^{1/2}|=|\boldsymbol{\Sigma}^{-1}||\mathbf{B}^{1/2}||\mathbf{B}^{1/2}|$$
$$=|\boldsymbol{\Sigma}^{-1}||\mathbf{B}|=\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|}|\mathbf{B}|$$

或

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|}=\frac{|\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}|}{|\mathbf{B}|}=\frac{\prod_{i=1}^{p}\eta_i}{|\mathbf{B}|}$$

合并对迹与行列式的结论，得出

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^b}e^{-\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}]/2}=\frac{\left(\prod_{i=1}^{p}\eta_i\right)^b}{|\mathbf{B}|^b}e^{-\sum_{i=1}^{p}\eta_i/2}=\frac{1}{|\mathbf{B}|^b}\prod_{i=1}^{p}\eta_i^b e^{-\eta_i/2}$$

但是，函数 $\eta^b e^{-\eta/2}$相对于 η 有一个出现在 $\eta=2b$ 处的最大值$(2b)^b e^{-b}$。对每个 i，选择 $\eta_i=2b$，可以给出

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^b}e^{-\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B})/2}\leqslant\frac{1}{|\mathbf{B}|^b}(2b)^{pb}e^{-bp}$$

当 $\boldsymbol{\Sigma}=(1/2b)\mathbf{B}$ 时，惟一地达到该上界，因为对于这个选择，有

$$\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}=\mathbf{B}^{1/2}(2b)\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}=(2b)\underset{(p\times p)}{\mathbf{I}}$$

和

$$\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}]=\mathrm{tr}[\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}]=\mathrm{tr}[(2b)\mathbf{I}]=2bp$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

进一步，

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|}=\frac{|\mathbf{B}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}^{1/2}|}{|\mathbf{B}|}=\frac{|(2b)\mathbf{I}|}{|\mathbf{B}|}=\frac{(2b)^p}{|\mathbf{B}|}$$

对于 $\mathrm{tr}|\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}|$ 和 $1/|\boldsymbol{\Sigma}|^b$ 直接地代入得到所指出的界。

$\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计是使式(4-16)中函数 $L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 最大的值，估计值用 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 表示。估计值 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 通过概括性统计量 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 随观测值 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 而定。

结论 4.11 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是一个来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的正态总体的随机样本。则

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{X}} \text{ 和 } \hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})'=\frac{(n-1)}{n}\mathbf{S}$$

分别是 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的**极大似然估计量**。它们的观测值 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $(1/n)\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$，称为 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的**极大似然估计值**。

证明 除了乘数因子 $-1/2$ 以外，似然函数[参见式(4-16)]中的指数是[参见式(4-17)]

$$\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right)\right]+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})$$

由结论 4.1，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 是正定的，因此，除非 $\boldsymbol{\mu}=\bar{\mathbf{x}}$，距离 $(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})>0$。所以，关于 $\boldsymbol{\mu}$ 在 $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{x}}$ 处使似然达到最大值。我们还须使

$$L(\hat{\boldsymbol{\mu}},\boldsymbol{\Sigma})=\frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right)\right]/2}$$

关于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 达到最大。由结论 4.10 和 $b=n/2$ 及 $\mathbf{B}=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$，在 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=(1/n)\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$ 处，出现所述的最大值。

极大似然估计量是随机量。它们是通过用相应的随机向量 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 去替换关于 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 表达式中的观测值 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 而得到的。

我们注意到极大似然估计量 $\bar{\mathbf{X}}$ 是一个随机向量且极大似然估计量 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 是一个随机矩阵。对于给定的数据集，极大似然估计是它们的特殊值。而且，该似然的最大值为

$$L(\hat{\boldsymbol{\mu}},\hat{\boldsymbol{\Sigma}})=\frac{1}{(2\pi)^{np/2}}\mathrm{e}^{-np/2}\frac{1}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|^{n/2}} \tag{4-18}$$

或，由于 $|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|=[(n-1)/n]^p|\mathbf{S}|$，

$$L(\hat{\boldsymbol{\mu}},\hat{\boldsymbol{\Sigma}})=\text{常数}\times(\text{广义方差})^{-n/2} \tag{4-19}$$

广义方差决定似然函数的“最大值”，因此，当母总体是多元正态时，它是变异性的自然度量。

极大似然估计量具有**不变性质**。设 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 是 $\boldsymbol{\theta}$ 的极大似然估计量，并考虑参数 $h(\boldsymbol{\theta})$，它是 $\boldsymbol{\theta}$ 的函数。则 $h(\boldsymbol{\theta})$ 的**极大似然估计**是由 $h(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 给定的，即

$$\underset{(\boldsymbol{\theta}\text{的一个函数})}{h(\boldsymbol{\theta})} \quad \text{由} \quad \underset{(\hat{\boldsymbol{\theta}}\text{的同一函数})}{h(\hat{\boldsymbol{\theta}})} \quad \text{给定} \tag{4-20}$$

(参见[1]和[13])。例如：

1. $\boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}$ 的极大似然估计量是 $\hat{\boldsymbol{\mu}}'\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}\hat{\boldsymbol{\mu}}$，其中 $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{X}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=((n-1)/n)\mathbf{S}$ 分别是 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的极大似然估计量。

2. $\sqrt{\sigma_{ii}}$的极大似然估计量是$\sqrt{\hat{\sigma}_{ii}}$，其中

$$\hat{\sigma}_{ii} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(X_{ij} - \overline{X}_i)^2$$

是 $\sigma_{ii}=\mathrm{Var}(X_i)$的极大似然估计量。

充分统计量

从式(4-15)，联合密度仅仅通过样本均值 $\bar{\mathbf{x}}$ 以及平方与交叉乘积之和矩阵 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})' = (n-1)\mathbf{S}$ 取决于观测值 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 的整个集合。我们用 $\bar{\mathbf{x}}$ 和$(n-1)\mathbf{S}$(或 $\mathbf{S}$)是**充分统计量**的说法来表达这一事实：

> 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的一个多元正态总体的随机样本，则
>
> $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 是**充分统计量** (4-21)

充分统计量对于正态总体的重要性在于，无论样本容量 n 多么大，数据矩阵 $\mathbf{X}$ 中关于 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的全部信息都包含在 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 中。对于非正态总体这一般是不成立的。由于许多多元方法先从样本均值和协方差开始，因此应慎重检查多元正态假设的适当性。(参见4.6 节。)若不能把数据当作多元正态，单独依赖于 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的方法可能会忽视其他有用的样本信息。

4.4 $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的抽样分布

初步假定 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 组成一个来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的正态总体的随机样本，这就完全决定了 $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的抽样分布。这里我们用与熟悉的一元结论相比较的办法提出关于 $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的抽样分布的结论。

在一元情况($p=1$)，我们已知 $\overline{X}$ 是正态的，且具有均值 $\mu=$(总体均值)和方差

$$\frac{1}{n}\sigma^2 = \frac{\text{总体方差}}{\text{样本容量}}$$

对于多元情况($p\geqslant 2$)结论是类似的，$\overline{\mathbf{X}}$ 为正态分布，其均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵为$(1/n)\boldsymbol{\Sigma}$。

对于样本方差，回想 $(n-1)s^2 = \sum_{j=1}^{n}(X_j - \overline{X})^2$ 的分布为 σ^2 乘以一个自由度(d.f.)为 $n-1$ 的卡方变量。该卡方度量是独立的标准正态随机变量的平方和的分布，即$(n-1)s^2$ 分布为 $\sigma^2(Z_1^2+\cdots+Z_{n-1}^2)=(\sigma Z_1)^2+\cdots+(\sigma Z_{n-1})^2$。单个项 σZ_i 独立地服从 $N(0,\sigma^2)$分布。对于样本协方差矩阵正是后面的形式，可以适当地推广到基本抽样分布。

样本协方差矩阵的抽样分布由于它的发现者，被称为**威沙特分布**；它被定义为多元正

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

态随机向量的独立乘积之和。具体地，

$$W_m(\cdot\,|\boldsymbol{\Sigma}) = \text{自由度为 } m \text{ 的威沙特分布}$$

$$= \sum_{j=1}^{m} \mathbf{Z}_j\mathbf{Z}_j' \text{ 的分布} \tag{4-22}$$

其中，$\mathbf{Z}_j$ 是相互独立的 $N_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$分布。

我们概括抽样分布结论如下：

> 设 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_n$ 是容量为 n 的随机样本，来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 p 元正态分布，则：
>
> 1. $\overline{\mathbf{X}}$ 的分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu}, (1/n)\boldsymbol{\Sigma})$。
> 2. $(n-1)\mathbf{S}$ 的分布为自由度为 $n-1$ 的威沙特随机矩阵。 (4-23)
> 3. $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 是独立的。

因为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 未知，$\overline{\mathbf{X}}$ 的分布不能直接用于对 $\boldsymbol{\mu}$ 作推断。但是，$\mathbf{S}$ 提供了关于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的独立信息，且 $\mathbf{S}$ 的分布不取决于 $\boldsymbol{\mu}$。这使我们能构造一个可对 $\boldsymbol{\mu}$ 作推断的统计量，正如我们将在第 5 章将见到的。

目前，我们对多元分布理论有一些更进一步的结论。威沙特分布的下列性质是从它作为独立乘积 $\mathbf{Z}_j\mathbf{Z}_j'$之和的定义直接推导出来的。证明可以在[1]中找到。

威沙特分布的性质

1. 若 $\mathbf{A}_1$ 与 $\mathbf{A}_2$ 独立，其分布分别为
$W_{m1}(\mathbf{A}_1|\boldsymbol{\Sigma})$和 $W_{m2}(\mathbf{A}_2|\boldsymbol{\Sigma})$，则 $\mathbf{A}_1+\mathbf{A}_2$ 的分布为
$W_{m_1+m_2}(\mathbf{A}_1+\mathbf{A}_2|\boldsymbol{\Sigma})$，即自由度相加。 (4-24)

2. 若 $\mathbf{A}$ 的分布为 $W_m(\mathbf{A}|\boldsymbol{\Sigma})$，则 $\mathbf{CAC}'$ 分布为 $W_m(\mathbf{CAC}'|\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}')$。

虽然我们对于威沙特分布的概率密度函数没有任何特殊需要，但也许有兴趣看看它的相当复杂的形式。除非样本容量 n 比变量 p 的数目更大，该密度是不存在的。当它存在时，它在正定矩阵 $\mathbf{A}$ 处的值是

$$w_{n-1}(\mathbf{A}|\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{|\mathbf{A}|^{(n-p-2)/2} e^{-\operatorname{tr}[\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}]/2}}{2^{p(n-1)/2}\pi^{p(p-1)/4}|\boldsymbol{\Sigma}|^{(n-1)/2}\prod_{i=1}^{p}\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-i)\right)}, \quad \mathbf{A} \text{ 正定} \tag{4-25}$$

其中 $\Gamma(\cdot)$是伽马函数。[参见[1]。]

4.5 $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 的大样本特性

假定量 X 是由独立的大量原因 $V_1, V_2, \cdots, V_n$ 所确定，其中随机变量 V_i 表示的原因具有大致相同的变化性。若 X 为和式

$$X = V_1 + V_2 + \cdots + V_n$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

则应用中心极限定理，我们断定 X 的分布近乎正态。这对于 V_i 的几乎任何母体分布，只要 n 足够大都是正确的。

一元中心极限定理还告诉我们样本均值的抽样分布，无论基本总体分布是什么形式，对一个大样本容量都是接近正态的。对于许多其他重要的一元统计量也有类似的结论。

某些多元统计量，诸如 $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$，有与一元情形类似的大样本特性。随样本容量的无限增加，不管总体的形式如何，某些规律性影响着 $\overline{\mathbf{X}}$ 和 $\mathbf{S}$ 中的抽样变差。因此，本节提到的结论不要求多元正态总体。不论总体的分布形式如何，只要具有均值 $\boldsymbol{\mu}$ 与有限协方差 $\boldsymbol{\Sigma}$ 即可。

结论 4.12 （大数定律） 设 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_n$ 是来自具有均值 $E(Y_i)=\mu$ 的总体的独立观测结果。则

$$\overline{Y} = \frac{Y_1 + Y_2 + \cdots + Y_n}{n}$$

在 n 无限增加时，依概率收敛于 μ。即，对任一给定的 $\varepsilon>0$，当 $n\to\infty$ 时，$P(-\varepsilon<\overline{Y}-\mu<\varepsilon)$ 接近于 1。

证明 参见[9]。

作为大数定律的一个直接推论，即每个 $\overline{X}_i$ 依概率收敛到 μ_i，$i=1,2,\cdots,p$，

$$\overline{\mathbf{X}} \text{ 依概率收敛到 } \boldsymbol{\mu} \tag{4-26}$$

又，每个样本协方差 s_{ik} 依概率收敛到 σ_{ik}，$k=1,2,\cdots,p$，且

$$\mathbf{S}(\text{或 } \hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{S}_n) \text{ 依概率收敛到 } \boldsymbol{\Sigma} \tag{4-27}$$

式(4-27)由下式可得

$$\begin{aligned}(n-1)s_{ik} &= \sum_{j=1}^{n}(X_{ji}-\overline{X}_i)(X_{jk}-\overline{X}_k)\\ &= \sum_{j=1}^{n}(X_{ji}-\mu_i+\mu_i-\overline{X}_i)(X_{jk}-\mu_k+\mu_k-\overline{X}_k)\\ &= \sum_{j=1}^{n}(X_{ji}-\mu_i)(X_{jk}-\mu_k)+n(\overline{X}_i-\mu_i)(\overline{X}_k-\mu_k)\end{aligned}$$

令 $Y_j=(X_{ji}-\mu_i)(X_{jk}-\mu_k)$，且 $E(Y_j)=\sigma_{ik}$，通过应用大数定律，可知 s_{ik} 中的第一项收敛到 σ_{ik} 且第二项收敛于零。

式(4-26)和(4-27)的实际的解释就是，每当样本容量很大时，将以大概率有 $\overline{\mathbf{X}}$ 接近于 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\mathbf{S}$ 接近于 $\boldsymbol{\Sigma}$。通过中心极限定理的多元形式，关于 $\overline{\mathbf{X}}$ 的陈述甚至可以更精确。

结论 4.13 （中心极限定理） 设 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_n$ 是来自任何有均值 $\boldsymbol{\mu}$ 与有限协方差 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的总体的独立观测结果。则对大样本容量，有

$$\sqrt{n}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}) \text{ 有一个近似的 } N_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}) \text{ 分布}$$

这里，n 相对于 p 也应是大的。

证明 参见[1]。

由中心极限定理提供的近似值适用于离散的以及连续的多元总体。从数学上看，极限是精确的，而且对正态性的接近常常是十分迅速的。此外，从 4.4 节的结论，我们已知当基本总体是正态时，$\overline{\mathbf{X}}$ 精确地服从正态分布。因此，我们可以期望，当总体接近正态时，对中等大小的 n，中心极限定理近似效果也很好。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

正如我们所见到的，当 n 大时，$\mathbf{S}$ 以大概率接近于 $\boldsymbol{\Sigma}$。因此，$\overline{\mathbf{X}}$ 逼近正态分布时用 $\mathbf{S}$ 替换 $\boldsymbol{\Sigma}$，对随后的概率计算的影响可以忽略。

结论 4.7 可以用来证明当 $\overline{\mathbf{X}}$ 的分布为 $N_p\left(\boldsymbol{\mu}, \frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma}\right)$ 或者等价地，当 $\sqrt{n}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 有 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$ 分布时，$n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 为 χ_p^2 分布。当 $\overline{\mathbf{X}}$ 近似正态分布时，$n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 的抽样分布近似服从 χ_p^2 分布。用 $\mathbf{S}^{-1}$ 替换 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$，对于比 p 大得多的大 n 来说，并不会严重影响这一近似。

我们概括本节的主要结论如下：

> 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 与有限（非奇异）协方差 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的总体的独立观测结果，则对于大的 $n-p$。
>
> $$\sqrt{n}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}) \text{ 是近似的 } N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma}) \text{ 分布}$$
>
> 且 (4-28)
>
> $$n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}) \text{ 是近似的 } \chi_p^2 \text{ 分布}$$

在下面三节里，我们考虑检验正态性假设的方法，以及将非正态观测结果变换成近似正态的观测结果的方法。

4.6 评估正态性假设

正如我们所指出的，以后各章讨论的大多数统计方法都假定每个观测向量 $\mathbf{X}_j$ 来自多元正态分布。另一方面，在样本容量很大，且所用的方法只取决于 $\overline{\mathbf{X}}$ 的特性或形为 $n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 的包含 $\overline{\mathbf{X}}$ 的距离时，对于单个的观测结果的正态性假设并不是决定性的。但在一定程度上，由这些方法所做的推断的质量随真实总体类似于多元正态形式的程度而定。因此，当数据显示出与多元正态的中度至极端的背离时，必须要有能发现这种情况的方法存在。

我们要回答这个问题：观测结果 $\mathbf{X}_j$ 是否违背它们来自正态总体的假设？基于正态分布的性质，我们已知正态变量的所有线性组合是正态的且多元正态密度的轮廓线是椭球面。因此，我们提出下述问题：

1. $\mathbf{X}$ 的元素的边缘分布是否呈正态？
   分量 X_i 的几个线性组合是否呈正态？
2. 根据各种特征的观测结果对作出的散布图，是否给出正态总体所期望的椭圆形状？
3. 是否存在应该进行检验以确保精确度的“杂乱”观测值？

我们的正态性研究将集中于一维或二维中观测结果的特性（例如，边缘分布和散布图），这将会很清楚。不出所料，结果表明要构造一个“好的”高于二维的联合正态性的全面的检验是困难的，因为大量的东西可能出错。在某种程度上，我们必须为集中力量于一元和二元正态性的检验付出代价：我们从来不能确保，我们没有漏掉仅在高维中才能显示的某种特性。（这是可能的，例如，用正态的边缘分布构造一个非正态二元分布。[参见练

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

习 4.8。])然而非正态的许多型式通常是反映在边缘分布和散布图中。另外，对于大多数实际工作，一维和二维的研究通常是足够的。幸而，在低维情况为正态而在高维情况为非正态的病态数据集，在实际中并不是经常碰到。

评估一元边缘分布的正态性

n 较小时的点图和 $n>25$ 时的直方图有助于揭示一元分布的一个尾部比另一个长得多时的情况。如果关于一个变量 X_j 的直方图似乎较为对称，我们可以通过计算在某个区间上的观测值的数目做进一步的检验。一个一元正态分布属于区间 $(\mu_i-\sqrt{\sigma_{ii}},\mu_i+\sqrt{\sigma_{ii}})$ 的概率赋值为 0.683，属于区间 $(\mu_i-2\sqrt{\sigma_{ii}},\ \mu_i+2\sqrt{\sigma_{ii}})$ 的概率为 0.954。因此，用一个大样本容量 n，我们期望观察到位于区间 $(\bar{x}_i-\sqrt{s_{ii}},\ \bar{x}_i+\sqrt{s_{ii}})$ 的观测结果的比例 $\hat{p}_{i1}$ 大约是 0.683。类似地，位于 $(\bar{x}_i-2\sqrt{s_{ii}},\ \bar{x}_i+2\sqrt{s_{ii}})$ 中的观测结果的比例 $\hat{p}_{i2}$ 大约是 0.954。利用关于 $\hat{p}_i$ 的抽样分布的正态近似(参见[9])，我们观察到

$$|\hat{p}_{i1}-0.683|>3\times\sqrt{\frac{0.683\times0.317}{n}}=\frac{1.396}{\sqrt{n}}$$

或者

$$|\hat{p}_{i2}-0.954|>3\times\sqrt{\frac{0.954\times0.046}{n}}=\frac{0.628}{\sqrt{n}} \tag{4-29}$$

表明了对第 i 个特性的正态分布假设的偏离。当观察比例太小时，建议采用比正态粗尾的母体分布。

在任何数据分析中，画图总是有效的方法。有一类可专门用于评估正态性假设的图形，叫做 ***Q-Q* 图**。对每个变量的样本观测值的边缘分布可以作此图。实际上，它们展示的是样本分位数与观测值确实是正态分布时所会观察到的分位数之间的关系。当各点离一条直线很近时，正态性假设仍然是保持的。若点偏离直线，正态性就较为可疑。而且，偏差的图形可提供有关非正态性种类的线索。一旦非正态的原因被确定，修正工作通常是可能的。(参见 4.8 节。)

为了简化记号，令 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 表示任何单一特征 X_i 的 n 个观测值。这些观测值按大小排序以后表示为 $x_{(1)}\leqslant x_{(2)}\leqslant\cdots\leqslant x_{(n)}$。例如，$x_{(2)}$ 是第二个最小的观测值，$x_{(n)}$ 是最大的观测值。当 $x_{(j)}$ 互不相同时，恰好有 j 个观测值小于或等于 $x_{(j)}$，$x_{(j)}$ 是样本分位数。(当观测值是我们通常假定的连续型时，这在理论上总是成立的。)为了分析方便，样本在位于 $x_{(j)}$ 的左边的比例 j/n 通常用 $\left(j-\frac{1}{2}\right)/n$ 近似①。

对于标准正态分布，分位数 $q_{(j)}$ 由下述关系定义

① $(j-1/2)/n$ 的分子中，1/2 是一个"连续性"修正。有些作者(参见[5]和[10])建议用 $(j-3/8)/(n+1/4)$ 代替 $(j-1/2)/n$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$P[Z \leqslant q_{(j)}] = \int_{-\infty}^{q_{(j)}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} dz = p_{(j)} = \frac{j - \frac{1}{2}}{n} \tag{4-30}$$

(参见附录中表 1。)这里 $p_{(j)}$是从标准正态总体取一次值会小于或等于 $q_{(j)}$的概率。

基本想法是在有关的累积概率$(j-1/2)/n$ 相同的情况下,考察分位数对$(q_{(j)}, x_{(j)})$。若数据由正态总体产生,由于 $\sigma q_{(j)}+\mu$ 近乎是期望的样本分位数,数对$(q_{(j)}, x_{(j)})$会近似线性相关①。

例 4.9 (作 Q-Q 图)

由下表给出一个 $n=10$ 的观测值的样本:

顺序观测值 $x_{(j)}$	概率水平$\left(j-\frac{1}{2}\right)/n$	标准正态分位数 $q_{(j)}$
−1.00	0.05	−1.645
−0.10	0.15	−1.036
0.16	0.25	−0.674
0.41	0.35	−0.385
0.62	0.45	−0.125
0.80	0.55	0.125
1.26	0.65	0.385
1.54	0.75	0.674
1.71	0.85	1.036
2.30	0.95	1.645

其中,例如,$P[Z \leqslant 0.385] = \int_{-\infty}^{0.385} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} dz = 0.65$。[参见式(4-30)。]

让我们构造 Q-Q 图并评述其形状。对于上述数据,该 Q-Q 图描述的是顺序数据 $x_{(j)}$与正态分位数 $q_{(j)}$之间的关系,如图 4.5 所示。点对$(q_{(j)}, x_{(j)})$的位置很接近一条直线,并且我们不拒绝这些数据服从正态分布的看法——特别是在样本容量像 $n=10$ 这么小的时候。

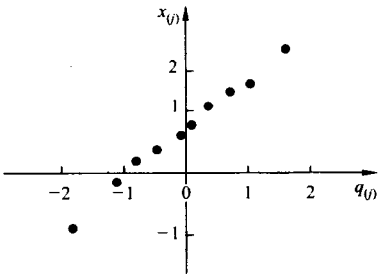


图 4.5 例 4.9 中数据的 Q-Q 图

为了画 Q-Q 图所需要的计算,用计算机很容易编程。在市场上有许多统计程序能画出这种图形。

① 一个较好的方法是画出$(m_{(j)}, x_{(j)})$,其中 $m_{(j)}=E(z_{(j)})$是从一个标准正态分布中抽取容量为 n 的样本的第 j 个顺序统计量的期望值。(参见[12]以便进一步讨论。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

作 Q-Q 图的步骤是：

1. 把原始观测值排序，得到 $x_{(1)}, x_{(2)}, \cdots, x_{(n)}$ 和它们的对应概率值 $\left(1-\frac{1}{2}\right)/n$，$\left(2-\frac{1}{2}\right)/n, \cdots, \left(n-\frac{1}{2}\right)/n$；

2. 计算标准正态分位数 $q_{(1)}, q_{(2)}, \cdots, q_{(n)}$；

3. 作观测值的点对 $(q_{(1)}, x_{(1)})$，$(q_{(2)}, x_{(2)})$，…，$(q_{(n)}, x_{(n)})$ 的图形，并检查结果的“直线性”。

Q-Q 图并不是特别能够提供信息，除非样本容量为中等或较大——例如，$n \geqslant 20$。对于小样本，即使在已知观测值是来自正态总体时，Q-Q 图的直线性也可能存在很大变异。

例 4.10 （放射性数据的 Q-Q 图）

一个微波炉制造厂家的质量控制部门根据联邦政府的要求，监控当炉门关闭着时的辐射量。测量了随机选取的 $n=42$ 个微波炉在炉门关闭时的辐射量。数据列于表 4.1 中。

表 4.1 辐射量数据（关门）

炉号	辐射量	炉号	辐射量	炉号	辐射量
1	0.15	15	0.10	29	0.08
2	0.09	16	0.10	30	0.18
3	0.18	17	0.02	31	0.10
4	0.10	18	0.10	32	0.20
5	0.05	19	0.01	33	0.11
6	0.12	20	0.40	34	0.30
7	0.08	21	0.10	35	0.02
8	0.05	22	0.05	36	0.20
9	0.08	23	0.03	37	0.20
10	0.10	24	0.05	38	0.30
11	0.07	25	0.15	39	0.30
12	0.02	26	0.10	40	0.40
13	0.01	27	0.15	41	0.30
14	0.10	28	0.09	42	0.05

资料来源：数据经 J. D. Cryer 许可使用。

为了确定超过规定容许水平的概率，需要有辐射量的概率分布。能否把观测值当作是正态分布呢？

使用计算机来综合处理数对 $(q_{(j)}, x_{(j)})$ 以及构造这 Q-Q 图，示于图 4.6。由数据作的散点图从整体来看似乎不是正态分布。图中用圆圈标出的点是离群值——这些值相对于其他观测值太大了。

对放射量数据，有些观测值是相等的。在这情况出现时，有相同值的那些观测值伴有相同的正态分位数。这个分位数是用观测值在全都略有不同时所会有的分位数的平均值算出的。

Q-Q 图的直线性可以通过计算图中点的相关系数来度量。Q-Q 图的相关系数由下式定义

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

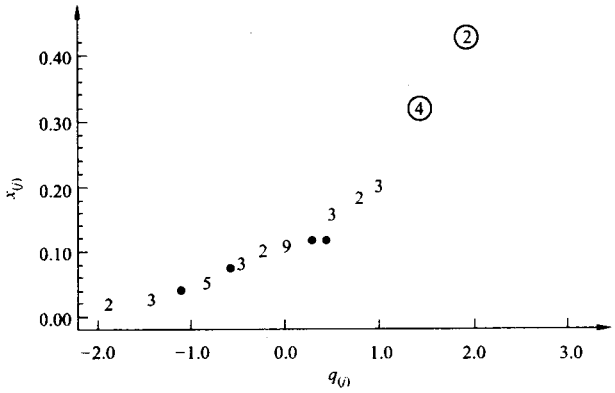


图 4.6　例 4.10 的辐射量(炉门关闭)数据的 Q-Q 图
(图中的整数表明在同一位置上的点的个数)

$$r_Q = \frac{\sum_{j=1}^{n}(x_{(j)} - \bar{x})(q_{(j)} - \bar{q})}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(x_{(j)} - \bar{x})^2}\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(q_{(j)} - \bar{q})^2}} \tag{4-31}$$

并且可以根据它对正态性进行有力的检验(参见[5],[10]和[11]。)形式上,在显著性水平 α 下,如果 r_Q 降为表 4.2 中适当值之下,我们拒绝正态性假设。

表 4.2　对正态性的 Q-Q 图相关系数检验的临界点

样本容量 n	显著性水平 α		
	0.01	0.05	0.10
5	0.8299	0.8788	0.9032
10	0.8801	0.9198	0.9351
15	0.9126	0.9389	0.9503
20	0.9269	0.9508	0.9604
25	0.9410	0.9591	0.9665
30	0.9479	0.9652	0.9715
35	0.9538	0.9682	0.9740
40	0.9599	0.9726	0.9771
45	0.9632	0.9749	0.9792
50	0.9671	0.9768	0.9809
55	0.9695	0.9787	0.9822
60	0.9720	0.9801	0.9836
75	0.9771	0.9838	0.9866
100	0.9822	0.9873	0.9895
150	0.9879	0.9913	0.9928
200	0.9905	0.9931	0.9942
300	0.9935	0.9953	0.9960

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

例 4.11 （正态性的相关系数检验法）

让我们计算例 4.9(参见图 4.5)的 Q-Q 图的相关系数 r_Q 并检验正态性。

利用例 4.9 的数据，我们有 $\bar{x}=0.770$ 以及

$$\sum_{j=1}^{10}(x_{(j)}-\bar{x})q_{(j)}=8.584,\ \sum_{j=1}^{10}(x_{(j)}-\bar{x})^2=8.472 \text{ 和 } \sum_{j=1}^{10}q_{(j)}^2=8.795$$

由于 $\bar{q}=0$

$$r_Q=\frac{8.584}{\sqrt{8.472}\times\sqrt{8.795}}=0.994$$

在显著性水平 10%下，通过把 $r_Q=0.994$ 与表 4.2 中对应于 $n=10$ 和 $\alpha=0.10$ 的表项相对照，来进行正态性检验。表项为 0.9351。由于 $r_Q>0.9351$，我们不拒绝正态性假设。

与 r_Q 不同，有些软件包评估由夏皮罗(Shapiro)和威尔克(Wilk)[11]提出的原始统计量。它的相关形式对应于用一个标准正态顺序统计量的期望值和它们的协方差的函数来替换 $q_{(j)}$。我们喜欢 r_Q，因为它直接对应于正态的许多散点图中的点。对于大样本容量，这两个统计量几乎是相同的(参见[12])，因此，任何一个都可用来判断拟合的不足。

可以研究多于一个特性的线性组合。许多统计学家建议标绘

$$\hat{\mathbf{e}}_1'\mathbf{x}_j \quad \text{其中} \quad \mathbf{S}\hat{\mathbf{e}}_1=\hat{\lambda}_1\hat{\mathbf{e}}_1$$

式中的 $\hat{\lambda}_1$ 是 $\mathbf{S}$ 的最大特征值。这里 $\mathbf{x}_j'=[x_{j1},x_{j2},\cdots,x_{jp}]$是对 p 个变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的第 j 个的观测值。对应于最小特征值的线性组合 $\hat{\mathbf{e}}_p'\mathbf{x}_j$ 也常常被挑选出来进行检验。(有关进一步的细节参见第 8 章和[6]。)

评估二元正态性

我们会希望检验所有 $2,3,\cdots,p$ 维的分布的正态性假设。然而，正如我们已指出的，对于实际工作，研究一元和二元分布通常就足够了。前面我们考虑过一元边缘分布。现在感兴趣的是检查二元情况。

在第 1 章中，我们对于表示特征的点对作了散布图。如果观测值是从一个多元正态分布生成的，每个二元分布会是正态的，并且常数密度轮廓线会是椭圆。散布图显示一个近乎椭圆的总形状，从而与这个结构一致。

此外，由结论 4.7，二元结果的集合 $\mathbf{x}$ 满足

$$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\chi_2^2(0.5)$$

其概率为 0.5。因此，我们应当粗略地期望对处于所给椭圆上的样本观测值有相同的百分比，50%，该椭圆由下式给出

$$\{\text{一切满足}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})\leqslant\chi_2^2(0.5)\text{ 的 }\mathbf{x}\}$$

其中我们用 $\boldsymbol{\mu}$ 的估计值 $\bar{\mathbf{x}}$ 来代替 $\boldsymbol{\mu}$ 并用 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$的估计值 $\mathbf{S}^{-1}$来代替 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$。否则，正态性假设就是可疑的。

例 4.12 （二元正态性检验）

虽然不是一个随机样本，在练习 1.4 中列举了对美国最大的 10 家工业公司的观测值对(x_1=销售额，x_2=利润)组成的数据。这些数据给出

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}62309\\2927\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}10005.20 & 255.76\\255.76 & 14.30\end{bmatrix}\times 10^5$$

于是

$$\mathbf{S}^{-1}=\frac{1}{77661.18}\begin{bmatrix}14.30 & -255.76\\-255.76 & 10005.20\end{bmatrix}\times 10^{-5}$$

$$=\begin{bmatrix}0.000184 & -0.003293\\-0.003293 & 0.128831\end{bmatrix}\times 10^{-5}$$

从附录表 3，$\chi_2^2(0.5)=1.39$。因此，任何满足

$$\begin{bmatrix}x_1-62309\\x_2-2927\end{bmatrix}'\begin{bmatrix}0.000184 & -0.003293\\-0.003293 & 0.128831\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1-62309\\x_2-2927\end{bmatrix}\times 10^{-5}\leqslant 1.39$$

的观测值 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2]$处于估计 50%轮廓线的线上或内部。否则观测值在轮廓线的外部，在练习 1.4 中第一对观测值是$[x_1,x_2]'=[1269744224]$。此时

$$\begin{bmatrix}126974-62309\\4224-2927\end{bmatrix}'\begin{bmatrix}0.000184 & -0.003293\\-0.003293 & 0.128831\end{bmatrix}\begin{bmatrix}126974-62309\\4224-2927\end{bmatrix}\times 10^{-5}$$

$$=4.34>1.39$$

并且该点落在 50%轮廓线之外。其余 9 个点距 $\bar{\mathbf{x}}$ 的广义距离分别为 1.20，0.59，0.83，1.88，1.01，1.02，5.33，0.81 和 0.97。由于这些距离中有 7 个小于 1.39，数据落在 50%轮廓线之内的比例占 0.70。如果观测结果是正态分布，我们应期望大约它们中的一半或 5 个处于轮廓线之内。在比例上有这么大的差别通常为拒绝二元正态性的看法提供证据；但是，本例中的样本容量太小，仅为 10，不足以得出这一结论。（也参见例 4.13。）

计算处于轮廓线内的点的比例，并将其与理论上的概率进行主观比较，这是有用的方法，不过有点粗略。在判断一个数据集的联合正态性时，一种更正式一些的方法是基于广义平方距离

$$d_j^2=(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}),\ j=1,2,\cdots,n \tag{4-32}$$

其中 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 是样本观测值。我们准备描述的方法不仅仅局限于二元情况，它对所有 $p\geqslant 2$ 的情况都适用。

当总体是多元正态的，且 n 和 $n-p$ 都比 25 或 30 更大时，平方距离 d_1^2，d_2^2，…，d_n^2 中的每一个希望表现为一个卡方随机变量。[参见结论 4.7 以及式(4-26)和式(4-27)。]即使这些距离不是独立的或不是精确的卡方分布，把它们当作如此来作图，也是有用的。所得到的图称为**卡方图或伽马图**，因为卡方分布是更一般的伽马分布的特殊情况。（参见[6]。）

构造卡方图的步骤如下：

1. 把式(4-32)中的平方距离从最小到最大排序为 $d_{(1)}^2\leqslant d_{(2)}^2\leqslant\cdots\leqslant d_{(n)}^2$。

2. 画出点对$\left(q_{c,p}\left(\left(j-\frac{1}{2}\right)/n\right),\ d_{(j)}^2\right)$的图形，其中 $q_{c,p}\left(\left(j-\frac{1}{2}\right)/n\right)$是自由度为 p 的卡方分布的 $100\left(j-\frac{1}{2}\right)/n$ 分位数。

分位数是用比例来规定的，而百分位数是用百分比来规定的。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

分位数 $q_{c,p}\left(\left(j-\frac{1}{2}\right)/n\right)$ 与卡方分布的上百分位数有关。具体地，$q_{c,p}\left(\left(j-\frac{1}{2}\right)/n\right)=\chi_p^2\left(\left(n-j+\frac{1}{2}\right)/n\right)$。

图形应当类似于一条通过原点且斜率为 1 的直线。一个系统的弯曲图形表明缺乏正态性。一个或两个远离直线的点表示大的距离，或是离群的观测值，这些都值得进一步注意。

例 4.13 （构造卡方图）

让我们构造在例 4.12 中所给的广义距离的卡方图。对于 $p=2$ 和 $n=10$ 的有序距离和相应的卡方百分位数列表如下：

j	$d_{(j)}^2$	$q_{c,2}\left(\frac{j-\frac{1}{2}}{10}\right)$
1	0.59	0.10
2	0.81	0.33
3	0.83	0.58
4	0.97	0.86
5	1.01	1.20
6	1.02	1.60
7	1.20	2.10
8	1.88	2.77
9	4.34	3.79
10	5.33	5.99

点对 $\left(q_{c,2}\left(\left(j-\frac{1}{2}\right)/10\right),\ d_{(j)}^2\right)$ 的图形示于图 4.7。图 4.7 中的点不是位于斜率为 1 的直线上，与对来自二元正态总体的容量为 10 的样本所期望的距离相比，最小距离显得太大，中等距离显得太小。这些数据并不像是二元正态的；然而，样本容量太小了，很难得到一个明确的结论。如果需要对数据做进一步分析，把它们变换为更接近二元正态的观测值是合理的。适当的变换方法在 4.8 节中讨论。

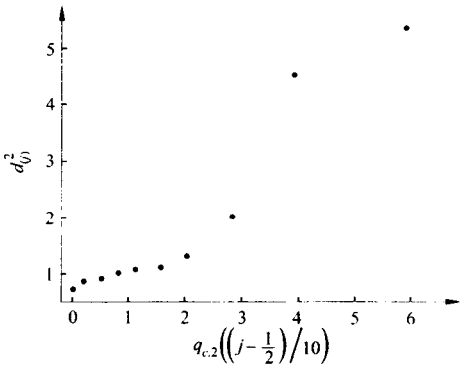


图 4.7 例 4.13 中有序距离的卡方图

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

除了检验单变量图和散布图外，我们应通过构造卡方图或 d^2 图来检验多元正态性。图 4.8 给出了对计算机生成的含 30 个四元正态随机向量的两个样本所作的 d^2 图。正如所期望的，该图为直线模式，但最高的两个或三个有序平方距离的变异性很大。

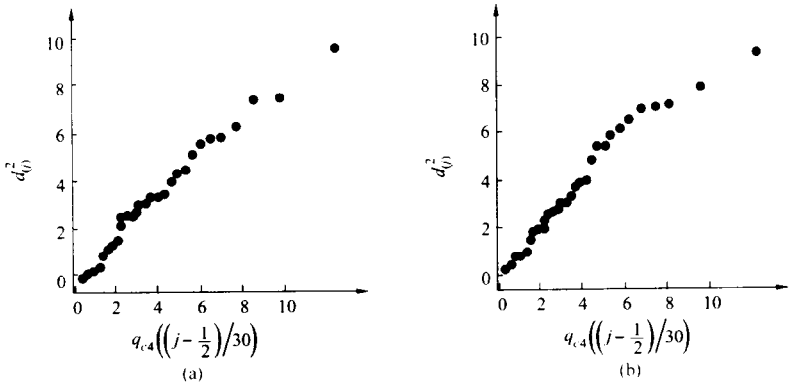


图 4.8　两个 $n=30$ 的模拟四元正态数据集的卡方图

下例给出一个真实的数据集，可与生成图 4.8 的模拟数据集进行比较。

例 4.14　（评估一个四元数据集的多元正态性）

表 4.3 中的数据是对 $n=30$ 块木板的每一块的硬度的四种不同的测量 x_1, x_2, x_3 和 x_4。第一个测量需要给木板传送一个向下的冲击波，第二个测量是当木板振动时测得的，后两个测量是从静态试验中得到的，平方距离 $d_j^2=(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$ 也在表中给出。

表 4.3　硬度的四种测量值

观测值序号	x_1	x_2	x_3	x_4	d^2	观测值序号	x_1	x_2	x_3	x_4	d^2
1	1889	1651	1561	1778	0.60	16	1954	2149	1180	1281	16.85
2	2403	2048	2087	2197	5.48	17	1325	1170	1002	1176	3.50
3	2119	1700	1815	2222	7.62	18	1419	1371	1252	1308	3.99
4	1645	1627	1110	1533	5.21	19	1828	1634	1602	1755	1.36
5	1976	1916	1614	1883	1.40	20	1725	1594	1313	1646	1.46
6	1712	1712	1439	1546	2.22	21	2276	2189	1547	2111	9.90
7	1943	1685	1271	1671	4.99	22	1899	1614	1422	1477	5.06
8	2104	1820	1717	1874	1.49	23	1633	1513	1290	1516	0.80
9	2983	2794	2412	2581	12.26	24	2061	1867	1646	2037	2.54
10	1745	1600	1384	1508	0.77	25	1856	1493	1356	1533	4.58
11	1710	1591	1518	1667	1.93	26	1727	1412	1238	1469	3.40
12	2046	1907	1627	1898	0.46	27	2168	1896	1701	1834	2.38
13	1840	1841	1595	1741	2.70	28	1655	1675	1414	1597	3.00
14	1867	1685	1493	1678	0.13	29	2326	2301	2065	2234	6.28
15	1859	1649	1389	1714	1.08	30	1490	1382	1214	1284	2.58

边缘分布很像是正态的，只有样本（木板）9 有可能例外。（参见练习 4.33。）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

为了进一步评价多元正态性，我们作卡方图，示于图 4.9。具有最大平方距离的两个样本很清楚偏离了直线图形。这两个点以及平方距离其次大的一两个点，使得图形在上面的末端弯曲。在例 4.15 中我们将回过来再对这一图形进行讨论。

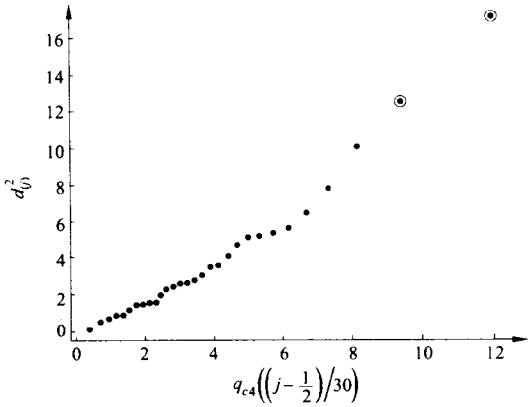


图 4.9　例 4.14 中数据的卡方图

我们已经讨论了一些检验正态性假设的简单方法。特别地，我们提倡计算 d_j^2，$j=1,2,\cdots,n$，[参见式(4-32)]并将结果与 χ^2 分位数相比较。例如，如果：

1. 大约有一半的 d_j^2 小于或等于 $q_{c,p}(0.50)$。

2. 分别与 $q_{c,p}\left(\dfrac{1-\frac{1}{2}}{n}\right)$，$q_{c,p}\left(\dfrac{2-\frac{1}{2}}{n}\right)$，$\cdots$，$q_{c,p}\left(\dfrac{n-\frac{1}{2}}{n}\right)$ 相对应的顺序。

平方距离 $d_{(1)}^2\leqslant d_{(2)}^2\leqslant\cdots\leqslant d_{(n)}^2$ 的图形近似是一条通过原点且斜率为 1 的直线。那么，就表明是 p 元正态的。(关于确定正态性方法的更完整的说明参见[6]。)

我们在本节结束时，要注意一切拟合优度的度量方法具有同样严重的缺点。当样本容量很小，只有最异常的情况会确定为缺乏拟合。另一方面，样本很大时，总量产生统计上显著的缺乏拟合。然而，对规定的分布的偏离可能很小，这对推断结论在技术上并不重要。

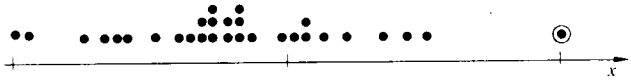
4.7　搜寻离群值及“清洁”数据

大多数数据集含有一个或几个异常的观测结果，它们似乎不属于这个由其他观测值产生的变异性的模型。在一个单一特性的数据中，异常观测值相对于其他值来说，或者是很大或者是很小。在多元数据下情况可能会更为复杂。在着手鉴别**离群值**的问题之前，必须强调不是所有的离群值都是错误的数据。它们有可能是聚类的一部分，并可以使我们更好地理解所研究的现象。

只要可能，最好是直观地搜寻出离群值。当观测值的个数 n 很大时，点图是不可行的。当特性 p 的数目很大时，散布图的数目 $p(p-1)/2$ 很大，会阻止对它们进行总的观察。即使如此，我们建议只要有可能，应首先直观地观察数据。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

我们应当观察什么？对于一个单一的随机变量，问题是一维的，我们寻找远离其他点的观测值。例如，点图



中显示了一个惟一的大的观测值。

在二维情形中，情况较为复杂。图 4.10 显示了有两个异常观测值的情况。

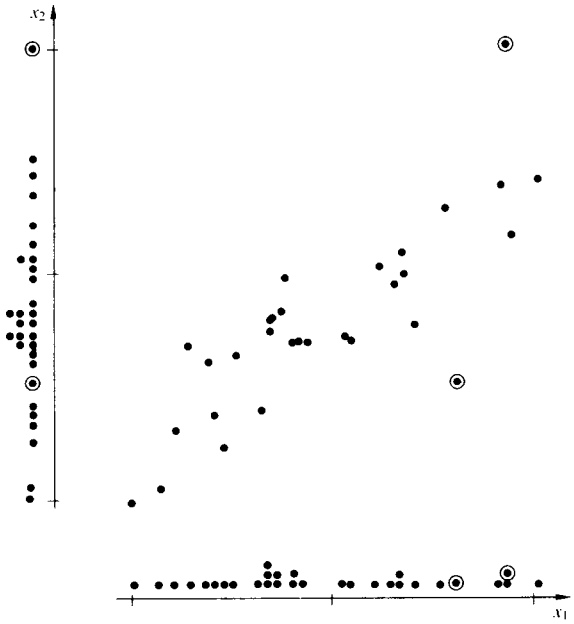


图 4.10　两个离群值；一个单变量和一个双变量

该图右上角带圈的数据点远离图中的图形，并且它的第二个坐标较其余的 x_2 的测量值大，正如垂直点图所显示的。也用圆圈圈起的第二个离群值远离其余点的椭圆形状，但分别来看，它的每一个分量都有一个正常的值。这个离群值不可能靠观察边缘点图搜寻出来。

在高维中，可能有的离群值不能从单变量散布图或者甚至二维散布图中搜寻出来。在这里，$(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$的大值表明有异常观测值，即使它不能直观地看到。

搜寻离群值的步骤

1. 对于每个变量作一个点图。

2. 对于每对变量作一个散布图。

3. 对于 $j=1,2,\cdots,n$ 和每列 $k=1,2,\cdots,p$，计算标准化值 $z_{jk}=(x_{jk}-\bar{x}_k)/\sqrt{s_{kk}}$，检查这些标准化值中的大值和小值。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

4. 计算广义平方距离$(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$，对异常大的值检查这些距离。在卡方图中，这些点应当是离原点最远的点。

步骤 3 中，“大”应当理解为与样本容量和变量个数相比较而言。有 $n\times p$ 个标准化值。当 $n=100$ 且 $p=5$ 时，有 500 个值。即使数据来自一个恰好正态的多元分布，可预期这些值中的 1 或 2 个大于 3 或小于 -3。对于一个中等的样本容量，作为一个指标，3.5 可以认为是大的。

在步骤 4 中，“大”是由自由度为 p 的卡方分布的一个恰当的百分位数来度量的。如果样本容量是 $n=100$，我们应当预期有 5 个观测值的 d_j^2 值超过卡方分布的上第 5 个百分位数。一个较为极端的百分位数应用于确定不拟合其余数据的图形的观测值。

表 4.3 中给出关于木板的数据已经进行过一些清理。来自同一研究的类似数据集还包含对 x_5=张力强度的数据。下表的各行列出的是从 112 个观测值向量中选出的 9 个向量，并给出了其标准化值。

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
1631	1528	1452	1559	1602	0.06	−0.15	0.05	0.28	−0.12
1770	1677	1707	1738	1785	0.64	0.43	1.07	0.94	0.60
1376	1190	723	1285	2791	−1.01	−1.47	−2.87	−0.73	4.57
1705	1577	1332	1703	1664	0.37	0.04	−0.43	0.81	0.13
1643	1535	1510	1494	1582	0.11	−0.12	0.28	0.04	−0.20
1567	1510	1301	1405	1553	−0.21	−0.22	−0.56	−0.28	−0.31
1528	1591	1714	1685	1698	−0.38	0.10	1.10	0.75	0.26
1803	1826	1748	2746	1764	0.78	1.01	1.23	4.65	0.52
1587	1554	1352	1554	1551	−0.13	−0.05	−0.35	0.26	−0.32
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

标准化值是根据从所有 112 个观测值计算出的样本均值和方差得到的。表中有两个极端标准化值。这两个值都太大，超过 4.5。在研究时，研究人员是在记录本中用手记录测量值，然后进行计算，得出表中的值。当他们根据分析结果核对这两个值的记录时，发现了错误所在。值 $x_5=2791$ 被改为 1241，$x_4=2746$ 被改为 1670。通过找到标准化值的大的首位数字的位置，就可以迅速地发现在个别变量上的错误读数。

下面的例题返回到例 4.14 中讨论过的木板数据。

例 4.15 （在木板数据中搜寻离群值）

表 4.4 包含了表 4.3 的数据以及标准化观测值。这些数据由硬度的四种不同的测量值 x_1,x_2,x_3 和 x_4 组成，每种都有 $n=30$ 块木板。第一个测量值是向下传送一个冲击波给木板，第二个测量值是当木板振动时确定的，最后两个测量值是从静态的试验得到的。标准化的测量值是

$$z_{jk}=\frac{x_{jk}-\bar{x}_k}{\sqrt{s_{kk}}},\ k=1,2,3,4;\quad j=1,2,\cdots,30$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

距离的平方是 $d_j^2=(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$。

表 4.4 硬度的四种测量值及标准化值

x_1	x_2	x_3	x_4	观测值序号	z_1	z_2	z_3	z_4	d^2
1889	1651	1561	1778	1	−0.1	−0.3	0.2	0.2	0.60
2403	2048	2087	2197	2	1.5	0.9	1.9	1.5	5.48
2119	1700	1815	2222	3	0.7	−0.2	1.0	1.5	7.62
1645	1627	1110	1533	4	−0.8	−0.4	−1.3	−0.6	5.21
1976	1916	1614	1883	5	0.2	0.5	0.3	0.5	1.40
1712	1712	1439	1546	6	−0.6	−0.1	−0.2	−0.6	2.22
1943	1685	1271	1671	7	0.1	−0.2	−0.8	−0.2	4.99
2104	1820	1717	1874	8	0.6	0.2	0.7	0.5	1.49
2983	2794	2412	2581	9	3.3	3.3	3.0	2.7	12.26
1745	1600	1384	1508	10	−0.5	−0.5	−0.4	−0.7	0.77
1710	1591	1518	1667	11	−0.6	−0.5	0.0	−0.2	1.93
2046	1907	1627	1898	12	0.4	0.5	0.4	0.5	0.46
1840	1841	1595	1741	13	−0.2	0.3	0.3	0.0	2.70
1867	1685	1493	1678	14	−0.1	−0.2	−0.1	−0.1	0.13
1859	1649	1389	1714	15	−0.1	−0.3	−0.4	−0.0	1.08
1954	2149	1180	1281	16	0.1	1.3	−1.1	−1.4	16.85
1325	1170	1002	1176	17	−1.8	−1.8	−1.7	−1.7	3.50
1419	1371	1252	1308	18	−1.5	−1.2	−0.8	−1.3	3.99
1828	1634	1602	1755	19	−0.2	−0.4	0.3	0.1	1.36
1725	1594	1313	1646	20	−0.6	−0.5	−0.6	−0.2	1.46
2276	2189	1547	2111	21	1.1	1.4	0.1	1.2	9.90
1899	1614	1422	1477	22	−0.0	−0.4	−0.3	−0.8	5.06
1633	1513	1290	1516	23	−0.8	−0.7	−0.7	−0.6	0.80
2061	1867	1646	2037	24	0.5	0.4	0.5	1.0	2.54
1856	1493	1356	1533	25	−0.2	−0.8	−0.5	−0.6	4.58
1727	1412	1238	1469	26	−0.6	−1.1	−0.9	−0.8	3.40
2168	1896	1701	1834	27	0.8	0.5	0.6	0.3	2.38
1655	1675	1414	1597	28	−0.8	−0.2	−0.3	−0.4	3.00
2326	2301	2065	2234	29	1.3	1.7	1.8	1.6	6.28
1490	1382	1214	1284	30	−1.3	−1.2	−1.0	−1.4	2.58

表 4.4 中最后一栏显示出样本 16 是一个多元离群值，因为 $\chi_4^2(0.005)=14.86$；所有的单个测量值都处于它们各自的单变量散布范围之内。样本 9 也有一个大的 d^2 值。

这两个平方距离较大的样本(9 和 16)，十分明显与图 4.9 中的其余部分不同。一旦这两点被除去，剩余部分的图形符合期望的直线关系。对于木板硬度测量的散布图，在图 4.11 中给出。图中的实心圆点对应于样本 9 和 16。虽然样本 16 的点在所有图中都与众不同，样本 9 的点在 x_3 与 x_4 的散布图中是“隐藏”的，并且在 x_1 与 x_3 的散布图中几乎是隐藏的。然而，当所有四个变量都考虑时，样本 9 很清楚地确定为一个多元离群值。

专门研究木材性质的科学家们，推测样本 9 是异乎寻常的没有疤痕，所以十分坚硬。样本 16 也显得有点异常，因为它的两个动态的测量值超过平均数而两个静态的测量值都低于平均数。可惜，对于这个样本进一步的研究已不可能，因为无法再获得资料了。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

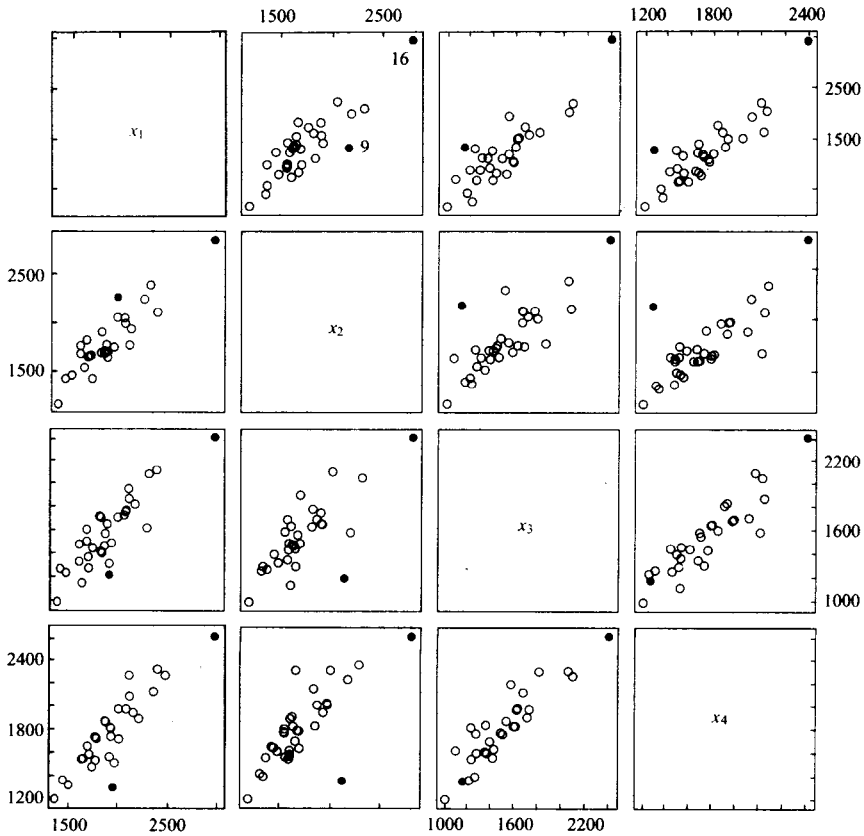


图 4.11　木板硬度数据的散布图，其中样本 9 和 16 用实圆点代表

如果离群值被确定，应当对其内容细查，正如例 4.15 中在木板硬度数据的例子中所做的。视离群值的特性和研究的目的而定，在以后的分析中，离群值可以删去或适当地“加权”。

虽然许多统计方法假定正态总体，那些基于样本均值向量的方法通常不会受几个中等的离群值干扰。霍金斯(Hawkins)[7]给出了关于离群值问题的广泛的论述。

4.8　变换到接近正态性

如果正态性不是一个可行的假定，下一步该怎么办？一个选择是不管正态性检验的结论，把数据当作正态分布来继续进行。我们不推荐这种作法。因为在许多情况下，它可能会导致错误的结论。第二个选择是通过考虑数据变换，使非正态数据更加“朝向正态”。在适当数据变换后，就可以实现正态理论分析。

变换无非是用不同的单位对数据进行重新表述。例如，正观测值的直方图显示出长的右尾时，通过取对数或平方根来变换观测值，经常显著地改进其关于均值的对称性，并且

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

提高对正态分布的近似程度。新单位对所研究的特性常常提供更自然的表达式。

按照(1)理论上的考虑或(2)数据本身(或两者)提出适当的变换。理论上已经证明对属于计数的数据取**平方根**通常可使之更接近正态。类似地,**对数变换**适用于比例,而将费希尔(Fisher)的 **z 变换**应用于相关系数,可产生近似正态分布的量。

向正态性接近的有用变换

原来的标度	变换后的标度	
1. 计数,y	$\sqrt{y}$	
2. 比例,$\hat{p}$	$\text{logit}(\hat{p})=\frac{1}{2}\log\left(\frac{\hat{p}}{1-\hat{p}}\right)$	(4-33)
3. 相关系数,r	费希尔 $z(r)=\frac{1}{2}\log\left(\frac{1+r}{1-r}\right)$	

在许多情况中,选择何种变换来改进对正态性的近似,不是很明显。对于这种情况,令数据假设一个变换是方便的。为此目的一个有效的变换类是**幂变换**。

幂变换只对正变量定义。然而,这并不像看起来的那样有限制性,因为如果某些值是负的,可以把数据集中的每个观测值加上一个常数。

设 x 表示一个任意的观测值。幂类变换是用参数 λ 来标记。对于 λ 来说,一个给定值意味着一个具体的变换。例如,对 x^{λ} 采用 $\lambda=-1$。由于 $x^{-1}=1/x$, λ 的这个选择相当于倒数变换。我们可以按照 x 的幂 λ 的范围从负到正来描绘变换的类。对于 $\lambda=0$,我们定义 $x^0=\ln x$。可能变换的系列为

$$\underbrace{\cdots,\ x^{-1}=\frac{1}{x},\ x^0=\ln x,\ x^{1/4}=\sqrt[4]{x},\ x^{1/2}=\sqrt{x},}_{x\text{的大值缩小}}\quad \underbrace{x^2,x^3,\cdots}_{x\text{的大值增加}}$$

为了选择一个幂变换,研究者察看边缘点图或直方图,并判断是否有大值要"向里拉"或"向外推"以改进关于均值的对称性。用上述的几个变换反复计算,以达到改进的目的。最后的选择总是应当通过 Q-Q 图或其他方法进行检查,以弄清尝试性的正态假设是否令人满意。

我们已讨论过的变换是基于数据进行的,即只有数据形态本身影响对适当变换方法的选择。我们没有考虑外部因素,虽然实际使用何种变换方法,要由数据和数据之外的因素(例如解释的简单性或容易性)所反映的综合信息来确定。

有一种方便的分析方法可用于选择幂变换。我们首先把注意力集中在一元情况。

博克斯(Box)和考克斯(Cox)[3]考虑有稍微修改的幂类变换

$$x^{(\lambda)}=\begin{cases}\dfrac{x^{\lambda}-1}{\lambda} & \lambda\neq 0\\ \ln x & \lambda=0\end{cases}\tag{4-34}$$

它在 $x>0$ 时对 λ 是连续的。(参见[8]。)给定观测值 $x_1,x_2,\cdots,x_n$,选择适当的幂 λ 的博克斯-考克斯解就是使式

$$l(\lambda)=-\frac{n}{2}\ln\left[\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_j^{(\lambda)}-\overline{x^{(\lambda)}})^2\right]+(\lambda-1)\sum_{j=1}^{n}\ln x_j\tag{4-35}$$

最大化的解。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

注意到 $x_j^{(\lambda)}$ 是由式(4-34)定义，且

$$\overline{x^{(\lambda)}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j^{(\lambda)} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{x_j^{\lambda}-1}{\lambda}\right) \tag{4-36}$$

是变换后的观测值的算术平均值。式(4-35)中的第一项，在对总体均值和方差参数求最大值后，除一个常数外，是一个正态似然函数的对数。

对许多 λ 值计算 $l(\lambda)$，对计算机来讲是件容易的工作。为了研究接近最大值的 $\hat{\lambda}$ 的特性，作出 $l(\lambda)$ 与 λ 的图形，并把数对 $(\lambda, l(\lambda))$ 表示成表格，是有用的。例如，如果 $\lambda=0$(对数)或 $\lambda=1/2$(平方根)靠近 $\hat{\lambda}$，由于其简单性，其中之一会被优先选用。

有些统计学家建议，与其进行式(4-35)中的计算，不如用一种等价的方法，即固定 λ 值，建立新变量

$$y_j^{(\lambda)} = \frac{x_j^{\lambda}-1}{\lambda\left[\left(\prod_{i=1}^{n} x_i\right)^{1/n}\right]^{\lambda-1}} \quad j=1,\cdots,n \tag{4-37}$$

然后计算样本方差。方差最小时的 λ 值与使式(4-35)达到最大时的 λ 是相同的。

评注 现在已知道，通过使 $l(\lambda)$ 最大化而得到的变换通常会改进正态性近似。但是，连 λ 的最好的选择都不能保证将产生一个充分符合正态分布的变换数值集。按照式(4-35)选择的变换所产生的结果总应当仔细地检查，因为有可能违背尝试性的正态性假定。这个警告适用于根据任何其他方法选择的变换。

例 4.16 (对一元数据确定幂变换)

在例 4.10 中，我们给出了 $n=42$ 个微波炉放出的在炉门关闭时的辐射量读数。在图 4.6 中，这些数据的 Q-Q 图表明观测值背离了如果它们是正态分布时的期望情形。由于所有的观测值为正，我们对数据进行幂变换，希望它会产生更接近正态的结果。把我们的注意力限制在式(4-34)中给出的一类变换，我们必须寻求 λ 的值，使式(4-35)中的函数 $l(\lambda)$ 达到最大值。

对于 λ 的若干取值，数对 $(\lambda, l(\lambda))$ 列于下表：

λ	$l(\lambda)$	λ	$l(\lambda)$
−1.00	70.52		
−0.90	75.65	0.40	106.20
−0.80	80.46	0.50	105.50
−0.70	84.94	0.60	104.43
−0.60	89.06	0.70	103.03
−0.50	92.79	0.80	101.33
−0.40	96.10	0.90	99.34
−0.30	98.97	1.00	97.10
−0.20	101.39	1.10	94.64
−0.10	103.35	1.20	91.96
0.00	104.83	1.30	89.10
0.10	105.84	1.40	86.07
0.20	106.39	1.50	82.88
0.30	106.51		

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$l(\lambda)$与 λ 之间的曲线图形使我们能更精确地确定 $\hat{\lambda}=0.28$，如图 4.12 所示。

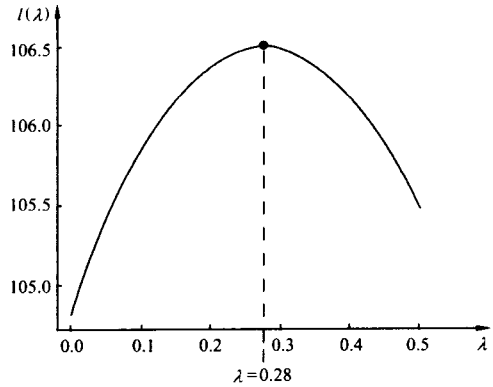


图 4.12　对辐射量数据(炉门关闭)的 $l(\lambda)$与 λ 之间的图形

从表和图二者都明显地看出 $\hat{\lambda}$ 的值在 0.30 附近使 $l(\lambda)$达到最大。为了方便起见，我们选择 $\hat{\lambda}=0.25$。数据 x_j 被重新表示为

$$x_j^{(1/4)}=\frac{x_j^{1/4}-1}{1/4}\quad j=1,2,\cdots,42$$

并按变换后的量构造了 Q-Q 图。该图示于图 4.13。分位数对非常接近一条直线，我们可从这个迹象得出结论，$x_j^{(1/4)}$ 是近似正态的。

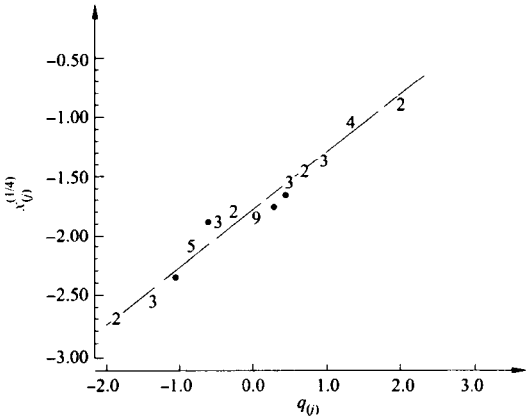


图 4.13　变换后的辐射量数据(炉门关闭)的 Q-Q 图
(图中整数表示处于同一位置的点的个数)

变换多元观测值

对于多元观测值，必须对每个变量选择一个幂变换。设 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 是对于 p 个测量特征的幂变换。每个 λ_k 通过使

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$l_k(\lambda) = -\frac{n}{2}\ln\left[\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(x_{jk}^{(\lambda_k)} - \overline{x_k^{(\lambda_k)}})^2\right] + (\lambda_k - 1)\sum_{j=1}^{n}\ln x_{jk} \tag{4-38}$$

最大化来选择，其中 $x_{1k}, x_{2k}, \cdots, x_{nk}$ 是第 k 个变量的 n 个观测值，$k=1,2,\cdots,p$。这里

$$\overline{x_k^{(\lambda_k)}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}x_{jk}^{(\lambda_k)} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{x_{jk}^{\lambda_k} - 1}{\lambda_k}\right) \tag{4-39}$$

是变换后的观测值的算术平均值。第 j 个变换后的多元观测值是

$$\mathbf{x}_j^{(\lambda)} = \begin{bmatrix} \dfrac{x_{j1}^{\hat{\lambda}_1} - 1}{\hat{\lambda}_1} \\ \dfrac{x_{j2}^{\hat{\lambda}_2} - 1}{\hat{\lambda}_2} \\ \vdots \\ \dfrac{x_{jp}^{\hat{\lambda}_p} - 1}{\hat{\lambda}_p} \end{bmatrix}$$

其中 $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \cdots, \hat{\lambda}_p$ 是分别使式(4-38)达到最大的值。

刚刚描述的方法等价于使每个边缘分布近似正态。虽然边缘正态不能充分地保证联合分布是正态的，在实际应用中，它们可以是足够好的。否则，我们可以从上述变换所得到的 $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \cdots, \hat{\lambda}_p$ 值着手，并迭代得到集合 $\boldsymbol{\lambda}' = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p]$，该集合共同使

$$\begin{aligned} & l(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p) \\ & = -\frac{n}{2}\ln|\mathbf{S}(\boldsymbol{\lambda})| + (\lambda_1 - 1)\sum_{j=1}^{n}\ln x_{j1} + (\lambda_2 - 1)\sum_{j=1}^{n}\ln x_{j2} \\ & \quad + \cdots + (\lambda_p - 1)\sum_{j=1}^{n}\ln x_{jp} \end{aligned} \tag{4-40}$$

最大化，其中 $\mathbf{S}(\boldsymbol{\lambda})$ 是从

$$\mathbf{x}_j^{(\lambda)} = \begin{bmatrix} \dfrac{x_{j1}^{\lambda_1} - 1}{\lambda_1} \\ \dfrac{x_{j2}^{\lambda_2} - 1}{\lambda_2} \\ \vdots \\ \dfrac{x_{jp}^{\lambda_p} - 1}{\lambda_p} \end{bmatrix} \qquad j = 1, 2, \cdots, n$$

计算得到的样本协方差矩阵。

使式(4-40)最大化不仅显著地比使式(4-38)中单个表达式最大化更困难，而且也不大可能得出明显更好的结果。基于式(4-40)的选择方法等价于使一个多元似然函数关于 $\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 最大化，而基于式(4-38)的方法对应于使第 k 个一元似然函数关于 μ_k, σ_{kk} 和 λ_k 达到最大。后一个似然函数是通过自认为存在某个能使观测值 $(x_{jk}^{\lambda_k} - 1)/\lambda_k (j=1,2,\cdots,n)$ 遵从正态分布的 λ^k 而产生的。对一元和多元情形更详细的讨论，分别参见[3]和[2]。(还可参见[8]。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

例 4.17 （对于二元数据确定幂变换）

例 4.10 中引入 $n=42$ 个微波炉在炉门打开时的辐射量也被记录下来。炉门打开时的辐射量列于表 4.5 中。

表 4.5 辐射量数据(炉门打开)

炉号	辐射量	炉号	辐射量	炉号	辐射量
1	0.30	15	0.12	29	0.09
2	0.09	16	0.20	30	0.28
3	0.30	17	0.04	31	0.10
4	0.10	18	0.10	32	0.10
5	0.10	19	0.01	33	0.10
6	0.12	20	0.60	34	0.30
7	0.09	21	0.12	35	0.12
8	0.10	22	0.10	36	0.25
9	0.09	23	0.05	37	0.20
10	0.10	24	0.05	38	0.40
11	0.07	25	0.15	39	0.33
12	0.05	26	0.30	40	0.32
13	0.01	27	0.15	41	0.12
14	0.45	28	0.09	42	0.12

依照例 4.16 中提出的方法，对这些数据通过使式(4-35)中的 $l(\lambda)$ 最大化来选择幂变换。近似的使 $l(\lambda)$ 最大化的值是 $\hat{\lambda}=0.30$。图 4.14 给出炉门打开时的辐射性量数据在未变换和已变换情况下的 Q-Q 图。(这些数据，如例 4.16 中那样，实际上是通过取四次方根变换而来的。)从图形清楚地看到，变换后的数据更接近正态，虽然正态近似效果没有炉门关闭时的数据好。

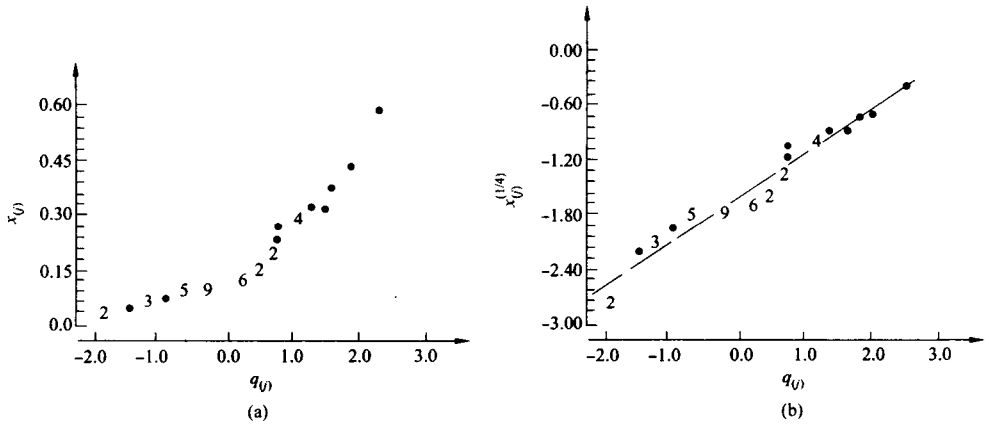


图 4.14 (a) 原始的和(b)变换后的辐射量数据(炉门打开)的 Q-Q 图
(图中整数表示处于同一位置的点的数目)

让我们用 $x_{11},x_{21},\cdots,x_{42,1}$ 表示炉门关闭时的数据，用 $x_{12},x_{22},\cdots,x_{42,2}$ 表示炉门打开

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

时的数据。对每个集合，通过使式(4-35)最大化来选择幂变换，等价于在 $k=1,2$ 时使式(4-38)$l_k(\lambda)$达到最大。因此，利用来自例 4.16 的结果和上述的结果，我们有 $\hat{\lambda}_1=0.30$ 和 $\hat{\lambda}_2=0.30$。这些幂是对于 x_1 和 x_2 的**边缘**分布而确定的。

我们可以考虑 x_1 和 x_2 的**联合**分布并同时确定幂对(λ_1,λ_2)，使得这个联合分布近似二元正态。我们必须使式(4-40)中的 $l(\lambda_1,\lambda_2)$关于 λ_1 和 λ_2 两者达到最大。

对于处于 $0\leqslant\lambda_1\leqslant0.50$ 和 $0\leqslant\lambda_2\leqslant0.50$ 范围内的 λ_1,λ_2，我们计算 $l(\lambda_1,\lambda_2)$，并作如图 4.15 所示的轮廓线图。我们看到最大值出现在$(\hat{\lambda}_1,\hat{\lambda}_2)=(0.16,0.16)$附近。

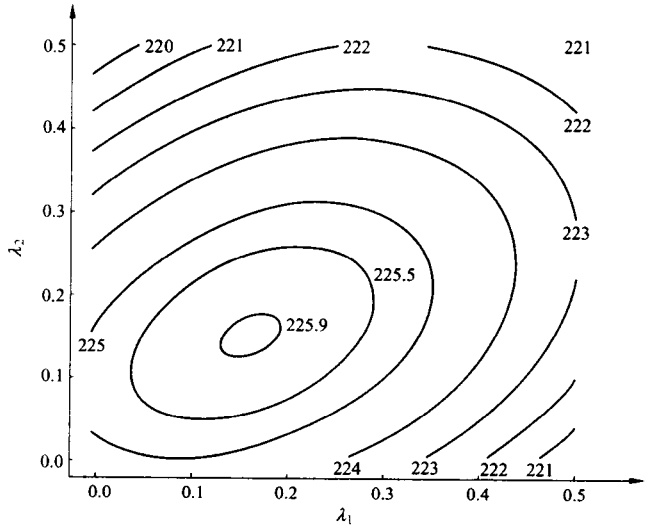


图 4.15　关于辐射量数据 $l(\lambda_1,\lambda_2)$的轮廓线图

对这个二元情形“最好的”幂变换与考虑每个边缘分布所得到的幂变换没有显著差别。

正如我们在例 4.17 中所看到的，使得每个边缘分布近似正态大致地等价于直接地处理二元分布并使得它近似正态。通常对边缘分布比对联合分布更容易选择适当的变换。

练　　习

4.1　设一个二元正态分布有 $\mu_1=1,\mu_2=3,\sigma_{11}=2$，$\sigma_{22}=1$ 和 $\rho_{12}=-0.8$。

(a) 写出二元正态密度。

(b) 把平方统计距离的表达式$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$写成 x_1 和 x_2 的二次函数。

4.2　设一个二元正态总体有 $\mu_1=0,\mu_2=2,\sigma_{11}=2,\sigma_{22}=1$ 和 $\rho_{12}=0.5$。

(a) 写出二元正态密度。

(b) 把广义平方距离的表达式$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$写成 x_1 和 x_2 的函数。

(c) 确定含 50%概率的常密度轮廓线(并画出草图)。

4.3　设 $\mathbf{X}$ 服从 $\boldsymbol{\mu}'=[-3,1,4]$和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}1 & -2 & 0\\ -2 & 5 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}$$

的 $N_3(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，下列各对随机变量中哪几对相互独立？请解释。

(a) X_1 和 X_2

(b) X_2 和 X_3

(c) (X_1,X_2)和 X_3

(d) $\dfrac{X_1+X_2}{2}$和 X_3

(e) X_2 和 $X_2-\dfrac{5}{2}X_1-X_3$

4.4　设 $\mathbf{X}$ 服从 $\boldsymbol{\mu}'=[2,-3,1]$和

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 3 & 2\\ 1 & 2 & 2\end{bmatrix}$$

的 $N_3(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，

(a) 求 $3X_1-2X_2+X_3$ 的分布。

(b) 如果必要，重新给变量标号，并求一个 2×1 向量 $\mathbf{a}$，使得 X_2 与 $X_2-\mathbf{a}'\begin{bmatrix}X_1\\ X_3\end{bmatrix}$相互独立。

4.5　对以下每一个概念作出详细说明。

(a) 对练习 4.2 中的联合分布给定 $X_2=x_2$ 时 X_1 的条件分布。

(b) 对练习 4.3 中的联合分布给定 $X_1=x_1$ 和 $X_3=x_3$ 时 X_2 的条件分布。

(c) 对练习 4.4 中的联合分布给定 $X_1=x_1$ 和 $X_2=x_2$ 时 X_3 的条件分布。

4.6　设 $\mathbf{X}$ 服从 $N_3(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$分布，其中 $\boldsymbol{\mu}'=[1,-1,2]$，

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}4 & 0 & -1\\ 0 & 5 & 0\\ -1 & 0 & 2\end{bmatrix}$$

下列各对随机变量中哪几对相互独立？试说明。

(a) X_1 和 X_2

(b) X_1 和 X_3

(c) X_2 和 X_3

(d) (X_1,X_3)和 X_2

(e) X_1 和 $X_1+3X_2-2X_3$

4.7　参看练习 4.6 详细说明以下每一个概念。

(a) 给定 $X_3=x_3$ 时 X_1 的条件分布。

(b) 给定 $X_2=x_2$ 和 $X_3=x_3$ 时 X_1 的条件分布。

4.8　(一个有正态边缘的非正态二元分布的例子)X_1 服从 $N(0,1)$，且

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$X_2=\begin{cases}-X_1 & 若\ -1\leqslant X_1\leqslant 1\\ X_1 & 其他\end{cases}$$

证明下列命题：

(a) X_2 也服从 $N(0,1)$ 分布。

(b) X_1 和 X_2 不服从二元正态分布。

提示：

(a) 由于 X_1 服从 $N(0,1)$，对任意 x 有 $P[-1<X_1\leqslant x]=P[-x\leqslant X_1<1]$。当 $-1<x_2<1$ 时，$P[X_2\leqslant x_2]=P[X_2\leqslant -1]+P[-1<X_2\leqslant x_2]=P[X_1\leqslant -1]+P[-1<-X_1\leqslant x_2]=P[X_1\leqslant -1]+P[-x_2\leqslant X_1<1]$。然而用本提示开头的对称性论点有 $P[-x_2\leqslant X_1<1]=P[-1<X_1\leqslant x_2]$，因此 $P[X_2\leqslant x_2]=P[X_1\leqslant -1]+P[-1<X_1\leqslant x_2]=P[X_1\leqslant x_2]$ 是一个标准正态概率。

(b) 考虑线性组合 X_1-X_2，它等于 0 且概率 $P[|X_1|>1]=0.3174$。

4.9　参看练习 4.8，但用 c 替换分割点 1 以更改结构，得到

$$X_2=\begin{cases}-X_1 & 若\ -c\leqslant X_1\leqslant c\\ X_1 & 其他\end{cases}$$

证明可以选到 c，使得 $\mathrm{Cov}(X_1,X_2)=0$，但两个随机变量却并不独立。

提示：

对于 $c=0$，计算 $\mathrm{Cov}(X_1,X_2)=E[X_1(X_1)]$。

对于很大的 c，计算 $\mathrm{Cov}(X_1,X_2)\doteq E[X_1(-X_1)]$。

4.10　证明下列命题：

(a)
$$\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}=|\mathbf{A}||\mathbf{B}|$$

(b)
$$\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{C}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}=|\mathbf{A}||\mathbf{B}|，其中\ |\mathbf{A}|\neq 0$$

提示：

(a) $\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{I}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}$。将行列式 $\begin{vmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}$ 按第一行展开（见定义 2A.24），产生一个 1 乘一个降低一阶的 $\mathbf{I}$ 的同样形式的行列式。重复此过程，直到得出 $1\times|\mathbf{B}|$。类似地，将 $\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{I}\end{vmatrix}$ 按最后一行展开，产生 $\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{I}\end{vmatrix}=|\mathbf{A}|$。

(b) $\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{C}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{B}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{I}\end{vmatrix}$。但将行列式 $\begin{vmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{I}\end{vmatrix}$ 按最后一行展开，给出 $\begin{vmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{I}\end{vmatrix}=1$。再利用(a)的结果。

4.11　若 $\mathbf{A}$ 是方阵，证明

$$\begin{aligned}|\mathbf{A}|&=|\mathbf{A}_{22}||\mathbf{A}_{11}-\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21}| && 对\ |\mathbf{A}_{22}|\neq 0\\ &=|\mathbf{A}_{11}||\mathbf{A}_{22}-\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}| && 对\ |\mathbf{A}_{11}|\neq 0\end{aligned}$$

提示：将 $\mathbf{A}$ 分块并证明

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} & \mathbf{I} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}$$

对这个等式的两边取行列式，再对左边第 1 个和第 3 个行列式以及右边的行列式利用练习 4.10 的结果。对 $|\mathbf{A}|$ 的第 2 个等式考虑

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} \end{bmatrix}$$

4.12　若 $\mathbf{A}$ 为对称矩阵，证明

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} & \mathbf{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} (\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} \end{bmatrix}$$

因此，$(\mathbf{A}_{11}-\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21})^{-1}$ 是 $\mathbf{A}^{-1}$ 的左上角的块。

提示：用 $\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} \end{bmatrix}^{-1}$ 左乘练习 4.11 提示中的表达式，并用 $\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21} & \mathbf{I} \end{bmatrix}^{-1}$ 右乘该式，最后对所得结果取逆。

4.13　若 $|\boldsymbol{\Sigma}| \neq 0$，

(a) 检验 $|\boldsymbol{\Sigma}| = |\boldsymbol{\Sigma}_{22}|\,|\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}|$。（注意，$|\boldsymbol{\Sigma}|$ 可以表示成来自边缘分布和条件分布两部分的乘积。）

(b) 检验

$$\begin{aligned}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) &= [\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)]' \\ &\quad \times (\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1}[\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)] \\ &\quad + (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)\end{aligned}$$

（于是，联合密度指数可以写成对应于来自边缘分布和条件分布的两项贡献之和。）

(c) 给定(a)和(b)的结果，指出 $\mathbf{X}_2$ 的边缘分布和 $\mathbf{X}_1|\mathbf{X}_2=\mathbf{x}_2$ 下的条件分布。

提示：

(a) 应用练习 4.11。

(b) 注意到练习 4.12，我们可以将 $(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$ 写作

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix}'\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} (\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \end{bmatrix}$$
$$\times \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix}$$

如果我们组合乘积，使得

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix}$$

便得所需结果。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

4.14　若 $\mathbf{X}$ 的分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 且 $|\boldsymbol{\Sigma}| \neq 0$，试证若 $\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \underset{(q\times(p-q))}{\mathbf{0}}$，则联合密度可写成 $\underset{(q\times 1)}{\mathbf{X}_1}$ 和 $\underset{((p-q)\times 1)}{\mathbf{X}_2}$ 的两个边缘密度的乘积。

提示：用分块乘法证明 $\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \end{bmatrix}$ 为 $\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{bmatrix}$ 的逆。然后写出

$$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) = [(\mathbf{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1)'(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)'] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1 \\ \mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix}$$

$$= (\mathbf{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\mathbf{x}_1-\boldsymbol{\mu}_1) + (\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$$

由练习 4.10(a)注意到 $|\boldsymbol{\Sigma}| = |\boldsymbol{\Sigma}_{11}||\boldsymbol{\Sigma}_{22}|$，便可分解联合密度。

4.15　证明 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'$ 和 $\sum_{j=1}^{n}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$ 二者皆为 $p\times p$ 的零矩阵，此处 $\mathbf{x}_j' = [x_{j1}, x_{j2}, \cdots, x_{jp}]$，$j=1,2,\cdots,n$ 和

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j$$

4.16　设 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3$ 和 $\mathbf{X}_4$ 是独立 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 随机向量。

(a) 对以下两个随机向量求边缘分布：

$$\mathbf{V}_1 = \frac{1}{4}\mathbf{X}_1 - \frac{1}{4}\mathbf{X}_2 + \frac{1}{4}\mathbf{X}_3 - \frac{1}{4}\mathbf{X}_4$$

$$\mathbf{V}_2 = \frac{1}{4}\mathbf{X}_1 + \frac{1}{4}\mathbf{X}_2 - \frac{1}{4}\mathbf{X}_3 - \frac{1}{4}\mathbf{X}_4$$

(b) 求(a)中定义的随机向量 $\mathbf{V}_1$ 和 $\mathbf{V}_2$ 的联合密度。

4.17　设 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3, \mathbf{X}_4$ 和 $\mathbf{X}_5$ 是有均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的独立同分布随机向量，试对这些随机向量的两个线性组合

$$\frac{1}{5}\mathbf{X}_1 + \frac{1}{5}\mathbf{X}_2 + \frac{1}{5}\mathbf{X}_3 + \frac{1}{5}\mathbf{X}_4 + \frac{1}{5}\mathbf{X}_5$$

和

$$\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2 + \mathbf{X}_3 - \mathbf{X}_4 + \mathbf{X}_5$$

分别求均值向量和协方差矩阵，并求这两个线性组合之间的协方差。

4.18　试根据来自二维正态总体的随机样本

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 3 & 6 \\ 4 & 4 \\ 5 & 7 \\ 4 & 7 \end{bmatrix}$$

求 2×1 均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 和 2×2 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计。

4.19　设 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_{20}$ 为来自总体 $N_6(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$，容量 $n=20$ 的一个随机样本，试对下列分布给出完整说明：

(a) $(\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu})$ 的分布。

(b) $\bar{\mathbf{X}}$ 和 $\sqrt{n}(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 的分布。

(c) $(n-1)\mathbf{S}$ 的分布。

4.20　对练习 4.19 中的随机变量 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_{20}$，详细说明以下情况中 $\mathbf{B}(19\mathbf{S})\mathbf{B}'$ 的

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

分布：

(a) $\mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & -1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & -1/2 & 1\end{bmatrix}$

(b) $\mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$

4.21　设 $\mathbf{X}_1,\cdots,\mathbf{X}_{60}$ 为来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 和协方差为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 4 维正态分布的随机样本，其容量为 60。试对下列各项给出完整说明：

(a) $\overline{\mathbf{X}}$ 的分布。

(b) $(\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{X}_1-\boldsymbol{\mu})$ 的分布。

(c) $n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 的分布。

(d) $n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 的近似分布。

4.22　设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_{75}$ 为来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$，协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的总体分布的随机样本，下面每个统计量的近似分布是什么？

(a) $\overline{\mathbf{X}}$

(b) $n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$

4.23　考虑 1963 至 1972 年间道琼斯 30 种工业股票价格指数的年回报率（包括红利）。这些数据乘以 100，便是 20.6，18.7，14.2，−15.7，19.0，7.7，−11.6，8.8，9.8 和 18.2。试利用这 10 个观测值完成下列问题。

(a) 作一个 Q-Q 图。这些数据看起来是否正态分布？请解释。

(b) 完成一个基于相关系数 r_Q 的正态性检验[见式(4-31)]。显著性水平取 $\alpha=0.10$。

4.24　练习 1.4 给出了 1990 年 4 月 10 家最大工业公司三个变量的数据。试对销售额(x_1)和利润(x_2)的数据

(a) 作 Q-Q 图。这些数据看起来是否正态分布？请解释。

(b) 完成一个基于相关系数 r_Q 的正态性检验[见式(4-31)]。显著性水平取 $\alpha=0.10$。这些检验结果能否证实(a)中的结果？

4.25　参看练习 1.4 中 10 个最大工业公司的数据。利用所有三个变量作卡方图。卡方分位数为 0.103　0.325　0.575　0.862　1.196　1.597　2.100　2.773　3.794　5.991。

4.26　练习 1.2 给出 $n=10$ 辆旧车的车龄 x_1(年)和销售价格 x_2(千美元)。这些数据如下：

x_1	3	5	5	7	7	7	8	9	10	11
x_2	2.30	1.90	1.00	0.70	0.30	1.00	1.05	0.45	0.70	0.30

(a) 利用练习 1.2 的结果计算平方统计距离

$$(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}),\ j=1,2,\cdots,10,\quad 其中\ \mathbf{x}_j'=[x_{j1},x_{j2}]。$$

(b) 利用(a)中得出的距离，确定落在二维正态分布估计的 50% 概率轮廓线之内的诸观测值所占的比例。

(c) 将(a)中的距离排序并作卡方图。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(d) 给定(b)和(c)的结果，这些数据是否接近二维正态分布？请解释。

4.27 考虑例 4.10 的射线数据(炉门关闭)。对这些数据的自然对数作 Q-Q 图。[注意自然对数变换对应式(4-34)中的 $\lambda=0$]。这些自然对数看起来是否呈正态分布？将你的结果同图 4.13 相比较。在这种情况下，选择 $\lambda=1/4$ 或 $\lambda=0$ 是否会产生很大差别？

下面的练习需要使用计算机。

4.28 考虑表 1.3 中所给的空气污染数据，对太阳辐射测量值作 Q-Q 图，并根据相关系数 r_Q 完成正态性检验(见式(4-31))。取 $\alpha=0.05$ 并利用表 4.2 中对应于 $n=40$ 的 r_Q 值。

4.29 用表 1.3 中所给的空气污染数据，考察 $X_5=NO_2$ 和 $X_6=O_3$ 这对变量的二维正态性。

(a) 计算统计距离 $(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$，$j=1,2,\cdots,42$，其中 $\mathbf{x}_j'=[x_{j5},\ x_{j6}]$。

(b) 确定落在二维正态分布的大约 50%概率轮廓线之内的观测值 $\mathbf{x}_j'=[x_{j5},x_{j6}]$，$j=1,2,\cdots,42$，所占的比例。

(c) 用(a)中排序距离作卡方图。

4.30 考虑练习 4.26 中旧车数据。

(a) 确定能使 x_1 值接近正态分布的幂变换 $\hat{\lambda}_1$。对变换后的数据作 Q-Q 图。

(b) 确定能使 x_2 值接近正态分布的幂变换 $\hat{\lambda}_2$。对变换后的数据作 Q-Q 图。

(c) 利用式(4-40)，确定能使$[x_1,x_2]$值服从联合正态分布的幂变换 $\hat{\boldsymbol{\lambda}}'=[\hat{\lambda}_1,\hat{\lambda}_2]$。将此结果同(a)和(b)中得出的结果进行比较。

4.31 试对表 1.4 中的多发性硬化数据考察变量 $X_1,X_2,\cdots,X_5$ 观测值的边缘正态性。对非多发硬化和多发硬化两组数据分别进行处理。可以采用你认为合适的任何处理方法，包括变换。

4.32 试对表 1.5 中射线疗法数据考察变量 $X_1,X_2,\cdots,X_6$ 观测值的边缘正态性。可采用你认为合适的包括变换在内的任何方法。

4.33 试对表 4.3 中的数据考察变量 X_1,X_2,X_3 和 X_4 观测值的边缘和二维的正态性。

4.34 考察表 1.6 中骨骼无机物含量数据的边缘和二维的正态性。

4.35 考察表 1.2 中纸张质量测量值数据的边缘和多元的正态性。

4.36 考察表 1.7 中女子全国和地区径赛记录数据的边缘和多元的正态性。

4.37 参看练习 1.18。将表 1.7 中女子径赛记录转变为以米每秒度量的速度。考察这些速度数据的边缘和多元正态性。

4.38 考察表 1.8 中公牛数据的边缘和多元正态性。只考虑变量 YrHgt，FtFrBody，PrctFFB，BkFat，SaleHt，and SaleWt.

参 考 文 献

1. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

2. Andrews, D. F., R. Gnanadesikan, and J. L. Warner. "Transformations of Multivariate Data." *Biometrics*, 27, no. 4 (1971), 825~840.
3. Box, G. E. P., and D. R. Cox. "An Analysis of Transformations" (with discussion). *Journal of the Royal Statistical Society (B)*, 26, no. 2 (1964), 211~252.
4. Daniel, C., and F. S. Wood, *Fitting Equations to Data* (2d ed.). New York: John Wiley, 1980.
5. Filliben, J. J. "The Probability Plot Correlation Coefficient Test for Normality" *Technometrics*, 17, no. 1 (1975), 111~117.
6. Gnanadesikan, R. *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations* New York: John Wiley, 1977.
7. Hawkins, D. M. *Identification of Outliers*. London, UK: Chapman and Hall, 1980.
8. Hernandez, F., and R. A. Johnson. "The Large-Sample Behavior of Transformations to Normality." *Journal of the American Statistical Association*, 75, no. 372 (1980), 855~861.
9. Hogg, R. V., and A. T. Craig. *Introduction to Mathematical Statistics* (4th ed.). New York: Macmillan, 1978.
10. Looney, S. W., and T. R. Gulledge, Jr. "Use of the Correlation Coefficient with Normal Probability Plots." *The American Statistician*, 39, no. 1 (1985), 75~79.
11. Shapiro, S. S., and M. B. Wilk. "An Analysis of Variance Test for Normality (Complete Samples)." *Biometrika*, 52, no. 4 (1965), 591~611.
12. Verrill, S., and R. A. Johnson. "Tables and Large-Sample Distribution Theory for Censored-Data Correlation Statistics for Testing Normality." *Journal of the American Statistical Association*, 83, no. 404 (1988), 1192~1197.
13. Zehna, P. "Invariance of Maximum Likelihood Estimators." *Annals of Mathematical Statistics*, 37, no. 3 (1966), 744.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第二部分

关于多元均值与线性模型的推断

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第5章 均值向量的推断

5.1 引言

本书从这一章起开始转入多元统计学的方法论。我们将利用前面第1章至第4章的各种概念和结论建立数据分析的方法。任何一种分析，其大部分内容均与**统计推断**相联系，即根据来自样本的信息得出有关总体的有效结论。

基于这一观点，我们将集中讨论关于总体均值向量及其分量的统计推断问题。虽然我们将从假设检验开始统计推断的讨论，但我们的最终目的，还是要基于联合置信域的形式给出均值向量诸分量的一个完整的统计分析。

多元分析的精髓之一，就是必须对 p 个相关变量同时进行分析。我们将通过用本章中给出的方法来举例说明这一原理。

5.2 μ_0 作为正态总体均值的似真性

我们先回忆一下在一元统计理论中，判断 μ_0 是否为总体均值 μ 的似真值的假设检验问题。从假设检验的观点出发，这个问题可归结为**检验假设**

$$H_0: \mu = \mu_0, \quad H_1: \mu \neq \mu_0$$

这里 H_0 为零假设，而 H_1 为(双边)备择假设。设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为从一正态总体中抽取的随机样本，那么，合理的检验统计量为

$$t = \frac{(\overline{X} - \mu_0)}{s/\sqrt{n}}, \text{其中 } \overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} X_j,\ s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(X_j - \overline{X})^2$$

这个检验统计量是自由度(d.f.)为 $n-1$ 的 t 分布。如果观测到的 $|t|$ 值超过自由度为 $n-1$ 的 t 分布的某个特定百分位点的值，则拒绝 H_0，即 μ_0 不是 μ 的似真值。

当 $|t|$ 值较大时拒绝 H_0 等价于 t 的平方

$$t^2 = \frac{(\overline{X} - \mu_0)^2}{s^2/n} = n(\overline{X} - \mu_0)(s^2)^{-1}(\overline{X} - \mu_0) \tag{5-1}$$

较大时拒绝 H_0。在式(5-1)中，变量 t^2 为样本均值 $\overline{X}$ 到检验值 μ_0 的距离的平方。距离的单位可用 $s/\sqrt{n}$ 或者 $\overline{X}$ 的估计标准差来表示。一旦观测出 $\overline{X}$ 和 s^2，则检验的原则为：在

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显著性水平 α 下，如果

$$n(\bar{x}-\mu_0)(s^2)^{-1}(\bar{x}-\mu_0)>t_{n-1}^2(\alpha/2) \tag{5-2}$$

则拒绝 H_0 而接受 H_1，其中 $t_{n-1}(\alpha/2)$ 代表自由度为 $n-1$ 的 t 分布的上 $100(\alpha/2)$ 百分位数。

如果 H_0 没有被拒绝，那么我们就认为 μ_0 为正态总体均值的似真值。然而，问题是，是否还有 μ 的其他值与数据相吻合呢？回答是肯定的。事实上，总是存在正态总体均值的一个似真值集合。从众所周知的检验假设 H_0：$\mu=\mu_0$，H_1：$\mu\neq\mu_0$ 的接受域与 μ 的置信区间的对应关系，我们有

{在显著性水平 α 下，H_0：$\mu=\mu_0$ 未被拒绝}或

$$\left|\frac{\bar{x}-\mu_0}{s/\sqrt{n}}\right|\leqslant t_{n-1}(\alpha/2)$$

等价于

$$\left\{\mu_0 \text{ 落在 } 100(1-\alpha)\%\text{置信区间 } \bar{x}\pm t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s}{\sqrt{n}}\right\}\text{或}$$

$$\bar{x}-t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s}{\sqrt{n}}\leqslant\mu_0\leqslant\bar{x}+t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s}{\sqrt{n}} \tag{5-3}$$

因此，在水平 α 下，没有被假设 H_0：$\mu=\mu_0$ 的检验拒绝的所有值 μ_0 构成了这个置信区间。

在样本尚未选出之前，式(5-3)中的 $100(1-\alpha)\%$ 置信区间是一个**随机区间**，因为该区间的两个端点依赖于随机变量 $\bar{X}$ 和 s。该区间包含 μ 的概率为 $1-\alpha$；在大量这样的独立区间中，大约有 $100(1-\alpha)\%$ 的区间包含 μ。

现在我们考虑对一给定的 $p\times1$ 向量 $\boldsymbol{\mu}_0$，判断它是否为多元正态分布均值的似真值的假设检验问题。我们将采用对方才所讨论的一元问题作类比推广的方法来处理这个问题。

式(5-1)中平方距离的多元情形的一个自然推广形式是

$$T^2=(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\left(\frac{1}{n}\mathbf{S}\right)^{-1}(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}_0)=n(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}_0) \tag{5-4}$$

其中

$$\underset{(p\times1)}{\bar{\mathbf{X}}}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{X}_j,\quad \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}}=\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})',\text{且 }\underset{(p\times1)}{\boldsymbol{\mu}_0}=\begin{bmatrix}\mu_{10}\\ \mu_{20}\\ \vdots\\ \mu_{p0}\end{bmatrix}$$

统计量 T^2 的分布最早是由多元分析的先驱者霍特林(Hotelling)得出的，为纪念这位先驱者，我们通常称该统计量为**霍特林 T^2 统计量**。式(5-4)中的 $(1/n)\mathbf{S}$ 为 $\bar{\mathbf{X}}$ 的协方差矩阵的估计量(见结论 3.1)。

如果观察到的统计距离 T^2 太大，也就是说，$\bar{\mathbf{x}}$ 与 $\boldsymbol{\mu}_0$ 距离太远，那么我们就拒绝假设 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$。需要指出的是，在检验该假设时，我们并不需要特殊的 T^2 百分位数表，这是因为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$T^2 \text{ 与 } \frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p} \text{ 同分布} \tag{5-5}$$

其中 $F_{p,n-p}$ 为服从自由度为 p 和 $n-p$ 的 F 分布随机变量。

概括起来，我们有如下结论：

> 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为从总体 $N_p(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\Sigma})$ 中抽取的一随机样本。记 $\overline{\mathbf{X}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{X}_j$，$\mathbf{S} = \frac{1}{(n-1)}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\overline{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\overline{\mathbf{X}})'$，那么
>
> $$\begin{aligned}\alpha &= P\left[T^2 > \frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)\right]\\ &= P\left[n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}) > \frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)\right]\end{aligned} \tag{5-6}$$
>
> 对所有 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}$ 成立，这里 $F_{p,n-p}(\alpha)$ 为 $F_{p,n-p}$ 分布的上 100α 百分位数。

从式(5-6)可立即得到假设 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$，$H_1$：$\boldsymbol{\mu}\neq\boldsymbol{\mu}_0$ 的一个检验方法。若在显著性水平 α 下，

$$T^2 = n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0) > \frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha) \tag{5-7}$$

则拒绝 H_0 而接受 H_1。

简要讨论一下 T^2 分布的实质及其与一元检验统计量之间的对应关系，有助于我们对 T^2 分布的了解。在 4.4 节中我们曾指出，威沙特分布是 χ^2 分布的推广，由于

$$T^2 = \sqrt{n}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\left(\frac{\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\overline{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\overline{\mathbf{X}})'}{n-1}\right)^{-1}\sqrt{n}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}_0)$$

通过关系

$$\begin{aligned}T^2_{p,n-1} &= \begin{pmatrix}\text{多元正态}\\ \text{随机向量}\end{pmatrix}'\left(\frac{\text{威沙特随机矩阵}}{\text{自由度}}\right)^{-1}\begin{pmatrix}\text{多元正态}\\ \text{随机向量}\end{pmatrix}\\ &= N_p(\mathbf{0},\ \boldsymbol{\Sigma})'\left[\frac{1}{n-1}\mathbf{W}_{p,n-1}(\boldsymbol{\Sigma})\right]^{-1}N_p(\mathbf{0},\ \boldsymbol{\Sigma})\end{aligned} \tag{5-8}$$

与正态随机向量 $N_p(\mathbf{0},\ \boldsymbol{\Sigma})$ 及威沙特随机矩阵 $\mathbf{W}_{p,n-1}(\boldsymbol{\Sigma})$ 相联系。所以，T^2 与一元情形下的

$$t^2 = \sqrt{n}(\overline{X}-\mu_0)(s^2)^{-1}\sqrt{n}(\overline{X}-\mu_0)$$

或

$$t^2_{n-1} = (\text{正态随机变量})\left(\frac{\chi^2\text{ 随机变量}}{\text{自由度}}\right)^{-1}(\text{正态随机变量})$$

类似。由于多元正态随机变量的分布与威沙特随机变量的分布相互独立[见式(4-23)]，因此它们的联合密度函数等于边缘正态分布与威沙特分布之积。利用这个联合分布及表达式(5-8)，通过积分可推导出式(5-5)T^2 的分布。

在多元情形中，人们很少满足于检验假设 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$，在这个零假设中，均值向量的所有分量都是完全确定的。人们通常更倾向于按照观测数据寻求一个 $\boldsymbol{\mu}$ 的似真值区域。我们

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

将在 5.4 节中再讨论这个问题。

例 5.1 （T^2 的计算）

设一个容量为 $n=3$ 的随机样本取自二维正态总体，其数据矩阵为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}6 & 9\\10 & 6\\8 & 3\end{bmatrix}$$

试对 $\boldsymbol{\mu}_0'=[9,5]$ 计算 T^2 的观测值。此时 T^2 的抽样分布是什么？注意到

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}\bar{x}_1\\\bar{x}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\dfrac{6+10+8}{3}\\\dfrac{9+6+3}{3}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8\\6\end{bmatrix}$$

且

$$s_{11}=\frac{(6-8)^2+(10-8)^2+(8-8)^2}{2}=4$$

$$s_{12}=\frac{(6-8)(9-6)+(10-8)(6-6)+(8-8)(3-6)}{2}=-3$$

$$s_{22}=\frac{(9-6)^2+(6-6)^2+(3-6)^2}{2}=9$$

故

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}4 & -3\\-3 & 9\end{bmatrix}$$

从而

$$\mathbf{S}^{-1}=\frac{1}{4\times 9-(-3)\times(-3)}\begin{bmatrix}9 & 3\\3 & 4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\dfrac{1}{3} & \dfrac{1}{9}\\\dfrac{1}{9} & \dfrac{4}{27}\end{bmatrix}$$

由式(5-4)，我们有

$$T^2=3[8-9,6-5]\begin{bmatrix}\dfrac{1}{3} & \dfrac{1}{9}\\\dfrac{1}{9} & \dfrac{4}{27}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}8-9\\6-5\end{bmatrix}=3[-1,1]\begin{bmatrix}-\dfrac{2}{9}\\\dfrac{1}{27}\end{bmatrix}=\frac{7}{9}$$

在样本被选出之前，T^2 的分布与随机变量 $\dfrac{(3-1)\times 2}{(3-2)}F_{2,3-2}=4F_{2,1}$ 的分布一致。

下面的例子说明如何对假设 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$ 进行检验，数据来源于威斯康星大学医学院对新诊断技术的一项研究工作。

例 5.2 （用 T^2 检验多元均值向量）

对 20 名健康女性的汗液进行分析，测出汗液的三种成分：X_1=排汗量，X_2=钠含量，X_3=钾含量。数据列于表 5.1。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 5.1 汗液数据

试验者	X_1(排汗量)	X_2(钠含量)	X_3(钾含量)
1	3.7	48.5	9.3
2	5.7	65.1	8.0
3	3.8	47.2	10.9
4	3.2	53.2	12.0
5	3.1	55.5	9.7
6	4.6	36.1	7.9
7	2.4	24.8	14.0
8	7.2	33.1	7.6
9	6.7	47.4	8.5
10	5.4	54.1	11.3
11	3.9	36.9	12.7
12	4.5	58.8	12.3
13	3.5	27.8	9.8
14	4.5	40.2	8.4
15	1.5	13.5	10.1
16	8.5	56.4	7.1
17	4.5	71.6	8.2
18	6.5	52.8	10.9
19	4.1	44.1	11.2
20	5.5	40.9	9.4

资料来源：数据经 Gerald Bargman 博士许可使用。

需要检验假设 H_0：$\boldsymbol{\mu}'=[4,50,10]$，$H_1$：$\boldsymbol{\mu}'\neq[4,50,10]$，显著性水平为 $\alpha=0.10$。由计算机算得

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}4.640\\45.400\\9.965\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}2.879 & 10.010 & -1.810\\10.010 & 199.788 & -5.640\\-1.810 & -5.640 & 3.628\end{bmatrix}$$

和

$$\mathbf{S}^{-1}\doteq\begin{bmatrix}0.586 & -0.022 & 0.258\\-0.022 & 0.006 & -0.002\\0.258 & -0.002 & 0.402\end{bmatrix}$$

于是有

$$T^2=20[4.640-4,45.400-50,9.965-10]\begin{bmatrix}0.586 & -0.022 & 0.258\\-0.022 & 0.006 & -0.002\\0.258 & -0.002 & 0.402\end{bmatrix}$$

$$\times\begin{bmatrix}4.640-4\\45.400-50\\9.965-10\end{bmatrix}$$

$$=20[0.640,-4.600,-0.035]\begin{bmatrix}0.467\\-0.042\\0.160\end{bmatrix}=9.74$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

将观察值 $T^2=9.74$ 与临界值

$$\frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.10)=\frac{19\times 3}{17}\times F_{3,17}(0.10)=3.353\times 2.44=8.18$$

比较，发现 $T^2=9.74>8.18$，所以我们在 10% 显著性水平下拒绝 H_0。

我们注意到，如果均值向量的一个或多个分量，或者这些分量的某种线性组合与假设值[4,50,10]相差很大，则 H_0 将被拒绝。此时，我们就不知道哪几个假设值可能得不到数据的支持。

由于我们假定汗液数据服从多元正态分布，所以由 X_1，X_2 和 X_3 的边缘分布构造的那些 Q-Q 图全都接近一条直线。此外，各对观测值的散点图都呈椭圆形，因而，正态性假设在此处是合理的(见练习 5.4)。

T^2 统计量的一个特点，就是对下列形式的 $\mathbf{X}$ 度量单位的改变具有不变性：

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{Y}}=\underset{(p\times p)}{\mathbf{C}}\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}}+\underset{(p\times 1)}{\mathbf{d}},\quad \mathbf{C}\text{ 为非奇异矩阵} \tag{5-9}$$

当我们先从第 i 个变量减去常数 b_i 得 X_i-b_i，再乘以常数 $a_i>0$ 得到 $a_i(X_i-b_i)$ 时，就产生出上述观测值变换，然后再用任一非奇异矩阵左乘先中心化再按比例增减后的诸量 $a_i(X_i-b_i)$，便得出式(5-9)。由 X_i 到 $a_i(X_i-b_i)$ 这种变换的一个例子，就是从华氏温度到摄氏温度的换算公式。

给定观测值 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 及变换式(5-9)，从结论 3.6 立即推得

$$\bar{\mathbf{y}}=\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{d}\quad 及\quad \mathbf{S}_y=\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{y}_j-\bar{\mathbf{y}})(\mathbf{y}_j-\bar{\mathbf{y}})'=\mathbf{CSC}'$$

而且，由式(2-24)及式(2-45)有

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}=E(\mathbf{Y})=E(\mathbf{CX}+\mathbf{d})=E(\mathbf{CX})+E(\mathbf{d})=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}+\mathbf{d}$$

因此，从 $\mathbf{y}$ 与假设值 $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y},0}=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_0+\mathbf{d}$ 算出的 T^2 为

$$\begin{aligned}T^2&=n(\bar{\mathbf{y}}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y},0})'\mathbf{S}_{\mathbf{y}}^{-1}(\bar{\mathbf{y}}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y},0})\\&=n(\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0))'(\mathbf{CSC}')^{-1}(\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0))\\&=n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{C}'(\mathbf{CSC}')^{-1}\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)\\&=n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{C}'(\mathbf{C}')^{-1}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)=n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)\end{aligned}$$

最后的这个表达式就是从观测值 $\mathbf{x}$ 算出的 T^2 值。

5.3 霍特林 T^2 与似然比检验

我们通过与一元平方距离 t^2 的类比引进了 T^2 统计量。在构造检验方法时存在一个一般原理，即所谓**似然比方法**，而 T^2 统计量则能从 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$ 的似然比检验导出。似然比检验的一般理论已超出本书范围(见[3]的处理方法)。似然比检验对充分大的样本有一些优良性质，而利用这些性质处理以多元正态参数形式陈述的假设时特别方便。

由式(4-18)可知，对一切可能的 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}$，多元正态似然函数的最大值为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\max_{\mu,\Sigma} L(\mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\hat{\Sigma}|^{n/2}} e^{-np/2} \tag{5-10}$$

其中，

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})' \text{ 和 } \hat{\mu} = \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j$$

分别为 Σ 和 μ 的极大似然估计量。前面已指出，对 μ 及 Σ 而言，选取极大似然估计量 $\hat{\mu}$ 及 $\hat{\Sigma}$ 能最好地刻画随机样本的观测值。

在假设 H_0：$\mu=\mu_0$ 下，正态似然函数为

$$L(\mu_0, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\Sigma|^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mu_0)'\Sigma^{-1}(\mathbf{x}_j - \mu_0)\right)$$

现在均值 μ_0 是固定的。但在固定 μ_0 的条件下可让 Σ 变化，以寻求其使似然函数为最大的值（即“最可能”导致所观察到的样本的值），因此，我们需要使 $L(\mu_0,\Sigma)$ 相对 Σ 极大化。

根据式(4-13)的步骤，$L(\mu_0,\Sigma)$ 中的指数部分可写为

$$\begin{aligned}-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mu_0)'\Sigma^{-1}(\mathbf{x}_j - \mu_0) &= -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[\Sigma^{-1}(\mathbf{x}_j - \mu_0)(\mathbf{x}_j - \mu_0)'] \\ &= -\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[\Sigma^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mu_0)(\mathbf{x}_j - \mu_0)'\right)\right]\end{aligned}$$

对 $\mathbf{B} = \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mu_0)(\mathbf{x}_j - \mu_0)'$ 和 $b=n/2$ 应用结论 4.10，我们有

$$\max_{\Sigma} L(\mu_0,\Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\hat{\Sigma}_0|^{n/2}} e^{-np/2} \tag{5-11}$$

其中

$$\hat{\Sigma}_0 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mu_0)(\mathbf{x}_j - \mu_0)'$$

为了确定 μ_0 是否为 μ 的似真值，将 $L(\mu_0,\Sigma)$ 的最大值与无限制的 $L(\mu,\Sigma)$ 的最大值相比较，所得出的比值就是所谓的**似然比统计量**。

由式(5-10)和式(5-11)可得

$$\text{似然比} = \Lambda = \frac{\max_{\Sigma} L(\mu_0,\Sigma)}{\max_{\mu,\Sigma} L(\mu,\Sigma)} = \left(\frac{|\hat{\Sigma}|}{|\hat{\Sigma}_0|}\right)^{n/2} \tag{5-12}$$

与此等价的统计量 $\Lambda^{2/n}=|\hat{\Sigma}|/|\hat{\Sigma}_0|$ 称为**威尔克斯 Λ 统计量**。如果这个似然比的观测值太小，则假设 H_0：$\mu=\mu_0$ 不大可能为真，应予拒绝。尤其是当

$$\Lambda = \left(\frac{|\hat{\Sigma}|}{|\hat{\Sigma}_0|}\right)^{n/2} = \left(\frac{\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'\right|}{\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mu_0)(\mathbf{x}_j - \mu_0)'\right|}\right)^{n/2} < c_\alpha \tag{5-13}$$

时，假设 H_0：$\mu=\mu_0$，H_1：$\mu\neq\mu_0$ 的似然比检验拒绝 H_0，这里 c_α 为 Λ 分布的第 100α 个下百分位数。（注意，似然比检验统计量为广义方差比的某次幂。）幸好 T^2 与 Λ 之间存在下面的联系，因此在检验时我们不需知道 Λ 的分布。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

结论 5.1 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为取自正态总体 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的一个随机样本。此时由于 $\Lambda^{2/n}=\left(1+\frac{T^2}{(n-1)}\right)^{-1}$，式(5-7)中根据 T^2 进行的检验等价于 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$，$H_1$：$\boldsymbol{\mu}\neq\boldsymbol{\mu}_0$ 的似然比检验。

证明 令 $(p+1)\times(p+1)$ 矩阵 $\mathbf{A}$ 为

$$\mathbf{A}=\left[\begin{array}{c:c}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})' & \sqrt{n}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)\\ \hdashline \sqrt{n}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)' & -1\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12}\\ \hdashline \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22}\end{array}\right]$$

由练习 4.11 知 $|\mathbf{A}|=|\mathbf{A}_{22}||\mathbf{A}_{11}-\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22}^{-1}\mathbf{A}_{21}|=|\mathbf{A}_{11}||\mathbf{A}_{22}-\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}|$，从而有

$$(-1)\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\right|$$

$$=\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right|\left|-1-n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right)^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)\right|$$

根据式(4-14)，

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}_0)'&=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}+\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}+\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\\&=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\end{aligned}$$

所以前述等式可写为

$$(-1)\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}_0)'\right|=\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right|(-1)\left(1+\frac{T^2}{(n-1)}\right)$$

或

$$|n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_0|=|n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|\left(1+\frac{T^2}{(n-1)}\right)$$

于是

$$\Lambda^{2/n}=\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_0|}=\left(1+\frac{T^2}{(n-1)}\right)^{-1}\tag{5-14}$$

对小的 $\Lambda^{2/n}$ 值(或等价地对大的 T^2 值)，假设 H_0 将被拒绝。T^2 的临界值由式(5-6)确定。

顺便提一句，式(5-14)表明了 T^2 可从两个行列式算得，这样就避免了 $\mathbf{S}^{-1}$ 的计算。解式(5-14)，可得

$$\begin{aligned}T^2&=\frac{(n-1)|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_0|}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}-(n-1)\\&=\frac{(n-1)\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{x}_j-\boldsymbol{\mu}_0)'\right|}{\left|\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right|}-(n-1)\end{aligned}\tag{5-15}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

似然比检验在多元分析中是很常用的。正如我们将要指出的那样，这种检验所具有的优良大样本性质在很大范围内都成立。似然比检验适用于本书所考虑的检验问题。在一元情形下，似然比方法所产生的统计量正是大家熟知的 F 统计量与 t 统计量。

广义似然比方法

现在我们考虑广义似然比方法，设 $\boldsymbol{\theta}$ 是由总体所有未知参数所组成的向量，$L(\boldsymbol{\theta})$ 为由 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 的联合密度在其观测值 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 处算得的似然函数。参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 在参数集 $\boldsymbol{\Theta}$ 中取值。例如，在 p 维多元正态情形下，$\boldsymbol{\theta}'=[\mu_1,\cdots,\mu_p,\ \sigma_{11},\ \cdots,\ \sigma_{1p},\ \sigma_{22},\cdots,\ \sigma_{2p},\ \cdots,\ \sigma_{p-1,p},\ \sigma_{pp}]$，而 $\boldsymbol{\Theta}$ 则由 p 维空间的并组成，此处 $-\infty<\mu_1<\infty,\cdots,-\infty<\mu_p<\infty$，且 $p(p+1)/2$ 维方差及协方差空间要满足 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为正定的条件。因此，$\boldsymbol{\Theta}$ 的维数为 $\nu=p+p(p+1)/2$。在零假设 H_0：$\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0$ 下，$\boldsymbol{\theta}$ 被限制在 $\boldsymbol{\Theta}$ 的一个子集 $\boldsymbol{\Theta}_0$ 中。对 $\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$ 而 $\boldsymbol{\Sigma}$ 未指定的多元正态情形下，$\boldsymbol{\Theta}_0=\{\mu_1=\mu_{10},\ \mu_2=\mu_{20},\cdots,\mu_p=\mu_{p0};\ \sigma_{11},\ \cdots,\ \sigma_{1p},\ \sigma_{22},\ \cdots,\ \sigma_{2p},\ \cdots,\ \sigma_{p-1,p},\ \sigma_{pp}$ 且 $\boldsymbol{\Sigma}$ 正定$\}$ 故 $\boldsymbol{\Theta}_0$ 的维数 $\nu_0=0+p(p+1)/2=p(p+1)/2$。

若

$$\Lambda=\frac{\max\limits_{\boldsymbol{\theta}\in\boldsymbol{\Theta}_0}L(\boldsymbol{\theta})}{\max\limits_{\boldsymbol{\theta}\in\boldsymbol{\Theta}}L(\boldsymbol{\theta})}<c \tag{5-16}$$

则似然比检验拒绝假设 H_0：$\boldsymbol{\theta}\in\boldsymbol{\Theta}_0$，而接受假设 H_1：$\boldsymbol{\theta}\notin\boldsymbol{\Theta}_0$。这里 c 为适当选定的常数。凭直觉来看，如果 $\boldsymbol{\theta}$ 在 $\boldsymbol{\Theta}_0$ 上变化时所得的最大似然函数值比 $\boldsymbol{\theta}$ 在 $\boldsymbol{\Theta}$ 上变化时要小得多，就拒绝 H_0，即当式(5-16)中的分子比分母小得多时，$\boldsymbol{\Theta}_0$ 不包含 $\boldsymbol{\theta}$ 的似真值。

在似然比方法的各种应用中，我们必须知道似然比检验统计量 Λ 的抽样分布。于是可在给定的显著性水平 α_0 下，选定检验法中的 c 值。但是，当样本容量很大且满足一定的正则性条件时，$-2\ln\Lambda$ 的抽样分布与 χ^2 分布十分接近。这一吸引人的特征部分地说明了为什么似然比方法如此流行。

结论 5.2 当样本容量 n 很大时，

$$-2\ln\Lambda=-2\ln\left(\frac{\max\limits_{\boldsymbol{\theta}\in\boldsymbol{\Theta}_0}L(\boldsymbol{\theta})}{\max\limits_{\boldsymbol{\theta}\in\boldsymbol{\Theta}}L(\boldsymbol{\theta})}\right)\text{近似等于随机变量 }\chi^2_{\nu-\nu_0}$$

这里自由度 $\nu-\nu_0=\boldsymbol{\Theta}$ 的维数$-\boldsymbol{\Theta}_0$ 的维数。

统计检验的优劣可以通过它们的**功效函数**进行比较，所谓功效函数，是对每一个参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 算出的高度为 P(检验拒绝 $H_0|\boldsymbol{\theta}$)的曲线或曲面。功效函数所度量的是当 H_0 非真时，检验法拒绝 H_0 的能力。在 H_0 中 $\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0$ 完全确定而备择假设 H_1 由单一值 $\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_1$ 构成这种罕见情形下，对相同的显著性水平 $\alpha=P$(检验拒绝 $H_0|\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0$)，似然比检验的功效比别的检验都要大。对于许多单参数情形(即 $\boldsymbol{\theta}$ 只有一个分量)，似然比检验同样具有最大功效。对其他情形，此种性质只对大样本近似成立。

对多元分析中似然比检验的一些最优性质的讨论，我们暂时不给出其具体细节。在本书中，此性质的含意就是当样本容量很大时，似然比检验具有最大可能的(平均)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

功效。

5.4 置信域和均值分量的联合比较

为得到利用样本进行推断的基本方法，我们需要把一元置信区间的概念推广到多元**置信域**。设 $\boldsymbol{\theta}$ 为总体未知参数向量，$\boldsymbol{\Theta}$ 为 $\boldsymbol{\theta}$ 所有可能值的集合。置信域就是 $\boldsymbol{\theta}$ 很可能有的那些值的集合。置信域是通过样本数据来确定的，我们暂且用 $R(\mathbf{X})$ 来表示，这里 $\mathbf{X}=[\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n]'$ 为数据矩阵。

若在样本被抽取之前有

$$P[R(\mathbf{X})\text{ 包含真值 }\boldsymbol{\theta}]=1-\alpha \tag{5-17}$$

且称区域 $R(\mathbf{X})$ 为 $\boldsymbol{\theta}$ 的 $100(1-\alpha)\%$**置信域**，其中的概率是在参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的未知真值处计算的。

对 p 维正态总体，其均值 $\boldsymbol{\mu}$ 的置信域可由式(5-6)获得。在样本被抽取之前，对任意未知的 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}$，有

$$P\left[n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)\right]=1-\alpha$$

换句话说，假如距离以 $n\mathbf{S}^{-1}$ 的形式给出，那么 $\overline{\mathbf{X}}$ 与 $\boldsymbol{\mu}$ 的距离以概率 $1-\alpha$ 落在 $[(n-1)pF_{p,n-p}(\alpha)/(n-p)]^{1/2}$ 内。对某一特定样本，可以算出其 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$，而其置信域 $R(\mathbf{X})$ 由满足下列不等式的所有参数 $\boldsymbol{\mu}$ 所确定：$n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant(n-1)pF_{p,n-p}(\alpha)/(n-p)$。在此情形下，置信域为一中心在 $\bar{\mathbf{x}}$ 的椭球，这个椭球就是 $\boldsymbol{\mu}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 置信域。

> p 维正态分布均值 $\boldsymbol{\mu}$ 的 $100(1-\alpha)\%$**置信域**是一椭球，它由满足下式的 $\boldsymbol{\mu}$ 的集合所构成：
>
> $$n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha) \tag{5-18}$$
>
> 这里 $\bar{\mathbf{x}}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j$，$\mathbf{S}=\frac{1}{(n-1)}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$ 而 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 为样本观测值。

为确定是否任何 $\boldsymbol{\mu}_0$ 都落在该置信域内(即 $\boldsymbol{\mu}_0$ 为 $\boldsymbol{\mu}$ 的一个似真值)，我们需要计算广义平方距离 $n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)$，并把它与 $[p(n-1)/(n-p)]F_{p,n-p}(\alpha)$ 作比较。若该广义平方距离大于 $[p(n-1)/(n-p)]F_{p,n-p}(\alpha)$，则 $\boldsymbol{\mu}_0$ 不落在该置信域中。由于这种情况与检验 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$，$H_1$：$\boldsymbol{\mu}\neq\boldsymbol{\mu}_0$ 相类似[见式(5-7)]，由此推知置信域(5-18)由所有使 T^2 检验在显著性水平 α 之下不拒绝 H_0 的那些 $\boldsymbol{\mu}_0$ 所组成。

对 $p\geqslant4$ 的情形，虽然我们画不出 $\boldsymbol{\mu}$ 的联合置信域的图形，但可计算出其置信椭球的主轴及其相对长度。它们可由 $\mathbf{S}$ 的特征根 λ_i 与特征向量 $\mathbf{e}_i$ 确定。与式(4-7)一样，我们可以通过沿特征向量 $\mathbf{e}_i$ 移动 $\sqrt{\lambda_i}c/\sqrt{n}=\sqrt{\lambda_i}\sqrt{p(n-1)F_{p,n-p}(\alpha)/n(n-p)}$ 个单位来确定椭球

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}) \leqslant c^2 = \frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)$$

主轴的方向和长度。若以 $\bar{\mathbf{x}}$ 为中心，则该置信椭球的主轴为

$$\pm\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\mathbf{e}_i,\ 其中\ \mathbf{S}\mathbf{e}_i = \lambda_i\mathbf{e}_i,\ i=1,2,\cdots,p \tag{5-19}$$

各种 λ_i 的比值将帮助我们识别沿每对主轴的相对延伸长度。

例 5.3 （μ 的置信椭球的构造）

我们沿用例 4.10 和例 4.17 的有关微波炉辐射的数据。设

$$x_1 = \sqrt[4]{炉门关闭时辐射的测量值}$$

$$x_2 = \sqrt[4]{炉门打开时辐射的测量值}$$

对于 $n=42$ 对经上述变换后的数据，我们算得

$$\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix}0.564\\0.603\end{bmatrix},\quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix}0.0144 & 0.0117\\0.0117 & 0.0146\end{bmatrix},$$

$$\mathbf{S}^{-1} = \begin{bmatrix}203.018 & -163.391\\-163.391 & 200.228\end{bmatrix}$$

S 的特征值和特征向量分别为

$$\lambda_1 = 0.026,\quad \mathbf{e}_1' = [0.704,\ 0.710]$$

$$\lambda_2 = 0.002,\quad \mathbf{e}_2' = [-0.710,\ 0.704]$$

由所有(μ_1,μ_2)组成的 $\boldsymbol{\mu}$ 的 95%置信椭圆为

$$42[0.564-\mu_1, 0.603-\mu_2]\begin{bmatrix}203.018 & -163.391\\-163.391 & 200.228\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.564-\mu_1\\0.603-\mu_2\end{bmatrix} \leqslant \frac{2\times 41}{40}F_{2,40}(0.05)$$

由于 $F_{2,40}(0.05)=3.23$，故有

$$42\times 203.018\times(0.564-\mu_1)^2 + 42\times 200.228\times(0.603-\mu_2)^2 - 84\times 163.391\times(0.564-\mu_1)(0.603-\mu_2) \leqslant 6.62$$

为了考察 $\boldsymbol{\mu}'=[0.562,\ 0.589]$是否落在置信域内，我们计算得

$$42\times 203.018\times(0.564-0.562)^2+42\times 200.228\times(0.603-0.589)^2 - 84\times 163.391\times(0.564-0.562)\times(0.603-0.589)=1.30\leqslant 6.62$$

可见 $\boldsymbol{\mu}'=[0.562,\ 0.589]$在置信域内。此结论等价于：在显著性水平 $\alpha=0.05$ 下检验假设 H_0: $\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}0.562\\0.589\end{bmatrix}$, H_1: $\boldsymbol{\mu}\neq\begin{bmatrix}0.562\\0.589\end{bmatrix}$时不拒绝 H_0。

联合置信椭圆的图形见图 5.1。其中心为 $\bar{\mathbf{x}}'=[0.564,\ 0.603]$，且其长半轴与短半轴之长分别为

$$\sqrt{\lambda_1}\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)} = \sqrt{0.026}\sqrt{\frac{2\times 41}{42\times 40}\times 3.23} = 0.064$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

和

$$\sqrt{\lambda_2}\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)} = \sqrt{0.002}\sqrt{\frac{2\times 41}{42\times 40}\times 3.23} = 0.018$$

当以 $\bar{\mathbf{x}}$ 为原点作图时，此两轴分别沿 $\mathbf{e}_1'=[0.704,\ 0.710]$ 和 $\mathbf{e}_2'=[-0.710,\ 0.704]$ 的方向。置信椭圆的延伸率可由长轴与短轴的长度比给出，这个比值为

$$\frac{2\sqrt{\lambda_1}\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}}{2\sqrt{\lambda_2}\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}} = \frac{\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\lambda_2}} = \frac{0.161}{0.045} = 3.6$$

即长轴的长度为短轴的 3.6 倍。

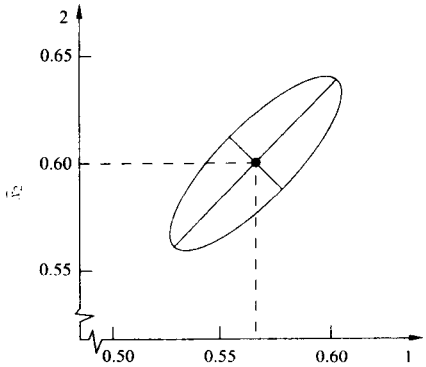


图 5.1　微波炉辐射数据 μ 的 95%置信椭圆

联合置信表示

在置信域 $n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant c^2$（$c$ 为常数）给出有关 μ 的似真值的联合信息的正确评估的同时，其结论往往已包含了单个均值分量的置信表示。在此过程中，我们承认了下列看法，即所有的各置信表示形式均应以一特定的大概率同时成立。我们引入所谓的**联合置信区间**，就是为了保证以一特定的概率避免任一置信表示发生错误。我们通过考虑与基于 T^2 统计量的联合置信域密切相关的联合置信表示来开始我们的讨论。

设 $\mathbf{X}$ 服从 $N_p(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\Sigma})$ 分布，考虑线性组合

$$Z = a_1X_1 + a_2X_2 + \cdots + a_pX_p = \mathbf{a}'\mathbf{X}$$

由式(2-43)知

$$\mu_Z = E(Z) = \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu},\quad \sigma_Z^2 = \mathrm{Var}(Z) = \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}$$

因此，由结论 4.2 知，Z 服从 $N(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu},\ \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a})$ 分布。如果 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为来自总体 $N_p(\boldsymbol{\mu},\ \boldsymbol{\Sigma})$ 的一随机样本，则相应的 Z 的样本可通过取线性组合产生。因此，

$$Z_j = a_1X_{j1} + a_2X_{j2} + \cdots + a_pX_{jp} = \mathbf{a}'\mathbf{X}_j\quad j = 1,2,\cdots,n$$

由式(3-36)，观察值 $z_1,z_2,\cdots,z_n$ 的样本均值和样本方差分别为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\bar{z} = \mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}} \text{ 和 } s_z^2 = \mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}$$

这里 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 分别为 $\mathbf{x}_j$ 的样本均值向量和协方差矩阵。

通过对各种不同的 $\mathbf{a}$ 考虑 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 的置信区间，便可得出所要的联合置信区间，其过程如下：

当 $\mathbf{a}$ 固定且 σ_Z^2 未知时，$\mu_Z=\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 置信区间根据 t 统计量

$$t = \frac{\bar{z} - \mu_Z}{s_z/\sqrt{n}} = \frac{\sqrt{n}\,(\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu})}{\sqrt{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}} \tag{5-20}$$

得出，故置信区间为

$$\bar{z} - t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s_z}{\sqrt{n}} \leqslant \mu_Z \leqslant \bar{z} + t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s_z}{\sqrt{n}}$$

即

$$\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}} - t_{n-1}(\alpha/2)\frac{\sqrt{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}}{\sqrt{n}} \leqslant \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu} \leqslant \mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}} + t_{n-1}(\alpha/2)\frac{\sqrt{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}}{\sqrt{n}} \tag{5-21}$$

其中 $t_{n-1}(\alpha/2)$ 为自由度为 $n-1$ 的 t 分布的上 $100(\alpha/2)$ 百分位数。

不等式(5-21)可以理解成均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 的分量的置信表示形式，例如对 $\mathbf{a}'=[1,0,\cdots,0]$，$\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}=\mu_1$，因而式(5-21)就是某个正态总体均值通常的置信区间。(注意，此时 $\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}=s_{11}$。)显然，通过选择不同的系数向量 $\mathbf{a}$，便可得到 $\boldsymbol{\mu}$ 的分量的若干个置信系数均为 $1-\alpha$ 的置信区间，但此时总的置信度就不再是 $1-\alpha$ 了。

直观地看，我们总可期望把由所有 $\mathbf{a}$ 的选择所生成的置信区间同某个“总”置信系数 $1-\alpha$ 联系在一起，不过代价是要放弃大的联合置信系数的便利性，即对一特定的 $\mathbf{a}$，它们的区间长度要比式(5-21)的大。

给定一个数据集 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 和特定的 $\mathbf{a}$，式(5-21)的置信区间是满足

$$|t| = \left|\frac{\sqrt{n}\,(\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu})}{\sqrt{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}}\right| \leqslant t_{n-1}(\alpha/2)$$

的 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 值的集合，或者说是满足

$$t^2 = \frac{n(\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu})^2}{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}} = \frac{n(\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}))^2}{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}} \leqslant t_{n-1}^2(\alpha/2) \tag{5-22}$$

的 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 值的集合。让 $\mathbf{a}$ 变化，我们可以通过使 t^2 相对较小的 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 值的集合来确定联合置信域。在通过对 $\mathbf{a}$ 的许多选择来得到相应的置信域表示时，将式(5-22)中的常数 $t_{n-1}^2(\alpha/2)$ 以较大的 c^2 值代替似乎是合理的。

现考虑满足 $t^2 \leqslant c^2$ 的 $\mathbf{a}$ 值，我们的目标自然是要求最大值

$$\max_{\mathbf{a}} t^2 = \max_{\mathbf{a}} \frac{n(\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}))^2}{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}。$$

在最大化引理(2-50)中，令 $\mathbf{x}=\mathbf{a}$，$\mathbf{d}=(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})$，及 $\mathbf{B}=\mathbf{S}$，就有

$$\max_{\mathbf{a}} \frac{n(\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}))^2}{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}} = n\left[\max_{\mathbf{a}} \frac{(\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}))^2}{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}\right] = n(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}) = T^2 \tag{5-23}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

最大值在 $\mathbf{a}$ 与 $\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})$ 成比例时达到。

结论 5.3 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为来自总体 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的随机样本，且 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为正定阵，则对所有 $\mathbf{a}$，区间

$$\left(\mathbf{a}'\mathbf{X}-\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}},\quad \mathbf{a}'\bar{\mathbf{X}}+\sqrt{\frac{p(n-1)}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}\right)$$

以概率 $1-\alpha$ 包含 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$。

证明 由式(5-23)，$T^2=n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant c^2$ 意味着对所有 $\mathbf{a}$ 有 $\dfrac{n(\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu})^2}{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}\leqslant c^2$，即对所有 $\mathbf{a}$ 有

$$\mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}-c\sqrt{\frac{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}{n}}\leqslant \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}\leqslant \mathbf{a}'\bar{\mathbf{x}}+c\sqrt{\frac{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}{n}}$$

取 $c^2=p(n-1)F_{p,n-p}(\alpha)/(n-p)$[见式(5-6)]，故对所有 $\mathbf{a}$，结论中的区间以概率 $1-\alpha=P[T^2\leqslant c^2]$ 包含 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$。

由于置信概率由 T^2 分布确定，因此为方便起见，今后我们称结论 5.3 的联合置信区间为 **T^2 区间**。在 T^2 区间中依次选取 $\mathbf{a}'=[1,0,\cdots,0]$，$\mathbf{a}'=[0,1,\cdots,0]$，$\cdots$，$\mathbf{a}'=[0,0,\cdots,1]$。我们便得出下列诸式以置信系数 $1-\alpha$ 同时成立的结论：

$$\begin{aligned}
&\bar{x}_1-\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{11}}{n}}\leqslant \mu_1\leqslant \bar{x}_1+\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{11}}{n}}\\
&\bar{x}_2-\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{22}}{n}}\leqslant \mu_2\leqslant \bar{x}_2+\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{22}}{n}}\\
&\qquad\vdots\qquad\qquad\qquad\vdots\qquad\qquad\qquad\vdots\\
&\bar{x}_p-\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}\leqslant \mu_p\leqslant \bar{x}_p+\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}
\end{aligned}\tag{5-24}$$

注意，若取 $\mathbf{a}'=[0,\cdots,0,a_i,0,\cdots,0,a_k,0,\cdots,0]$，$a_i=1$ 且 $a_k=-1$，则可得到差值 $\mu_i-\mu_k$ 的置信系数为 $1-\alpha$ 的置信区间，此时 $\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}=s_{ii}-2s_{ik}+s_{kk}$，故其置信区间为

$$\begin{aligned}
\bar{x}_i-\bar{x}_k-\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{ii}-2s_{ik}+s_{kk}}{n}}&\leqslant \mu_i-\mu_k\\
\leqslant \bar{x}_i-\bar{x}_k+\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{ii}-2s_{ik}+s_{kk}}{n}}&
\end{aligned}\tag{5-25}$$

联合 T^2 置信区间的方法对数据探测是较理想的。由于其置信系数 $1-\alpha$ 对任意的 $\mathbf{a}$ 保持不变，因此，根据数据实验应受到检验的诸分量 μ_i 的线性组合可以被估计出来。

另外，根据补充 5A 中的结论，我们可以得到 (μ_i,μ_k) 的置信域，其中 (μ_i,μ_k) 在以样本均值为中心的椭圆内，即

$$n[\bar{x}_i-\mu_i,\bar{x}_k-\mu_k]\begin{bmatrix}s_{ii} & s_{ik}\\ s_{ik} & s_{kk}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\bar{x}_i-\mu_i\\ \bar{x}_k-\mu_k\end{bmatrix}\leqslant\frac{p(n-1)}{n-p}F_{p,n-p}(\alpha)\tag{5-26}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

而它们所有的置信系数仍保持为 $1-\alpha$。

均值向量的单一分量的联合 T^2 置信区间恰好为置信椭球在该分量轴上的投影。我们在下一个例子中将说明置信椭球的投影与由式(5-24)给出的联合置信区间之间的这种联系。

例 5.4 （联合置信区间作为置信椭球的投影）

在例 5.3 中，我们得到了炉门关闭及开启时微波炉辐射测量值四次根的均值的 95% 置信椭圆。由式(5-24)知，这两个均值分量的 95%联合 T^2 置信区间为

$$\left(\bar{x}_1-\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)}\sqrt{\frac{s_{11}}{n}},\ \bar{x}_1+\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)}\sqrt{\frac{s_{11}}{n}}\right)$$

$$=\left(0.564-\sqrt{\frac{2\times 41}{40}\times 3.23}\times\sqrt{\frac{0.0144}{42}},\ 0.564+\sqrt{\frac{2\times 41}{40}\times 3.23}\times\sqrt{\frac{0.0144}{42}}\right)$$

$$=(0.516,\ 0.612)$$

$$\left(\bar{x}_2-\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)}\sqrt{\frac{s_{22}}{n}},\ \bar{x}_2+\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)}\sqrt{\frac{s_{22}}{n}}\right)$$

$$=\left(0.603-\sqrt{\frac{2\times 41}{40}\times 3.23}\times\sqrt{\frac{0.0146}{42}},\ 0.603+\sqrt{\frac{2\times 41}{40}\times 3.23}\times\sqrt{\frac{0.0146}{42}}\right)$$

$$=(0.555,0.651)$$

在图 5.2 中，我们重绘了例 5.3 中的 95%置信椭圆，可以看出，其 95%联合置信区间为此椭圆在其均值分量轴上的投影。

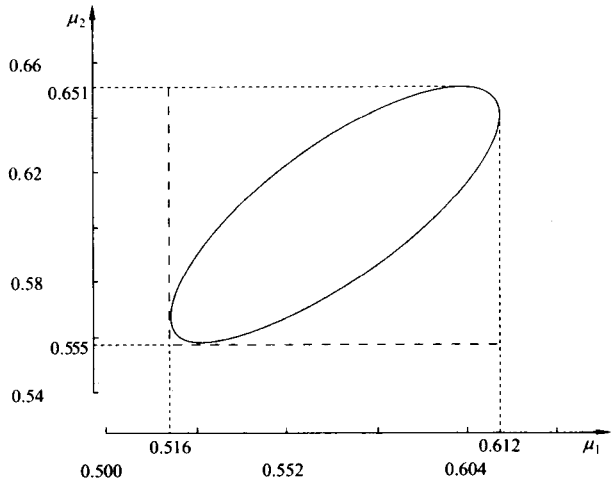


图 5.2 均值分量的联合 T^2 区间作为置信椭圆在其轴上的投影——微波炉辐射数据

例 5.5 （构造联合置信区间与置信椭圆）

表 5.2 为 $n=87$ 名大学生参加大学水平考试计划课程 X_1 及大学资格考试课程 X_2 与 X_3 的成绩。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 5.2　大学考试数据

考生	X_1（社会科学与历史）	X_2（语言表达）	X_3（自然科学）	考生	X_1（社会科学与历史）	X_2（语言表达）	X_3（自然科学）
1	468	41	26	45	494	41	24
2	428	39	26	46	541	47	25
3	514	53	21	47	362	36	17
4	547	67	33	48	408	28	17
5	614	61	27	49	594	68	23
6	501	67	29	50	501	25	26
7	421	46	22	51	687	75	33
8	527	50	23	52	633	52	31
9	527	55	19	53	647	67	29
10	620	72	32	54	647	65	34
11	587	63	31	55	614	59	25
12	541	59	19	56	633	65	28
13	561	53	26	57	448	55	24
14	468	62	20	58	408	51	19
15	614	65	28	59	441	35	22
16	527	48	21	60	435	60	20
17	507	32	27	61	501	54	21
18	580	64	21	62	507	42	24
19	507	59	21	63	620	71	36
20	521	54	23	64	415	52	20
21	574	52	25	65	554	69	30
22	587	64	31	66	348	28	18
23	488	51	27	67	468	49	25
24	488	62	18	68	507	54	26
25	587	56	26	69	527	47	31
26	421	38	16	70	527	47	26
27	481	52	26	71	435	50	28
28	428	40	19	72	660	70	25
29	640	65	25	73	733	73	33
30	574	61	28	74	507	45	28
31	547	64	27	75	527	62	29
32	580	64	28	76	428	37	19
33	494	53	26	77	481	48	23
34	554	51	21	78	507	61	19
35	647	58	23	79	527	66	23
36	507	65	23	80	488	41	28
37	454	52	28	81	607	69	28
38	427	57	21	82	561	59	34
39	521	66	26	83	614	70	23
40	468	57	14	84	527	49	30
41	587	55	30	85	474	41	16
42	507	61	31	86	441	47	26
43	574	54	31	87	607	67	32
44	507	53	23				

资料来源：数据经 Richard W. Johnson 许可使用。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表中的 X_1, X_2, X_3 分别代表社会科学与历史、语言表达及自然科学三门课程的考试成绩。由表中的数据可得

$$\bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 527.74 \\ 54.69 \\ 25.13 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 5691.34 & 600.51 & 217.25 \\ 600.51 & 126.05 & 23.37 \\ 217.25 & 23.37 & 23.11 \end{bmatrix}$$

现计算 μ_1, μ_2, μ_3 的 95%联合置信区间。由于

$$\frac{p(n-1)}{n-p} F_{p,n-p}(\alpha) = \frac{3 \times (87-1)}{(87-3)} F_{3,84}(0.05) = \frac{3 \times 86}{84} \times 2.7 = 8.29$$

可以得到联合置信区间[见式(5-24)]为

$$527.74 - \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{5691.34}{87}} \leqslant \mu_1 \leqslant 527.74 + \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{5691.34}{87}}$$

即

$$504.45 \leqslant \mu_1 \leqslant 551.03$$

$$54.69 - \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{126.05}{87}} \leqslant \mu_2 \leqslant 54.69 + \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{126.05}{87}}$$

即

$$51.22 \leqslant \mu_2 \leqslant 58.16$$

$$25.13 - \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{23.11}{87}} \leqslant \mu_3 \leqslant 25.13 + \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{23.11}{87}}$$

即

$$23.65 \leqslant \mu_3 \leqslant 26.61$$

除语言表达成绩外，其边缘 Q-Q 图及二维散点图表明，并无迹象表明有严重背离大学资格考试数据的正态性的现象产生。(见练习 5.16。)此外，即使数据不是严格服从正态分布，这么大的样本容量也足以保证该方法的合理性。(见 5.5 节。)

由于上述三个置信区间均必须以 95%的置信度成立，因此其联合 T^2 区间要比一元置信区间更宽些。又因为可以用同样的置信度来构造它们之间差值的置信区间，所以这些置信区间也许比通常所需的更宽。

例如，对 $\mathbf{a}' = [0, 1, -1]$，$\mu_2 - \mu_3$ 的置信区间的两个端点为

$$(\bar{x}_2 - \bar{x}_3) \pm \sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)} F_{p,n-p}(0.05)} \sqrt{\frac{s_{22} + s_{33} - 2s_{23}}{n}}$$

$$= (54.69 - 25.13) \pm \sqrt{8.29} \times \sqrt{\frac{126.05 + 23.11 - 2 \times 23.37}{87}}$$

$$= 29.56 \pm 3.12$$

故 $\mu_2 - \mu_3$ 的 95%置信区间为(26.44,32.68)。对其他差值同样可构造其联合置信区间。

最后，能以相同的 95%置信度构造每对均值的置信椭圆。比如，对(μ_2, μ_3)这对均值来说，有

$$87 \times [54.69 - \mu_2, 25.13 - \mu_3] \begin{bmatrix} 126.05 & 23.37 \\ 23.37 & 23.11 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 54.69 - \mu_2 \\ 25.13 - \mu_3 \end{bmatrix}$$

$$= 0.849 \times (54.69 - \mu_2)^2 + 4.633 \times (25.13 - \mu_3)^2$$

$$- 2 \times 0.859 \times (54.69 - \mu_2) \times (25.13 - \mu_3) \leqslant 8.29$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

该椭圆及另外两对均值的 95%置信椭圆的图形见图 5.3。图中还给出了这些椭圆在其均值分量轴上的投影，这些投影即为 T^2 区间。

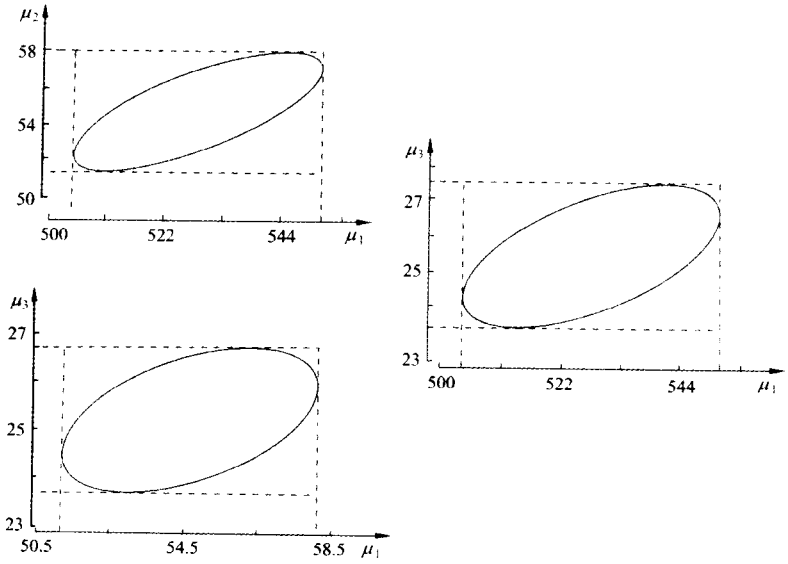


图 5.3　各对均值的 95%置信椭圆及联合 T^2 区间——大学考试数据

联合置信区间与单一置信区间的比较

构造置信区间的另一种方法是每次只考虑一个分量 μ_i，正如当 $\mathbf{a}'=[0,\cdots,0,a_i,0,\cdots,0]$（此处 $a_i=1$）时式(5-21)所暗示的那样。这种方法不必考虑 p 维变量的协方差矩阵的结构，就可得到置信区间

$$
\begin{aligned}
&\bar{x}_1 - t_{n-1}(\alpha/2)\sqrt{\frac{s_{11}}{n}} \leqslant \mu_1 \leqslant \bar{x}_1 + t_{n-1}(\alpha/2)\sqrt{\frac{s_{11}}{n}} \\
&\bar{x}_2 - t_{n-1}(\alpha/2)\sqrt{\frac{s_{22}}{n}} \leqslant \mu_2 \leqslant \bar{x}_2 + t_{n-1}(\alpha/2)\sqrt{\frac{s_{22}}{n}} \\
&\quad\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\
&\bar{x}_p - t_{n-1}(\alpha/2)\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}} \leqslant \mu_p \leqslant \bar{x}_p + t_{n-1}(\alpha/2)\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}
\end{aligned}
\tag{5-27}
$$

虽然在抽样之前第 i 个区间包含 μ_i 的概率为 $1-\alpha$，但一般而言，对其他区间包含各自的 μ_i 的概率并不能断言什么。正如我们在前面指出的，这个概率并非 $1-\alpha$。

为了更清楚地说明这个问题，考虑观测值服从正态分布且

$$
\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix}
$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的特殊情形。由于第一个变量的观测值与第二个变量的观测值相互独立，故可应用独立事件的乘法法则，因而在样本被抽取之前有

$$P[\text{式(5-27) 中的所有 } t \text{ 区间包含各自的 } \mu_i] = (1-\alpha)(1-\alpha)\cdots(1-\alpha) = (1-\alpha)^p$$

若 $1-\alpha=0.95$ 且 $p=6$，则此概率为 $0.95^6=0.74$。

为保证所有均值分量的置信表示同时成立的概率为 $1-\alpha$，其各自的置信区间要比其 t 区间大，至于大多少，这就与 p，n 及 $1-\alpha$ 三者的大小有关。

对 $1-\alpha=0.95$，$n=15$ 和 $p=4$，式(5-24)及式(5-27)中 $\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}}$ 前的乘数分别为

$$\sqrt{\frac{p(n-1)}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)} = \sqrt{\frac{4\times 14}{11}\times 3.36} = 4.14$$

及 $t_{n-1}(0.025)=2.145$。因此这种情况下的联合置信区间要比单一 t 区间宽 $100\times(4.14-2.145)/2.145=93\%$。

表 5.3 给出了按式(5-21)算出的单一 t 区间及相应的联合 T^2 区间的距离乘数的临界值。一般说来，相对 t 区间而言，T^2 区间的宽度当 n 固定而 p 增大时增大；而当 p 固定而 n 增大时减小。

表 5.3　对选定的 n 与 p($1-\alpha=0.95$)单一 t 区间与 T^2 区间的距离乘数之临界值

n	$t_{n-1}(0.025)$	$\sqrt{\frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)}$	
		$p=4$	$p=10$
15	2.145	4.14	11.52
25	2.064	3.60	6.39
50	2.010	3.31	5.05
100	1.970	3.19	4.61
∞	1.960	3.08	4.28

将表 5.3 中的置信区间进行比较显然有些不公平，因为对固定的 n 与 p，其所有的 T^2 区间相联系的置信水平为 0.95，而在同样的 n 值，所有单一 t 区间的置信水平却比 0.95 要小些。单一 t 区间的宽度太短，以至于对所有 p 个均值的单独置信区间不能有一个总的置信水平。然而，当这是惟一可作的推断时，我们有时就把它们看作是均值的最佳可能信息。此外，如果仅当 T^2 检验拒绝零假设时才计算单一置信区间，那么有些研究者认为，单一置信区间也许比 T^2 区间更精确地代表有关均值的信息。

如果 T^2 区间仅应用于 p 个均值分量，那么 T^2 区间显然太宽。为了说明其原因，我们来考虑图 5.2 中的置信椭圆及联合置信区间。若 μ_1，μ_2 分别落在各自的 T^2 区间内，那么 (μ_1,μ_2) 就落在由此两区间围成的矩形内。此矩形显然包含了置信椭圆。虽然置信椭圆更小些，但它却以 0.95 的概率包含了均值向量 $\boldsymbol{\mu}=(\mu_1,\mu_2)$。因此，对由 T^2 区间所围成的矩形而言，其包含两个均值分量 μ_1 与 μ_2 的概率要大于 0.95。这一结果促使我们去考虑第二种进行多重比较的方法，即所谓的庞弗罗尼方法。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

多重比较的庞弗罗尼方法

人们常把注意力集中在少数的单一置信区间上，在这些情形中，可能会得到比结论5.3的联合置信区间更好的结论。但如果均值分量 μ_i 的个数 m 很小，或者其线性组合 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}=a_1\mu_1+a_2\mu_2+\cdots+a_p\mu_p$ 很小，则可采用较为精确的联合置信区间的方法。另一种多重比较法就是**庞弗罗尼方法**，它是由庞弗罗尼概率不等式引申而来的。

假设在得到数据之前，已知 m 个线性组合 $\mathbf{a}_1'\boldsymbol{\mu},\mathbf{a}_2'\boldsymbol{\mu},\cdots,\mathbf{a}_m'\boldsymbol{\mu}$ 的置信区间，记 C_i 为 $\mathbf{a}_i'\boldsymbol{\mu}$ 的置信表示，满足 $P(C_i\text{ 为真})=1-\alpha_i$，$i=1,2,\cdots,m$，我们有(见练习5.6)

$$\begin{aligned}P(\text{所有 } C_i \text{ 为真}) &= 1-P(\text{至少有一个 } C_i \text{ 为假})\\ &\geqslant 1-\sum_{i=1}^{m}P(C_i\text{ 为假})=1-\sum_{i=1}^{m}(1-P(C_i\text{ 为真}))\\ &=1-(\alpha_1+\alpha_2+\cdots+\alpha_m)\end{aligned}\tag{5-28}$$

不等式(5-28)为庞弗罗尼不等式的一个特殊情形。利用它，研究人员总可控制总体误差率 $\alpha_1+\alpha_2+\cdots+\alpha_m$，不管置信表示中隐藏着何种相关结构。同时，在控制一组重要置信表示的误差率以及使它与另一些不太重要的置信表示达成均衡中，此法也是较为灵活的。

让我们来给出由 $\boldsymbol{\mu}$ 的分量 μ_i 组成的约束集的联合区间估计。由于对这些分量的相对重要性缺乏了解。我们考虑单一的 t 区间：

$$\bar{x}_i \pm t_{n-1}\left(\frac{\alpha_i}{2}\right)\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}} \quad i=1,2,\cdots,m$$

这里 $\alpha_i=\alpha/m$。由于

$$P[\bar{X}_i \pm t_{n-1}(\alpha/2m)\sqrt{s_{ii}/n}\text{ 包含 }\mu_i]=1-\alpha/m,\ i=1,2,\cdots,m$$

由式(5-28)知

$$\begin{aligned}P\left[\bar{X}_i \pm t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}}\text{ 包含 }\mu_i,\ \forall\, i\right] &\geqslant 1-\underbrace{\left(\frac{\alpha}{m}+\frac{\alpha}{m}+\cdots+\frac{\alpha}{m}\right)}_{m\text{项}}\\ &=1-\alpha\end{aligned}$$

因此，以不小于 $1-\alpha$ 的总置信水平，可得下列 $m=p$ 个置信表示

$$\begin{aligned}&\bar{x}_1-t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{11}}{n}}\leqslant\mu_1\leqslant\bar{x}_1+t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{11}}{n}}\\ &\bar{x}_2-t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{22}}{n}}\leqslant\mu_2\leqslant\bar{x}_2+t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{22}}{n}}\\ &\qquad\vdots\qquad\qquad\vdots\qquad\qquad\vdots\\ &\bar{x}_p-t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}\leqslant\mu_p\leqslant\bar{x}_p+t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}\end{aligned}\tag{5-29}$$

将式(5-29)与式(5-24)进行比较，我们发现式(5-29)中仅以百分位数 $t_{n-1}(\alpha/2p)$ 替代了式(5-24)中的 $\sqrt{(n-1)pF_{p,n-p}(\alpha)/(n-p)}$，区间保持相同结构。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

例 5.6 （庞弗罗尼联合置信区间的构造以及与 T^2 区间的比较）

仍考虑例 5.3 及例 5.4 中的微波炉辐射数据。我们将给出均值 μ_1 与 μ_2 的 95%庞弗罗尼联合置信区间，这里 $\alpha_i=0.05/2$，$i=1,2$。利用例 5.3 的结论，注意到 $n=42$ 及 $t_{41}(0.05/(2\times 2))=t_{41}(0.0125)=2.327$，可知

$$\bar{x}_1 \pm t_{41}(0.0125)\sqrt{\frac{s_{11}}{n}} = 0.564 \pm 2.327 \times \sqrt{\frac{0.0144}{42}} \quad 即\ 0.521 \leqslant \mu_1 \leqslant 0.607$$

$$\bar{x}_2 \pm t_{41}(0.0125)\sqrt{\frac{s_{22}}{n}} = 0.603 \pm 2.327 \times \sqrt{\frac{0.0146}{42}} \quad 即\ 0.560 \leqslant \mu_1 \leqslant 0.646$$

图 5.4 给出了 μ_1,μ_2 的 95%联合 T^2 置信区间以及相应的 95%庞弗罗尼置信区间。对每一均值分量，其庞弗罗尼置信区间均落在 T^2 区间内。因此，由其庞弗罗尼置信区间所围成的矩形区域包含在由其 T^2 区间所围成的矩形区域中。如果我们仅对均值分量感兴趣，那么，庞弗罗尼区间估计比 T^2 区间估计更精确。另一方面，当考虑被测变量之间的相关性时，$\boldsymbol{\mu}$ 的 95%置信域还能给出(μ_1,μ_2)的似真值。

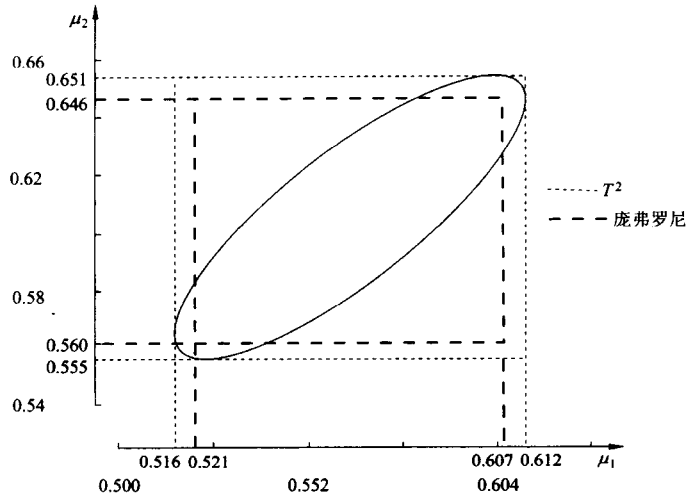


图 5.4 均值分量的 95%T^2 区间与 95%庞弗罗尼置信区间——微波炉辐射数据

线性组合 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 的庞弗罗尼区间与 T^2 区间均有形式

$$\mathbf{a}'\bar{\mathbf{X}} \pm 临界值 \cdot \sqrt{\frac{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}{n}}$$

因此，对 $\alpha_i=\alpha/m$，有

$$\frac{庞弗罗尼区间宽度}{T^2\ 区间宽度} = \frac{t_{n-1}(\alpha/2m)}{\sqrt{\dfrac{p(n-1)}{n-p}F_{p,n-p}(\alpha)}} \tag{5-30}$$

这个比值与随机量 $\bar{\mathbf{X}}$ 与 $\mathbf{S}$ 无关。正如我们前面指出的，对特定的 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$，当 m 小时，庞弗罗尼区间总要窄些。表 5.4 对某些 n 与 p 值列出了其宽度要窄多少。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 5.4 （庞弗罗尼区间宽度）/（T^2 区间宽度）

$1-\alpha=0.95$，$\alpha_i=0.05/m$

n	$m=p$		
	2	4	10
15	0.88	0.69	0.29
25	0.90	0.75	0.48
50	0.91	0.78	0.58
100	0.91	0.80	0.62
∞	0.91	0.81	0.66

当 $m=p$ 时，由表 5.4 可知，庞弗罗尼方法得到的置信区间要更窄些。正因此法容易应用且能给出推断所需的较窄置信区间，今后我们将经常根据庞弗罗尼方法使用联合 t_1 区间。

5.5 总体均值向量的大样本推断

当样本容量很大时，我们不需要总体的正态性假设就可以构造 $\boldsymbol{\mu}$ 的假设检验及置信域。正如练习 5.13，5.14 及 5.15 所指出的，对大的 n，即使总体分布是离散型分布，我们也能够对总体均值作出推断。事实上，对正态性的严重偏离可通过大样本来克服。此时，假设检验与联合置信表示都近似地具有名义上的置信水平。

大样本的优越性，也许部分地被只使用汇总统计量 $\bar{\mathbf{x}}$ 与 $\mathbf{S}$ 而造成的样本信息损失所抵销。另一方面，由于 $(\bar{\mathbf{x}},\mathbf{S})$ 是**正态**总体的充分统计量[见式(4-21)]，因此基础总体的分布与多元正态分布越接近，统计推断中样本信息的利用就越充分。

所有 $\boldsymbol{\mu}$ 的大样本推断都是建立在 χ^2 分布基础上的，由式(4-28)，我们知道 $(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\cdot(n^{-1}\mathbf{S})^{-1}(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})=n(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$ 近似服从自由度为 p 的 χ^2 分布，因此

$$p[n(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\chi_p^2(\alpha)]\doteq 1-\alpha \tag{5-31}$$

其中 $\chi_p^2(\alpha)$ 是 χ_p^2 分布的上 100α 百分位数。

由式(5-31)可立即推得大样本假设检验与联合置信域。其过程概括在下面的结论 5.4 与 5.5 中。

结论 5.4 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$，协方差阵为正定阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的总体的一个随机样本。当 $n-p$ 很大时，若观测值

$$n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)>\chi_p^2(\alpha)$$

我们就在大约为 α 的置信水平下拒绝 H_0：$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\mu}_0$ 而接受 H_1：$\boldsymbol{\mu}\neq\boldsymbol{\mu}_0$，这里 $\chi_p^2(\alpha)$ 是自由度为 p 的上 100α 百分位数。

将结论 5.4 中的检验与式(5-7)中相应的正态理论检验作比较，我们发现它们的检验

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

统计量具有相同的结构，只是临界值有所不同。但进一步的考察揭示：当结论 5.4 的 χ^2 检验较为适宜时，两种检验基本上给出相同的结果。这主要是因为，当 n 相对于 p 较大时，$(n-1)pF_{p,n-p}(\alpha)/(n-p)$ 与 $\chi_p^2(\alpha)$ 近似相等（见附录中的表 3 和表 4）。

结论 5.5 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为来自均值为 $\boldsymbol{\mu}$，协方差阵为正定阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的总体的一个随机样本。当 $n-p$ 很大时，对所有的 $\mathbf{a}$，$\mathbf{a}'\overline{\mathbf{X}}\pm\sqrt{\chi_p^2(\alpha)}\sqrt{\dfrac{\mathbf{a}'\mathbf{S}\mathbf{a}}{n}}$ 包含 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}$ 的概率近似为 $1-\alpha$。因此，我们有 $100(1-\alpha)\%$ 的联合置信表示

$$\bar{x}_1\pm\sqrt{\chi_p^2(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{11}}{n}}\quad 包含\ \mu_1$$

$$\bar{x}_2\pm\sqrt{\chi_p^2(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{22}}{n}}\quad 包含\ \mu_2$$

$$\vdots\qquad\qquad\vdots$$

$$\bar{x}_p\pm\sqrt{\chi_p^2(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{pp}}{n}}\quad 包含\ \mu_p$$

此外，对所有 (μ_i,μ_k)，$i,k=1,2,\cdots,p$，以样本均值为中心的置信椭圆

$$n[\bar{x}_i-\mu_i,\bar{x}_k-\mu_k]\begin{bmatrix}s_{ii} & s_{ik}\\ s_{ik} & s_{kk}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\bar{x}_i-\mu_i\\ \bar{x}_k-\mu_k\end{bmatrix}\leqslant\chi_p^2(\alpha)\ 包含(\mu_i,\mu_k)$$

的概率近似为 $1-\alpha$。

证明 第一部分的结论可从结论 5A.1 推出。其中 $c^2=\chi_p^2(\alpha)$。概率水平由式(5-31)给出。若取 $\mathbf{a}'=[0,\cdots,0,a_i,0,\cdots,0]$，$a_i=1,i=1,2,\cdots,p$，就可得到 μ_i 的置信表示。各对均值的置信椭圆的结论可从结论 5A.2 推出，其中 $c^2=\chi_p^2(\alpha)$。所有置信表示的总置信水平约为 $1-\alpha$ 这一结论，同样是式(5-31)所归纳的大样本分布理论的结果。

对这些大样本推断方法进行正态理论所要求的各种检验，这是一种很好的统计实践。虽然当 n 很大时，对正态性的微小甚至中等程度的偏离一般不会引起任何困难，但过大的偏差就会产生问题，特别是真实误差率会远远地偏离其名义错误率水平 α。如果在 Q-Q 散点图和其他考察方法中发现存在离群值和其他过大的偏差（例如，参见[2]），则应采取适当的校正措施，包括对数据进行变换。对称多元分布均值向量的检验方法相对来说，对偏离正态性不很敏感，这些方法在[10]中有所讨论。在某些情形下，结论 5.4 和 5.5 仅对非常大的样本才有效。

下面的例子用来解释如何对单一均值分量构造大样本联合置信区间的问题。

例 5.7 （构造大样本联合置信区间）

一名音乐教育工作者为制定芬兰的音乐教育标准，测试了数千名芬兰学生的音乐才能，部分统计数据见表 5.5。这些统计数据来自由 $n=96$ 名芬兰 12 年级学生组成的样本：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 5.5　96 名 12 年级芬兰学生音乐才能测试数据的均值与标准差

变量	原始成绩	
	均值($\bar{x}_i$)	标准差($\sqrt{s_{ii}}$)
X_1=旋律	28.1	5.76
X_2=和声	26.6	5.85
X_3=速度	35.4	3.82
X_4=拍子	34.2	5.12
X_5=短句	23.6	3.76
X_6=协调	22.0	3.93
X_7=风格	22.7	4.03

资料来源：数据经 V. Sell 许可使用。

我们来构造均值分量 μ_i，$i=1,2,\cdots,7$ 的 90%联合置信区间。

由结论 5.5，90%的联合置信限为

$$\bar{x}_i \pm \sqrt{\chi_7^2(0.10)}\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}},\ i=1,2,\cdots,7,\ 其中\ \chi_7^2(0.10)=12.02$$

因此在大约 90%的置信水平下有：

$$28.1 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{5.76}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_1，即\ 26.06 \leqslant \mu_1 \leqslant 30.14$$

$$26.6 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{5.85}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_2，即\ 24.53 \leqslant \mu_2 \leqslant 28.67$$

$$35.4 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{3.82}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_3，即\ 34.05 \leqslant \mu_3 \leqslant 36.75$$

$$34.2 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{5.12}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_4，即\ 32.39 \leqslant \mu_4 \leqslant 36.01$$

$$23.6 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{3.76}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_5，即\ 22.27 \leqslant \mu_5 \leqslant 24.93$$

$$22.0 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{3.93}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_6，即\ 20.61 \leqslant \mu_6 \leqslant 23.39$$

$$22.7 \pm \sqrt{12.02} \times \frac{4.03}{\sqrt{96}} \quad 包含\ \mu_7，即\ 21.27 \leqslant \mu_7 \leqslant 24.13$$

或许，从数千例美国学生的数据出发，这名研究者会假设他们音乐才能测试成绩的均值为

$$\boldsymbol{\mu}_0' = [31,27,34,31,23,22,22]$$

从上面的联合置信区间我们看到，$\boldsymbol{\mu}_0$ 的旋律、速度及拍子三个分量似乎不是芬兰学生相应成绩均值的似真值。

当样本容量很大时，均值分量的单一置信区间为

$$\bar{x}_i - z\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}} \leqslant \mu_i \leqslant \bar{x}_i + z\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}} \quad i=1,2,\cdots,p$$

这里的 $z(\alpha/2)$ 是标准正态分布的上 $100(\alpha/2)$ 百分位数。当 $m=p$ 时，单个均值置信表示的庞

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

弗罗尼联合置信区间其形式与上相同，只不过其中的百分位数应改成 $z(\alpha/2p)$，即

$$\bar{x}_i - z\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}} \leqslant \mu_i \leqslant \bar{x}_i + z\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{ii}}{n}} \quad i = 1,2,\cdots,p$$

表 5.6 给出例 5.7 中音乐才能测试数据的单一置信区间、庞弗罗尼置信区间及基于 χ^2（即置信椭球的投影）的置信区间。

表 5.6　音乐才能测试数据的 95%大样本置信区间

（单一区间、庞弗罗尼置信区间及 T^2 区间）

对单一置信区间用 $z(0.025)=1.96$

对联合庞弗罗尼区间用 $z(0.025/7)=2.69$

对联合 T^2 区间（即置信椭球的投影），用 $\chi_7^2(0.05)=14.07$

变量	单一区间		庞弗罗尼区间		椭球的投影	
	下限	上限	下限	上限	下限	上限
X_1＝旋律	26.95	29.25	26.52	29.68	25.90	30.30
X_2＝和声	25.43	27.77	24.99	28.21	24.36	28.84
X_3＝速度	34.64	36.16	34.35	36.45	33.94	36.86
X_4＝拍子	33.18	35.22	32.79	35.61	32.24	36.16
X_5＝短句	22.85	24.35	22.57	24.63	22.16	25.04
X_6＝协调	21.21	22.79	20.92	23.08	20.50	23.50
X_7＝风格	21.89	23.51	21.59	23.81	21.16	24.24

虽然样本容量可以很大，但有些统计学家更愿意用基于 F 分布与 t 分布的百分位数，而不愿意使用基于 χ^2 分布及标准正态分布的百分位数，而后面那些常数恰好是前面那些常数在样本容量趋于无穷时的极限。用 F 分布与 t 分布百分位数所生成的置信区间要更大些，因而也就更保守些。表 5.7 给出了在这种情形下音乐才能测试数据的单一置信区间，庞弗罗尼置信区间及基于 F 分布的置信区间（即置信椭球的投影）。

表 5.7　音乐才能测试数据的 95%单一区间、庞弗罗尼区间及 T^2 区间

单一置信区间用 $t_{95}(0.025)=1.99$

联合庞弗罗尼区间用 $t_{95}(0.025/7)=2.75$

联合 T^2 区间（即置信椭球的投影）用 $F_{7,89}(0.05)=2.11$

变量	单一区间		庞弗罗尼区间		椭球的投影	
	下限	上限	下限	上限	下限	上限
X_1＝旋律	26.93	29.27	26.48	29.72	25.76	30.44
X_2＝和声	25.41	27.79	24.96	28.24	24.23	28.97
X_3＝速度	34.63	36.17	34.33	36.47	33.85	36.95
X_4＝拍子	33.16	35.24	32.76	35.64	32.12	36.28
X_5＝短句	22.84	24.36	22.54	24.66	22.07	25.13
X_6＝协调	21.20	22.80	20.90	23.10	20.41	23.59
X_7＝风格	21.88	23.52	21.57	23.83	21.07	24.33

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

比较表 5.7 与表 5.6，可以发现，表 5.7 中的区间要更大一些。不过对较大的样本容量 $n=96$，典型的情况是置信限的差别仅在第三位数字上反映出来。

5.6 多元质量控制图

为改进产品和服务的质量，需要考察数据以查明引起质量变动的原因。当一个制造过程为连续地生产产品，或当我们监控某种服务活动时，就应收集数据，用以评估这个过程的能力与稳定性。当一个过程稳定时，变动是由一些经常存在的原因引起的，没有一个原因是变动的主要来源。

任何控制图的目的，就是为了识别是否出现了引起变动的特殊原因，这些原因来自常规过程的外部。这些变动原因的出现表明需要某种适时的维修，不过也可能暗示需要改进此过程，控制图可使这些变动可视化，因而有利于我们区分引起变动的一般原因和特殊原因。

一个控制图一般由按时间顺序标绘的数据点和两条水平线组成，这两条水平线称为控制限，用来表示由一般原因引起的变动量。有一种有用的控制图称为 $\overline{X}$ 控制图，其生成过程如下：

1. 按时间顺序对各个观测值或样本均值作出标绘。
2. 生成并画出代表所有观测值的样本均值的中心线 $\overline{\overline{x}}$。
3. 按如下公式计算并画出控制限：

$$\text{控制上限(UCL)} = \overline{\overline{x}} + 3 \times \text{标准差}$$

$$\text{控制下限(LCL)} = \overline{\overline{x}} - 3 \times \text{标准差}$$

控制限中的标准差可用被标绘观测值的标准差来估计。对单一的观测值，上述标准差往往就是样本标准差。假如所标绘的是容量为 m 的若干个子样本的均值，则其标准差为样本标准差除以 $\sqrt{m}$。控制限中所以选取加减 3 倍标准差，那是为了在数据服从正态分布的假设下，使误将正常数据标成失控数据的可能性变得非常小。所谓失控数据，是指暗示存在某种特殊变动原因的观察值。

例 5.8 （构造一元控制图）

威斯康星州麦迪逊警署把对自身行为的定期监测作为其管理质量改进计划的一部分。表 5.8 给出了 5 类加班小时数的数据，每一个观察值代表 12 个工资支付期（大约为半年）内加班小时数之和。

表 5.8 威斯康星州麦迪逊警署的 5 类加班小时数

x_1 法定加班出勤时数	x_2 特殊事件处理加班时数	x_3 处理遗留人员加班时数	x_4 允许补偿的加班时数	x_5 会议时数
3387	2200	1181	14 861	236
3109	875	3532	11 367	310
2670	957	2502	13 329	1182

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

x_1 法定加班出勤时数	x_2 特殊事件处理加班时数	x_3 处理遗留人员加班时数	x_4 允许补偿的加班时数	x_5 会议时数
3125	1758	4510	12 328	1208
3469	868	3032	12 847	1385
3120	398	2130	13 979	1053
3671	1603	1982	13 528	1046
4531	523	4675	12 699	1100
3678	2034	2354	13 534	1349
3238	1136	4606	11 609	1150
3135	5326	3044	14 189	1216
5217	1658	3340	15 052	660
3728	1945	2111	12 236	299
3506	344	1291	15 482	206
3824	807	1365	14 900	239
3516	1223	1175	15 078	161

我们来考察法定加班出勤时数的稳定性，由计算机算得 $\bar{x}_1=3558$，由于只将单个数值进行标绘，故 $\bar{x}_1$ 与 $\bar{\bar{x}}_1$ 相同。此外，样本标准差为 $\sqrt{s_{11}}=607$。于是控制限为

$$\mathrm{UCL}=\bar{\bar{x}}_1+3\sqrt{s_{11}}=3558+3\times 607=5379$$

$$\mathrm{LCL}=\bar{\bar{x}}_1-3\sqrt{s_{11}}=3558-3\times 607=1737$$

数据、中心线及控制限三者合在一起，构成图 5.5 中的 $\bar{X}$ 控制图。

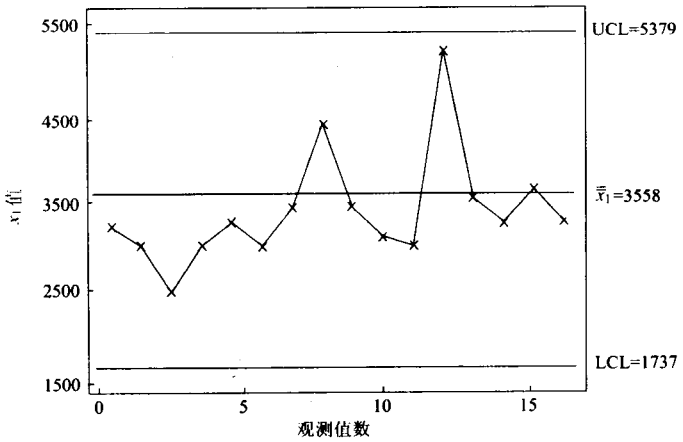


图 5.5　x_1=法定加班出勤时数的 $\bar{X}$ 控制图

法定加班出勤时数在数据收集期内是稳定的，加班时数的波动是由一般原因引起的，并无迹象表明存在引起波动的特殊原因。

在考虑多于一个重要特征的情形下，需要用多元的方法来监控过程的稳定性。这种方

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

法能考虑诸特征之间的相关性，且能控制对波动的特殊原因发出错误信号的总体概率。变量间的高度相关使得评估一个总的误差率成为不可能，而这点却可以通过大量一元控制图来实现。

两个最常见的多元控制图是(i)椭圆控制图和(ii)T^2 控制图。

实践中出现两种情况，需要用不同的方法处理：

1. 监控一个给定的多元观测值样本的稳定性

2. 为未来的观测值设置一个控制域

首先，我们考虑将多元控制方法用于多元观测值样本 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$，然后，再来讨论当观测值为一些子集的均值时的多元方法。

监控多元观测值样本稳定性的控制图

假设 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_n$ 独立同分布，分布服从 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$。由结论 4.8 可知，对

$$\mathbf{X}_j - \overline{\mathbf{X}} = \left(1 - \frac{1}{n}\right)\mathbf{X}_j - \frac{1}{n}\mathbf{X}_1 - \cdots - \frac{1}{n}\mathbf{X}_{j-1} - \frac{1}{n}\mathbf{X}_{j+1} - \cdots - \frac{1}{n}\mathbf{X}_n$$

有

$$E(\mathbf{X}_j - \overline{\mathbf{X}}) = \mathbf{0} = (1 - n^{-1})\boldsymbol{\mu} - (n-1)n^{-1}\boldsymbol{\mu},$$

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{X}_j - \overline{\mathbf{X}}) = \left(1 - \frac{1}{n}\right)^2\boldsymbol{\Sigma} + (n-1)n^{-2}\boldsymbol{\Sigma} = \frac{(n-1)^2}{n}\boldsymbol{\Sigma}$$

而且服从分布 $N_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$。但由于 $\mathbf{X}_j - \overline{\mathbf{X}}$ 与样本协方差阵 $\mathbf{S}$ 不独立，所以我们只能用近似的 χ^2 分布来确定其控制限。

椭圆控制图 两变量控制域的椭圆控制图是一种较为直观的控制图，不过这种方法仅限于两个变量。若将第 j 单元的两个特征画作(x_{j1}, x_{j2})，则 95%置信椭圆由满足如下不等式的所有 $\mathbf{x}$ 构成：

$$(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \leqslant \chi_2^2(0.05) \tag{5-32}$$

例 5.9 （加班时数的椭圆控制图）

参看例 5.8，构造一对特征(法定加班出勤时数及特殊事件处理加班时数)的椭圆质量控制图。由计算机的计算给出：

$$\overline{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 3558 \\ 1478 \end{bmatrix} \quad 且 \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 367\,884.7 & -72\,093.8 \\ -72\,093.8 & 1\,399\,053.1 \end{bmatrix}$$

用 99%置信椭圆来说明椭圆控制图，构成该椭圆的所有 $\mathbf{x}$ 满足

$$(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}}) \leqslant \chi_2^2(0.01)$$

这里 $p=2$，故 $\chi_2^2(0.01)=9.21$，因此，该椭圆为：

$$\frac{s_{11}s_{22}}{s_{11}s_{22} - s_{12}^2}\left[\frac{(x_1 - \overline{x}_1)^2}{s_{11}} - 2s_{12}\frac{(x_1 - \overline{x}_1)(x_2 - \overline{x}_2)}{s_{11}s_{22}} + \frac{(x_2 - \overline{x}_1)^2}{s_{22}}\right]$$

$$= \frac{(367844.7 \times 1399053.1)}{367844.7 \times 1399053.1 - (-72093.8)^2} \times$$

$$\left[\frac{(x_1 - 3558)^2}{367844.7} - 2 \times (-72093.8) \times \frac{(x_1 - 3558)(x_2 - 1478)}{367844.7 \times 1399053.1}\right.$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$+\frac{(x_1-1478)^2}{1399053.1}\Bigg]\leqslant 9.21$$

这个椭圆的图形及各对数据所对应的点均示于图 5.6。

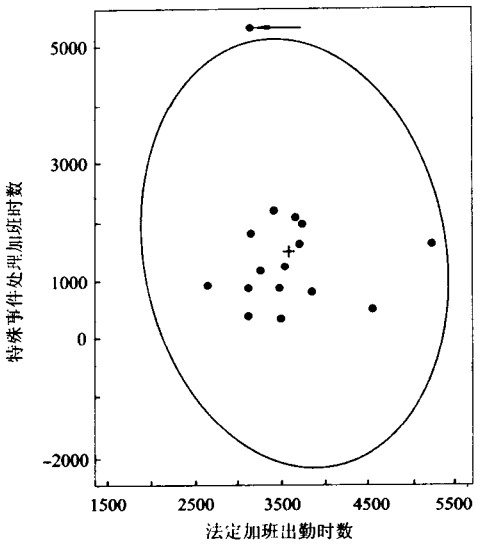


图 5.6　法定加班出勤时数及特殊事件处理加班时数的 99%椭圆质量控制图

注意，箭头所指的那个点在椭圆之外。当一个点落在控制域外面时，需对 x_1 和 x_2 分别构造 $\bar{x}$ 控制图。x_1 的 $\overline{X}$ 控制图在图 5.5 中已给出，x_2 的 $\overline{X}$ 控制图见图 5.7。

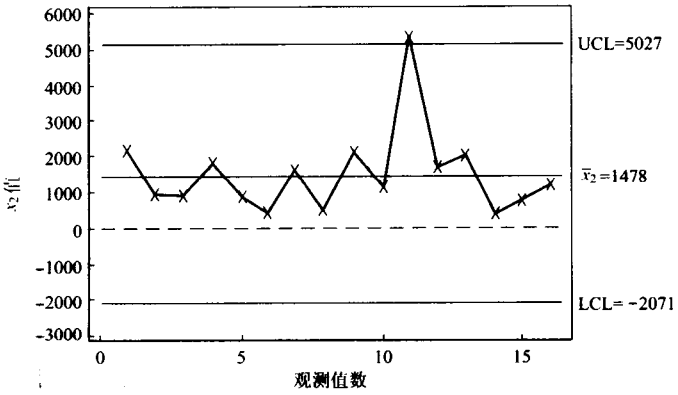


图 5.7　x_2=特殊事件处理加班时数的 $\overline{X}$ 控制图

当必须为非负的数据的控制下限小于 0 时，一般把控制下限设为 0，故图 5.7 中的虚线即为控制下限。

图 5.7 中的特殊事件处理加班时间数据中，有一个点落在控制上限之外，这是不是由特殊原因引起的异常事件？事实上，在这段时间里美国轰炸了某国首都，招致麦迪逊城学生的抗议，故大多数特殊事件处理加班时间均用在这 4 周之内。虽然根据定义，这种加班处理时数仅当有特殊事件发生时才会出现，因而是不可预测的，但它仍有一定的稳定性。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

T^2 控制图 一个 T^2 控制图可用来处理大量的特征。与椭圆控制图不同的是，它并不仅仅局限于两个变量。此外，与散点图不同的是，它的点是按时间顺序画出的，这样我们从图上可以看到各种变化模式和趋势。

对第 j 个点计算 T^2 统计量

$$T_j^2 = (\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) \tag{5-33}$$

然后将 T^2 值画在时间轴上。控制下限为 0，而控制上限可定为 $\mathrm{UCL} = \chi_p^2(0.05)$ 或 $\chi_p^2(0.01)$。

在 T^2 控制图中没有中心线。值得注意的是，T^2 统计量与 4.6 节中用于检验正态性的量 d_j^2 相同。

例 5.10 （加班时数的 T^2 控制图）

利用例 5.8 中警署的数据，可以构造两变量 X_1＝法定加班出勤时数及 X_2＝特殊事件处理加班时数的 T^2 控制图。变量多于两个的 T^2 控制图在练习 5.23 中考虑。与例 5.9 的椭圆控制图一样，我们取 $\alpha = 0.01$。

图 5.8 的 T^2 控制图表明，第 11 期的那对数据失控。与例 5.9 一样，进一步的研究表明，这是由于这段时间内，用于特殊事件处理的加班时数很大所致。

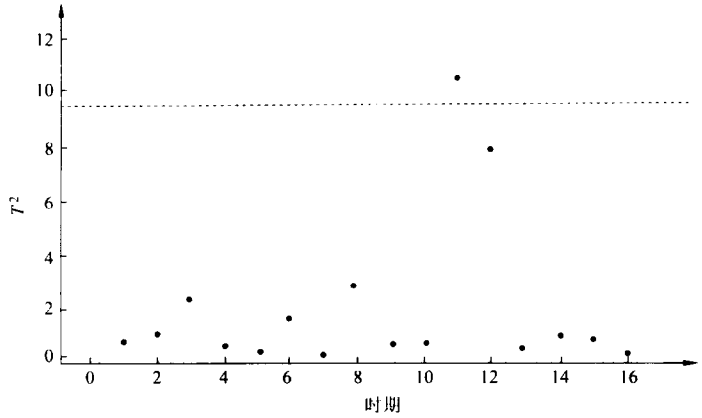


图 5.8 法定加班出勤时数及特殊事件处理加班时数的 T^2 质量控制图（$\alpha = 0.01$）

当多元 T^2 控制图发出第 j 个数据落在控制域外面的信号时，就应确定哪些变量要对此负责。为此，我们经常选择基于庞弗罗尼区间的控制域来解决这一问题。如果 x_{jk} 不落在区间 $(\bar{x}_k - t_{n-1}(0.005/p)\sqrt{s_{kk}},\ \bar{x}_k + t_{n-1}(0.005/p)\sqrt{s_{kk}})$ 之中，则第 k 个变量失控，此处 p 为所测量变量的总数。

未来单个观察值的控制域

现在的目标是：当一个过程稳定时，利用收集到的数据 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$ 来确定某一个或某些未来观测值的控制域。预期未来观测值将落入其内的区域称为**预测域**。若过程稳定，则观测值可视为独立同分布的，其分布服从 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$。由于这些控制域除了监控质量

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

之外还具有更普遍的重要性，我们在结论 5.6 中先给出其基本的分布理论。

结论 5.6 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 独立同分布，分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，记 $\mathbf{X}$ 为来自相同分布的一个未来观测值，此时

$$T^2=\frac{n}{n+1}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})\text{ 服从分布}\frac{(n-1)p}{n-p}F_{p,n-p}$$

且其 $100(1-\alpha)\%$ 的 p-维预测椭球由满足如下不等式的全部 $\mathbf{x}$ 决定：

$$(\mathbf{x}-\overline{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\overline{\mathbf{x}})\leqslant\frac{(n^2-1)p}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)$$

证明 首先注意到 $\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}}$ 的均值为 0，由于 $\mathbf{X}$ 为未来观测值，故 $\mathbf{X}$ 与 $\overline{\mathbf{X}}$ 相互独立，于是

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})=\mathrm{Cov}(\mathbf{X})+\mathrm{Cov}(\overline{\mathbf{X}})=\boldsymbol{\Sigma}+\frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma}=\frac{(n+1)}{n}\boldsymbol{\Sigma}$$

且由结论 4.8 知 $\sqrt{n/(n+1)}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})$ 服从分布 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$。

矩阵 $\sqrt{\frac{n}{n+1}}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})'\mathbf{S}^{-1}\sqrt{\frac{n}{n+1}}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})$ 是服从多元正态分布 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$ 的随机向量与独立的威沙特阵 $W_{p,n-1}(\boldsymbol{\Sigma})$ 相结合的随机矩阵，具有如下形式：

$$(\text{多元正态随机向量})'\left(\frac{\text{威沙特随机阵}}{\text{自由度}}\right)^{-1}(\text{多元正态随机向量})$$

根据式(5-8)，这样的随机矩阵服从 F 分布。

椭圆中的常数由式(5-6)得出。

注意，对一个未来观测值 $\mathbf{x}$，结论 5.6 中的预测域为一椭球，其中心为初始的样本均值 $\overline{\mathbf{x}}$，其轴则由 $\mathbf{S}$ 的特征向量确定。由于

$$P\left[(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{X}-\overline{\mathbf{X}})\leqslant\frac{(n^2-1)p}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)\right]=1-\alpha$$

在获得任何新观测值之前，$\mathbf{X}$ 落在预测椭球中的概率为 $1-\alpha$。

请记住，在利用当前观测值来确定未来观测值的控制域之前，这些当前观测值必须是稳定的。

根据结论 5.6，可得出两种关于未来观测值的质量控制图。

未来观测值的控制椭圆

对 $p=2$，结论 5.6 中的 95% 预测椭圆为

$$(\mathbf{x}-\overline{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\overline{\mathbf{x}})\leqslant\frac{(n^2-1)2}{n(n-2)}F_{2,n-2}(0.05)\tag{5-34}$$

如果未来观测值 $\mathbf{x}$ 落在控制椭圆之外，就说 $\mathbf{x}$ 失控。

例 5.11 （未来加班时数的控制椭圆）

在例 5.9 中，我们检验了法定加班出勤时数与特殊事件处理加班时数的稳定性，下面我们用这些数据来确定这两个变量未来观测值的控制域。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

从例 5.9 及图 5.6 我们发现，第 11 期的那对数据失控。我们舍去此点，重新构造 99%椭圆控制图。此时所有的点均在控制域内，因此，它们可用来确定 $p=2$ 时的 95%预测域。这个控制椭圆连同 15 个稳定的原始观测值均示于图 5.9。

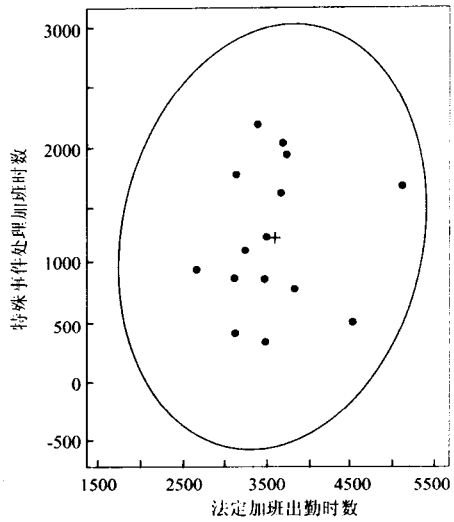


图 5.9　法定出勤及特殊事件处理加班时数的未来观测值的 95%控制椭圆

落在椭圆中的任何未来观测值被认为是稳定或在控制中的。椭圆之外的观测值代表着可能的失控观测值或特殊原因变量。

未来观测值的 T^2 控制图

对每一个新的观测值 $\mathbf{x}$，按时间顺序对 $T^2=\frac{n}{n+1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})$ 作图，令 LCL=0，并取 $\mathrm{UCL}=\frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(0.05)$

落在控制上限上方的那些点表示其波动有潜在的特殊原因，因而暗示我们应对该控制过程进行检查，以确定是否立即采取纠正措施。

基于子样本均值的控制图

假定来自控制过程的每一个观测值随机向量独立同分布，且分布服从 $N_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$。当抽样方法指定选取的单元数 $m>1$ 时，我们将采取与前不同的处理方法。由第一个样本确定其样本均值 $\bar{\mathbf{X}}_1$ 和协方差阵 $\mathbf{S}_4$，当总体为正态时，这两个随机量彼此独立。

对一般的子样本均值 $\bar{\mathbf{X}}_j$，$\bar{\mathbf{X}}_j-\bar{\bar{\mathbf{X}}}$ 服从正态分布，其均值为 $\mathbf{0}$，且

$$\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_j-\bar{\bar{\mathbf{X}}})=\left(1-\frac{1}{n}\right)^2\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_j)+\frac{n-1}{n^2}\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1)=\frac{(n-1)}{nm}\boldsymbol{\Sigma}$$

其中

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\bar{\bar{\mathbf{X}}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\bar{\mathbf{X}}_j$$

正如 6.4 节中将要说明的，来自 n 个子样本的样本协方差联合起来可给出其公共协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的一个估计量(即第 6 章中的 $\mathbf{S}_p$)，其表达式为：

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n}(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \cdots + \mathbf{S}_n)$$

这里 $(nm-n)\mathbf{S}$ 独立于每一个 $\bar{\mathbf{X}}_j$，因而也独立于它们的均值 $\bar{\bar{\mathbf{X}}}$，而且 $(nm-n)\mathbf{S}$ 服从自由度为 $nm-n$ 的威沙特分布。注意，在任一给定的时期内，我们可用收集到的数据本身来估计 $\boldsymbol{\Sigma}$。这些估计量联合起来，便形成一个自由度很大 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的单个估计量。于是

$$T^2 = \frac{nm}{n-1}(\bar{\mathbf{X}}_j - \bar{\bar{\mathbf{X}}})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{X}}_j - \bar{\bar{\mathbf{X}}}) \tag{5-35}$$

服从分布 $\frac{(nm-n)p}{(nm-n-p+1)}F_{p,nm-n-p+1}$

椭圆控制图 按照类似于前面讨论单独多元观测值的方式，各对子样本均值的椭圆控制图为

$$(\bar{\mathbf{x}} - \bar{\bar{\mathbf{x}}})\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \bar{\bar{\mathbf{x}}}) \leqslant \frac{(n-1)(m-1)2}{m(nm-n-1)}F_{2,nm-n-1}(0.05) \tag{5-36}$$

此式右端常用 $\chi_2^2(0.05)/m$ 来近似替代。

对那些落在控制椭圆外的点所对应的子样本应仔细检查，以确定被测量的质量特征的行为是否有变化。对这个问题的进一步讨论，感兴趣的读者可参看[9]。

T^2 控制图 为构造有 p 个特征的子样本的 T^2 控制图，需画出量 $T_j^2 = m(\bar{\mathbf{X}}_j - \bar{\bar{\mathbf{X}}})'\mathbf{S}^{-1}\cdot(\bar{\mathbf{X}}_j - \bar{\bar{\mathbf{X}}})\ j=1,2,\cdots,n$ 的图，此处

$$\mathrm{UCL} = \frac{(n-1)(m-1)p}{(nm-n-p+1)}F_{2,nm-n-p+1}(0.05)$$

当 n 很大时 UCL 常可用 $\chi_2^2(0.05)$ 来逼近。

超过 UCL 的 T_j^2 值对应于潜在的失控或存在特殊原因的被动，应予以检查(见[9])。

未来子样本观测值的控制域

一旦数据取自某一稳定运行过程，便可用来构造未来可观测子样本均值的控制限。

若 $\bar{\mathbf{X}}$ 为未来子样本均值，那么 $\bar{\mathbf{X}} - \bar{\bar{\mathbf{X}}}$ 服从多元正态分布，均值为 $\mathbf{0}$，且

$$\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}} - \bar{\bar{\mathbf{X}}}) = \mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}) + \frac{1}{n}\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1) = \frac{(n+1)}{nm}\boldsymbol{\Sigma}$$

因此，$\frac{nm}{n+1}(\bar{\mathbf{X}} - \bar{\bar{\mathbf{X}}})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{X}} - \bar{\bar{\mathbf{X}}})$ 服从分布 $\frac{(nm-n)p}{(nm-n-p+1)}F_{p,nm-n-p+1}$

未来子样本均值的控制椭圆 $p=2$ 个特征的未来子样本均值的预测椭圆被定义为所有满足如下条件的 $\bar{\mathbf{x}}$ 的集合：

$$(\bar{\mathbf{x}} - \bar{\bar{\mathbf{x}}})'\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}} - \bar{\bar{\mathbf{x}}}) \leqslant \frac{(n+1)(m-1)\times 2}{m(nm-n-1)}F_{2,nm-n-1}(0.05) \tag{5-37}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

同样，此式右端常用 $\chi_2^2(0.05)/m$ 来逼近。

未来子样本均值的 T^2 控制图 同前面一样，我们将 $n/(n+1)$ 引进控制限，并将由未来样本均值构成的量 $T^2=m(\overline{\mathbf{X}}-\overline{\overline{\mathbf{X}}})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\overline{\overline{\mathbf{X}}})$ 按时间顺序作图。此时控制上限为

$$\mathrm{UCL}=\frac{(n+1)(m-1)p}{(nm-n-p+1)}F_{p,nm-n-p+1}(0.05)$$

当 n 很大时，UCL 常用 $\chi_2^2(0.05)$ 来逼近。

落在预测椭圆之外或控制上限上方的那些点暗示：质量特征的当前值在某种程度上不同于先前稳定过程的相应值。这也许是好事，也可能是坏事，但几乎可以肯定地说，我们必须认真地去查明引起这种变化的原因。

5.7 观测值缺损时均值向量的推断

人们常常得不到观测向量的某些分量值。当记录设备发生故障，或当被调查人不愿回答问卷调查表中的某个问题时，就会出现这种情况。处理这类不完全观测值（即缺损值）问题的最好方法在很大程度上依赖于实验本身。如果观测值缺损的方式与应答值密切相关，比如说一个收入极高的人在薪水调查问卷中会拒绝应答，则随后所作的部分推断将发生严重偏倚。到目前为止，还没有能对付这种情形的统计方法。但当数据缺损是一种随机缺损，或者说当数据缺损的机会不受变量值的影响时，我们就能对这种情形进行处理。

登普斯特(Dempster)等人在[5]中提出一种从不完全数据出发计算其极大似然估计的一般方法。这种被称为 **EM 算法**的技术，由包含两个步骤的迭代计算组成，这二个步骤分别称为**预测**步骤和**估计**步骤：

1. **预测步骤** 给定未知参数的某一估计 $\tilde{\theta}$，预测任何缺损观测值对（完全数据）充分统计量的贡献。

2. **估计步骤** 利用预测得到的充分统计量计算参数的修正估计。

从一步到另一步的计算循环往复地进行，直到由相继两次迭代所得出的修正估计之间没有明显差异时为止。

当观测值 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为来自 p 元正态总体的随机样本时，这个预测-估计算法是以完全数据的充分统计量[见式(4-21)]

$$\mathbf{T}_1=\sum_{j=1}^{n}\mathbf{X}_j=n\overline{\mathbf{X}}$$

及

$$\mathbf{T}_2=\sum_{j=1}^{n}\mathbf{X}_j\mathbf{X}_j'=(n-1)\mathbf{S}+n\overline{\mathbf{X}}\,\overline{\mathbf{X}}'$$

为依据的。在此种情形下，算法的具体步骤如下（假定总体的均值 $\boldsymbol{\mu}$ 与方差 $\boldsymbol{\Sigma}$ 未知）：

预测步骤 对每一具有缺损值的向量 $\mathbf{x}_j$，记 $\mathbf{x}_j^{(1)}$ 为其缺损的分量，$\mathbf{x}_j^{(2)}$ 为其可获得分量。于是 $\mathbf{x}_j'=[x_j^{(1)\prime},x_j^{(2)\prime}]$。

设由估计步骤算出的估计值 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ 给定，在 $\mathbf{x}^{(2)}$ 给定的条件下，利用 $\mathbf{x}^{(1)}$ 的条件正态

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

分布的均值来估计缺损值，即用①

$$\tilde{\mathbf{x}}_j^{(1)} = E(\mathbf{X}_j^{(1)} | \mathbf{x}_j^{(2)}; \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}) = \tilde{\boldsymbol{\mu}}^{(1)} + \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_j^{(2)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}^{(2)}) \tag{5-38}$$

来估计 $\mathbf{x}_j^{(1)}$ 对 $\mathbf{T}_1$ 的贡献。

然后预测出 $\mathbf{x}_j^{(1)}$ 对 $\mathbf{T}_2$ 的贡献为

$$\widetilde{\mathbf{x}_j^{(1)}\mathbf{x}_j^{(2)\prime}} = E(\mathbf{X}_j^{(1)}\mathbf{X}_j^{(1)\prime} | \mathbf{x}_j^{(2)}; \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}) = \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{11} - \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22}^{-1}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{21} + \tilde{\mathbf{x}}_j^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_j^{(1)\prime} \tag{5-39}$$

和

$$\widetilde{\mathbf{x}_j^{(1)}\mathbf{x}_j^{(2)\prime}} = E(\mathbf{X}_j^{(1)}\mathbf{X}_j^{(2)\prime} | \mathbf{x}_j^{(2)}; \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}) = \tilde{\mathbf{x}}_j^{(1)}\tilde{\mathbf{x}}_j^{(2)\prime}$$

将式(5-38)和式(5-39)中的贡献对所有含缺损分量的 $\mathbf{x}_j$ 求和，此和与样本数据结合便可产生 $\tilde{\mathbf{T}}_1$ 和 $\tilde{\mathbf{T}}_2$。

估计步骤 计算修正后的极大似然估计值(见结论 4.11)

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \frac{\tilde{\mathbf{T}}_1}{n}, \quad \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{n}\tilde{\mathbf{T}}_2 - \tilde{\boldsymbol{\mu}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}' \tag{5-40}$$

我们通过例 5.12 来说明预测-估计算法的计算步骤。

例 5.12 (EM 算法的说明)

用不完全数据集

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} - & 0 & 3 \\ 7 & 2 & 6 \\ 5 & 1 & 2 \\ - & - & 5 \end{bmatrix}$$

来估计正态总体均值 $\boldsymbol{\mu}$ 与协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，这里 $n=4, p=3$，观测值向量 $\mathbf{x}_1$ 与 $\mathbf{x}_4$ 的某些分量的数据缺损。

我们先从可获得观测值计算出样本均值初始估计：

$$\tilde{\mu}_1 = \frac{7+5}{2} = 6, \quad \tilde{\mu}_2 = \frac{0+2+1}{3} = 1, \quad \tilde{\mu}_3 = \frac{3+6+2+5}{4} = 4$$

用这些均值代替缺损值，比如说 $\tilde{x}_{11}=6$，我们就能得到协方差阵的初始估计，在构造这些估计时，均需除以 n，因为这种算法最终产生的是极大似然估计 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$。于是

$$\tilde{\sigma}_{11} = \frac{(6-6)^2 + (7-6)^2 + (5-6)^2 + (6-6)^2}{4} = \frac{1}{2}$$

$$\tilde{\sigma}_{22} = \frac{1}{2}, \quad \tilde{\sigma}_{33} = \frac{5}{2}$$

$$\tilde{\sigma}_{12} = \frac{(6-6)\times(0-1) + (7-6)\times(2-1) + (5-6)\times(1-1) + (6-6)\times(1-1)}{4}$$

$$= \frac{1}{4}$$

$$\tilde{\sigma}_{23} = \frac{3}{4}, \quad \tilde{\sigma}_{13} = 1$$

预测步骤的内容是利用初始估计 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 与 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ 预测缺损值对充分统计量 $\mathbf{T}_1$ 与 $\mathbf{T}_2$ 的贡献[见式(5-38)及式(5-39)]。

---

① 若所有分量 $\mathbf{x}_j$ 均缺损，则令 $\tilde{\mathbf{x}}_j = \tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 且 $\tilde{\mathbf{x}}_j\tilde{\mathbf{x}}_j' = \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} + \tilde{\boldsymbol{\mu}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}'$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

由于 $\mathbf{x}_1$ 的第一个分量缺损，我们把 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 与 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ 两个矩阵分块，写成

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \\ \tilde{\mu}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\mu}^{(1)} \\ \tilde{\mu}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \left[\begin{array}{c:cc} \tilde{\sigma}_{11} & \tilde{\sigma}_{12} & \tilde{\sigma}_{13} \\ \hdashline \tilde{\sigma}_{12} & \tilde{\sigma}_{22} & \tilde{\sigma}_{23} \\ \tilde{\sigma}_{13} & \tilde{\sigma}_{23} & \tilde{\sigma}_{33} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c:c} \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{11} & \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12} \\ \hdashline \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{21} & \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22} \end{array}\right]$$

然后作如下述预测：

$$\tilde{x}_{11} = \tilde{\mu}_1 + \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22}^{-1}\begin{bmatrix} x_{12} - \tilde{\mu}_2 \\ x_{13} - \tilde{\mu}_3 \end{bmatrix} = 6 + \left[\frac{1}{4}, 1\right]\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{5}{2} \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} 0 - 1 \\ 3 - 4 \end{bmatrix} = 5.73$$

$$\widetilde{x_{11}^2} = \tilde{\sigma}_{11} - \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22}^{-1}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{21} + \tilde{x}_{11}^2 = \frac{1}{2} - \left[\frac{1}{4}, 1\right]\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{5}{2} \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ 1 \end{bmatrix} + 5.73^2 = 32.99$$

$$\widetilde{x_{11}[x_{12}, x_{13}]} = \tilde{x}_{11}[x_{12}, x_{13}] = 5.73 \times [0, 3] = [0, 17.18]$$

对 $\mathbf{x}_4$ 的两个缺损分量，我们将 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 与 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ 分块成如下形式：

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \\ \tilde{\mu}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\boldsymbol{\mu}}^{(1)} \\ \tilde{\mu}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \left[\begin{array}{cc:c} \tilde{\sigma}_{11} & \tilde{\sigma}_{12} & \tilde{\sigma}_{13} \\ \tilde{\sigma}_{12} & \tilde{\sigma}_{22} & \tilde{\sigma}_{23} \\ \hdashline \tilde{\sigma}_{13} & \tilde{\sigma}_{23} & \tilde{\sigma}_{33} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c:c} \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{11} & \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12} \\ \hdashline \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{21} & \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22} \end{array}\right]$$

然后预测缺损值对 $\mathbf{T}_1$ 的贡献为

$$\widetilde{\begin{bmatrix} x_{41} \\ x_{42} \end{bmatrix}} = E\left(\begin{bmatrix} X_{41} \\ X_{42} \end{bmatrix} \middle| x_{43} = 5;\ \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\right) = \begin{bmatrix} \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \end{bmatrix} + \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{12}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{22}^{-1}(x_{43} - \tilde{\mu}_3)$$

$$= \begin{bmatrix} 6 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}\left(\frac{5}{2}\right)^{-1}(5 - 4) = \begin{bmatrix} 6.4 \\ 1.3 \end{bmatrix}$$

另外从式(5-39)得出缺损值对 $\mathbf{T}_2$ 的贡献为

$$\begin{bmatrix} \widetilde{x_{41}^2} & \widetilde{x_{41}x_{42}} \\ \widetilde{x_{41}x_{42}} & \widetilde{x_{42}^2} \end{bmatrix} = E\left(\begin{bmatrix} X_{41}^2 & X_{41}X_{42} \\ X_{41}X_{42} & X_{42}^2 \end{bmatrix} \middle| x_{43} = 5;\ \tilde{\boldsymbol{\mu}},\ \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\right)$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}\left(\frac{5}{2}\right)^{-1}\begin{bmatrix} 1 & \frac{3}{4} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 6.4 \\ 1.3 \end{bmatrix}[6.4 \quad 1.3]$$

$$= \begin{bmatrix} 41.06 & 8.27 \\ 8.27 & 1.97 \end{bmatrix}$$

及

$$\widetilde{\begin{bmatrix} x_{41} \\ x_{42} \end{bmatrix}}(x_{43}) = E\left(\begin{bmatrix} X_{41}X_{43} \\ X_{42}X_{43} \end{bmatrix} \middle| x_{43} = 5;\ \tilde{\boldsymbol{\mu}}, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\right) = \widetilde{\begin{bmatrix} x_{41} \\ x_{42} \end{bmatrix}}(x_{43})$$

$$= \begin{bmatrix} 6.4 \\ 1.3 \end{bmatrix} \times 5 = \begin{bmatrix} 32.0 \\ 6.5 \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

于是，我们预测出完全数据充分统计量为：

$$\tilde{\mathbf{T}}_1=\begin{bmatrix}\tilde{x}_{11}+x_{21}+x_{31}+\tilde{x}_{41}\\ x_{12}+x_{22}+x_{32}+\tilde{x}_{42}\\ x_{13}+x_{23}+x_{33}+x_{43}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5.73+7+5+6.4\\ 0+2+1+1.3\\ 3+6+2+5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}24.13\\ 4.30\\ 16.00\end{bmatrix}$$

$$\tilde{\mathbf{T}}_2=\begin{bmatrix}\widetilde{x_{11}^2}+x_{21}^2+x_{31}^2+\widetilde{x_{41}^2} & & \\ \widetilde{x_{11}x_{12}}+x_{21}x_{22}+x_{31}x_{32}+\widetilde{x_{41}x_{42}} & x_{12}^2+x_{22}^2+x_{32}^2+\widetilde{x_{42}^2} & \\ \widetilde{x_{11}x_{13}}+x_{21}x_{23}+x_{31}x_{33}+\widetilde{x_{41}x_{43}} & x_{12}x_{13}+x_{22}x_{23}+x_{32}x_{33}+\widetilde{x_{42}x_{43}} & x_{13}^2+x_{23}^2+x_{33}^2+x_{43}^2\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}32.99+7^2+5^2+41.06 & & \\ 0+7\times2+5\times1+8.27 & 0^2+2^2+1^2+1.97 & \\ 17.18+7\times6+5\times2+32 & 0\times3+2\times6+1\times2+6.5 & 3^2+6^2+2^2+5^2\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}148.05 & 27.27 & 101.18\\ 27.27 & 6.97 & 20.50\\ 101.18 & 20.50 & 74.00\end{bmatrix}$$

预测步骤到此结束。

在接下来的估计步骤中，用式(5-40)求出 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的修正估计①：

$$\tilde{\boldsymbol{\mu}}=\frac{1}{n}\tilde{\mathbf{T}}_1=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}24.13\\ 4.30\\ 16.00\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}6.03\\ 1.08\\ 4.00\end{bmatrix}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}=\frac{1}{n}\tilde{\mathbf{T}}_2-\tilde{\boldsymbol{\mu}}\tilde{\boldsymbol{\mu}}'$$

$$=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}148.05 & 27.27 & 101.18\\ 27.27 & 6.97 & 20.50\\ 101.18 & 20.50 & 74.00\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}6.03\\ 1.08\\ 4.00\end{bmatrix}\begin{bmatrix}6.03 & 1.08 & 4.00\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}0.61 & 0.33 & 1.17\\ 0.33 & 0.59 & 0.83\\ 1.17 & 0.83 & 2.50\end{bmatrix}$$

注意，这里的 $\tilde{\sigma}_{11}=0.61$ 与 $\tilde{\sigma}_{22}=0.59$ 要比相应的初始估计大一些，而初始估计是第一和第二个变量中的缺损观测值用其余诸值的样本均值代替后得到的。第三个方差的估计 $\tilde{\sigma}_{33}$保持不变，因为它不受缺损分量的影响。

预测步骤与估计步骤之间的迭代一直持续到 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ 与 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$中的元素基本保持不变为止。这类计算用计算机是很容易处理的。

一旦得出最终的估计 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$，而 $\mathbf{X}$ 中的缺损值个数相对说又很少时，则将满足关系

$$n(\hat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu})'\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\mu}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\chi_p^2(\alpha) \tag{5-41}$$

的所有 $\boldsymbol{\mu}$ 作为近似的 $100(1-\alpha)\%$置信椭球来处理似乎是合理的。这时联合置信表示同5.5节中一样，只不过那里的 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 应分别用 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 代替。

---

① 最后形式的 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$的元素严格取两位小数。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

警告 前面所讨论的预测-估计算法，其基础是要求分量观测值的缺损是一种随机缺损。若缺损值与响应的水平有关，则用前面的方法处理缺损值可能给估计方法带来严重偏倚。然而典型的情况是，缺损值与被测量的响应有关。因此，即使数据的丢失是随机的，我们也应对任何一种用作弥补的计算方案持怀疑态度。当缺损值不止少数几个时，对研究者来说，寻找产生此种现象的原因是绝对必要的。

5.8 多元观测中由时间相依性造成的困难

对本章所描述的方法，我们都假定多元观测量 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 构成一随机样本，就是说，它们相互独立。如果观测数据是按时间顺序收集的，这个假定可能不成立。即使观测数据中间只存在中等程度的时间相依性，也会对建立在独立性假设基础上的统计检验、置信域以及联合置信区间造成很大困难。

当时间相依性可由一阶多元自回归模型(AR(1))来刻画时，我们来解释这种困难的本质。设 $p\times 1$ 随机向量 $\mathbf{X}_t$ 服从多元 AR(1)模型：

$$\mathbf{X}_t-\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{X}_{t-1}-\boldsymbol{\mu})+\boldsymbol{\varepsilon}_t \tag{5-42}$$

其中所有 $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ 独立同分布，满足 $E[\boldsymbol{\varepsilon}_t]=\mathbf{0}$ 与 $\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_t)=\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon$，且系数矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 的所有特征值均在 -1 与 1 之间。

在该模型中，$\mathrm{Cov}(\mathbf{X}_t,\ \mathbf{X}_{t-j})=\boldsymbol{\Phi}^j\boldsymbol{\Sigma}_X$，此处 $\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{X}=\sum_{j=0}^{\infty}\boldsymbol{\Phi}^j\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon\boldsymbol{\Phi}'^j$。AR(1)模型式(5-42)通过系数矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 建立 t 时刻的观测值与 $t-1$ 时刻的观测值之间的关系。此外，当系数阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 的所有元素均为 0 时，在多元正态性假设下，该模型就表明诸观测值相互独立。自回归模型这一名称来自这样的事实：式(5-42)看上去就像是以 $\mathbf{X}_t$ 为因变量，以其前期值 $\mathbf{X}_{t-1}$ 为自变量的多元回归模型。

文献[8]中已证明

$$\overline{\mathbf{X}}\to\boldsymbol{\mu},\quad \mathbf{S}=\frac{1}{n-1}\sum_{t=1}^{n}(\mathbf{X}_t-\overline{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_t-\overline{\mathbf{X}})'\to\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{X}$$

且

$$\mathrm{Cov}\left(n^{-1/2}\sum_{t=1}^{n}\mathbf{X}_t\right)\to(\mathbf{I}-\boldsymbol{\Phi})^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{X}+\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{X}(\mathbf{I}-\boldsymbol{\Phi}')^{-1}-\boldsymbol{\Sigma}_\mathbf{X} \tag{5-43}$$

其中的箭头表示依概率收敛。此外，当 n 很大时，$\sqrt{n}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})$近似服从均值为 0，协方差矩阵由式(5-43)给出的正态分布。

为计算方便起见，假设基本过程有 $\boldsymbol{\Phi}=\phi\mathbf{I}$，其中 $|\phi|<1$。现在考虑 $\boldsymbol{\mu}$ 的名义水平为 95%的大样本置信椭球：

$$\{\boldsymbol{\mu}:\ n(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{S}^{-1}(\overline{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu})\leqslant\chi_p^2(0.05)\}$$

当观测值相互独立时，该椭球覆盖样本的概率为 0.95。当观测值由上述的自回归模型刻画时，该椭球的覆盖概率为

$$P[\chi_p^2\leqslant(1-\phi)(1+\phi)^{-1}\chi_p^2(0.05)]$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 5.9 显示了覆盖概率与系数 ϕ 及变量个数 p 之间的关系。

表 5.9 名义水平为 95%的置信椭球的覆盖概率

		ϕ			
		−0.25	0	0.25	0.5
p	1	0.989	0.950	0.871	0.742
	2	0.993	0.950	0.834	0.632
	5	0.998	0.950	0.751	0.405
	10	0.999	0.950	0.641	0.193
	15	1.000	0.950	0.548	0.090

表 5.9 的数据表明，即使对双变量的情形，覆盖概率也可能降得很低(低到 0.632)。

独立性假设十分重要，但当观测值实际上不独立时，根据独立性假设得出的结论很可能将人引入歧途。

补充 5A 作为 p 维椭球投影的联合置信区间与置信椭圆

作为本节的开始，我们先介绍一个椭球到直线投影的一般结论。

结论 5A.1 设常数 $c>0$ 和正定 $p\times p$ 矩阵 $\mathbf{A}$ 确定椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$。对给定向量 $\mathbf{u}\neq\mathbf{0}$。且椭球中任意一点 $\mathbf{z}$，椭球 $\{\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$ 在 $\mathbf{u}$ 上的投影为 $c\dfrac{\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}}{\mathbf{u}'\mathbf{u}}\mathbf{u}$，其由 $\mathbf{0}$ 沿 $\mathbf{u}$ 方向的长度为 $c\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}/\mathbf{u}'\mathbf{u}}$。当 $\mathbf{u}$ 为单位向量时，投影的长度为 $c\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}$ 个单位，故 $|\mathbf{z}'\mathbf{u}|\leqslant c\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}$，在 $-\mathbf{u}$ 方向的投影长度与此相同。

证明 由定义 2A.12，任一向量 $\mathbf{z}$ 在 $\mathbf{u}$ 上的投影为 $(\mathbf{z}'\mathbf{u})\mathbf{u}/\mathbf{u}'\mathbf{u}$，其长度平方为 $(\mathbf{z}'\mathbf{u})^2/\mathbf{u}'\mathbf{u}$，我们想使这个投影对椭球 $\mathbf{z}'\mathbf{A}\mathbf{z}\leqslant c^2$ 中的所有 $\mathbf{z}$ 达到极大。由推广的柯西-施瓦茨不等式(2-49)知 $(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2\leqslant(\mathbf{b}'\mathbf{B}\mathbf{d})(\mathbf{d}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d})$，等号在 $\mathbf{b}=k\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d}$ 时成立。令 $\mathbf{b}=\mathbf{z},\mathbf{d}=\mathbf{u}$ 和 $\mathbf{B}=\mathbf{A}^{-1}$，我们有

$$
\begin{aligned}
&\text{对所有 } \mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\\
&(\mathbf{u}'\mathbf{u})(\text{投影的长度})^2=(\mathbf{z}'\mathbf{u})^2\leqslant(\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z})(\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u})\\
&\qquad\qquad\leqslant c^2\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}
\end{aligned}
$$

当 $\mathbf{z}=c\mathbf{A}\mathbf{u}/\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}$ 时等号成立，此时上式给出投影最大值。就是说，$\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}=c^2\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}/\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}=c^2$ 对这个 $\mathbf{z}$ 来说提供最长的投影。因此，椭球在 $\mathbf{u}$ 上的投影为 $c\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}\mathbf{u}/\mathbf{u}'\mathbf{u}$，其长度为 $c\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}/\mathbf{u}'\mathbf{u}}$。对单位向量 $\mathbf{e}_u=\mathbf{u}/\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{u}}$，投影沿 $\mathbf{u}$ 方向伸长 $\sqrt{c^2\mathbf{e}_u'\mathbf{A}\mathbf{e}_u}=\dfrac{c}{\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{u}}}\sqrt{\mathbf{u}'\mathbf{A}\mathbf{u}}$ 个单位，在 $-\mathbf{u}$ 方向上伸长的长度也一样。

结论 5A.2 假定椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$ 给定，且 $\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1\vdots\mathbf{u}_2]$ 为任一秩为 2 的矩阵。此

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

时，该椭球中的 $\mathbf{z}$ 对所有 $\mathbf{U}$ 均蕴含了落在基于 $(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}$ 与 c^2 的椭球中的 $\mathbf{U}'\mathbf{z}$，即

$$\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z} \leqslant c^2 \quad \text{蕴含了} (\mathbf{U}'\mathbf{z})'(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}(\mathbf{U}'\mathbf{z}) \leqslant c^2 (\text{对所有 } \mathbf{U})$$

证明 先建立一基本不等式。

设 $\mathbf{P}=\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{U}(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}\mathbf{U}'\mathbf{A}^{1/2}$，其中 $\mathbf{A}=\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{A}^{1/2}$，注意到 $\mathbf{P}=\mathbf{P}'$ 和 $\mathbf{P}^2=\mathbf{P}$，有 $(\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{P}'=\mathbf{P}-\mathbf{P}^2=\mathbf{0}$。再利用 $\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{A}^{-1/2}$，就可写出

$$\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z} = (\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z})'(\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z}) \text{ 和 } \mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z} = \mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z} + (\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z}$$

于是

$$\begin{aligned}\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z} &= (\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z})'(\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z}) \\ &= (\mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z} + (\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z})'(\mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z} + (\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z}) \\ &= (\mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z})'(\mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z}) + ((\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z})'((\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z}) \\ &\geqslant \mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{P}'\mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z} = \mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{P}\mathbf{A}^{-1/2}\mathbf{z} = \mathbf{z}'\mathbf{U}(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}\mathbf{U}'\mathbf{z} \qquad (5\text{A-}1)\end{aligned}$$

由于 $\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2$ 及 $\mathbf{U}$ 的任意性，结论得证。

我们的下一结论给出了作为 p 维椭球投影的二维置信椭圆的构造方法（参见图 5.10）。

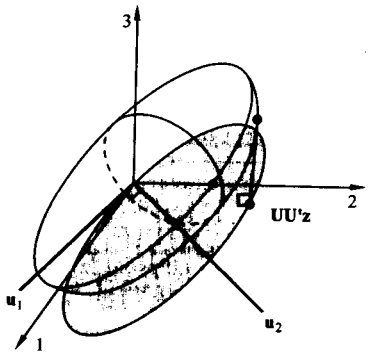


图 5.10 椭球 $\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2$ 在 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 面上的投影为椭圆

椭球在平面上的投影是最简单的，当该平面由 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 两向量确定时，只要首先使这两单位向量彼此正交即可（见结论 2A.3）。

结论 5A.3 给定椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$ 及两正交单位向量 $\mathbf{u}_1$ 和 $\mathbf{u}_2$，则椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$ 在 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 平面上的投影是一椭圆 $\{(\mathbf{U}'\mathbf{z})'(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}(\mathbf{U}'\mathbf{z})\leqslant c^2\}$，其中，$\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1 \vdots \mathbf{u}_2]$。

证明 由结论 2A.3，向量 $\mathbf{z}$ 在 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 平面上的投影为

$$(\mathbf{u}_1'\mathbf{z})\mathbf{u}_1 + (\mathbf{u}_2'\mathbf{z})\mathbf{u}_2 = [\mathbf{u}_1 \vdots \mathbf{u}_2]\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1'\mathbf{z}\\ \mathbf{u}_2'\mathbf{z}\end{bmatrix} = \mathbf{U}\mathbf{U}'\mathbf{z}$$

椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$ 的投影为椭球中所有向量 $\mathbf{z}$ 在 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 面上的投影，即 $\mathbf{U}\mathbf{U}'\mathbf{z}$，考虑投影 $\mathbf{U}(\mathbf{U}'\mathbf{z})$ 的两坐标 $\mathbf{U}'\mathbf{z}$。设 $\mathbf{z}$ 属于椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$，则 $\mathbf{U}\mathbf{U}'\mathbf{z}$ 属于椭球的投影。由结论 5A.2

$$(\mathbf{U}'\mathbf{z})'(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}(\mathbf{U}'\mathbf{z}) \leqslant c^2$$

故椭圆 $\{(\mathbf{U}'\mathbf{z})'(\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U})^{-1}(\mathbf{U}'\mathbf{z})\leqslant c^2\}$ 包含椭球投影的系数向量。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

设 $\mathbf{Ua}$ 为 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 平面上一向量，其系数 $\mathbf{a}$ 属于椭圆 $\{\mathbf{a}'(\mathbf{U}'\mathbf{AU})^{-1}\mathbf{a}\leqslant c^2\}$。若令 $\mathbf{z}=\mathbf{AU}(\mathbf{U}'\mathbf{AU})^{-1}\mathbf{a}$，则有

$$\mathbf{U}'\mathbf{z}=\mathbf{U}'\mathbf{AU}(\mathbf{U}'\mathbf{AU})^{-1}\mathbf{a}=\mathbf{a}$$

及

$$\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}=\mathbf{a}'(\mathbf{U}'\mathbf{AU})^{-1}\mathbf{U}'\mathbf{AA}^{-1}\mathbf{AU}(\mathbf{U}'\mathbf{AU})^{-1}\mathbf{a}=\mathbf{a}'(\mathbf{U}'\mathbf{AU})^{-1}\mathbf{a}\leqslant c^2$$

因此，$\mathbf{U}'\mathbf{z}$ 属于系数向量椭圆，且 $\mathbf{z}$ 属于椭球 $\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2$，于是，该椭圆只包含来自由椭球 $\{\mathbf{z}:\mathbf{z}'\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}\leqslant c^2\}$ 向 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 平面的投影的系数向量。

评注 椭球先投影到 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2$ 平面，然后再投影到 $\mathbf{u}_1$ 轴，这与将椭球直接投影到 $\mathbf{u}_1$ 轴是一样的。在讨论置信椭球时，二维置信椭圆的投影给出单一分量的置信区间。

评注 若 $\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1,\cdots,\mathbf{u}_q]$ 由 $q(2<q\leqslant p)$ 个线性无关的列所组成，则结论 5A.2 及结论 5A.3 仍成立。

练　　习

5.1 (a) 设数据 $\mathbf{X}=\begin{bmatrix}2 & 12\\ 8 & 9\\ 6 & 9\\ 8 & 10\end{bmatrix}$

给定，零假设为 H_0：$\boldsymbol{\mu}'=[7,11]$，试计算 T^2。

(b) 确定(a)中 T^2 的分布。

(c) 利用(a)与(b)，在 $\alpha=0.05$ 水平下检验 H_0。你得出什么结论？

5.2 利用例 5.1 的数据，验证：若将每个观测值 $\mathbf{x}_j$，$j=1,2,3$，分别用 $\mathbf{Cx}_j$ 替代，则 T^2 保持不变。此处

$$\mathbf{C}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$$

注意：观测值

$$\mathbf{Cx}_j=\begin{bmatrix}x_{j1}-x_{j2}\\ x_{j1}+x_{j2}\end{bmatrix}$$

产生的数据矩阵为：

$$\begin{bmatrix}(6-9) & (10-6) & (8-3)\\ (6+9) & (10+6) & (8+3)\end{bmatrix}'$$

5.3 (a) 对练习 5.1 中的数据，利用式(5-15)计算 T^2。

(b) 用练习 5.1 的数据，计算式(5-13)中的 Λ，并计算威尔克斯 Λ 值。

5.4 利用表 5.1 的汗液数据(见例 5.2)

(a) 确定 $\boldsymbol{\mu}$ 的 90%置信椭球的主轴，并计算其主轴的长度。

(b) 对排汗量、钠含量与钾含量的数据，分别作 Q-Q 图，并对每一对变量的观测值作

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

散点图。对这种情形，多元正态假设是否合理？试讨论。

5.5　对例 5.3 中的微波炉辐射数据给出的 $\bar{\mathbf{x}}$，$\mathbf{S}$ 及 $\mathbf{S}^{-1}$，在显著性水平 $\alpha=0.05$ 下检验零假设 H_0：$\boldsymbol{\mu}'=[0.55, 0.60]$，所得结果是否与图 5.1 中 $\boldsymbol{\mu}$ 的 95%置信椭圆相一致？请作出解释。

5.6　对 $m=3$ 验证庞弗罗尼不等式(5-28)。提示：考虑三个事件 C_1，C_2 与 C_3 的韦恩图也许有帮助。

5.7　对表 5.1 的汗液数据(见例 5.2)，利用结论 5.3 计算 μ_1，μ_2 与 μ_3 的 95%联合 T^2 置信区间，并用式(5-29)构造其 95%庞弗罗尼区间，并对这两种区间进行比较。

5.8　从式(5-23)我们知道，T^2 等于由线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{x}_j$ 构造的一元 t 值平方中的最大者，此处 $\mathbf{a}=\mathbf{S}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu}_0)$。利用例 5.3 中的结论及练习 5.5 中的 H_0，对变换后的微波炉辐射数据计算 $\mathbf{a}$ 值。验证：由此 $\mathbf{a}$ 值计算出的 t^2 值等于练习 5.5 中的 T^2 值。

5.9　一名人类学家对 9 根古秘鲁人的头发完成了矿物分析，测得其中的铬(Cr)含量 x_1 和锶(Sr)含量 x_2(单位为 p.p.m，即百万分之一)分别为

x_1(Cr)	0.48	40.53	2.19	0.55	0.74	0.66	0.93	0.37	0.22
x_2(Sr)	12.57	73.68	11.13	20.03	20.29	0.78	4.64	0.43	1.08

已知铬含量较低(低于或等于 0.100 p.p.m)可能是糖尿病的表现，而锶含量的高低则说明动物蛋白摄入的多少。

(a) 假定这 9 根秘鲁人头发代表一个来自属于某种特定古秘鲁文化的随机样本。试构造并画出总体均值向量 $\boldsymbol{\mu}'=[\mu_1,\mu_2]$的 90%联合置信椭圆。

(b) 用(a)中构造的椭圆向每一坐标轴投影，求出 μ_1 与 μ_2 的 90%联合置信区间(可利用结论 5.3)。是否有迹象表明这种古秘鲁人头发的平均锶含量为 10？也就是说，所有的点(任意 μ_1 值，10)是否都在置信域中？$[0.30,10]'$是否为 $\boldsymbol{\mu}$ 的似真值？试作讨论。

(c) 这些数据是否显示出二元正态性？利用 Q-Q 图与散点图来考察这个问题。若数据没有二元正态性，那么(a)与(b)中的结论又意味着什么？

(d) 摒弃明显的离群观测值后重新进行分析，推断是否会有所改变？试作评论。

5.10　设有若干个分量缺损的观测数据为

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix} 3 & 6 & 0 \\ 4 & 4 & 3 \\ - & 8 & 3 \\ 5 & - & - \end{bmatrix}$$

试用 5.7 节中的预测-估计算法估计 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$，要求给出其初始估计值及一步迭代的修正估计值。

5.11　对表 5.1 的汗液数据确定 $-n\ln(|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|/|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_0|)$的近似分布(参见结论 5.2)。

5.12　试建立一个类似于表 5.4 的新表，表中的元素为(单一 t 区间的宽度)/(庞弗罗尼 t 区间的宽度)。

练习 5.13，5.14 及 5.15 需要用到下面的知识：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

人们感兴趣的总体特征通常全部或部分地表现为一些属性，这时总体中的每一个体可用它所具有的属性来描述。为方便起见，通常将属性按它们的存在与否进行数量化编码。若以变量 X 代表某一特定属性，我们便可通过如下定义来区别此种属性的有无：

$$x=\begin{cases}1 & \text{该属性存在}\\ 0 & \text{该属性不存在}\end{cases}$$

用这种方式，我们就能给性质特征指定数值。

当属性用 0—1 变量进行数量化编码时，来自我们感兴趣总体的随机样本将导致两种不同计数，每一种代表具有不同特征的样本项目数，如果样本计数很大，不难将产生联合置信表示方法改写得适合于包括比例在内的情形。

考虑这样一种情形：一个具有某种特定属性组合的个体可归入 $q+1$ 个互斥完备类之一，相应的概率分别为 $p_1,p_2,\cdots,p_q,p_{q+1}$。因为这些类别包含了所有各种可能性，所以 $p_{q+1}=1-(p_1+p_2+\cdots+p_q)$。来自第 k 类的个体对应一个$[(q+1)\times 1]$向量$[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]'$，其中 1 出现在第 k 个位置。

我们知道，来自由 $q+1$ 个互斥完备类中的个体组成的总体的样本观测值，其概率分布为多项分布，并有如下结构：

$$\begin{array}{lccccccc}
\text{类别：} & 1 & 2 & \cdots & k & \cdots & q & q+1\\
\text{结果：} & \begin{bmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\0\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\\vdots\\\vdots\\0\end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix}0\\\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix}0\\0\\0\\\vdots\\0\\1\\0\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}0\\0\\0\\\vdots\\\vdots\\0\\1\end{bmatrix}\\
\text{概率(比例)：} & p_1 & p_2 & \cdots & p_k & \cdots & p_q & p_{q+1}=1-\sum_{i=1}^{q}p_i
\end{array}$$

设 $\mathbf{X}_j$，$j=1,2,\cdots,n$ 为来自多项分布总体的一个容量为 n 的随机样本，若样本观测值(个体)来自第 k 类，则 $\mathbf{X}_j$ 的第 k 个分量 $X_{jk}=1$，否则为 0。

随机样本 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 可变换成一个样本比例向量，该向量就前面数据的性质而论是一样本均值向量，故

$$\hat{\mathbf{p}}\begin{bmatrix}\hat{p}_1\\\hat{p}_2\\\vdots\\\hat{p}_{q+1}\end{bmatrix}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{X}_j \text{ 满足 } E(\hat{\mathbf{p}})=\mathbf{p}=\begin{bmatrix}p_1\\p_2\\\vdots\\p_{q+1}\end{bmatrix}$$

及

$$\mathrm{Cov}(\hat{\mathbf{p}})=\frac{1}{n}\mathrm{Cov}(\mathbf{X}_j)=\frac{1}{n}\Sigma=\frac{1}{n}\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1,q+1}\\\sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2,q+1}\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\\sigma_{1,q+1} & \sigma_{2,q+1} & \cdots & \sigma_{q+1,q+1}\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

当 n 充分大时，中心极限定理给出 $\hat{\mathbf{p}}$ 的近似抽样分布，即有

$$\sqrt{n}(\hat{\mathbf{p}}-\mathbf{p}) \text{ 近似服从分布 } N(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$$

其中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的元素为 $\sigma_{kk}=p_k(1-p_k)$，$\sigma_{ik}=-p_ip_k$。当 σ_{kk} 用 $\hat{\sigma}_{kk}=\hat{p}_k(1-\hat{p}_k)$ 来估计，σ_{ik} 用 $\hat{\sigma}_{ik}=-\hat{p}_i\hat{p}_k$，$i\neq k$ 来估计时，正态近似仍有效。

由于每一个体属于且仅属于某一类，故 $X_{q+1,j}=1-(X_{1j}+X_{2j}+\cdots+X_{qj})$，从而 $\hat{p}_{q+1}=1-(\hat{p}_1+\hat{p}_2+\cdots+\hat{p}_q)$ 且 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 的秩为 q。尽管此时 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 的逆阵不存在，但我们仍可构造所有线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{p}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 联合置信区间。

结论 设 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 为来自具有 $q+1$ 类的多项分布总体，$P[X_{jk}=1]=p_k$，$k=1,2,\cdots,q+1$，$j=1,2,\cdots,n$，假如 $n-q$ 充分大，那么，对所有线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{p}=a_1p_1+a_2p_2+\cdots+a_{q+1}p_{q+1}$，其近似的 $100(1-\alpha)\%$ 联合置信区间为

$$\mathbf{a}'\hat{\mathbf{p}} \pm \sqrt{\chi_q^2(\alpha)}\sqrt{\frac{\mathbf{a}'\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\,\mathbf{a}}{n}}$$

其中 $\hat{\mathbf{p}}=(1/n)\sum_{j=1}^{n}\mathbf{X}_j$，且 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\{\hat{\sigma}_{ik}\}$ 是一个 $(q+1)\times(q+1)$ 矩阵，满足 $\hat{\sigma}_{kk}=\hat{p}_k(1-\hat{p}_k)$ 与 $\hat{\sigma}_{ik}=-\hat{p}_i\hat{p}_k$，$i\neq k$，而 $\chi_q^2(\alpha)$ 则为自由度为 q 的 χ^2 分布的上 100α 百分位数。

在此结论中，要求 $n-q$ 充分大可理解为对每一类有 $n\hat{p}_k\geqslant 20$。

在这里，我们仅略微涉及分析分类数据的可能性问题，对这个问题的完整讨论，读者可从[1]与[4]中得到。

5.13 设 X_{ji} 和 X_{jk} 分别为 $\mathbf{X}_j$ 的第 i 个分量与第 k 个分量。

(a) 证明 $\mu_i=E(X_{ji})=p_i$，$\sigma_{ii}=\mathrm{Var}(X_{ji})=p_i(1-p_i)$，$i=1,2,\cdots,p$。

(b) 证明 $\sigma_{ik}=\mathrm{Cov}(X_{ji},X_{jk})=-p_ip_k$，$i\neq k$。并说明此协方差为何必为负值。

5.14 作为一个大型市场营销研究项目的一部分，谢尔伍德银行的一名顾问想知道把银行存款作为主要储蓄手段的储户的比例。此外，他还想知道这家银行的三个主要竞争对手(银行 B，C 和 D)的上述储户的比例。在一项调查中，每个被调查者回答了下面的问题：

哪家银行是您的主要储蓄银行？

回答

谢尔伍德银行	银行 B	银行 C	银行 D	其他银行	没有存款

当被问及主要的储蓄银行时，被调查的 $n=355$ 名有储蓄账户者的回答统计如下(没有存款的在存户比较中被忽略，故总共只有 5 类)：

银行(分类)	谢尔伍德银行	银行 B	银行 C	银行 D	其他银行	
考察人数	105	119	56	25	50	总人数 $n=355$
总体比例	p_1	p_2	p_3	p_4	$p_5=1-(p_1+p_2+p_3+p_4)$	
样本比例	$\hat{p}_1=\frac{105}{355}=0.30$	$\hat{p}_2=0.33$	$\hat{p}_3=0.16$	$\hat{p}_4=0.07$	$\hat{p}_5=0.14$	

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

设总体比例为

p_1=在谢尔伍德银行存款的储户的比例

p_2=在银行 B 存款的储户的比例

p_3=在银行 C 存款的储户的比例

p_4=在银行 D 存款的储户的比例

$1-(p_1+p_2+p_3+p_4)$=在其他银行存款的储户的比例

(a) 求 $p_1,p_2,\cdots,p_5$ 的 95%联合置信区间

(b) 构造一个可将谢尔伍德银行与其主要竞争对手 B 进行比较的 95%联合置信区间，并对此区间作出解释。

5.15　为评估某城市高中学生中吸毒问题的普遍性，对来自该城市 5 所高中的 200 名学生所组成的一个随机样本进行了调查，调查的问题之一及相应的回答如下：

通常您一周吸几枝大麻烟？

	分类		
	不吸	中等(1～3 枝)	严重(4 枝以上)
应答人数	117	62	21

试对这三种人的比例 p_1,p_2 与 $p_3=1-(p_1+p_2)$构造 95%联合置信区间。

下面的练习需要使用计算机。

5.16　利用表 5.2 中的大学考试数据(见例 5.5)

(a) 在显著性水平 $\alpha=0.05$ 下检验假设

$$H_0:\ \boldsymbol{\mu}'=[500,50,30],H_1:\ \boldsymbol{\mu}'\neq[500,50,30]$$

假定$[500,50,30]'$代表近 10 年来数千名大学生考试的平均成绩。是否有理由相信，成绩被列入表 5.2 的那一组学生与以往的学生相比其得分情况有明显不同？请作出解释。

(b) 确定 $\boldsymbol{\mu}$ 的 95%置信椭球的主轴的长度与方向。

(c) 从社会科学与历史、语言表达以及自然科学各科成绩的边缘分布画出 Q-Q 图。从各对不同变量的观测值中画出可能的三个散点图。讨论这些数据是否服从正态分布。

5.17　表 5.10 中给出由 $n=30$ 根一等级木材组成的样本的硬度 x_1 与弯曲强度 x_2 的测量值，单位为磅/吋^2。利用表中数据：

表 5.10　木 材 数 据

x_1(硬度)	x_2(弯曲强度)	x_1(硬度)	x_2(弯曲强度)
1232	4175	1712	7749
1115	6652	1932	6818
2205	7612	1820	9307
1897	10 914	1900	6457
1932	10 850	2426	10 102
1612	7627	1558	7414
1598	6954	1470	7556

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

x_1(硬度)	x_2(弯曲强度)	x_1(硬度)	x_2(弯曲强度)
1804	8365	1858	7833
1752	9469	1587	8309
2067	6410	2208	9559
2365	10 327	1487	6255
1646	7320	2206	10 723
1579	8196	2332	5430
1880	9709	2540	12 090
1773	10 370	2322	10 072

(a) 构造并画出$[\mu_1,\mu_2]'$的95%置信椭圆，其中$\mu_1=E(X_1)$，$\mu_2=E(X_2)$。

(b) 假设硬度及弯曲强度的"标准"值分别为$\mu_{10}=2000$及$\mu_{20}=10000$，已知(a)的结论，讨论表5.10中的数据是否与这些数值相容。

(c) 用Q-Q图及散点图来解释二维正态分布是否为该总体的一个可行的模型。

5.18 一位野生动物生态学家对一个由$n=45$只雌性钩镰鸢组成的样本测量了两项指标：x_1=尾长(毫米)，x_2=翅长(毫米)，数据列于表5.11。

表5.11 钩镰鸢数据

x_1 (尾长)	x_2 (翅长)	x_1 (尾长)	x_2 (翅长)	x_1 (尾长)	x_2 (翅长)
191	284	186	266	173	271
197	285	197	285	194	280
208	288	201	295	198	300
180	273	190	282	180	272
180	275	209	305	190	292
188	280	187	285	191	286
210	283	207	297	196	285
196	288	178	268	207	286
191	271	202	271	209	303
179	257	205	285	179	261
208	289	190	280	186	262
202	285	189	277	174	245
200	272	211	310	181	250
192	282	216	305	189	262
199	280	189	274	188	258

资料来源：数据经S. Temple许可使用。

利用表中的数据：

(a) 构造并画出总体均值μ_1和μ_2的95%置信椭圆，假定雄性钩镰鸢的$\mu_1=190$毫米，$\mu_2=275$毫米，试问这些值是否为雌性钩镰鸢的平均尾长和平均翅膀长的似真值？请予以解释。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(b) 试作出 μ_1 和 μ_2 的 95%联合 T^2 区间及庞弗罗尼区间，并将这两种区间进行比较，T^2 区间是否比庞弗罗克区间更优越(如果有优越性的话)?

(c) 二元正态分布是可行的总体模型吗? 试用 Q-Q 图和散点图来解释。

5.19 利用表 1.6 中的数据，构造其各均值的 95%庞弗罗尼区间，以及 95%联合 T^2 区间，并对这两个区间进行比较。

5.20 复制第 6 章表 6.8 中的部分数据。这些数据代表用卡车把牛奶从农场运到奶制品厂的各种运输成本。表 6.8 只给出了卡车的前 25 个多元观测值。第 9 和第 21 个观测值是由 36 个观测值组成的整个数据集中的两个离群值(见[2])。

牛奶运输价格数据

燃料(x_1)	维修(x_2)	资金(x_3)
16.44	12.43	11.23
7.19	2.70	3.92
9.92	1.35	9.75
4.24	5.78	7.78
11.20	5.05	10.67
14.25	5.78	9.88
13.50	10.98	10.60
13.32	14.27	9.45
29.11	15.09	3.28
12.68	7.61	10.23
7.51	5.80	8.13
9.90	3.63	9.13
10.25	5.07	10.17
11.11	6.15	7.61
12.17	14.26	14.39
10.24	2.59	6.09
10.18	6.05	12.14
8.88	2.70	12.23
12.34	7.73	11.68
8.51	14.02	12.01
26.16	17.44	16.89
12.95	8.24	7.18
16.93	13.37	17.59
14.70	10.78	14.58
10.32	5.16	17.00

(a) 试作燃料成本、维修成本与资金的边缘分布的 Q-Q 图，并作出各对不同变量观测值之间的三个可能的散点图。有无明显的离群值? 摒弃离群值后，重新绘制 Q-Q 图及散点图，试讨论现在的数据是否服从正态分布。

(b) 求成本均值的 95%庞弗罗尼区间及 T^2 区间，并对它们进行比较。

5.21 利用表 5.8 中的麦迪逊警署数据，构造 x_3 和 x_4 的个别 $\bar{\mathbf{X}}$ 控制图。试问这两个

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

过程是否都处在受控状态(即是否稳定)?

5.22 参看练习5.21。利用x_3与x_4的数据,作出它们的质量控制椭圆及T^2控制图。这些二元观测值所代表的过程是否处在受控状态?试作出评论。从多元控制图中,你是否学到了某些在个别$\bar{\mathbf{X}}$控制图中没有的东西?

5.23 利用表5.8中的x_1,x_2及x_3的数据构造一个T^2控制图,将此图与例5.10中的图5.8进行比较,添加一个特征后绘出的T^2控制图是否改变了你对过程稳定性的结论?请解释。

5.24 用表5.8中x_3与x_4的数据,构造未来观测值$\mathbf{x}'=(x_3,x_4)$的预测椭圆。注意,预测椭圆必须从稳定过程出发求得。对所得结果作出解释。

参考文献

1. Agresti, A. *Categorical Data Analysis*. New York: John Wiley, 1988.
2. Bacon-Shone, J., and W. K. Fung. "A New Graphical Method for Detecting Single and Multiple Outliers in Univariate and Multivariate Data." *Applied Statistics*, 36, no. 2 (1987), 153~162.
3. Bickel, P. J., and K. A. Doksum. *Mathematical Statistics: Basic Ideas and Selected Topics*, San Francisco: Holden-Day, 1977.
4. Bishop, Y. M. M., S. E. Feinberg, and P. W. Holland. *Discrete Multivariate Analysis: Theory and Practice*. Cambridge, MA.: The MIT Press, 1975.
5. Dempster, A. P., N. M. Laird, and D. B. Rubin. "Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm (with Discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society* (B), 39, no. 1 (1977), 1~38.
6. Hartley, H. O. "Maximum Likelihood Estimation from Incomplete Data." *Biometrics*, 14 (1958), 174~194.
7. Hartley, H. O., and R. R. Hocking, "The Analysis of Incomplete Data."*Biometrics*,27 (1971), 783~808.
8. Johnson, R. A. and T. Langeland "A Linear Combinations Test for Detecting Serial Correlation in Multivariate Samples."*Topics in Statistical Dependence*. (1991) Institute of Mathematical Statistics monograph, Eds. Block, H. et al 299~313.
9. Ryan, T. P. *Statistical Methods for Quality Improvement*. New York: John Wiley, 1989.
10. Tiku, M. L., and M. Singh. "Robust Statistics for Testing Mean Vectors of Multivariate Distributions." *Communications in Statistics—Theory and Methods*, 11, no. 9 (1982), 985~1001.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第6章 多元均值向量

6.1 引言

第5章中所建立的统计思想可推广到处理多个均值向量的比较问题。在多元正态或大样本的假设下，其理论与方法比第5章略为复杂些。在讨论过程中，我们将经常回顾一元情形的处理方法，然后用类比法将其推广到相应的多元情形。我们所提供数学实例将有助于加深对概念的理解。

由于均值的比较往往(且应该)来源于实验设计，我们就有机会来讨论优秀的实验设计应遵循的一些基本原则。在行为研究中很有用的**重复测量**设计，以及这种设计在分析**生长曲线**时所需的一些修改，我们都作了明确考虑。

6.2节先考虑成对均值向量的比较。在随后几节中，将讨论按处理水平排列的均值向量的若干种比较方法。相应的检验统计量依赖于总变差按各种来源的变差及误差的分解，这种分解就是所谓的**多元方差分析**(简记为MANOVA)。

6.2 成对比较与重复测量设计

成对比较

为了考察不同实验条件下的响应是否明显不同，人们常常将这些条件下的实验测量值记录下来。例如，对一种新药的效果或广告宣传的饱和度，可通过比较“处理”(新药与广告)前与处理后的测量值来确定。在另一些情形下，对相同或相似的实验单元可使用两种或更多种处理，比较其响应，便可评价各种处理引起的效应。

用来对两种处理进行比较或用来判断一种处理是否存在的一个合理方法，就是将两种处理指配给相同的单元(个人、商店、小块土地等)，然后通过计算成对响应之差，消除单元到单元的外来变差所引起的大部分影响，从而完成对这些响应的分析。

在单个响应(即一元)的情形下，用X_{j1}表示在第j个试验下对处理1的响应(或处理前的响应)，用X_{j2}表示在第j个试验下对处理2的响应(或处理后的响应)。也就是说(X_{j1}, X_{j2})为对第j个单元或对第j对相似单元记录的测量值。通过设计，n个差值

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$D_j = X_{j1} - X_{j2}, \quad j = 1,2,\cdots,n \tag{6-1}$$

应只反映各种不同处理所引起的效应。

若已知式(6-1)中的差值 D_j 为来自分布 $N(\delta,\sigma_d^2)$ 的独立观测值，则变量

$$t = \frac{\overline{D} - \delta}{s_d/\sqrt{n}} \tag{6-2}$$

服从自由度为 $n-1$ 的大分布，其中

$$\overline{D} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} D_j, \quad s_d^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(D_j - \overline{D})^2 \tag{6-3}$$

因此，在显著性水平为 α 时，可通过比较 $|t|$ 与 $t_{n-1}(\alpha/2)$，来检验假设 $H_0:\delta=0$(即各种处理的平均差为 0)和 $H_1:\delta\neq 0$。其中的 $t_{n-1}(\alpha/2)$ 为自由度为 $n-1$ 的 t 分布的上 $100(\alpha/2)$ 百分位数。其平均差 $\delta=E(X_{j1}-X_{j2})$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 置信区间为：

$$\bar{d} - t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s_d}{\sqrt{n}} \leqslant \delta \leqslant \bar{d} + t_{n-1}(\alpha/2)\frac{s_d}{\sqrt{n}} \tag{6-4}$$

(例如参见[7]。)

为了把成对比较方法推广到多元情形，需要再引进一些记号。有必要区分 p 个响应，两种处理和 n 个试验单元。为此，将第 j 个单元内的 p 个响应记作：

X_{1j1}=第 1 种处理下的第 1 个响应。

X_{1j2}=第 1 种处理下的第 2 个响应。

……

X_{1jp}=第 1 种处理下的第 p 个响应。

……

X_{2j1}=第 2 种处理下的第 1 个响应。

X_{2j2}=第 2 种处理下的第 2 个响应。

……

X_{2jp}=第 2 种处理下的第 p 个响应。

因而 p 对响应差随机变量为

$$\begin{aligned} D_{j1} &= X_{1j1} - X_{2j1} \\ D_{j2} &= X_{1j2} - X_{2j2} \\ &\vdots \\ D_{jp} &= X_{1jp} - X_{2jp} \end{aligned} \tag{6-5}$$

令 $\mathbf{D}_j' = [D_{j1}, D_{j2}, \cdots, D_{jp}]$，并假定对 $j=1,2,\cdots,n$，有

$$E(\mathbf{D}_j) = \delta = \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_p \end{bmatrix} \quad 及 \quad \mathrm{Cov}(\mathbf{D}_j) = \boldsymbol{\Sigma}_d \tag{6-6}$$

另外，若 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \cdots, \mathbf{D}_n$ 为独立随机向量且服从分布 $N(\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\Sigma}_d)$，则根据 T^2 统计量可对均值差向量 $\boldsymbol{\delta}$ 作统计推断，特别是根据以下 T^2 进行推断：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$T^2 = n(\bar{\mathbf{D}} - \boldsymbol{\delta})'\mathbf{S}_d^{-1}(\bar{\mathbf{D}} - \boldsymbol{\delta}) \tag{6-7}$$

其中，
$$\bar{\mathbf{D}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{D}_j \quad 且 \quad \mathbf{S}_d = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{D}_j - \bar{\mathbf{D}})(\mathbf{D}_j - \bar{\mathbf{D}})' \tag{6-8}$$

结论 6.1 设差值 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \cdots, \mathbf{D}_n$ 为来自总体 $N_p(\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\Sigma}_d)$ 的一个随机样本，此时对任意的 $\boldsymbol{\delta}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_d$，$T^2 = n(\bar{\mathbf{D}} - \boldsymbol{\delta})'\mathbf{S}_d^{-1}(\bar{\mathbf{D}} - \boldsymbol{\delta})$ 与随机变量 $[(n-1)p/(n-p)]F_{p,n-p}$ 同分布。

若 n 及 $n-p$ 均充分大，则无论差值的总体是什么分布，T^2 总是近似服从 χ_p^2 分布。

证明 T^2 的精确分布为式(5-6)的另一种表述，只不过将原来的观测值向量换成差值向量罢了，当 n 及 $n-p$ 均充分大时，T^2 的近似分布由式(4-28)推出。

条件 $\boldsymbol{\delta} = \mathbf{0}$ 等价于"两个处理之间无平均差异"，对第 i 个变量(响应)来说，$\delta_i > 0$ 表示平均说来，处理 2 的效应大于处理 1 的效应，一般说来，利用结论 6.1 可作出关于 $\boldsymbol{\delta}$ 的推断。

给定对应于式(6-5)中随机变量的观测值之差 $\mathbf{d}_j' = d_{j1}, d_{j2}, \cdots, d_{jp}]$，$j = 1, 2, \cdots, n$，对总体 $N_p(\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\Sigma}_d)$，若 $T^2 = n\bar{\mathbf{d}}'\mathbf{S}_d^{-1}\bar{\mathbf{d}} > \frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)$，则在水平 α 下，拒绝 $H_0: \boldsymbol{\delta} = \mathbf{0}$ 而接受 $H_1: \boldsymbol{\delta} \neq \mathbf{0}$，其中 $F_{p,n-p}(\alpha)$ 为自由度为 p 与 $n-p$ 的 F 分布的上 100α 百分位数，而 $\bar{\mathbf{d}}$ 与 $\mathbf{S}_d$ 由式(6-8)给出。

$\boldsymbol{\delta}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ **置信域**由所有满足

$$(\bar{\mathbf{d}} - \boldsymbol{\delta})'\mathbf{S}_d^{-1}(\bar{\mathbf{d}} - \boldsymbol{\delta}) \leqslant \frac{(n-1)p}{n(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha) \tag{6-9}$$

的 $\boldsymbol{\delta}$ 组成。

此外，个别均值差 δ_i 的 $100(1-\alpha)\%$ **联合置信区间**为

$$\delta_i: \bar{d}_i \pm \sqrt{\frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{d_i}^2}{n}} \tag{6-10}$$

此处 $\bar{d}_i$ 为 $\bar{\mathbf{d}}$ 的第 i 个分量，$S_{d_i}^2$ 为 $\mathbf{S}_d$ 的第 i 个对角元。

当 $n-p$ 充分大时，$[(n-1)p/(n-p)]F_{p,n-p}(\alpha) \doteq \chi_p^2(\alpha)$，因而不需要正态性假设。

单一均值差的 $100(1-\alpha)\%$ **庞弗罗尼联合置信区间**为

$$\delta_i: \bar{d}_i \pm t_{n-1}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\frac{s_{d_i}^2}{n}} \tag{6-10a}$$

其中 $t_{n-1}(\alpha/2p)$ 为自由度为 $n-1$ 的第 $100(\alpha/2p)$ 个上百分位数。

例 6.1 (检验成对观测值的均值差)

法津要求城市污水处理工厂对它们排向河流的污水进行定期监测。出于对来自这些厂方自我监督方案之一的数据可靠性的关注，开展了一项研究工作：把污水的每个样品分成两份，分别送往两个实验室进行检验。一份送往威斯康星州卫生实验室，另一份送往通常为厂方监控方案作检验的私营商业实验室。这两家实验室对 11 个样品分别提供了生化氧(BOD)和悬浮固体(SS)的含量的测量值，数据见表 6.1。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 6.1 污水数据

样品 j	商业实验室		州卫生实验室	
	x_{1j1}(BOD)	x_{1j2}(SS)	x_{2j1}(BOD)	x_{2j2}(SS)
1	6	27	25	15
2	6	23	28	13
3	18	64	36	22
4	8	44	35	29
5	11	30	15	31
6	34	75	44	64
7	28	26	42	30
8	71	124	54	64
9	43	54	34	56
10	33	30	29	20
11	20	14	39	21

试问，这两家实验室的化学分析结果是否一致？若不一致，原因是什么？

检验 $H_0:\boldsymbol{\delta}'=[\delta_1,\delta_2]=[0,0]$的 T^2 统计量可用下列成对观测值之差来构造：

$d_{1j}=x_{1j1}-x_{2j1}$	−19	−22	−18	−27	−4	−10	−14	17	9	4	−19
$d_{2j}=x_{1j2}-x_{2j2}$	12	10	42	15	−1	11	−4	60	−2	10	−7

由此得

$$\bar{\mathbf{d}}=\begin{bmatrix}\bar{d}_1\\ \bar{d}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-9.36\\ 13.27\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}_d=\begin{bmatrix}199.26 & 88.38\\ 88.38 & 418.61\end{bmatrix}$$

因而

$$T^2=11[-9.36,\ 13.27]\begin{bmatrix}0.0055 & -0.0012\\ -0.0012 & 0.0026\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-9.36\\ 13.27\end{bmatrix}=13.6$$

取 $\alpha=0.05$，求得$[p(n-1)/(n-p)]F_{p,n-p}(0.05)=[(2\times10)/9]F_{2,9}(0.05)=9.47$。因为 $T^2=13.6>9.47$，我们拒绝 H_0，并得出这两家实验室的检验结果有显著差异的结论。从数据的检查中也可发现，商业实验室检验提供的生化氧(BOD)测量值要比州卫生实验室的测量值低，而悬浮固体(SS)含量的测量值则要比后者的测量值高。从式(6-10)可算出均值差 δ_1 和 δ_2 的 95%联合置信区间：

$$\delta_1:\bar{d}_1\pm\sqrt{\frac{(n-1)p}{(n-p)}F_{p,n-p}(\alpha)}\sqrt{\frac{s_{d_1}^2}{n}}$$

$$=-9.36\pm\sqrt{9.47}\times\sqrt{\frac{199.26}{11}}\quad \text{即}(-22.46,\ 3.74)$$

$$\delta_2:13.27\pm\sqrt{9.47}\sqrt{\frac{418.61}{11}}\quad \text{即}(-5.71,32.25)$$

虽然这两个 95%的联合置信区间均包含 0，但在 0.05 显著性水平下，还是拒绝假设 H_0：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\boldsymbol{\delta}=\mathbf{0}$。我们能得出什么结论？

这一证据暗示的确存在差别。点 $\boldsymbol{\delta}=\mathbf{0}$ 落在 $\boldsymbol{\delta}$ 的 95%置信区域之外(见练习 6.1)，因而这一结果与 T^2 检验的结果一致。95%的联合置信系数适用于能用 δ_1,δ_2 的一切可能的线性组合 $a_1\delta_1+a_2\delta_2$ 构造的区间集合。与($a_1=1,a_2=0$)和($a_1=0,a_2=1$)这两种选择对应的特定区间均包含 0，但对 a_1,a_2 的其他选择将产生出不包含 0 的联合置信区间(若假设 $H_0:\boldsymbol{\delta}=\mathbf{0}$ 不被拒绝，则所有的联合置信区间均包含 0)。

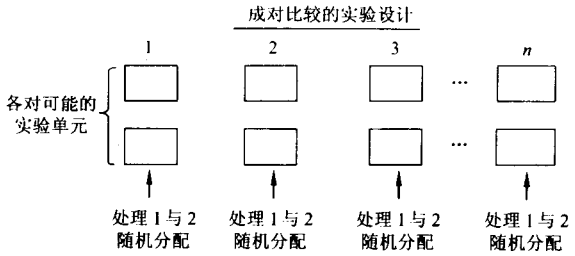
庞弗罗尼联合置信区间也包含 0(见练习 6.2)。

我们的分析是在 $\mathbf{D}_j$ 的正态性假定下进行的。实际上，当存在一个或可能两个离群值时，情况将更加复杂(见练习 6.3)。

本例的数值结果说明，在我们进行统计推断时：可能发生某种不正常情况。虽然这些数据可变换成更接近正态性的数据，但对这种小样本来说，要消除离群值效应实在很困难(见练习 6.4)。

例 6.1 中的实验人员实际上要先摇晃样品，再迅速将它分别倒入两个瓶子里以供化学分析。这样做是很明智的，因为若是简单地把瓶中样品的上一半倒入一个瓶，剩余一半倒入另一个瓶，则由于沉淀之故，第二个瓶中会有较多的悬浮固体。这样，两个实验室所处理的实验单元就不会相同，因而它们得出的结论也就不能反映实验室的水平、测量技术等方面的差异。

每当研究人员能控制将处理分配给各实验单元的过程时，实验单元的适当配对和处理的随机分配就能提高统计推断的精度。一些被设想为相同的实验单元之间若有差异，必须将这种差异识别出来，并将最相似的那些实验单元配对。此外，将处理 1 随机分配给一个单元而将处理 2 分配给另一个单元有助于消除不可控变差来源所造成的系统效应。实现随机化的方法是通过掷硬币来确定成对单元中的第一个单元是接受第一种处理(正面)还是接受第二种处理(反面)，此时另一种处理就被分配给另一个单元。对每一对单元来说，随机化是各自独立地进行的。这一过程设想如下：



注意到 $\bar{\mathbf{d}}$ 和 $\mathbf{S}_d$，便得出成对比较讨论的结论，由此可从全样本统计量 $\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}$ 计算出 T^2，此处 $\bar{\mathbf{x}}$ 为两种处理下，p 个变量的 $2p\times1$ 样本均值向量。

即
$$\bar{\mathbf{x}}'=[\bar{x}_{11},\bar{x}_{12},\cdots,\bar{x}_{1p},\bar{x}_{21},\bar{x}_{22},\cdots,\bar{x}_{2p}] \tag{6-11}$$

$\mathbf{S}$ 为 $2p\times2p$ 样本协方差阵：

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}\underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_{11}} & \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_{12}}\\ \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_{21}} & \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_{22}}\end{bmatrix} \tag{6-12}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\mathbf{S}_{11}$和$\mathbf{S}_{22}$分别为处理 1 和处理 2 下 p 个变量的样本协方差阵，而$\mathbf{S}_{12}=\mathbf{S}_{21}'$则为由处理 1 和处理 2 各对变量的观测值算出的样本协方差阵。

定义矩阵

$$\underset{(p\times 2p)}{\mathbf{C}} = \left[\begin{array}{cccc:cccc} 1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & -1 \end{array}\right] \tag{6-13}$$

第 $p+1$ 列

可以验证(见练习 6.9)：

$$\mathbf{d}_j = \mathbf{C}\mathbf{x}_j, \quad j = 1,2,\cdots,n$$

$$\bar{\mathbf{d}} = \mathbf{C}\bar{\mathbf{x}} \quad \text{and} \quad \mathbf{S}_d = \mathbf{CSC}' \tag{6-14}$$

于是，

$$T^2 = n\bar{\mathbf{x}}'\mathbf{C}'(\mathbf{CSC}')^{-1}\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}} \tag{6-15}$$

因而不必先计算差值 $\mathbf{d}_1,\mathbf{d}_2,\cdots,\mathbf{d}_n$。另一方面，为检验随机样本的假设及正态性，计算这些差值又是明智之举。

式(6-13)中矩阵 $\mathbf{C}$ 的每一行 $\mathbf{c}_i'$ 均为一**对比向量**，因为其元素之和为 0。在比较各种处理时，人们通常关注的是对比向量。由于 $\mathbf{c}_i'\mathbf{1}=0$，故每一对比向量都垂直于向量 $\mathbf{1}'=[1,1,\cdots,1]$。分量 $\mathbf{1}'\mathbf{x}_j$ 代表所有处理之和，它常被本节所提供的检验统计量 T^2 所忽略。

比较各种处理的重复测量设计

一元成对 t 统计量的另一种推广，就是在一个响应变量的情况下对 q 种处理进行比较。在一系列相继时段内，每一主体或每一实验单元每次只接受一种处理。第 j 个观测为

$$\mathbf{X}_j = \begin{bmatrix} X_{j1} \\ X_{j2} \\ \vdots \\ X_{jq} \end{bmatrix}, \quad j = 1,2,\cdots,n$$

此处 X_{ji}代表对第 j 个单元施加第 i 种处理后的响应。**重复测量**设计得名于这样的事实，即对每一单元都将施加所有的处理。

出于比较的目的，我们考虑 $\boldsymbol{\mu}=E(\mathbf{X}_i)$的分量的对比。它们是：

$$\begin{bmatrix} \mu_1-\mu_2 \\ \mu_1-\mu_3 \\ \vdots \\ \mu_1-\mu_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_q \end{bmatrix} = \mathbf{C}_1\boldsymbol{\mu}$$

或

$$\begin{bmatrix} \mu_2-\mu_1 \\ \mu_3-\mu_2 \\ \vdots \\ \mu_q-\mu_{q-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_q \end{bmatrix} = \mathbf{C}_2\boldsymbol{\mu}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

由于 $\mathbf{C}_1$ 与 $\mathbf{C}_2$ 的 $q-1$ 行线性独立，且每行均为对比向量，故 $\mathbf{C}_1$，$\mathbf{C}_2$ 均称为**对比矩阵**。在这里，实验设计的目的是消除单元间变差对处理比较所产生的诸多影响。当然，实验者应使向每一单元提供处理的顺序随机化。

当处理均值相等时，$\mathbf{C}_1\boldsymbol{\mu}_1=\mathbf{C}_2\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$，一般说，诸处理之间无差异（处理均值相等）的假设为：对任一对比矩阵 $\mathbf{C}$，$\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}=\mathbf{0}$。

因此，根据观测值中的对比向量 $\mathbf{C}\mathbf{x}_i$，我们有均值 $\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}$ 及协方差阵 $\mathbf{CSC}'$，且可用 T^2 统计量

$$T^2 = n(\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{CSC}')^{-1}\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}$$

来检验 $\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}=\mathbf{0}$。

重复测量设计中各种处理的等效性检验

考虑总体 $N_q(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$。设 $\mathbf{C}$ 为对比矩阵，若

$$T^2 = n(\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{CSC}')^{-1}\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}} > \frac{(n-1)(q-1)}{(n-q+1)}F_{q-1,n-q+1}(\alpha) \tag{6-16}$$

则在显著性水平 α 下拒绝 H_0：$\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}=\mathbf{0}$（即处理均值相等）而接受 H_1：$\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}\neq\mathbf{0}$。

此处 $F_{q-1,n-q+1}(\alpha)$ 为自由度为 $q-1$ 和 $n-q+1$ 的 F 分布的第 100α 个上百分位数，且样本均值向量及样本协方差矩阵分别为

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j \quad 和 \quad \mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$$

可以证明，T^2 不依赖于 $\mathbf{C}$ 的选择①。

设 $\boldsymbol{\mu}$ 为正态总体的均值向量，则对比向量 $\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 置信区域为满足

$$n(\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{C}\boldsymbol{\mu})'(\mathbf{CSC}')^{-1}(\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}) \leqslant \frac{(n-1)(q-1)}{(n-q+1)}F_{q-1,n-q+1}(\alpha) \tag{6-17}$$

的所有 $\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}$。此处的 $\bar{\mathbf{x}}$ 与 $\mathbf{S}$ 由式(6-16)中定义。因此对我们感兴趣的任何对比向量来说，单个对比向量 $\mathbf{C}'\boldsymbol{\mu}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 联合置信区间为（见结论 5A.1）：

$$\mathbf{c}'\boldsymbol{\mu}:\ \mathbf{c}'\bar{\mathbf{x}} \pm \sqrt{\frac{(n-1)(q-1)}{(n-q+1)}F_{q-1,n-q+1}(\alpha)}\sqrt{\frac{\mathbf{c}'\mathbf{Sc}}{n}} \tag{6-18}$$

例 6.2 （重复测量设计中等效处理的检验）

改进的麻醉剂往往是先通过动物试验研究其效果后开发出来的。在一项研究中，先给 19 只狗服用戊巴比妥，然后让每只狗在两种压力水平下吸入二氧化碳（CO_2）。接着让狗先吸入三氟溴氯乙烷（H），再吸入 CO_2。对四种处理组合测量响应，即测量狗的心跳间隔（毫秒）：

① 任一对对比矩阵 $\mathbf{C}_1$，$\mathbf{C}_2$ 都有关系式 $\mathbf{C}_1=\mathbf{BC}_2$，$\mathbf{B}$ 为非奇异阵。这是因为对每一 $\mathbf{C}$，其线性独立行的最大可能行数为 $q-1$，且全都与向量 $\mathbf{1}$ 正交，故 $(\mathbf{BC}_2)'(\mathbf{BC}_2\mathbf{SC}_2'\mathbf{B}')^{-1}(\mathbf{BC}_2)=\mathbf{C}_2'\mathbf{B}(\mathbf{B}')^{-1}(\mathbf{C}_2\mathbf{SC}_2')^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{BC}_2=\mathbf{C}_2'(\mathbf{C}_2\mathbf{SC}_2')^{-1}\mathbf{C}_2$。因此用 $\mathbf{C}_2$ 或 $\mathbf{C}_1=\mathbf{BC}_2$ 算出的 T^2 值相等。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

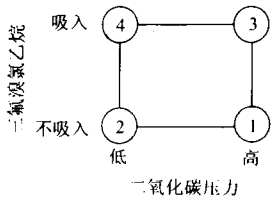


表 6.2 中列出 19 只狗的这 4 个测量值，其中：

处理 1＝高 CO_2 压力，不吸入 H

处理 2＝低 CO_2 压力，不吸入 H

处理 3＝高 CO_2 压力，吸入 H

处理 4＝低 CO_2 压力，吸入 H

表 6.2　睡眠中狗的数据

狗	处理			
	1	2	3	4
1	426	609	556	600
2	253	236	392	395
3	359	433	349	357
4	432	431	522	600
5	405	426	513	513
6	324	438	507	539
7	310	312	410	456
8	326	326	350	504
9	375	447	547	548
10	286	286	403	422
11	349	382	473	497
12	429	410	488	547
13	348	377	447	514
14	412	473	472	446
15	347	326	455	468
16	434	458	637	524
17	364	367	432	469
18	420	395	508	531
19	397	556	645	625

我们来分析这一重复测量设计中 CO_2 压力与三氟溴氯乙烷的麻醉效果。

在该实验中，所感兴趣的处理对比有 3 种。记 μ_1，μ_2，μ_3 和 μ_4 分别为在处理 1，2，3 和 4 作用下相应的响应均值。此时

$(\mu_3+\mu_4)-(\mu_1+\mu_2)=$（三氟溴氯乙烷对比，代表吸入三氟溴氯乙烷与否间差异）

$(\mu_1+\mu_3)-(\mu_2+\mu_4)=$（高和低 CO_2 对比，代表 CO_2 压力高低间差异）

$(\mu_1+\mu_4)-(\mu_2+\mu_3)=$（代表 H－$CO_2$ 压力交互作用影响的对比）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

对 $\boldsymbol{\mu}'=[\mu_1,\mu_2,\mu_3,\mu_4]$，对比矩阵 $\mathbf{C}$ 为

$$\mathbf{C}=\begin{bmatrix}-1 & -1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & 1 & -1\\ 1 & -1 & -1 & 1\end{bmatrix}$$

由数据(见表 6.2)知

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}368.21\\404.63\\479.26\\502.89\end{bmatrix},\ \mathbf{S}=\begin{bmatrix}2819.29 & & & \\ 3568.42 & 7963.14 & & \\ 2943.49 & 5303.98 & 6851.32 & \\ 2295.35 & 4065.44 & 4499.63 & 4878.99\end{bmatrix}$$

可以验证

$$\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}209.31\\-60.05\\-12.79\end{bmatrix};\quad \mathbf{CSC}'=\begin{bmatrix}9432.32 & 1098.92 & 927.62\\ 1098.92 & 5195.84 & 914.54\\ 927.62 & 914.54 & 7557.44\end{bmatrix}$$

因而 $T^2=n(\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{CSC}')^{-1}(\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}})=19\times 6.11=116$

对 $\alpha=0.05$ 我们有

$$\frac{(n-1)(q-1)}{(n-q+1)}F_{q-1,n-q+1}(\alpha)=\frac{18\times 3}{16}F_{3,16}(0.05)=\frac{18\times 3}{16}\times 3.24=10.94$$

由式(6-16)知 $T^2=116>10.94$，故拒绝 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}=\mathbf{0}$(无处理效应)。为说明是哪个对比向量导致 H_0 的被拒绝，我们来构造这些对比向量的 95%联合置信区间。由式(6-18)知，对比

$$\mathbf{c}_1'\boldsymbol{\mu}=(\mu_3+\mu_4)-(\mu_1+\mu_2)=\text{三氟溴氯乙烷的影响}$$

的 95%联合置信区间为

$$(\bar{x}_3+\bar{x}_4)-(\bar{x}_1+\bar{x}_2)\pm\sqrt{\frac{18\times 3}{16}F_{3,16}(0.05)}\sqrt{\frac{\mathbf{c}_1'\mathbf{S}\mathbf{c}_1}{19}}$$

$$=209.31\pm\sqrt{10.94}\times\sqrt{\frac{9432.32}{19}}$$

$$=209.31\pm 73.70$$

其中 $\mathbf{c}_1'$ 为 $\mathbf{C}$ 的第一行，其余对比的区间估计为：

CO_2 压力影响 $=(\mu_1+\mu_3)-(\mu_2+\mu_4)$：

$$-60.05\pm\sqrt{10.94}\times\sqrt{\frac{5195.84}{19}}=-60.05\pm 54.70$$

H 与 CO_2 压力交互作用影响 $=(\mu_1+\mu_4)-(\mu_2+\mu_3)$：

$$-12.79\pm\sqrt{10.94}\times\sqrt{\frac{7557.44}{19}}=-12.79\pm 65.97$$

第一个置信区间表明存在三氟溴氯乙烷的效应。因此，吸入三氟溴氯乙烷能使心跳的时间间隔长些。这种情形在两种 CO_2 压力下均会发生，原因是 H 与 CO_2 压力的交互作用 $(\mu_1+\mu_4)-(\mu_2-\mu_3)$ 与零无显著差异(见第三个置信区间)。第二个置信区间暗示存在某种来自 CO_2 压力的效应：低水平的 CO_2 压力会导致心跳时间间隔增大。

由于我们的试验是先不用三氟溴氯乙烷而后又用三氟溴氯乙烷，因此在对结果作解

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

释时应该谨慎。表观的 H 效应也许是时间趋势所致(理想的做法是所有处理的时间顺序应随机地确定)。

当协方差矩阵 $\mathrm{Cov}(\mathbf{X})=\boldsymbol{\Sigma}$ 不具有任何特殊结构时,式(6-16)所给出的检验是适宜的。如果有理由认为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具有特殊结构,那么,据此结构所设计的检验其功效理应比式(6-16)的要高(对 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具有等相关结构(8-14)的情形,可参看[10],[16]中对"随机化区组"设计的讨论)。

6.3 两总体均值向量的比较

与一元情形进行类比,可得到检验两个多元总体均值向量相等性的 T^2 统计量。这个 T^2 统计量适用于对两组独立实验条件(总体 1 与 2)下的响应进行比较。这种比较就毋需像成对比较那样对实验单元之间的变异性进行控制。

当然,如果可能的话,还是应将一组实验条件随机地分配给各实验单元。从某种程度上说,随机化将减少在对处理作相继比较时由于实验单元间的变异性所产生的影响。虽然这种比较的精度略逊于成对比较,但由于不要求实验单元具有一致性,两个总体情形下的这些推断方法常适用于较为一般的情形。

考虑两个随机样本,一个来自总体 1,样本容量为 n_1;另一个来自总体 2,样本容量为 n_2。p 个变量的观察值排列如下表:

样本	汇总统计量	
(总体 1) $\mathbf{x}_{11},\mathbf{x}_{12},\cdots,\mathbf{x}_{1n_1}$	$\bar{\mathbf{x}}_1=\frac{1}{n_1}\sum_{j=1}^{n_1}\mathbf{x}_{1j}$	$\mathbf{S}_1=\frac{1}{n_1-1}\sum_{j=1}^{n_1}(\mathbf{x}_{1j}-\bar{\mathbf{x}}_1)(\mathbf{x}_{1j}-\bar{\mathbf{x}}_1)'$
(总体 2) $\mathbf{x}_{21},\mathbf{x}_{22},\cdots,\mathbf{x}_{2n_2}$	$\bar{\mathbf{x}}_2=\frac{1}{n_2}\sum_{j=1}^{n_2}\mathbf{x}_{2j}$	$\mathbf{S}_2=\frac{1}{n_2-1}\sum_{j=1}^{n_2}(\mathbf{x}_{2j}-\bar{\mathbf{x}}_2)(\mathbf{x}_{2j}-\bar{\mathbf{x}}_2)'$

表中符号的第一个角标(1 或 2)代表总体。

我们要对两总体均值之差 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 作出推断。例如,我们要回答这样的问题:$\boldsymbol{\mu}_1=\boldsymbol{\mu}_2$(即 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$)是否成立?若 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2\neq\mathbf{0}$,那么哪些分量不相等?

只需很少几个假定,我们就能回答上述问题。

关于数据结构的假定

1. $\mathbf{X}_{11},\mathbf{X}_{12},\cdots,\mathbf{X}_{1n_1}$ 为来自均值向量为 $\boldsymbol{\mu}_1$,协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 的 p 维总体的随机样本。
2. $\mathbf{X}_{21},\mathbf{X}_{22},\cdots,\mathbf{X}_{2n_2}$ 为来自均值向量为 $\boldsymbol{\mu}_2$,协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}_2$ 的 p 维总体的随机样本。
3. 样本 $\mathbf{X}_{11},\mathbf{X}_{12},\cdots,\mathbf{X}_{1n_1}$ 与样本 $\mathbf{X}_{21},\mathbf{X}_{22},\cdots,\mathbf{X}_{2n_2}$ 相互独立。 (6-19)

以后我们将会看到,对大样本情形,这个结构对 $p\times 1$ 维向量 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的推断已经足

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

够。但当 n_1 与 n_2 均较小时，则需更多的假定。

n_1 与 n_2 均较小时的进一步假定

1. 两总体均为多元正态总体。

2. $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2$（协方差矩阵相等。） (6-20)

第二个假定 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2$ 要比一元情形的相应假定更强。这里我们需要假定有若干对方差和协方差几乎相等。

当 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \boldsymbol{\Sigma}$ 时，$\sum_{j=1}^{n_1}(\mathbf{x}_{1j} - \bar{\mathbf{x}}_1)(\mathbf{x}_{1j} - \bar{\mathbf{x}}_1)'$ 为 $(n_1 - 1)\boldsymbol{\Sigma}$ 的估计量，而 $\sum_{j=1}^{n_2}(\mathbf{x}_{2j} - \bar{\mathbf{x}}_2)(\mathbf{x}_{2j} - \bar{\mathbf{x}}_2)'$，则为 $(n_2 - 1)\boldsymbol{\Sigma}$ 的估计量。因此，为了估计公共协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，需融合来自两个样本的信息。为此，令

$$\mathbf{S}_{\mathrm{P}} = \frac{\sum_{j=1}^{n_1}(\mathbf{x}_{1j} - \bar{\mathbf{x}}_1)(\mathbf{x}_{1j} - \bar{\mathbf{x}}_1)' + \sum_{j=1}^{n_2}(\mathbf{x}_{2j} - \bar{\mathbf{x}}_2)(\mathbf{x}_{2j} - \bar{\mathbf{x}}_2)'}{n_1 + n_2 - 2}$$

$$= \frac{n_1 - 1}{n_1 + n_2 - 2}\mathbf{S}_1 + \frac{n_2 - 1}{n_1 + n_2 - 2}\mathbf{S}_2 \tag{6-21}$$

由于 $\sum_{j=1}^{n_1}(\mathbf{x}_{1j} - \bar{\mathbf{x}}_1)(\mathbf{x}_{1j} - \bar{\mathbf{x}}_1)'$ 的自由度为 $n_1 - 1$，而 $\sum_{j=1}^{n_2}(\mathbf{x}_{2j} - \bar{\mathbf{x}}_2)(\mathbf{x}_{2j} - \bar{\mathbf{x}}_2)'$ 的自由度为 $n_2 - 1$，因此，式(6-21)的分母 $(n_1 - 1) + (n_2 - 1)$ 恰为其组成部分的自由度之和[见式(4-24)]。另一个可以说明融合过程的理由来自多元正态的极大似然估计(见练习 6.11)。

对给定的 $\boldsymbol{\delta}_0$，为检验 $\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2 = \boldsymbol{\delta}_0$，我们考虑由 $\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2$ 到 $\boldsymbol{\delta}_0$ 的统计距离的平方。显然有

$$E(\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2) = E(\bar{\mathbf{X}}_1) - E(\bar{\mathbf{X}}_2) = \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2$$

由独立性假定(6-19)知，$\bar{\mathbf{X}}_1$ 与 $\bar{\mathbf{X}}_2$ 也相互独立。因此 $\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1, \bar{\mathbf{X}}_2) = 0$(见结论 4.5)。于是由式(3-9)可知

$$\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2) = \mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1) + \mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_2) = \frac{1}{n_1}\boldsymbol{\Sigma} + \frac{1}{n_2}\boldsymbol{\Sigma} = \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\boldsymbol{\Sigma} \tag{6-22}$$

又因 $\boldsymbol{S}_{\mathrm{P}}$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的估计量，我们看到 $\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_{\mathrm{P}}$ 为 $\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2)$ 的一个估计量。

对假设 $H_0: \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2 = \boldsymbol{\delta}_0$ 的似然比检验建立在统计距离平方 T^2 的基础之上(见[1])：若

$$T^2 = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2 - \boldsymbol{\delta}_0)'\left[\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_{\mathrm{P}}\right]^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2 - \boldsymbol{\delta}_0) > c^2 \tag{6-23}$$

则拒绝 H_0，其中临界距离 c^2 由二样本 T^2 统计量的分布确定。

结论 6.2 设 $\mathbf{X}_{11}, \mathbf{X}_{12}, \cdots, \mathbf{X}_{1n_1}$ 为来自总体 $N_p(\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma})$ 的一个容量为 n_1 的随机样本，而 $\mathbf{X}_{21}, \mathbf{X}_{22}, \cdots, \mathbf{X}_{2n_2}$ 则为来自总体 $N_p(\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma})$ 的一个容量为 n_2 的独立随机样本，此时

$$T^2 = [\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2 - (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)]'\left[\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_{\mathrm{P}}\right]^{-1}[\bar{\mathbf{X}}_1 - \bar{\mathbf{X}}_2 - (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)]$$

的分布为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\frac{(n_1+n_2-2)p}{(n_1+n_2-p-1)}F_{p,n_1+n_2-p-1}$$

于是有

$$P\left[(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))'\left[\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_p\right]^{-1}(\bar{\mathbf{X}}_1-\mathbf{X}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))\leqslant c^2\right]=1-\alpha \tag{6-24}$$

其中，
$$c^2=\frac{(n_1+n_2-2)p}{(n_1+n_2-p-1)}F_{p,n_1+n_2-p-1}(\alpha)$$

证明 首先注意到

$$\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2=\frac{1}{n_1}\mathbf{X}_{11}+\frac{1}{n_1}\mathbf{X}_{12}+\cdots+\frac{1}{n_1}\mathbf{X}_{1n_1}-\frac{1}{n_2}\mathbf{X}_{21}-\frac{1}{n_2}\mathbf{X}_{22}-\cdots-\frac{1}{n_2}\mathbf{X}_{2n_2}$$

服从分布 $N_p\left(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2,\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\boldsymbol{\Sigma}\right)$，这只需在结论 4.8 中令 $c_1=c_2=\cdots=c_{n_1}=1/n_1$，$c_{n_1+1}=c_{n_1+2}=\cdots=c_{n_1+n_2}=-1/n_2$ 即可看出。由式(4-23)知 $(n_1-1)\mathbf{S}_1$ 与 $(n_2-1)\mathbf{S}_2$ 分别服从 $W_{n_1-1}(\boldsymbol{\Sigma})$ 和 $W_{n_2-1}(\boldsymbol{\Sigma})$ 分布。根据假定，$\mathbf{X}_{1j}$ 与 $\mathbf{X}_{2j}$ 相互独立，故 $(n_1-1)\mathbf{S}_1$ 与 $(n_2-1)\mathbf{S}_2$ 也相互独立。于是由式(4-24)知 $(n_1-1)\mathbf{S}_1+(n_2-1)\mathbf{S}_2$ 服从 $\mathbf{W}_{n_1+n_2-2}(\boldsymbol{\Sigma})$ 分布，因此

$$\begin{aligned}T^2&=\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)^{-1/2}(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))'\mathbf{S}_p^{-1}\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)^{-1/2}(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))\\&=\left(\begin{matrix}\text{多元正态随机}\\\text{向量}\end{matrix}\right)'\left(\frac{\text{威沙特随机矩阵}}{\text{自由度}}\right)^{-1}\left(\begin{matrix}\text{多元正态随机}\\\text{向量}\end{matrix}\right)\\&=N_p(0,\boldsymbol{\Sigma})'\left[\frac{W_{n_1+n_2-2}(\boldsymbol{\Sigma})}{n_1+n_2-2}\right]^{-1}N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})\end{aligned}$$

这就是式(5-8)所规定的 T^2 分布，只不过该式中的 n 为 n_1+n_2-1 所取代[与 F 分布的关系见式(5-5)]。

我们的主要兴趣是 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的置信区域，由式(6-24)知，与 $\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2$ 的统计距离平方小于等于 c^2 的所有 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$，构成了所求的置信区域。这是一个中心在 $\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2$ 的椭球，其主轴由 $\mathbf{S}_p$(或 $\mathbf{S}_p^{-1}$)的特征值和特征向量确定。

例 6.3 （两个均值向量之差的置信区域的构造）

用两种工艺各生产 50 块肥皂，测量两个指标：X_1=泡沫量，X_2=舒适度。由两种工艺生产的肥皂的汇总统计数字为：

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}8.3\\4.1\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}_1=\begin{bmatrix}2&1\\1&6\end{bmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}10.2\\3.9\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}2&1\\1&4\end{bmatrix}$$

要求构造 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的 95%置信区域。

注意到 $\mathbf{S}_1$ 与 $\mathbf{S}_2$ 近似相等，故可把这两个样本融合。由式(6-21)知

$$\mathbf{S}_p=\frac{49}{98}\mathbf{S}_1+\frac{49}{98}\mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}2&1\\1&5\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

又由于 $\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}-1.9\\0.2\end{bmatrix}$，所以置信椭圆的中心在$[-1.9,0.2]'$，从特征方程

$$0=|\mathbf{S}_p-\lambda\mathbf{I}|=\begin{vmatrix}2-\lambda & 1\\1 & 5-\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2-7\lambda+9$$

可解得 $\mathbf{S}_p$ 的特征根为

$$\lambda=(7\pm\sqrt{49-36})/2 \quad 即 \quad \lambda_1=5.303,\quad \lambda_2=1.697$$

再由

$$\mathbf{S}_p\mathbf{e}_i=\lambda_i\mathbf{e}_i,\ i=1,2$$

求得相应的特征向量 $\mathbf{e}_1$ 和 $\mathbf{e}_2$：

$$\mathbf{e}_1=\begin{bmatrix}0.290\\0.957\end{bmatrix},\quad \mathbf{e}_2=\begin{bmatrix}0.957\\-0.290\end{bmatrix}$$

由于 $F_{2,97}(0.05)=3.1$，

$$\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)c^2=\left(\frac{1}{50}+\frac{1}{50}\right)\times\frac{98\times 2}{97}\times F_{2,97}(0.05)=0.25$$

由结论 6.2 知置信椭圆的主轴沿特征向量 $\mathbf{e}_i$ 的长度为

$$\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)c^2}=\sqrt{\lambda_i}\times\sqrt{0.25}$$

即在 $\mathbf{e}_1$ 方向上长度为 1.15 个单位，在 $\mathbf{e}_2$ 方向上长度为 0.65 个单位。95%置信椭圆示于图 6.1。$\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$ 显然不在此椭圆内，因而我们得出结论：两种制皂工艺有差别。从图可看出，虽然两种工艺生产的肥皂具有相同的舒适度(X_2)，但第二种工艺生产的肥皂的泡沫量(X_1)较多。

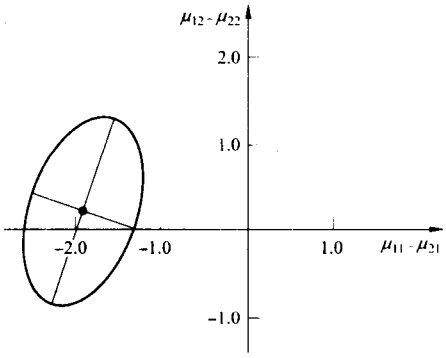


图 6.1 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的 95%置信椭圆

联合置信区间

有可能推出向量 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 诸分量的联合置信区间，只要考虑诸均值向量之差的所有可能的线性组合即可。假定各个多元母总体均服从多元正态分布，且具有公共的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$。

结论 6.3 设 $c^2=[(n_1+n_2-2)p/(n_1+n_2-p-1)]F_{p,n_1+n_2-p-1}(\alpha)$。此时对任意的 $\mathbf{a}$，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2)\pm c\sqrt{\mathbf{a}'\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_p\,\mathbf{a}}$$

将以概率 $1-\alpha$ 包含 $\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)$。特别是

$$(\bar{X}_{1i}-\bar{X}_{2i})\pm c\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)s_{ii,p}},\ i=1,2,\cdots,p$$

将包含 $\mu_{1i}-\mu_{2i}$。

证明 考虑由观测值 $\mathbf{X}_{11},\mathbf{X}_{12},\cdots,\mathbf{X}_{1n_1}$ 与 $\mathbf{X}_{21},\mathbf{X}_{22},\cdots,\mathbf{X}_{2n_2}$ 构成的一元线性组合

$$\mathbf{a}'\mathbf{X}_{1j}=a_1X_{1j1}+a_2X_{1j2}+\cdots+a_pX_{1jp}\ 及\ \mathbf{a}'\mathbf{X}_{2j}=a_1X_{2j1}+a_2X_{2j2}+\cdots+a_pX_{2jp}$$

这些线性组合的样本均值与样本方差分别为 $\mathbf{a}'\bar{\mathbf{X}}_1,\mathbf{a}'\mathbf{S}_1\mathbf{a}$ 及 $\mathbf{a}'\bar{\mathbf{X}}_2,\mathbf{a}'\mathbf{S}_2\mathbf{a}$，其中 $\bar{\mathbf{X}}_1,\mathbf{S}_1$ 与 $\bar{\mathbf{X}}_2$，$\mathbf{S}_2$ 分别为原样本的样本均值和样本方差(见结论 3.5)。当两个母总体具有相同的协方差阵时。$s_{1,\mathbf{a}}^2=\mathbf{a}'\mathbf{S}_1\mathbf{a}$ 与 $s_{2,\mathbf{a}}^2=\mathbf{a}'\mathbf{S}_2\mathbf{a}$ 二者均为线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_1$ 与 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_2$ 的公共总体方差 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}$ 的估计量。融合这些估计量，便得

$$\begin{aligned}s_{\mathbf{a},p}^2&=\frac{(n_1-1)s_{1,\mathbf{a}}^2+(n_2-1)s_{2,\mathbf{a}}^2}{(n_1+n_2-2)}\\&=\mathbf{a}'\left[\frac{n_1-1}{n_1+n_2-2}\mathbf{S}_1+\frac{n_2-1}{n_1+n_2-2}\mathbf{S}_2\right]\mathbf{a}\\&=\mathbf{a}'\mathbf{S}_p\,\mathbf{a}\end{aligned}\tag{6-25}$$

为了根据 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_{1j}$ 和 $\mathbf{a}'\mathbf{X}_{2j}$ 检验 $H_0:\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)=\mathbf{a}'\boldsymbol{\delta}_0$，我们构造一元二样本 t 统计量的平方

$$t_{\mathbf{a}}^2=\frac{[\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2)-\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)]^2}{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)s_{\mathbf{a},p}^2}=\frac{[\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))]^2}{\mathbf{a}'\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_p\,\mathbf{a}}\tag{6-26}$$

根据对 $\mathbf{d}=(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))$ 和 $\mathbf{B}=(1/n_1+1/n_2)\mathbf{S}_p$ 的最大化引理(2-50)，我们有，对一切 $\mathbf{a}\neq 0$

$$\begin{aligned}t_{\mathbf{a}}^2&\leqslant(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))'\left[\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_p\right]^{-1}(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2))\\&=T^2\end{aligned}$$

因此，

$$\begin{aligned}(1-\alpha)&=P[T^2\leqslant c^2]=P[t_{\mathbf{a}}^2\leqslant c^2,\ 对一切\ \mathbf{a}]\\&=P\left[|\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2)-\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)|\leqslant c\sqrt{\mathbf{a}'\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{S}_p\,\mathbf{a}},\ 对一切\ \mathbf{a}\right]\end{aligned}$$

这里的 c^2 根据结论 6.2 选出。

评注 对检验 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$ 来说，含系数向量 $\hat{\mathbf{a}}\propto\mathbf{S}_p^{-1}\cdot(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)$ 的线性组合 $\hat{\mathbf{a}}'(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)$ 给出了最大总体差值的定量表示。也就是说，当 T^2 拒绝 H_0 时，$\hat{\mathbf{a}}'(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)$ 可能有非零均值。由于题材和统计上的重要性，我们往往要对这个线性组合的诸分量作出解释。

例 6.4 (计算均值分量之差的联合置信区间)

考虑威斯康星州分别由有空调设备和无空调设备住宅房主构成的两个样本(数据经威斯康星大学统计实验室许可使用)，样本容量分别为 $n_1=45$ 和 $n_2=55$。考虑两个用电量测量值(千瓦小时)，一个是 7 月份用电高峰时间的总用电量(X_1)，另一个是 7 月份非高

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

峰用电时间的用电量(X_2)。其统计结果如下。

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}204.4\\556.6\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}_1=\begin{bmatrix}13825.3 & 23823.4\\23823.4 & 73107.4\end{bmatrix},\quad n_1=45$$

$$\bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}130.0\\355.0\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}8632.0 & 19616.7\\19616.7 & 55964.5\end{bmatrix},\quad n_2=55$$

(非高峰时间的耗电量高于高峰时间的耗电量原因是在一个月内非高峰用电时间比高峰用电时间长。)

我们来求均值分量之差的95%联合置信区间。

尽管样本方差间存在某些差异,但为明确我们的目的,我们仍用融合的样本协方差阵,此处

$$\mathbf{S}_p=\frac{n_1-1}{n_1+n_2-2}\mathbf{S}_1+\frac{n_2-1}{n_1+n_2-2}\mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}10963.7 & 21505.5\\21505.5 & 63661.3\end{bmatrix}$$

且

$$c^2=\frac{(n_1+n_2-2)p}{n_1+n_2-p-1}F_{p,n_1+n_2-p-1}(\alpha)=\frac{98\times 2}{97}\times F_{2,97}(0.05)$$
$$=2.02\times 3.1=6.26$$

对 $\boldsymbol{\mu}_1'-\boldsymbol{\mu}_2'=[\mu_{11}-\mu_{21},\mu_{12}-\mu_{22}]$,其总体均值差的95%联合置信区间为:

$$\mu_{11}-\mu_{21}:(204.4-130.0)\pm\sqrt{6.26}\times\sqrt{\left(\frac{1}{45}+\frac{1}{55}\right)\times 10963.7}$$

即

$$21.7\leqslant\mu_{11}-\mu_{21}\leqslant 127.1$$

$$\mu_{12}-\mu_{22}:(556.6-355.0)\pm\sqrt{6.26}\times\sqrt{\left(\frac{1}{45}+\frac{1}{55}\right)\times 63661.3}$$

即

$$74.7\leqslant\mu_{12}-\mu_{22}\leqslant 328.5$$

于是我们得出结论:有空调设备与无空调设备的家庭的耗电量之间有显著差异,这种差异在用电高峰时间及非高峰时间均存在。

$\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的95%置信椭圆可用其特征值和特征向量确定,其中特征值与特征向量分别为 $\lambda_1=71323.5$,$\mathbf{e}_1'=[0.336,\ 0.942]$及 $\lambda_2=3301.5$,$\mathbf{e}_2'=[0.942,-0.336]$,由于

$$\sqrt{\lambda_1}\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)c^2}=\sqrt{71323.5}\times\sqrt{\left(\frac{1}{45}+\frac{1}{55}\right)\times 6.26}=134.3$$

$$\sqrt{\lambda_2}\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)c^2}=\sqrt{3301.5}\times\sqrt{\left(\frac{1}{45}+\frac{1}{55}\right)\times 6.26}=28.9$$

我们得出如图6.2所示的 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的95%置信椭圆。因为这个均值差的置信椭圆不包含 $\mathbf{0}'=[0,0]$,故在5%显著性水平下,T^2 统计量将拒绝假设 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$。

对拒绝该假设起主要作用的线性组合而言,其系数向量与 $\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)$ 成正比(见练习6.7)。

p 维总体均值差的 $100(1-\alpha)\%$ **庞弗罗尼联合置信区间**为

$$\mu_{1i}-\mu_{2i}:\ (\bar{x}_{1i}-\bar{x}_{2i})\pm t_{n_1+n_2-2}\left(\frac{\alpha}{2p}\right)\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)s_{ii,p}}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

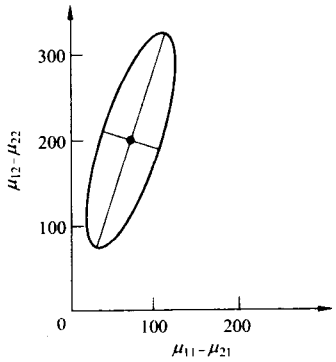


图 6.2　$\mu_1'-\mu_2'=(\mu_{11}-\mu_{21},\mu_{12}-\mu_{22})$的 95%置信椭圆

其中的 $t_{n_1+n_2-2}(\alpha/2p)$为自由度为 n_1+n_2-2 的 t 分布的上 $100(\alpha/2p)$百分位数。

$\Sigma_1\neq\Sigma_2$ 时的二样本情形

$\Sigma_1\neq\Sigma_2$ 时，我们无法找到像 T^2 这样的"距离"测度，T^2 的分布与未知的 Σ_1 和 Σ_2 无关。虽然我们可用巴特利特检验[3]以广义方差的形式来检验 Σ_1 与 Σ_2 的相等性，不幸的是，当总体为非正态总体时，结论将受到严重误导。在巴特勒检验中，非正态性与不相等协方差不能分离。蒂库和巴拉克里莎[17]提出了一种检验两个协方差阵是否相等的方法，该方法对多元正态性假设不太敏感。不过在我们无条件地介绍这一方法之前，尚需积累更多的实际经验。

我们认为(没有多少实际根据)，阶的歧异可能很严重($\sigma_{1,ii}=4\sigma_{2,ii}$，反过来也一样)。这在一元情形是对的。在多元情形下，极其重要的歧异大小在很大程度上依赖于变量数目 p。

当边际方差之间有较大差异时，某种变换也许能使情况得到改善。不过当 n_1 与 n_2 很大时，由不相等的协方差阵所引起的复杂性可以避免。

结论 6.4　设样本容量使 n_1-p 与 n_2-p 都很大，此时 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的近似 $100(1-\alpha)\%$置信椭球为满足

$$[\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)]'\left[\frac{1}{n_1}\mathbf{S}_1+\frac{1}{n_2}\mathbf{S}_2\right]^{-1}[\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)]\leqslant\chi_p^2(\alpha)$$

的所有 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 给出，其中 $\chi_p^2(\alpha)$为自由度为 p 的 χ^2 分布的上 100α 百分位数。而且，所有线性组合 $\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)$的 $100(1-\alpha)\%$联合置信区间为

$$\mathbf{a}'(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)\pm\sqrt{\chi_p^2(\alpha)}\sqrt{\mathbf{a}'\left(\frac{1}{n_1}\mathbf{S}_1+\frac{1}{n_2}\mathbf{S}_2\right)\mathbf{a}}$$

证明　由式(6-22)及式(3-9)知

$$E(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2)=\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$$

$$\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2)=\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_1)+\mathrm{Cov}(\bar{\mathbf{X}}_2)=\frac{1}{n_1}\boldsymbol{\Sigma}_1+\frac{1}{n_2}\boldsymbol{\Sigma}_2$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

根据由中心极限定理，$\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2$ 近似服从 $N_p[\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2, n_1^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_1+n_2^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_2]$。若 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_2$ 已知，从 $\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2$ 到 $\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2$ 的统计距离的平方为

$$[\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)]'\left(\frac{1}{n_1}\boldsymbol{\Sigma}_1+\frac{1}{n_2}\boldsymbol{\Sigma}_2\right)^{-1}[\bar{\mathbf{X}}_1-\bar{\mathbf{X}}_2-(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)]$$

根据结论 4.7，此距离平方近似服从 χ_p^2 分布。当 n_1, n_2 很大时，$\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$ 将分别以较大的概率接近 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_2$。因此，用 $\mathbf{S}_1$ 与 $\mathbf{S}_2$ 分别替换 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}_2$ 时近似成立。

关于联合置信区间的结论可从结论 5A.1 得出。

评注 若 $n_1=n_2=n$，则 $(n-1)/(n+n-2)=1/2$，从而，

$$\frac{1}{n_1}\mathbf{S}_1+\frac{1}{n_2}\mathbf{S}_2=\frac{1}{n}(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)=\frac{(n-1)\mathbf{S}_1+(n-1)\mathbf{S}_2}{n+n-2}\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n}\right)$$
$$=\mathbf{S}_p\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n}\right)$$

故当两个样本的容量相等时，大样本方法和基于融合协方差阵的方法相同（见结论 6.2）。在一维情形下众所周知：当 $n_1=n_2$ 时，方差不等的效应最小，而当 $n_1\ll n_2$（或 $n_2\ll n_1$）时，方差不等的效应最大。

例 6.5 （推断均值差的大样本方法）

我们用大样本方法来分析例 6.4 中的电力消费数据。首先计算

$$\frac{1}{n_1}\mathbf{S}_1+\frac{1}{n_2}\mathbf{S}_2=\frac{1}{45}\times\begin{bmatrix}13825.3 & 23823.4\\ 23823.4 & 73107.4\end{bmatrix}+\frac{1}{55}\times\begin{bmatrix}8632.0 & 19616.7\\ 19616.7 & 55964.5\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}464.17 & 886.08\\ 886.08 & 2642.15\end{bmatrix}$$

线性组合

$$\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)=[1,0]\begin{bmatrix}\mu_{11}-\mu_{21}\\ \mu_{12}-\mu_{22}\end{bmatrix}=\mu_{11}-\mu_{21}$$

和

$$\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)=[0,1]\begin{bmatrix}\mu_{11}-\mu_{21}\\ \mu_{12}-\mu_{22}\end{bmatrix}=\mu_{12}-\mu_{22}$$

的 95%联合置信区间为（见结论 6.4）：

$$\mu_{11}-\mu_{21}:\ 74.4\pm\sqrt{5.99}\ \sqrt{464.17}\quad 即\quad (21.7, 127.1)$$
$$\mu_{12}-\mu_{22}:\ 201.6\pm\sqrt{5.99}\ \sqrt{2642.15}\quad 即\quad (75.8, 327.4)$$

注意，这些区间与用融合方法处理所得的区间之间的差异是极其微小的。检验 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$ 的 T^2 检验统计量为

$$T^2=[\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2]'\left[\frac{1}{n_1}\mathbf{S}_1+\frac{1}{n_2}\mathbf{S}_2\right]^{-1}[\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2]$$
$$=\begin{bmatrix}204.4-130.0\\ 556.6-355.0\end{bmatrix}'\begin{bmatrix}464.17 & 886.08\\ 886.08 & 2642.15\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}204.4-130.0\\ 556.6-355.0\end{bmatrix}$$
$$=[74.4\quad 201.6]\times 10^{-4}\times\begin{bmatrix}59.874 & -20.080\\ -20.080 & 10.519\end{bmatrix}\begin{bmatrix}74.4\\ 201.6\end{bmatrix}=15.66$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

对 $\alpha=0.05$，临界值 $\chi_2^2(0.05)=5.99$。故由于 $T^2=15.66>\chi_2^2(0.05)=5.99$，我们拒绝 H_0。

导致拒绝 H_0 的最关键的线性组合其系数向量为

$$\hat{\mathbf{a}} \propto \left(\frac{1}{n_1}\mathbf{S}_1+\frac{1}{n_2}\mathbf{S}_2\right)^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)=(10^{-4})\begin{bmatrix}59.874 & -20.080\\ -20.080 & 10.519\end{bmatrix}\begin{bmatrix}74.4\\ 201.6\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}0.041\\ 0.063\end{bmatrix}$$

有空调与无空调家庭的非高峰电力消费之差，比高峰电力消费之差对拒绝 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$ 作出的贡献更大。

对小样本及中等大小的样本，蒂库和辛格[18]给出了一个类似于 T^2 的统计量，该统计量对离群观测值不太敏感。但是对容量在中等以上的样本，对正态性的微小偏离或存在少数几个离群值就不会对霍特林 T^2 产生明显影响。

6.4 多个多元总体均值向量的比较(单因子 MANOVA)

我们常常需要对两个以上的总体进行比较，设从 g 个总体分别抽取的随机样本为

$$\begin{array}{ll}\text{总体 1:} & \mathbf{X}_{11},\mathbf{X}_{12},\cdots,\mathbf{X}_{1n_1}\\ \text{总体 2:} & \mathbf{X}_{21},\mathbf{X}_{22},\cdots,\mathbf{X}_{2n_2}\\ \vdots & \vdots\\ \text{总体 } g\text{:} & \mathbf{X}_{g1},\mathbf{X}_{g2},\cdots,\mathbf{X}_{gn_g}\end{array} \tag{6-27}$$

MANOVA 首先被用来研究这些总体的均值向量是否相等，若不等，那么哪些分量有显著差异。

单因子 MANOVA 的数据结构假设

1. 设 $\mathbf{X}_{l1},\mathbf{X}_{l2},\cdots,\mathbf{X}_{ln_l}$ 为来自均值为 $\boldsymbol{\mu}_l$ 的总体的一容量为 n_l 的随机样本，$l=1,2,\cdots,g$。来自不同总体的样本相互独立。
2. 所有总体均具有公共的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$。
3. 每个总体均为多元正态总体。

当所有样本容量 n_l 均充分大时，根据中心极限定理(结论 4.13)，可将条件 3 放宽。

在开始讨论 MANOVA 之前，回顾一下一元方差分析(ANOVA)是有益的。

一元 ANOVA 概述

在一元情形下的假设为：$X_{l1},X_{l2},\cdots,X_{ln_l}$ 为来自总体 $N(\mu_l,\sigma^2)$，$l=1,2,\cdots,g$ 的随机样本，而且来自不同总体的样本相互独立。虽然关于均值相等的零假设可陈述为 $\mu_1=\mu_2=\cdots=\mu_g$。但我们习惯于将 μ_l 表示成总均值分量 μ 与某个归因于特定总体的分量之和，例

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

如，$\mu_l=\mu+(\mu_l-\mu)$或 $\mu_l=\mu+\tau_l$，其中 $\tau_l=\mu_l-\mu$。

不同总体通常对应于不同的实验条件，因此，研究与第 l 个总体(处理)相联系的偏差 τ_l 是合适的。

重新参数化

$$\underset{\begin{pmatrix}\text{第 } l \text{ 个总体}\\ \text{均值}\end{pmatrix}}{\mu_l} = \underset{\begin{pmatrix}\text{总均}\\ \text{值}\end{pmatrix}}{\mu} + \underset{\begin{pmatrix}\text{第 } l \text{ 个总体(处理)}\\ \text{的效应}\end{pmatrix}}{\tau_l} \tag{6-28}$$

导致均值相等性假设的另一种表述：

$$H_0:\tau_1=\tau_2=\cdots=\tau_g=0$$

而服从分布 $N(\mu+\tau_l,\sigma^2)$的响应 X_{lj}则可表成如下形式：

$$X_{lj} = \underset{\text{(总均值)}}{\mu} + \underset{\text{(处理效应)}}{\tau_l} + \underset{\text{(随机误差)}}{e_{lj}} \tag{6-29}$$

其中 e_{lj}为独立同分布随机变量，其分布为 $N(0,\sigma^2)$。为了唯一地确定模型参数及它们的最小二乘估计值，通常需附加约束条件 $\sum_{l=1}^{g} n_l\tau_l=0$。

受分解式(6-29)的启发，方差分析可在对观测值进行类似分解的基础上进行：

$$\underset{\text{(观测值)}}{x_{lj}} = \underset{\text{(样本总均值)}}{\bar{x}} + \underset{\begin{pmatrix}\text{处理效应的}\\ \text{估计}\end{pmatrix}}{(\bar{x}_l-\bar{x})} + \underset{\text{(残差)}}{(x_{lj}-\bar{x}_l)} \tag{6-30}$$

其中 $\bar{x}$ 为 μ 的估计，$\hat{\tau}_l=(\bar{x}_l-\bar{x})$为 τ_l 的估计而$(x_{lj}-\bar{x}_l)$为误差 e_{lj}的估计。

例 6.6 (一元 ANOVA 的平方和分解)

考虑如下独立样本

总体 1：9,6,9

总体 2：0,2

总体 3：3,1,2

由于，比如说 $\bar{x}_3=(3+1+2)/3=2$ 和 $\bar{x}=(9+6+9+0+2+3+1+2)/8=4$，我们有

$$\begin{aligned}3=x_{31}&=\bar{x}+(\bar{x}_3-\bar{x})+(x_{31}-\bar{x}_3)\\&=4+(2-4)+(3-2)\\&=4+(-2)+1\end{aligned}$$

对每个观测值作上述的分解，便得

$$\begin{pmatrix}9&6&9\\0&2&\\3&1&2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}4&4&4\\4&4&\\4&4&4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}4&4&4\\-3&-3&\\-2&-2&-2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&-2&1\\-1&1&\\1&-1&0\end{pmatrix}$$

$$\underset{(x_{lj})}{\text{观测值}} = \underset{(\bar{x})}{\text{均值}} + \underset{(\bar{x}_l-\bar{x})}{\text{处理效应}} + \underset{(x_{lj}-\bar{x}_l)}{\text{残差}}$$

通过评估处理效应的贡献是否比残差的贡献大，就能回答均值的相等性问题。(τ_l 的

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

估计 $\hat{\tau}_l = \bar{x}_l - \bar{x}$ 总满足 $\sum_{l=1}^{g} n_l \hat{\tau}_l = 0$，在假设 H_0 下，每一个 $\hat{\tau}_l$ 均为 0 的估计。）若处理的贡献很大，应拒绝 H_0。对上述 4 个矩阵，分别求出其所有元素的**平方和**(SS)。对这些观测值，我们构造一个向量 $\mathbf{y}' = [9,6,9,0,2,3,1,2]$，其平方和为

$$SS_{观测} = 9^2 + 6^2 + 9^2 + 0^2 + 2^2 + 3^2 + 1^2 + 2^2 = 216$$

类似地，有

$$SS_{均值} = 4^2 + 4^2 + 4^2 + 4^2 + 4^2 + 4^2 + 4^2 + 4^2 = 8 \times 4^2 = 128$$

$$\begin{aligned} SS_{处理} &= 4^2 + 4^2 + 4^2 + (-3)^2 + (-3)^2 + (-2)^2 + (-2)^2 + (-2)^2 \\ &= 3 \times 4^2 + 2 \times (-3)^2 + 3 \times (-2)^2 = 78 \end{aligned}$$

以及残差平方和

$$SS_{残差} = 1^2 + (-2)^2 + 1^2 + (-1)^2 + 1^2 + 1^2 + (-1)^2 + 0^2 = 10$$

这些平方和满足与式(6-30)一样的分解式，故

$$SS_{观测} = SS_{均值} + SS_{处理} + SS_{残差}$$

即 216=128+78+10。总平方和的这种分解把样本中的总变差分解成来自总均值，处理和残差三部分，方差分析就是要进行 $SS_{处理}$ 与 $SS_{残差}$ 的大小比较。假如 H_0 为真，那么由 $SS_{处理}$ 与 $SS_{残差}$ 算出的变差应近似相等。

在例 6.6 中用数字说明的平方和分解方法是非常基本的，现在来推导这种分解的代数式。

从式(6-30)两边减去 $\bar{x}$，然后取平方，得

$$(x_{lj} - \bar{x})^2 = (\bar{x}_l - \bar{x})^2 + (x_{lj} - \bar{x}_l)^2 + 2(\bar{x}_l - \bar{x})(x_{lj} - \bar{x}_l)$$

两边对 j 求和，注意到 $\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj} - \bar{x}_l) = 0$，就有

$$\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj} - \bar{x})^2 = n_l(\bar{x}_l - \bar{x})^2 + \sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj} - \bar{x}_l)^2$$

然后，两边再对 l 求和，可得

$$\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj} - \bar{x})^2 = \sum_{l=1}^{g} n_l(\bar{x}_l - \bar{x})^2 + \sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj} - \bar{x}_l)^2 \tag{6-31}$$

$$\begin{pmatrix} SS_{总} \\ 总(修正的)平方和 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} SS_{处理} \\ 组间平方和 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} SS_{残差} \\ 组内平方和 \end{pmatrix}$$

即

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l} x_{lj}^2 &= (n_1 + n_2 + \cdots + n_g)\bar{x}^2 + \sum_{l=1}^{g} n_l(\bar{x}_l - \bar{x})^2 + \sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj} - \bar{x}_l)^2 \\ (SS_{观测}) &= (SS_{均值}) + (SS_{处理}) + (SS_{残差}) \end{aligned} \tag{6-32}$$

在式(6-32)的推导过程中，我们实际上已证明了均值向量、处理效应向量及残差向量是相互**正交**的。也就是说，对任意的观测值向量 $\mathbf{y}' = [x_{11}, \cdots, x_{1n_1}, x_{21}, \cdots, x_{2n_2}, \cdots, x_{gn_g}]$，这些数组视作向量的都是正交的。因此只要利用 $SS_{残差} = SS_{观测} - SS_{均值} - SS_{处理}$，不用计算单个残差便得到 $SS_{残差}$。但这种方法并不经济，因为由单个残差构成的残差图实际上可为模型中的假定提交检验。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

包含在分解式(6-30)中的数组的向量表示具有能提供自由度的几何解释。对任一观测值集，令 $\mathbf{y}'=[x_{11},\cdots,x_{1n_1},x_{21},\cdots,x_{2n_2},\cdots,x_{gn_g}]$。观测值向量 $\mathbf{y}$ 可以在 $n=n_1+\cdots+n_g$ 维空间的任何地方，均值向量 $\bar{x}\mathbf{1}=[\bar{x},\cdots,\bar{x}]'$ 必定处在 $\mathbf{1}$ 的等角线上，而处理效应向量

$$(\bar{x}_1-\bar{x})\begin{bmatrix}1\\ \vdots\\ 1\\ 0\\ \vdots\\ 0\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix}\begin{matrix}\left.\vphantom{\begin{matrix}1\\ \vdots\\ 1\end{matrix}}\right\}n_1\\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{matrix}+(\bar{x}_2-\bar{x})\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ 1\\ \vdots\\ 1\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix}\begin{matrix}\\ \\ \\ \left.\vphantom{\begin{matrix}1\\ \vdots\\ 1\end{matrix}}\right\}n_2\\ \\ \\ \\ \end{matrix}+\cdots+(\bar{x}_g-\bar{x})\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ 0\\ \vdots\\ 0\\ 1\\ \vdots\\ 1\end{bmatrix}\begin{matrix}\\ \\ \\ \\ \\ \\ \left.\vphantom{\begin{matrix}1\\ \vdots\\ 1\end{matrix}}\right\}n_g\end{matrix}$$

$$=(\bar{x}_1-\bar{x})\mathbf{u}_1+(\bar{x}_2-\bar{x})\mathbf{u}_2+\cdots+(\bar{x}_g-\bar{x})\mathbf{u}_g$$

则位于 g 个向量 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_g$ 的线性组合所张成的超平面中。又因 $\mathbf{1}=\mathbf{u}_1+\mathbf{u}_2+\cdots+\mathbf{u}_g$，故均值向量也位于这个超平面中，而且总与处理效应向量垂直(见练习 6.10)。因此，均值向量可在 1 维空间中变化，而处理效应向量则在一个 $g-1$ 维空间中变化。残差向量 $\hat{\mathbf{e}}=\mathbf{y}-(\bar{x}\mathbf{1})-[(\bar{x}_1-\bar{x})\mathbf{u}_1+\cdots+(\bar{x}_g-\bar{x})\mathbf{u}_g]$ 与均值向量及处理效应向量均垂直，所以只能在与它们的超平面垂直的 $n-(g-1)-1=n-g$ 维子空间中变化。

概括地说，$SS_{均值}$，$SS_{处理}$ 和 $SS_{残差}$ 的自由度分别为 1，$g-1$ 和 $n-g=(n_1+n_2+\cdots+n_g)-g$。总自由度为 $n=n_1+n_2+\cdots+n_g$。另外，根据一元分布理论，我们发现这些自由度正是各平方和所对应的 χ^2 分布的自由度。

平方和的计算以及相应的自由度可方便地用 ANOVA 表来表示。

比较一元总体均值的 ANOVA 表

变差来源	平方和(SS)	自由度(d.f.)
处理	$SS_{处理}=\sum_{l=1}^{g}n_l(\bar{x}_l-\bar{x})^2$	$g-1$
残差(误差)	$SS_{残差}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj}-\bar{x}_l)^2$	$\sum_{l=1}^{g}n_l-g$
总和	$SS_{总}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(x_{lj}-\bar{x})^2$	$\sum_{l=1}^{g}n_l-1$

若 $F=\dfrac{SS_{处理}/(g-1)}{SS_{残差}/\left(\sum_{l=1}^{g}n_l-g\right)}>F_{g-1,\sum n_l-g}(\alpha)$，则在显著性水平 α 下拒绝 $H_0:\tau_1=\tau_2=\cdots=\tau_g=0$。此处 $F_{g-1,\sum n_l-g}(\alpha)$ 为自由度为 $g-1$ 和 $\sum n_l-g$ 的 F 分布的上 100α 百分

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

位数。这相当于在 $SS_{处理}/SS_{残差}$ 值很大或 $1+SS_{处理}/SS_{残差}$ 值很大时拒绝 H_0。适合向多元情形推广的检验统计量为

$$\frac{1}{1+SS_{处理}/SS_{残差}}=\frac{SS_{残差}}{SS_{残差}+SS_{处理}} \tag{6-33}$$

当此值很小时，就拒绝 H_0。

例 6.7 （一元 ANOVA 表及处理效应的 F 检验）

利用例 6.6 的信息，可得出如下 ANOVA 表：

变差来源	平方和	自由度
处理	$SS_{处理}=78$	$g-1=3-1=2$
残差	$SS_{残差}=10$	$\sum_{l=1}^{g} n_l - g = (3+2+3)-3=5$
总和	$SS_{总和}=88$	$\sum_{l=1}^{g} n_l - 1 = 7$

于是
$$F=\frac{SS_{处理}/(g-1)}{SS_{残差}/(\sum n_l-g)}=\frac{78/2}{10/5}=19.5$$

由于 $F=19.5>F_{2,5}(0.01)=13.27$，所以在 0.01 显著性水平下，我们拒绝 $H_0:\tau_1=\tau_2=\tau_3=0$（即无处理效应）。

多元方差分析（MANOVA）

与一元情形的重新参数化类似，我们先建立 MANOVA 模型如下：

比较 g 个总体均值向量的 MANOVA 模型

$$\mathbf{X}_{lj}=\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{\tau}_l+\mathbf{e}_{lj},\ j=1,2,\cdots,n_l,\ l=1,2,\cdots,g \tag{6-34}$$

此处 $\mathbf{e}_{lj}$ 为独立的 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$ 随机变量，参数向量 $\boldsymbol{\mu}$ 为总均值（水平），而 $\boldsymbol{\tau}_l$ 则代表第 l 个处理效应，且满足 $\sum_{l=1}^{g} n_l \boldsymbol{\tau}_l=\mathbf{0}$。

根据模型(6-34)，观测值向量 $\mathbf{X}_{lj}$ 的**每个分量**满足一元模型(6-29)。但 $\mathbf{X}_{lj}$ 的分量的误差彼此相关。且所有总体的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 均相同。

观测值向量可按模型所暗示的方式分解如下：

$$\underset{(观测值)}{\mathbf{x}_{lj}} = \underset{\begin{pmatrix}样本总\\均值\ \hat{\boldsymbol{\mu}}\end{pmatrix}}{\bar{\mathbf{x}}} + \underset{\begin{pmatrix}处理效应\\的估计量\ \hat{\boldsymbol{\tau}}_l\end{pmatrix}}{(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})} + \underset{\begin{pmatrix}残差\\ \hat{\mathbf{e}}_{lj}\end{pmatrix}}{(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)} \tag{6-35}$$

分解式(6-35)导致与一元情形相类似的多元平方和分解式。首先，注意到乘积 $(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})'$ 可写成

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})' &= [(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)+(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})][(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)+(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})]' \\
&= (\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)'+(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})' \\
&\quad +(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)'+(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})'
\end{aligned}
$$

因为 $\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)=\mathbf{0}$，所以对 j 求和后，中间两项均为零矩阵。于是将交叉乘积对 l 和 j 求和后可得：

$$
\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})' = \sum_{l=1}^{g}n_l(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})' + \sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)'
$$

（总平方和及交叉乘积和）　{处理平方和及交叉乘积和（或组间平方和）}　{残差平方和及交叉乘积和（或组内平方和）}　(6-36)

组内平方和可表示为

$$
\begin{aligned}
\mathbf{W} &= \sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)' \\
&= (n_1-1)\mathbf{S}_1+(n_2-1)\mathbf{S}_2+\cdots+(n_g-1)\mathbf{S}_g
\end{aligned}
\tag{6-37}
$$

其中 $\mathbf{S}_l$ 为第 l 个样本的样本协方差矩阵。它是二样本时 $(n_1+n_2-2)\mathbf{S}_p$ 的推广，在处理效应的存在性检验中，它起着决定性作用。

同一元情形相似，可通过比较处理与残差的平方和及交叉乘积和的相对大小，来检验关于无处理效应的假设

$$H_0:\tau_1=\tau_2=\cdots=\tau_g=\mathbf{0}$$

等价的做法是，也可以考虑残差与总和（修正后的）平方和及交叉乘积和的相对大小。我们将得出检验统计量的计算用 MANOVA 表列出。

总体均值向量比较的 MANOVA 表

变差来源	平方和及交叉乘积和矩阵(SSP)	自由度(d.f.)
处理	$\mathbf{B}=\sum_{l=1}^{g}n_l(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})'$	$g-1$
残差（误差）	$\mathbf{W}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)'$	$\sum_{l=1}^{g}n_l-g$
总和（修正后的）	$\mathbf{B}+\mathbf{W}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})'$	$\sum_{l=1}^{g}n_l-1$

此表与一元情形下的 ANOVA 表形式完全相同，只是 ANOVA 表中标量平方和在此处已被相应的向量分量的平方和所代替。例如 $(\bar{x}_l-\bar{x})^2$ 被换成了 $(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})\cdot(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})'$。各种自由度与一元几何相对应，因而也与某种包含威沙特密度在内的多元分布原理相对应（见[1]）。

假设 $H_0:\tau_1=\tau_2=\cdots=\tau_g=\mathbf{0}$ 的一个检验涉及广义方差，若广义方差比

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\Lambda^* = \frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|} = \frac{\left|\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)'\right|}{\left|\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}})'\right|} \tag{6-38}$$

过小，则拒绝 H_0。$\Lambda^* = |\mathbf{W}|/|\mathbf{B}+\mathbf{W}|$ 这个量最早是由威尔克斯提出的（见[20]），它与一元情形下假设"H_0：无处理效应"的 F 检验的等价形式(6-33)相对应。**威尔克斯**①Λ 统计量的优点是使用方便，而且与似然比准则密切相关。对于表 6.3 所列的一些特殊情形，可导出 Λ^* 的精确分布。对于其他情形及大样本情形，经巴特利特（见[4]）修正的 Λ^* 可用于检验 H_0。

表 6.3　威尔克斯 $\Lambda^* = |\mathbf{W}|/|\mathbf{B}+\mathbf{W}|$ 的分布

变量数	组数	多元正态数据的抽样分布
$p=1$	$g\geqslant 2$	$\left(\frac{\sum n_l - g}{g-1}\right)\left(\frac{1-\Lambda^*}{\Lambda^*}\right) \sim F_{g-1,\sum n_l - g}$
$p=2$	$g\geqslant 2$	$\left(\frac{\sum n_l - g - 1}{g-1}\right)\left(\frac{1-\sqrt{\Lambda^*}}{\sqrt{\Lambda^*}}\right) \sim F_{2(g-1),2(\sum n_l - g - 1)}$
$p\geqslant 1$	$g=2$	$\left(\frac{\sum n_l - p - 1}{p}\right)\left(\frac{1-\Lambda^*}{\Lambda^*}\right) \sim F_{p,\sum n_l - p - 1}$
$p\geqslant 1$	$g=3$	$\left(\frac{\sum n_l - p - 2}{p}\right)\left(\frac{1-\sqrt{\Lambda^*}}{\sqrt{\Lambda^*}}\right) \sim F_{2p,2(\sum n_l - p - 2)}$

巴特利特（见[4]）证明了，若假设 H_0 为真且 $\sum n_l = n$ 充分大，则

$$-\left(n-1-\frac{(p+g)}{2}\right)\ln\Lambda^* = -\left(n-1-\frac{(p+g)}{2}\right)\ln\left(\frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|}\right) \tag{6-39}$$

近似服从自由度为 $p(g-1)$ 的 χ^2 分布，因此，当 $\sum n_l = n$ 充分大时，若

$$-\left(n-1-\frac{(p+g)}{2}\right)\ln\left(\frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|}\right) > \chi^2_{p(g-1)}(\alpha) \tag{6-40}$$

我们就以显著性水平 α 拒绝 H_0，其中的 $\chi^2_{p(g-1)}(\alpha)$ 为自由度为 $p(g-1)$ 的 χ^2 分布的上 100α 百分位数。

例 6.8　（检验三个均值向量相等性的 MANOVA 表及威尔克斯 Λ 统计量）

假定在例 6.6 中再观测一个附加变量。样本容量仍分别为 $n_1=3, n_2=2$ 和 $n_3=3$，将各对观测值 $\mathbf{x}_{lj}$ 排列成行，得到

① 威尔克斯 Λ 统计量也可表示成 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 的特征值的函数：$\Lambda^* = \prod_{i=1}^{s}\left(\frac{1}{1+\lambda_i}\right)$，其中 $s=\min(p,g-1)$ 为 $\mathbf{B}$ 的秩。其他用于检验若干个多元均值向量相等性的检验统计量，如皮莱统计量，劳雷-霍特林统计量及罗依最大根统计量，均可表示为 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 的特征值的函数，对大样本情形，这些统计量基本上是等价的（详见后面的讨论）。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\begin{pmatrix} \begin{bmatrix}9\\3\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}6\\2\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}9\\7\end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix}0\\4\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}2\\0\end{bmatrix} & \\ \begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}1\\9\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}2\\7\end{bmatrix} \end{pmatrix} \quad \text{其中 } \bar{\mathbf{x}}_1 = \begin{bmatrix}8\\4\end{bmatrix}, \bar{\mathbf{x}}_2 = \begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}, \bar{\mathbf{x}}_3 = \begin{bmatrix}2\\8\end{bmatrix}, \quad \text{和 } \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix}4\\5\end{bmatrix}$$

在一元 ANOVA 的讨论中，我们已将第一个变量的观测值表示成总均值、处理效应与残差之和，我们发现有：

$$\underset{\text{（观测值）}}{\begin{pmatrix} 9 & 6 & 9 \\ 0 & 2 & \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}} = \underset{\text{（均值）}}{\begin{pmatrix} 4 & 4 & 4 \\ 4 & 4 & \\ 4 & 4 & 4 \end{pmatrix}} + \underset{\text{（处理效应）}}{\begin{pmatrix} 4 & 4 & 4 \\ -3 & -3 & \\ -2 & -2 & -2 \end{pmatrix}} + \underset{\text{（残差）}}{\begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}}$$

且

$$SS_{\text{观测}} = SS_{\text{均值}} + SS_{\text{处理}} + SS_{\text{残差}}$$

$$216 = 128 + 78 + 10$$

$$\text{（修正后）总和 } SS = SS_{\text{观测}} - SS_{\text{均值}} = 216 - 128 = 88$$

对第二个变量的观测值重复上述操作，就有

$$\underset{\text{（观测值）}}{\begin{pmatrix} 3 & 2 & 7 \\ 4 & 0 & \\ 8 & 9 & 7 \end{pmatrix}} = \underset{\text{（均值）}}{\begin{pmatrix} 5 & 5 & 5 \\ 5 & 5 & \\ 5 & 5 & 5 \end{pmatrix}} + \underset{\text{（处理效应）}}{\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -3 & -3 & \\ 3 & 3 & 3 \end{pmatrix}} + \underset{\text{（残差）}}{\begin{pmatrix} -1 & -2 & 3 \\ 2 & -2 & \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}}$$

且

$$SS_{\text{观测}} = SS_{\text{均值}} + SS_{\text{处理}} + SS_{\text{残差}}$$

$$272 = 200 + 48 + 24$$

$$\text{（修正后）总和 } SS = SS_{\text{观测}} - SS_{\text{均值}} = 272 - 200 = 72$$

为完整地给出 MANOVA 表，还必须考虑它们的**交叉乘积**。将两变量中的数据按行相乘，可得交叉乘积的贡献：

均值交叉乘积：$4\times5+4\times5+\cdots+4\times5=8\times4\times5=160$

处理交叉乘积：$3\times4\times(-1)+2\times(-3)\times(-3)+3\times(-2)\times3=-12$

残差交叉乘积：$1\times(-1)+(-2)\times(-2)+1\times3+(-1)\times2+\cdots+0\times(-1)=1$

总交叉乘积：$9\times3+6\times2+9\times7+0\times4+\cdots+2\times7=149$

（修正的）总交叉乘积＝总交叉乘积－均值交叉乘积＝149－160＝－11，于是，MANOVA 表具有如下形式：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

变差来源	平方和与交叉乘积和矩阵	自由度
处理	$\begin{bmatrix} 78 & -12 \\ -12 & 48 \end{bmatrix}$	$3-1=2$
残差	$\begin{bmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 24 \end{bmatrix}$	$3+2+3-3=5$
(修正后)总和	$\begin{bmatrix} 88 & -11 \\ -11 & 72 \end{bmatrix}$	7

注意到以下关系，式(6-36)就得到验证：

$$\begin{bmatrix} 88 & -11 \\ -11 & 72 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 78 & -12 \\ -12 & 48 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 24 \end{bmatrix}$$

由式(6-38)可得

$$\Lambda^* = \frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|} = \frac{\begin{vmatrix} 10 & 1 \\ 1 & 24 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 88 & -11 \\ -11 & 72 \end{vmatrix}} = \frac{10 \times 24 - 1^2}{88 \times 72 - (-11)^2} = \frac{239}{6215} = 0.0385$$

因为 $p=2, g=3$，所以表 6.3 暗示有一个假设为 $H_0: \tau_1=\tau_2=\tau_3=\mathbf{0}$ 和 H_l：至少有一个 $\tau_l \neq \mathbf{0}$的精确检验(假定存在正态性和各组协方差阵相等的条件)。为完成检验，我们将检验统计量

$$\left(\frac{1-\sqrt{\Lambda^*}}{\sqrt{\Lambda^*}}\right)\frac{(\sum n_l - g - 1)}{(g-1)} = \left(\frac{1-\sqrt{0.0385}}{\sqrt{0.0385}}\right) \times \left(\frac{8-3-1}{3-1}\right) = 8.19$$

与自由度为 $V_1 = 2(g-1) = 4$ 及 $V_2 = 2(\sum n_l - g - 1) = 8$ 的 F 分布的百分位数进行比较，由于 $8.19 > F_{4,8}(0.01) = 7.01$，故在 $\alpha = 0.01$ 的显著性水平下拒绝 H_0，即认为各种处理之间存在差异。

当变量数目 p 很大时，通常不用 MANOVA 表，这时一种常见的做法是用计算机打印出矩阵 **B** 和 **W**，这就有可能出现特别大的矩阵元素。此外，为了判断正态性是否成立和离群值是否存在，应利用第 4 章 4.6 和 4.7 两节的讨论考察残差向量 $\hat{\mathbf{e}}_{lj} = \mathbf{x}_{lj} - \bar{\mathbf{x}}_l$。

例 6.9 (威斯康星州小型疗养所数据的多元分析)

威斯康星州卫生和社会服务部为了支付该州小型疗养所提供服务的费用，根据诸如护理等级、平均工资率和该州的平均工资率等因素设计出一组公式，用来计算每一项设备的费用率。

小型疗养所可按其所有制(私营、非盈利组织和政府经营)以及设备等级证书(技术型设备，中等设备，或两者的结合)来分类。

最近一项研究的目的是调查所有制或设备等级证书(或两者)对费用的影响，为分析的需要选取了四项费用(按每位患者每天计算，以每位患者每天的小时数来衡量)：X_1=护理人工费用，X_2=膳食服务费用，X_3=设备操作及维护费用，X_4=房产管理与洗衣费用。对这 $p=4$ 个费用变量中的每一个以及对每一种所有制各取 $n=516$ 个观测值。下面

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

是这 3 组汇总统计数字。

组别	观测值数	样本均值向量
$l=1$(私营)	$n_1=271$	$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}2.066\\0.480\\0.082\\0.360\end{bmatrix}$; $\bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}2.167\\0.596\\0.124\\0.418\end{bmatrix}$; $\bar{\mathbf{x}}_3=\begin{bmatrix}2.273\\0.521\\0.125\\0.383\end{bmatrix}$
$l=2$(非盈利组织)	$n_2=138$	
$l=3$(政府经营)	$n_3=107$	
	$\sum_{l=1}^{3} n_l=516$	

样本协方差阵

$$\mathbf{S}_1=\begin{bmatrix}0.291 & & & \\ -0.001 & 0.011 & & \\ 0.002 & 0.000 & 0.001 & \\ 0.010 & 0.003 & 0.000 & 0.010\end{bmatrix};\quad \mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}0.561 & & & \\ 0.011 & 0.025 & & \\ 0.001 & 0.004 & 0.005 & \\ 0.037 & 0.007 & 0.002 & 0.019\end{bmatrix};$$

$$\mathbf{S}_3=\begin{bmatrix}0.261 & & & \\ 0.030 & 0.017 & & \\ 0.003 & -0.000 & 0.004 & \\ 0.018 & 0.006 & 0.001 & 0.013\end{bmatrix}$$

资料来源:数据经威斯康星州卫生与社会服务部许可使用。

由于各 $\mathbf{S}_l$ 似乎差异不大①,故可将它们融合(见式(6-37))可得

$$\mathbf{W}=(n_1-1)\mathbf{S}_1+(n_2-1)\mathbf{S}_2+(n_3-1)\mathbf{S}_3$$

$$=\begin{bmatrix}182.962 & & & \\ 4.408 & 8.200 & & \\ 1.695 & 0.633 & 1.484 & \\ 9.581 & 2.428 & 0.394 & 6.538\end{bmatrix}$$

此外有

$$\bar{\mathbf{x}}=\frac{n_1\bar{\mathbf{x}}_1+n_2\bar{\mathbf{x}}_2+n_3\bar{\mathbf{x}}_3}{n_1+n_2+n_3}=\begin{bmatrix}2.136\\0.519\\0.102\\0.380\end{bmatrix}$$

和

$$\mathbf{B}=\sum_{l=1}^{3} n_l(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})'=\begin{bmatrix}3.475 & & & \\ 1.111 & 1.225 & & \\ 0.821 & 0.453 & 0.235 & \\ 0.584 & 0.610 & 0.230 & 0.304\end{bmatrix}$$

① 不过由于样本容量很大,所以在任意合理的显著性水平下,用正态理论检验假设 $H_0:\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2=\boldsymbol{\Sigma}_3$ 时仍将拒绝 H_0。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

为检验 $H_0:\tau_1=\tau_2=\tau_3$(无所有制的效应,或等价地说,私人、非营利者和政府三类业主之间的平均费用没有差别),可利用表 6.3 中 $g=3$ 的结果。

由计算机算得

$$\Lambda^* = \frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|} = 0.7714$$

及 $$\left(\frac{\sum n_l - p - 2}{p}\right)\left(\frac{1-\sqrt{\Lambda^*}}{\sqrt{\Lambda^*}}\right) = \left(\frac{516-4-2}{4}\right)\times\left(\frac{1-\sqrt{0.7714}}{\sqrt{0.7714}}\right) = 17.67$$

取 $\alpha=0.01$,这样 $F_{2\times4,2\times510}(0.01)\doteq\chi_8^2(0.01)/8=2.51$。由于 $17.67>F_{8,1020}(0.01)\doteq 2.51$,故在 0.01 显著性水平下我们拒绝 H_0,并得出平均费用因所有制不同而存在差异的结论。

将这种"精确"检验结果与用式(6-39)和式(6-40)给出的大样本分析结果进行比较是有益的。在本例中,$\sum n_l=n=516$ 很大,所以 H_0 可在 $\alpha=0.01$ 显著性水平下进行检验,只要比较

$$-[n-1-(p+g)/2]\ln\left(\frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|}\right) = -511.5\ln(0.7714) = 132.76$$

与 $\chi^2_{p(g-1)}(0.01)=\chi_8^2(0.01)=20.09$ 的大小即可。由于 $132.76>\chi_8^2(0.01)=20.09$,故拒绝 H_0。这与刚才用 F 统计量所得出的结果相一致。

6.5 处理效应的联合置信区间

当处理效应的相等性假设被拒绝时,人们自然就会对导致假设被拒绝的那些效应感兴趣。对成对比较,用庞弗罗尼方法(见 5.4 节)可构造出 $\tau_k-\tau_l$(或 $\mu_k-\mu_l$)的分量的联合置信区间,这些区间比用别的方法构造的区间要窄,而且只要求用一元 t 分布的临界值。

设 τ_{ki} 为 τ_k 的第 i 个分量,由于 $\hat{\tau}_k=\bar{\mathbf{x}}_k-\bar{\mathbf{x}}$ 为 τ_k 的估计量,故有

$$\tau_{ki} = \bar{x}_{ki} - \bar{x}_i \tag{6-41}$$

而且 $\tau_{ki}-\hat{\tau}_{li}=\bar{x}_{ki}-\bar{x}_{li}$ 为两独立样本的均值差。对经过适当修正的 α 值,建立在二样本 t 分布基础上的置信区间依然成立。注意:

$$\mathrm{Var}(\hat{\tau}_{ki}-\hat{\tau}_{li}) = \mathrm{Var}(\bar{X}_{ki}-\bar{X}_{li}) = \left(\frac{1}{n_k}+\frac{1}{n_l}\right)\sigma_{ii}$$

其中 σ_{ii} 为 $\mathbf{\Sigma}$ 的第 i 个对角元素,正如式(6-37)所暗示的,$\mathrm{Var}(\bar{X}_{ki}-\bar{X}_{li})$ 可通过将 $\mathbf{W}$ 的相应元素除以其自由度来估计,即

$$\widehat{\mathrm{Var}}\ (\bar{X}_{ki}-\bar{X}_{li}) = \left(\frac{1}{n_k}+\frac{1}{n_l}\right)\frac{w_{ii}}{n-g}$$

此处 w_{ii} 为 $\mathbf{W}$ 的第 i 个对角元素,且 $n=n_1+\cdots+n_g$。

尚需将误差率分配到许多置信区间中去。我们仍可应用式(5-28)。由于有 p 个变量及

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$g(g-1)/2$ 对差值，故每一个二样本 t 区间需用到临界值 $t_{n-g}(\alpha/2m)$，其中

$$m = pg(g-1)/2 \tag{6-42}$$

为联合置信区间的个数。

结论 6.5 设 $n = \sum_{k=1}^{g} n_k$，对模型(6-34)，对所有的分量 $i=1,2,\cdots p$ 及所有差值 $l<k=1,\cdots,g$，以至少为 $1-\alpha$ 的置信度有

$$\tau_{ki} - \tau_{li}\text{属于 } \bar{x}_{ki} - \bar{x}_{li} \pm t_{n-g}\left(\frac{\alpha}{pg(g-1)}\right)\sqrt{\frac{w_{ii}}{n-g}\left(\frac{1}{n_k}+\frac{1}{n_l}\right)}$$

其中的 w_{ii} 为 $\mathbf{W}$ 的第 i 个对角元素。

下面将利用例 6.9 中的小型疗养所数据来说明如何构造处理均值间成对差的联合区间估计。

例 6.10 （处理间均值差的联合置信区间——小型疗养所）

在例 6.9 中我们看到，小型疗养所的平均费用因所有制类型的不同而异。我们可利用结论 6.5 来估计这些差异的大小。为比较私营疗养所与政府疗养所的设备操作和维护费用 X_3 之间的差异，我们可以估计 $\tau_{13}-\tau_{33}$。利用式(6-35)及例 6.9 中的信息，有

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_1 = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} -0.070 \\ -0.039 \\ -0.020 \\ -0.020 \end{bmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{\tau}}_3 = (\bar{\mathbf{x}}_3 - \bar{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} 0.137 \\ 0.002 \\ 0.023 \\ 0.003 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} 182.962 & & & \\ 4.408 & 8.200 & & \\ 1.695 & 0.633 & 1.484 & \\ 9.581 & 2.428 & 0.394 & 6.538 \end{bmatrix}$$

因此 $$\hat{\tau}_{13} - \hat{\tau}_{33} = -0.020 - 0.023 = -0.043$$

因为 $$n = 271 + 138 + 107 = 516\text{，所以}$$

$$\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_3}\right)\frac{w_{33}}{n-g}} = \sqrt{\left(\frac{1}{271}+\frac{1}{107}\right)\times\frac{1.484}{516-3}} = 0.00614$$

又因 $p=4$ 和 $g=3$，故对 95%的联合置信区间要求用 $t_{513}[0.05/(4\times3\times2)]\doteq 2.87$（见附录表 1）。于是 95%联合置信区间为

$$\begin{aligned}\tau_{13} - \tau_{33}\text{属于 } \hat{\tau}_{13} - \hat{\tau}_{33} \pm t_{513}(0.00208)&\sqrt{\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_3}\right)\frac{w_{33}}{n-g}} \\ &= -0.043 \pm 2.87 \times 0.00614 \\ &= -0.043 \pm 0.018\text{，即}(-0.061,\ -0.025)\end{aligned}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

因此，政府所有的疗养所其设备操作与维护的平均费用人均每天要比私营疗养所的高出0.025到0.061小时。以同样95%的置信度我们可以说：

$\tau_{13}-\tau_{23}$属于区间(−0.058，−0.026)

$\tau_{23}-\tau_{33}$属于区间(−0.021，0.019)

因此这项费用在非盈利组织办的疗养所与私营疗养所之间有差异，但在非盈利组织疗养所与政府疗养所间则无差别。

6.6 双因子多元方差分析

与单因子MANOVA的做法一样，我们先简单回顾一下双因子一元方差分析模型，然后用类比法将其推广到多元情形。

有交互效应的一元双因子固定效应模型

假定测量值是在两个因子的不同水平上获得的。在某些情形下，这些实验条件代表了安排在若干区组内的单个处理的水平。本书不考虑所用实验设计的具体方法(实验设计的讨论见[9]和[10])。但我们将假定在实验条件的各种组合下得出的观测值是相互独立的。

设两组实验条件分别为因子1和因子2的两组水平①。假设因子1有g个水平，因子2有b个水平，共有gb个水平组合，对每个水平组合可得n个独立观测值。用X_{lkr}表示在因子1的水平l，因子2的水平k下得出的第r个观测值。此时双因子一元模型为

$$X_{lkr}=\mu+\tau_l+\beta_k+\gamma_{lk}+l_{lkr} \tag{6-43}$$

$$l=1,2,\cdots,g$$

$$k=1,2,\cdots,b$$

$$r=1,2,\cdots,n$$

其中$\sum_{l=1}^{g}\tau_l=\sum_{k=1}^{b}\beta_k=\sum_{l=1}^{g}\gamma_{lk}=\sum_{k=1}^{b}\gamma_{lk}=0$且$l_{lkr}$为独立$N(0,\sigma^2)$随机变量在上式中，$\mu$代表总水平，$\tau_l$代表因子1的效应，$\beta_k$代表因子2的效应，$\gamma_{lk}$为因子1和因子2的交互效应。因子1的第$l$水平和因子2的第$k$水平的期望响应为

$$E(X_{lkr}) = \mu + \tau_l + \beta_k + \gamma_{lk}$$

$$\begin{pmatrix}\text{平均}\\\text{响应}\end{pmatrix}=(\text{总水平})+\begin{pmatrix}\text{因子1}\\\text{的效应}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{因子2}\\\text{的效应}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{因子1和因子2}\\\text{的交互效应}\end{pmatrix}$$

① 用“因子”这一术语来表述实验条件较为方便。但这里所说的因子不能与第9章的因子分析中所考虑的不可观测因子相混淆。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$l=1,2,\cdots,g,\quad k=1,2,\cdots,b \tag{6-44}$$

交互效应 γ_{lk} 的存在，意味着因子效应是不可加的，而且使结果的解释复杂化。图 6.3(a)和(b)分别表示有交互效应和无交互效应时，期望响应作为因子水平的函数的图形。无交互效应意味着对一切 l 与 k，有 $\gamma_{lk}=0$。

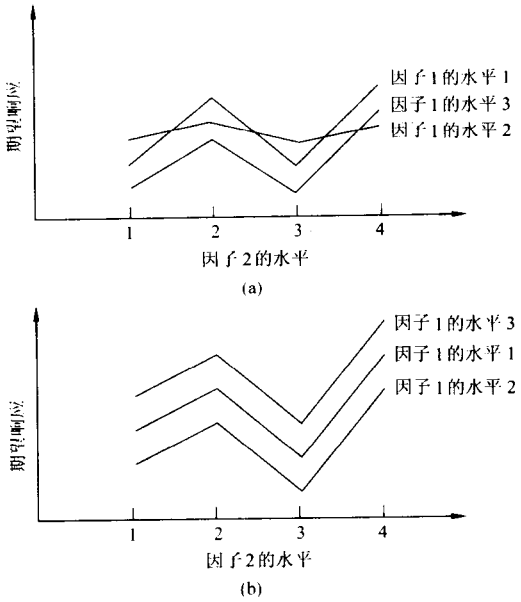


图 6.3　期望响应曲线：(a)有交互效应；(b)无交互效应

类似于式(6-44)，每个观测值也可分解为

$$x_{lkr}=\bar{x}+(\bar{x}_{l\cdot}-\bar{x})+(\bar{x}_{\cdot k}-\bar{x})+(\bar{x}_{lk}-\bar{x}_{l\cdot}-\bar{x}_{\cdot k}+\bar{x})+(x_{lkr}-\bar{x}_{lk}) \tag{6-45}$$

其中 $\bar{x}$ 为总平均，$\bar{x}_{l\cdot}$ 为因子 1 的第 l 个水平下观测值的平均，$\bar{x}_{\cdot k}$ 为因子 2 的第 k 个水平下观测值的平均，$\bar{x}_{lk}$ 为因子 1 的第 l 个水平。因子 2 的第 k 个水平下观测值的平均，将 $(x_{lkr}-\bar{x})$ 取平方再求和，可得

$$\begin{aligned}\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(x_{lkr}-\bar{x})^2=&\sum_{l=1}^{g}bn(\bar{x}_{l\cdot}-\bar{x})^2+\sum_{k=1}^{b}gn(\bar{x}_{\cdot k}-\bar{x})^2\\&+\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}n(\bar{x}_{lk}-\bar{x}_{l\cdot}-\bar{x}_{\cdot k}+\bar{x})^2\\&+\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(x_{lkr}-\bar{x}_{lk})^2\end{aligned} \tag{6-46}$$

或

$$SS_{总}=SS_{因子1}+SS_{因子2}+SS_{交互}+SS_{残差}$$

与式(6-46)中各平方和相联系的相应自由度为：

$$gbn-1=(g-1)+(b-1)+(g-1)(b-1)+gb(n-1) \tag{6-47}$$

ANOVA 表有如下形式：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

比较两因子效应及其交互效应的方差分析表

变差来源	平方和 (SS)	自由度 (d.f.)
因子 1	$SS_{因子1} = \sum_{l=1}^{g} bn(\bar{x}_{l\cdot} - \bar{x})^2$	$g-1$
因子 2	$SS_{因子2} = \sum_{k=1}^{b} gn(\bar{x}_{\cdot k} - \bar{x})^2$	$b-1$
交互效应	$SS_{交互} = \sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b} n(\bar{x}_{lk} - \bar{x}_{l\cdot} - \bar{x}_{\cdot k} + \bar{x})^2$	$(g-1)(b-1)$
残差(误差)	$SS_{残差} = \sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(x_{lkr} - \bar{x}_{lk})^2$	$gb(n-1)$
总和(修正的)	$SS_{总} = \sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(x_{lkr} - \bar{x})^2$	$gbn-1$

均方 $SS_{因子1}/(g-1)$，$SS_{因子2}/(b-1)$ 和 $SS_{交互}/(g-1)(b-1)$ 分别与均方 $SS_{残差}/[gb(n-1)]$ 形成的 F 比，可分别用于检验因子 1 的效应，因子 2 的效应，以及它们之间的交互效应(参见[7]中关于双因子一元方差分析的讨论)。

具有交互效应的双因子多元固定效应模型

用类比方法，我们可以对由 p 个分量组成的响应向量给出双因子固定效应模型如下：

$$\mathbf{X}_{lkr} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\tau}_l + \boldsymbol{\beta}_k + \boldsymbol{\gamma}_{lk} + \mathbf{e}_{lkr} \tag{6-48}$$

$$l = 1,2,\cdots,g$$

$$k = 1,2,\cdots,b$$

$$r = 1,2,\cdots,n$$

其中 $\sum_{l=1}^{g}\boldsymbol{\tau}_l = \sum_{k=1}^{b}\boldsymbol{\beta}_k = \sum_{l=1}^{g}\boldsymbol{\gamma}_{lk} = \sum_{k=1}^{b}\boldsymbol{\gamma}_{lk} = \mathbf{0}$。所有向量的阶数均为 $p\times 1$，且 $\mathbf{e}_{lkr}$ 为独立 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$ 随机向量。于是，响应由在因子 1 和因子 2 的每一种可能的水平组合下重复 n 次的 p 个测量值组成。

根据式(6-45)，可将观测向量 $\mathbf{x}_{lkr}$ 分解为

$$\mathbf{x}_{lkr} = \bar{\mathbf{x}} + (\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot} - \bar{\mathbf{x}}) + (\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k} - \bar{\mathbf{x}}) + (\bar{\mathbf{x}}_{lk} - \bar{\mathbf{x}}_{l\cdot} - \bar{\mathbf{x}}_{\cdot k} + \bar{\mathbf{x}}) + (\mathbf{X}_{lkr} - \bar{\mathbf{x}}_{lk}) \tag{6-49}$$

其中，$\bar{\mathbf{x}}$ 为观测向量的总平均，$\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}$ 为在因子 1 的第 l 个水平下观测向量的平均，$\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}$ 为在因子 2 的第 k 个水平下观测向量的平均，$\bar{\mathbf{x}}_{lk}$ 为在因子 1 的第 l 个水平下、因子 2 的第 k 个水平下观测向量的平均。

直接推广式(6-46)及式(6-47)，可得平方和与交叉乘积和以及自由度的如下分解：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(\mathbf{x}_{lkr}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lkr}-\bar{\mathbf{x}})'=\sum_{l=1}^{g}bn(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})'$$
$$+\sum_{k=1}^{b}gn(\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}-\bar{\mathbf{x}})'$$
$$+\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}n(\bar{\mathbf{x}}_{lk}-\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}+\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{lk}-\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}+\bar{\mathbf{x}})'$$
$$+\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(\mathbf{x}_{lrk}-\bar{\mathbf{x}}_{lk})(\mathbf{x}_{lrk}-\bar{\mathbf{x}}_{lk})' \tag{6-50}$$

$$gbn-1=(g-1)+(b-1)+(g-1)(b-1)+gb(n-1) \tag{6-51}$$

我们再次看到，从一元分析到多元分析的推广只不过是简单地将诸如$(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})^2$这样的标量用相应的矩阵$(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})'$替代而已。

下面是 MANOVA 表：

比较因子效应及其交互效应的多元方差分析表

变差来源	平方和与交叉乘积和矩阵(SSP)	自由度(d.f.)
因子 1	$\mathrm{SSP}_{因子1}=\sum_{l=1}^{g}bn(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}})'$	$g-1$
因子 2	$\mathrm{SSP}_{因子2}=\sum_{k=1}^{b}gn(\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}-\bar{\mathbf{x}})'$	$b-1$
交互效应	$\mathrm{SSP}_{交互}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}n(\bar{\mathbf{x}}_{lk}-\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}+\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_{lk}-\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}+\bar{\mathbf{x}})'$	$(g-1)(b-1)$
残差(误差)	$\mathrm{SSP}_{残差}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(\mathbf{x}_{lkr}-\bar{\mathbf{x}}_{lk})(\mathbf{x}_{lkr}-\bar{\mathbf{x}}_{lk})'$	$gb(n-1)$
总和(修正的)	$\mathrm{SSP}_{总}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{k=1}^{b}\sum_{r=1}^{n}(\mathbf{x}_{lkr}-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_{lkr}-\bar{\mathbf{x}})'$	$gbn-1$

检验(似然比检验)①，假设

$$H_0:\boldsymbol{\gamma}_{11}=\boldsymbol{\gamma}_{12}=\cdots=\boldsymbol{\gamma}_{gb}=\mathbf{0}\quad(无交互效应) \tag{6-52}$$
$$H_1:\text{至少有一个 }\boldsymbol{\gamma}_{lk}\neq\mathbf{0}$$

的检验统计量为

$$\Lambda^*=\frac{|\mathrm{SSP}_{残差}|}{|\mathrm{SSP}_{交互}+\mathrm{SSP}_{残差}|} \tag{6-53}$$

若Λ^*较小，则拒绝H_0。对于大样本情形，上面的威尔克斯Λ统计量的数值可以用χ^2分布的百分位数作其近似值。利用巴特利特乘子(见[6])使这种近似获得改进后，若

$$-\left[gb(n-1)-\frac{p+1-(g-1)(b-1)}{2}\right]\ln\Lambda^*>\chi^2_{(g-1)(b-1)p}(\alpha) \tag{6-54}$$

① 似然检验法要求 $p\leqslant gb(n-1)$，故 $\mathrm{SSP}_{残差}$为正定阵(概率为 1)。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

则在显著性水平 α 下拒绝 $H_0:\gamma_{11}=\gamma_{12}=\cdots=\gamma_{gb}=\mathbf{0}$。

这里 Λ^* 由式(6-53)给出，而 $\chi^2_{(g-1)(b-1)p}(\alpha)$ 则为自由度为 $(g-1)(b-1)p$ 的 χ^2 分布的上 100α 百分位数。

通常人们总是先检验交互效应，再检验因子的主效应。如果交互效应存在，那么它们的主效应就缺乏清晰的解释。但从实用角度来看，再做进一步的多元检验是不明智的，此时，可以对每个响应分别作双因子一元方差分析，以考察交互效应在哪些响应中出现。倘若因子 1 和因子 2 的效应存在，那么，无交互效应的那些响应可解释为因子 1 与 2 的效应和。若用处理样本均值代替期望值，我们总可以像图 6.3 那样，画出交互效应的图形，这种图最好地反映了主效应和交互效应的大小关系。

在多元模型中，我们用如下的方法检验因子 1 和因子 2 的主效应。首先考虑假设

$$H_0:\tau_1=\tau_2=\cdots=\tau_g=\mathbf{0}$$

$$H_1:\text{至少有一个 }\tau_l\neq\mathbf{0}$$

这些假设分别表示无因子 1 效应及有因子 1 效应。当

$$\Lambda^*=\frac{|\mathrm{SSP}_{\text{残差}}|}{|\mathrm{SSP}_{\text{因子1}}+\mathrm{SSP}_{\text{残差}}|} \tag{6-55}$$

具有较小值时，就接受 H_1。利用巴特利特修正，H_0 的似然比检验为：若

$$-\left[gb(n-1)-\frac{p+1-(g-1)}{2}\right]\ln\Lambda^*>\chi^2_{(g-1)p}(\alpha) \tag{6-56}$$

则在显著性水平 α 下，拒绝 $H_0:=\tau_1=\tau_2=\cdots=\tau_g=\mathbf{0}$(即无因子 1 效应)。此处 Λ^* 由式(6-55)定义，而 $\chi^2_{(g-1)p}(\alpha)$ 则为自由度为 $(g-1)p$ 的 χ^2 分布的第 100α 个上百分位数。

用类似方法可检验因子 2 的主效应，只要考虑假设

$$H_0:\beta_1=\beta_2=\cdots=\beta_b=\mathbf{0}$$

$$H_1:\text{至少有一个 }\beta_k\neq\mathbf{0}$$

即可。当

$$\Lambda^*=\frac{|\mathrm{SSP}_{\text{残差}}|}{|\mathrm{SSP}_{\text{因子2}}+\mathrm{SSP}_{\text{残差}}|} \tag{6-57}$$

取较小值时接受 H_1，对于大样本情形，仍可利用巴特利特修正：若

$$-\left[gb(n-1)-\frac{p+1-(b-1)}{2}\right]\ln\Lambda^*>\chi^2_{(b-1)p}(\alpha) \tag{6-58}$$

则在显著性水平 α 下拒绝 $H_0:\beta_1=\beta_2=\cdots=\beta_b=\mathbf{0}$(即无因子 2 效应)。这里的 Λ^* 由式(6-57)给出，$\chi^2_{(b-1)p}(\alpha)$ 为自由度为 $(b-1)p$ 的 χ^2 分布的第 100α 个上百分位数。

供模型参数对比的联合置信区间能使我们认识因子效应的本质。对双因子模型来说，可获得一些与结论 6.5 相容的结果。当交互效应可以忽略时，可集中考虑因子 1 与因子 2 的主效应的对比。庞弗罗尼方法分别适用于因子 1 效应的差值分量 $\tau_l-\tau_m$ 和因子 2 效应的差值分量 $\beta_k-\beta_q$。

$\tau_{li}-\tau_{mi}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 联合置信区间为：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\tau_{li}-\tau_{mi}\text{属于}\ (\bar{x}_{li\cdot}-\bar{x}_{mi\cdot})\pm t_v\left[\frac{\alpha}{pg(g-1)}\right]\sqrt{\frac{E_{ii}}{v}\frac{2}{bn}} \tag{6-59}$$

其中 $v=gb(n-1)$，E_{ii}为 $\mathbf{E}=\mathrm{SSP}_{残差}$的第 i 个对角元素，$\bar{x}_{li\cdot}-\bar{x}_{mi\cdot}$ 则为 $\bar{\mathbf{x}}_{l\cdot}-\bar{\mathbf{x}}_{m\cdot}$ 的第 i 个分量。

类似地，$\beta_{ki}-\beta_{qi}$的 $100(1-\alpha)\%$联合置信区间为：

$$\beta_{ki}-\beta_{qi}\text{属于}\ (\bar{x}_{\cdot ki}-\bar{x}_{\cdot qi})\pm t_v\left(\frac{\alpha}{pb(b-1)}\right)\sqrt{\frac{E_{ii}}{v}\frac{2}{gn}} \tag{6-60}$$

其中的 v 及 E_{ii}刚才已经定义，而 $\bar{x}_{\cdot ki}-\bar{x}_{\cdot qi}$则为 $\bar{\mathbf{x}}_{\cdot k}-\bar{\mathbf{x}}_{\cdot q}$的第 i 个分量。

评注 前面我们讨论了重复观测的双因子多元模型。也就是说，这种模型允许每个水平组合都有 n 个观测值向量。这就使我们能考察诸因子的“交互作用”。如果对因子水平的每种组合只能获得一个观测值向量，那么双因子模型中就不允许有交互作用项 γ_{lk}。此时相应 MANOVA 表中作为总变差分量的就只有因子 1、因子 2 与残差三个变差来源（见练习 6.13）。

例 6.11 （塑料胶卷数据的双因子多元方差分析）

有人用所谓调优运算法（见[8]）考察了挤压塑料胶卷的最佳工艺条件。在所进行的研究中，考虑两个因子：拉速及添加剂数量。每个因子各取两个水平，并在各因子水平下测量其三个响应指标：X_1=耐撕力，X_2=光泽度，X_3=不透明度。对每种因子水平组合做 5 次重复观测，所得的测试数据列在表 6.4 中。

表 6.4 塑料胶卷数据

x_1=耐撕力，x_2=光泽度，x_3=不透明度

		因子 2：(添加剂数量)					
		低(1.0%)			高(1.5%)		
因子 1：(拉速)	低(−10%)	x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	x_3
		[6.5	9.5	4.4]	[6.9	9.1	5.7]
		[6.2	9.9	6.4]	[7.2	10.0	2.0]
		[5.8	9.6	3.0]	[6.9	9.9	3.9]
		[6.5	9.6	4.1]	[6.1	9.5	1.9]
		[6.5	9.2	0.8]	[6.3	9.4	5.7]
	高(10%)	x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	x_3
		[6.7	9.1	2.8]	[7.1	9.2	8.4]
		[6.6	9.3	4.1]	[7.0	8.8	5.2]
		[7.2	8.3	3.8]	[7.2	9.7	6.9]
		[7.1	8.4	1.6]	[7.5	10.1	2.7]
		[6.8	8.5	3.4]	[7.6	9.2	1.9]

计算了各平方和矩阵及交叉乘积和矩阵（见显示板 6.1 的 SAS 统计软件输出），所得结果导致如 257 页 MANOVA 表：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 6.1　例 6.11 的 SAS 分析(利用 PROC GLM)

```
title 'MANOVA';
data film;
infile 'T6-4.dat';
input x1 x2 x3 factor1 factor2;
proc glm data=film;
class factor1 factor2;
model x1 x2 x3=factor1 factor2 factor1 * factor2/ss3;
manova h=factor1 factor2 factor1 * factor2/printe;
means factor1 factor2;
```

PROGRAM COMMANDS

General Linear Models Procedure

Class Level Information

Class	Levels	Values
FACTOR1	2	0 1
FACTOR2	2	0 1

Number of observations in data set=20

OUTPUT

Dependent Variable: X1

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr>F
Model	3	2.50150000	0.83383333	7.56	0.0023
Error	16	1.76400000	0.11025000		
Corrected Total	19	4.26550000			

R-Square	C.V.	Root MSE	X1 Mean
0.586449	4.893724	0.332039	6.78500000

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr>F
FACTOR1	1	1.74050000	1.74050000	15.79	0.0011
FACTOR2	1	0.76050000	0.76050000	6.90	0.0183
FACTOR1 * FACTOR2	1	0.00050000	0.00050000	0.00	0.9471

Dependent Variable: X2

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr>F
Model	3	2.45750000	0.81916667	4.99	0.0125
Error	16	2.62800000	0.16425000		
Corrected Total	19	5.08550000			

R-Square	C.V.	Root MSE	X2 Mean
0.483237	4.350807	0.405278	9.31500000

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 6.1(续)

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Valuep	Pr>F
FACTOR1	1	1.30050000	1.30050000	7.92	0.0125
FACTOR2	1	1.61250000	0.61250000	3.73	0.0714
FACTOR1 * FACTOR2	1	0.54450000	0.54450000	3.32	0.0874

Dependent Variable: X3

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr>F
Model	3	9.28150000	3.09383333	0.76	0.5315
Error	16	64.92400000	4.05775000		
Corrected Total	19	74.20550000			

R-Square	C.V.	Root MSE	X3 Mean
0.125078	51.19151	2.014386	3.93500000

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr>F
FACTOR1	1	0.42050000	0.42050000	0.10	0.7517
FACTOR2	1	4.90050000	4.90050000	1.21	0.2881
FACTOR1 * FACTOR2	1	3.96050000	3.96050000	0.98	0.3379

E=Error SS&CP Matrix

	X1	X2	X3
X1	1.764	0.02	−3.07
X2	0.02	2.628	−0.552
X3	−3.07	−0.552	64.924

Manova Test Criteria and Exact F Statistics for

the Hypothesis of no Overall FACTOR1 Effect

H=Type III SS&CP Matrix for FACTOR1 E=Error SS&CP Matrix

S=1 M=0.5 N=6

Statistic	Value	F	Num DF	Den DF	Pr>F
Wilks' Lambda	0.38185838	7.5543	3	14	0.0030
Pillai's Trace	0.61814162	7.5543	3	14	0.0030
Hotelling-Lawley Trace	1.61877188	7.5543	3	14	0.0030
Roy's Greatest Root	1.61877188	7.5543	3	14	0.0030

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 6.1(续)

Manova Test Criteria and Exact F Statistics for

the **Hypothesis of no Overall FACTOR2 Effect**

H=Type III SS&CP Matrix for FACTOR2 E=Error SS&CP Matrix

S=1 M=0.5 N=6

Statistic	Value	F	Num DF	Den DF	Pr>F
Wilks'Lambda	**0.52303490**	**4.2556**	**3**	**14**	**0.0247**
Pillai's Trace	0.47696510	4.2556	3	14	0.0247
Hotelling-Lawley Trace	0.91191832	4.2556	3	14	0.0247
Roy's Greatest Root	0.91191832	4.2556	3	14	0.0247

Manova Test Criteria and Exact F Statistics for

the **Hypothesis of no Overall FACTOR1 * FACTOR2 Effect**

H=Type III SS&CP Matrix for FACTOR1 * FACTOR2 E=Error SS&CP Matrix

S=1 M=0.5 N=6

Statistic	Value	F	Num DF	Den DF	Pr>F
Wilks'Lambda	**0.77710576**	**1.3385**	**3**	**14**	**0.3018**
Pillai's Trace	0.22289424	1.3385	3	14	0.3018
Hotelling-Lawley Trace	0.28682614	1.3385	3	14	0.3018
Roy's Greatest Root	0.28682614	1.3385	3	14	0.3018

Level of		----------X1----------		----------X2----------	
FACTOR1	N	Mean	SD	Mean	SD
0	10	6.49000000	0.42018514	9.57000000	0.29832868
1	10	7.08000000	0.32249031	9.06000000	0.57580861

Level of		----------X3----------	
FACTOR1	N	Mean	SD
0	10	3.79000000	1.85379491
1	10	4.08000000	2.18214981

Level of		----------X1----------		----------X2----------	
FACTOR2	N	Mean	SD	Mean	SD
0	10	6.59000000	0.40674863	9.14000000	0.56015871
1	10	6.98000000	0.47328638	9.49000000	0.42804465

Level of		----------X3----------	
FACTOR2	N	Mean	SD
0	10	3.44000000	1.55077042
1	10	4.43000000	2.30123155

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

变差来源	平方和阵与交叉乘积和阵	自由度
因子 1:拉速	$\begin{bmatrix} 1.7405 & -1.5045 & 0.8555 \\ & 1.3005 & -0.7395 \\ & & 0.4205 \end{bmatrix}$	1
因子 2:添加剂数量	$\begin{bmatrix} 0.7605 & 0.6825 & 1.9305 \\ & 0.6125 & 1.7325 \\ & & 4.9005 \end{bmatrix}$	1
交互效应	$\begin{bmatrix} 0.0005 & 0.0165 & 0.0445 \\ & 0.5445 & 1.4685 \\ & & 3.9605 \end{bmatrix}$	1
残差	$\begin{bmatrix} 1.7640 & 0.0200 & -3.0700 \\ & 2.6280 & -0.5520 \\ & & 64.9240 \end{bmatrix}$	16
总和(修正的)	$\begin{bmatrix} 4.2655 & -0.7855 & -0.2395 \\ & 5.0855 & 1.9095 \\ & & 74.2055 \end{bmatrix}$	19

为检验交互效应,我们计算

$$\Lambda^* = \frac{|\mathrm{SSP}_{残差}|}{|\mathrm{SSP}_{交互} + \mathrm{SSP}_{残差}|} = \frac{275.7098}{354.7906} = 0.7771$$

因$(g-1)(b-1)=1$,

故 $F=\left(\frac{1-\Lambda^*}{\Lambda^*}\right)\frac{[gb(n-1)-p+1]/2}{[|(g-1)(b-1)-p|+1]/2}$ 服从自由度为 $v_1=|(g-1)(b-1)-p|+1$ 和 $v_2=gb(n-1)-p+1$ 的 F 分布(见[1])。就此例而言,

$$F=\left(\frac{1-0.7771}{0.7771}\right)\frac{(2\times 2\times 4-3+1)/2}{(|1\times 1-3|+1)/2}=1.34$$

$$v_1=(|1\times 1-3|+1)=3$$

$$v_2=(2\times 2\times 4-3+1)=14$$

且 $F_{3,14}(0.05)=3.34$,由于 $F=1.34<F_{3,14}(0.05)=3.34$,我们不能拒绝假设 $H_0:\boldsymbol{\gamma}_{11}=\boldsymbol{\gamma}_{12}=\boldsymbol{\gamma}_{21}=\boldsymbol{\gamma}_{22}=\mathbf{0}$(无交互效应)。

注意,这一检验的近似 χ^2 统计量可利用式(6-54)得出,即$-[2\times 2\times 4-(3+1-1\times 1)/2]\ln(0.7771)=3.66$,因为 $\chi_3^2(0.05)=7.81$,由此得出的结论与精确 F 分布下推得的结论完全相同。

为检验因子 1 和因子 2 的主效应,我们计算

$$\Lambda_1^* = \frac{|\mathrm{SSP}_{残差}|}{|\mathrm{SSP}_{因子1} + \mathrm{SSP}_{残差}|} = \frac{275.7098}{722.0212} = 0.3819$$

和

$$\Lambda_2^* = \frac{|\mathrm{SSP}_{残差}|}{|\mathrm{SSP}_{因子2} + \mathrm{SSP}_{残差}|} = \frac{275.7098}{527.1347} = 0.5230$$

对 $g-1=1$ 和 $b-1=1$,

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$F_1 = \left(\frac{1-\Lambda_1^*}{\Lambda_1^*}\right)\frac{[gb(n-1)-p+1]/2}{[|(g-1)-p|+1]/2}$$

和
$$F_2 = \left(\frac{1-\Lambda_2^*}{\Lambda_2^*}\right)\frac{(gb(n-1)-p+1)/2}{(|(b-1)-p|+1]/2}$$

分别服从自由度为 $v_1=|(g-1)-p|+1, v_2=gb(n-1)-p+1$ 及 $v_1=|(b-1)-p|+1$, $v_2=gb(n-1)-p+1$ 的 F 分布(见[1])。在本例中,

$$F_1 = \left(\frac{1-0.3819}{0.3819}\right)\frac{(16-3+1)/2}{(|1-3|+1)/2} = 7.55$$

$$F_2 = \left(\frac{1-0.5230}{0.5230}\right)\frac{(16-3+1)/2}{(|1-3|+1)/2} = 4.26$$

且
$$v_1 = |1-3|+1 = 3 \quad v_2 = (16-3+1) = 14$$

由于 $F_{3,14}(0.05)=3.34$,就有 $F_1=7.55>F_{3,14}(0.05)=3.34$。因此我们在 5%水平下拒绝 $H_0:\tau_1=\tau_2=\mathbf{0}$(无因子 1 效应)。类似地,$F_2=4.26>F_{3,14}(0.05)=3.34$,因而在 5%显著性水平下我们拒绝 $H_0:\beta_1=\beta_2=\mathbf{0}$(无因子 2 效应)。因此,添加剂数量及挤压速度的改变对三个响应指标都有影响。

在练习 6.15 中,研究了因子 1 和因子 2 对响应指标的影响的本质,在该练习中,还考虑了 τ_l 与 β_k 的分量对比的联合置信区间。

6.7 轮廓分析

当我们将由 p 种处理(如测验,问卷调查等)组成的一个处理组施加于两组或多组对象时,可采用轮廓分析方法。设所有响应均在相似的单元中被表出,再假定不同组的响应彼此独立。我们自然要问:总体的均值向量是否都相等?在轮廓分析中,诸均值向量的相等性问题可分成几种可能性。

考虑总体均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1'=[\mu_{11},\mu_{12},\mu_{13},\mu_{14}]$,它代表对第一组四种处理的平均响应。这些用直线连接的均值,其图形示于图 6.4。这种折线图就称为总体 1 的**轮廓**,对每个总体(组)都可构造其轮廓。我们主要讨论二个总体(组)的情形。

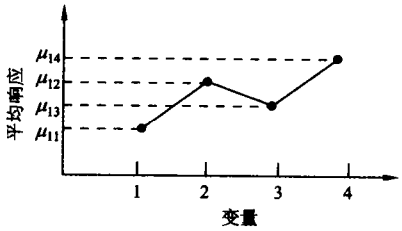


图 6.4 总体轮廓($p=4$)

设 $\boldsymbol{\mu}_1'=[\mu_{11},\mu_{12},\cdots,\mu_{1p}]$和 $\boldsymbol{\mu}_2'=[\mu_{21},\mu_{22},\cdots,\mu_{2p}]$分别为总体 1 和总体 2 对 p 种处理的平均响应。假设 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1=\boldsymbol{\mu}_2$ 意味着对这两个总体来说,p 种处理的效应相等。按照轮廓分析的思想方法,可将相等性问题分成如下几步:

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

1. 两轮廓是否平行？等价地说，假设

$H_{01}:\mu_{1i}-\mu_{1i-1}=\mu_{2i}-\mu_{2i-1}, i=2,3,\cdots,p$，是否可接受？

2. 假如两轮廓是平行的，那么它们是否重合①？等价地说，假设 $H_{02}:\mu_{1i}=\mu_{2i}\quad i=1,2,\cdots,p$，是否可以接受？

3. 假如两轮廓重合，它们是水平的吗？即所有均值是否都等于同一常数？等价地说，假设 $H_{03}:\mu_{11}=\mu_{12}=\cdots=\mu_{1p}=\mu_{21}=\mu_{22}=\cdots=\mu_{2p}$是否可以接受？

在第一步中，零假设可写为

$$H_{01}:\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_1=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_2$$

这里 $\mathbf{C}$ 为对比阵

$$\underset{((p-1)\times p)}{\mathbf{C}}=\begin{bmatrix}-1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 1\end{bmatrix} \tag{6-61}$$

对来自两个总体的容量分别为 n_1 和 n_2 的独立样本，通过构造变换后的观测值

$$\mathbf{C}\mathbf{x}_{1j},\quad j=1,2,\cdots,n_1$$

和

$$\mathbf{C}\mathbf{x}_{2j},\quad j=1,2,\cdots,n_2$$

便可检验零假设。变换后的观测值的样本均值向量分别为 $\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}_1$ 和 $\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}_2$。联合的样本协方差阵为 $\mathbf{C}\mathbf{S}_p\mathbf{C}'$。

由于变换后的两组观测值分别服从 $N_{p-1}(\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_1,\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}')$与 $N_{p-1}(\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_2,\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}')$，应用结论 6.2，便可检验两个轮廓的平行性。

两个正态总体平行轮廓的检验

若

$$T^2=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{C}'\left[\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{C}\mathbf{S}_p\mathbf{C}'\right]^{-1}\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)>c^2 \tag{6-62}$$

则在显著性水平 α 下拒绝 $H_{01}:\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_1=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_2$，其中

$$c^2=\frac{(n_1+n_2-2)(p-1)}{n_1+n_2-p}F_{p-1,n_1+n_2-p}(\alpha)$$

当两个总体的轮廓平行时，第 1 个总体的轮廓或者高于第 2 个总体的轮廓（对所有 i，$\mu_{1i}>\mu_{2i}$），或者低于第 2 个总体的轮廓，两者必居其一。在此条件下，只有当总高度 $\mu_{11}+\mu_{12}+\cdots+\mu_{1p}=\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_1$ 与 $\mu_{21}+\mu_{22}+\cdots+\mu_{2p}=\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_2$ 相等时，两总体的轮廓才会重合，因此，第二步中的零假设可改写为如下等价形式

$$H_{02}:\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_1=\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_2$$

这时我们可以利用根据一元观测值 $\mathbf{1}'\mathbf{x}_{1j}, j=1,2,\cdots,n_1$ 和 $\mathbf{1}'\mathbf{x}_{2j}, j=1,2,\cdots,n_2$ 得出的两个普通二样本 t 统计量来检验 H_{02}。

① 练习 6.12 中考虑了这样的问题：假如两轮廓平行，它们是否线性？线性轮廓的零假设可写作 $H_0:(\mu_{1i}+\mu_{2i})-(\mu_{1i-1}+\mu_{2i-1})=(\mu_{1i-1}+\mu_{2i-1})-(\mu_{1i-2}+\mu_{2i-2}), i=3,\cdots,p$。这样的假设虽然在特定情况下人们也许会感兴趣，但通常我们最感兴趣的是两平行轮廓是否重合，无论它们的本质怎样。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

两个总体轮廓平行时的重合轮廓的检验

对两个正态总体，若

$$T^2 = \mathbf{1}'(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)\left[\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\mathbf{1}'\mathbf{S}_p\mathbf{1}\right]^{-1}\mathbf{1}'(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)$$

$$= \left[\frac{\mathbf{1}'(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)}{\sqrt{\left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}\right)\mathbf{1}'\mathbf{S}_p\mathbf{1}}}\right]^2 > t^2_{n_1+n_2-2}\left(\frac{\alpha}{2}\right) = F_{1,n_1+n_2-2}(\alpha) \tag{6-63}$$

则我们在显著性水平 α 下拒绝假设

$$H_{02}: \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_1 = \mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_2 \text{（轮廓重合）}$$

若两总体的轮廓重合，则 $\mathbf{x}_{11}, \mathbf{x}_{12}, \cdots, \mathbf{x}_{1n_1}$ 与 $\mathbf{x}_{21}, \mathbf{x}_{22}, \cdots, \mathbf{x}_{2n_2}$ 均来自同一正态总体，下一步要研究是否所有变量具有相同的均值，因而其公共轮廓是水平的。

当 H_{01} 和 H_{02} 被接受时，可用 n_1+n_2 个观测值来估计其公共均值向量 $\boldsymbol{\mu}$，其估计量为：

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n_1+n_2}\left(\sum_{j=1}^{n_1}\mathbf{x}_{1j} + \sum_{j=1}^{n_2}\mathbf{x}_{2j}\right) = \frac{n_1}{(n_1+n_2)}\bar{\mathbf{x}}_1 + \frac{n_2}{(n_1+n_2)}\bar{\mathbf{x}}_2$$

如果其公共轮廓是水平的，即 $\mu_1=\mu_2=\cdots=\mu_p$，那么第 3 步的零假设可改写为

$$H_{03}: \mathbf{C}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$$

其中的 $\mathbf{C}$ 由式(6-61)给出，于是我们有如下检验：

两个总体轮廓重合时的水平轮廓检验

对两个正态总体，若

$$(n_1+n_2)\bar{\mathbf{x}}'\mathbf{C}'[\mathbf{CSC}']^{-1}\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}} > c^2 \tag{6-64}$$

则在显著性水平 α 下拒绝假设

$$H_{03}: \mathbf{C}\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0} \text{（轮廓水平）}$$

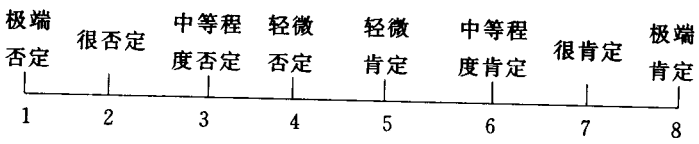
其中，$\mathbf{S}$ 为基于所有 n_1+n_2 个观测值的样本协方差阵，且

$$c^2 = \frac{(n_1+n_2-1)(p-1)}{(n_1+n_2-p+1)}F_{p-1,n_1+n_2-p+1}(\alpha)$$

例 6.12 （爱情与婚姻数据的轮廓分析）

作为有关爱情与婚姻问题的一个较大研究项目的一部分，社会学家哈特菲尔德调查了一些已婚成年人在他们婚姻方面的“贡献”与“结果”，以及他们爱情的“热度”与“可结伴性”。他请最近结婚的男性和女性回答下列问题，并按下图所示的 8 级分制打分：

1. 要是全面地考虑，你如何描述自己对婚姻的“贡献”程度？
2. 要是全面地考虑，你如何描述自己婚姻的“结果”？



同时请调查对象按下列 5 级分制回答如下问题：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

3. 你感觉你伴侣的爱情“热度”如何？

4. 你感觉你伴侣的爱情“可结伴”程度如何？

没有	很小	有些	很大	非常大
1	2	3	4	5

设

x_1＝对问题 1 的 8 级分制应答

x_2＝对问题 2 的 8 级分制应答

x_3＝对问题 3 的 5 级分制应答

x_4＝对问题 4 的 5 级分制应答

两个总体的定义如下：

总体 1＝已婚男性

总体 2＝已婚女性

总体均值分别为已婚男性及女性对上述 $p=4$ 个问题回答的平均分，假设这两个总体具有公共的协方差阵 $\mathbf{\Sigma}$，我们感兴趣的是男性总体与女性总体的轮廓是否一致？

对已婚男女各 30 名（$n_1=30, n_2=30$ 的两个样本）进行了调查，得出样本均值向量和融合的样本协方差阵如下：

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}6.833\\7.033\\3.967\\4.700\end{bmatrix},\quad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}6.633\\7.000\\4.000\\4.533\end{bmatrix}$$

（男性）　　（女性）

$$\mathbf{S}_p=\begin{bmatrix}0.606 & 0.262 & 0.066 & 0.161\\0.262 & 0.637 & 0.173 & 0.143\\0.066 & 0.173 & 0.810 & 0.029\\0.161 & 0.143 & 0.029 & 0.306\end{bmatrix}$$

样本均值向量作为样本轮廓如图 6.5 所示。

尽管回答均取整数值，它们虽然不是正态随机变量，但由于样本容量足够大，我们仍可采用正态理论的方法来处理。为检验轮廓的平行性（即 $H_{01}:\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_1=\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_2$），我们算出

$$\mathbf{C}\mathbf{S}_p\mathbf{C}'=\begin{bmatrix}-1 & 1 & 0 & 0\\0 & -1 & 1 & 0\\0 & 0 & -1 & 1\end{bmatrix}\cdot\mathbf{S}_p\cdot\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\1 & -1 & 0\\0 & 1 & -1\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}0.719 & -0.268 & -0.125\\-0.268 & 1.101 & -0.751\\-0.125 & -0.751 & 1.058\end{bmatrix}$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

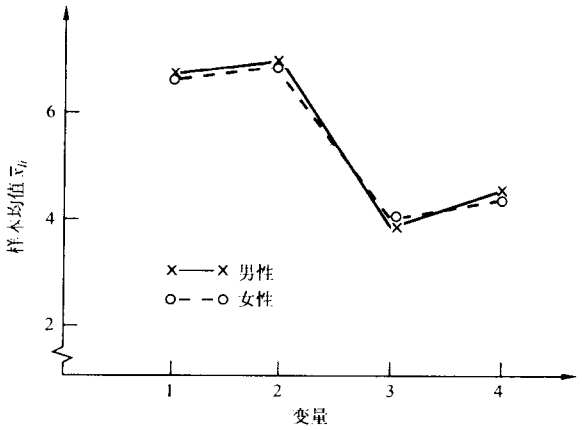


图 6.5　对爱情-婚姻问题的回答所构成的样本轮廓

$$\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)=\begin{bmatrix}-1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.200\\ 0.033\\ -0.033\\ 0.167\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-0.167\\ -0.066\\ 0.200\end{bmatrix}$$

因而

$$T^2=[-0.167,-0.066,0.200]\left(\frac{1}{30}+\frac{1}{30}\right)^{-1}\begin{bmatrix}0.719 & -0.268 & -0.125\\ -0.268 & 1.101 & -0.751\\ -0.125 & -0.751 & 1.058\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}-0.167\\ -0.066\\ 0.200\end{bmatrix}$$

$$=15\times 0.067=1.005$$

此外，对 $\alpha=0.05$，$c^2=[(30+30-2)(4-1)/(30+30-4)]F_{3,56}(0.05)=3.11\times 2.8=8.7$。因为 $T^2=1.005<8.7$，我们得出结论：两个总体的平行轮廓假设是可以接受的。由图 6.5 可以看出，这一结论并不奇怪。

在接受平行轮廓的假设之后，我们要检验轮廓的相合性，即检验 $H_{02}:\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_1=\mathbf{1}'\boldsymbol{\mu}_2$（轮廓重合）。为此需要完成下列计算：

$\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2$ 中元素之和 $=\mathbf{1}'(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)=0.367$

$\mathbf{S}_p$ 中元素之和 $=\mathbf{1}'\mathbf{S}_p\mathbf{1}=4.207$

利用式(6-63)得到

$$T^2=\left[\frac{0.367}{\sqrt{\left(\frac{1}{30}+\frac{1}{30}\right)\times 4.027}}\right]^2=0.501$$

对 $\alpha=0.05$ 有 $F_{1,58}(0.05)=4.0$ 和 $T^2=0.501<F_{1,58}(0.05)=4.0$，所以我们不能拒绝轮廓的相合性假设，即对所考虑的四个问题，男性与女性的回答并没有差异。

现在可以检验这两个轮廓的水平性。但由于问题 1 和 2 的衡量尺度是 1～8 分，而问题 3 与 4 的衡量尺度则是 1～5 分，所以在本例中这种检验是没有意义的。尺度的不相容性使水平轮廓的检验失去意义，这说明为了给出一个完整的轮廓分析，需要有相似的测量值。

当样本容量较小时，轮廓分析依赖于正态性假定。用第 4 章讨论的方法，可用原始观

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

测值 $\mathbf{x}_{lj}$或对照观测值 $\mathbf{Cx}_{lj}$，对这个假定进行检验。

对于两个以上的总体，其轮廓分析可仿照两总体的做法去完成。事实上，就连那些比较的量度也可从上面所讨论的量度通过类比得出(见[13])。

6.8 重复测量设计和生长曲线

如前所述，**重复测量**是针对在不同的时间和地点，对同一对象(个体)观测其同一特征这种情况来说的。

(a) 一个个体的观测值可与各种不同的处理相对应，比如在例 6.2 中，对每一只狗，可在 2×2 种处理组合下分别测量其心跳的间隔时间。当同一个体的诸响应相关时，还需比较它们的处理。

(b) 一种处理可用于每一个个体，并在一个时间段内观测一个特征。例如，我们可以测量一只刚出生的幼狗的体重，而后每过一月测量一次，这样就能画出描绘一只典型的狗生长轨迹的曲线。我们在本书中称这条曲线为**生长曲线**。

当某些个体接受一种处理而另一些个体接受另一种处理时，就需要对这两种处理的生长曲线进行比较。

为说明普特霍夫与罗伊[15]所提出的生长曲线模型，我们考虑老年妇女主尺骨中的钙含量问题。对于控制组，除了测试开始时记录的数据之外，表 6.5 中还给出了经过 1 年、2 年和 3 年后钙含量数据。对同一个体(即测试对象)，由光子吸收测量术获得的测试数据是相关的，但不同个体间的测试数据应相互独立。这种模型假定每一个个体均有相同的协方差矩阵 $\mathbf{\Sigma}$。与一元方法不同的是，该模型并不要求四次测量具有相同的方差。由 4 个样本均值($\bar{x}_1,\bar{x}_2,\bar{x}_3,\bar{x}_4$)构造的轮廓概要地描述了特征的生长过程，即钙随时间损失的过程。问题是，这种生长模式是否可用时间的多项式来表达？

表 6.5 被测对象主尺骨中的钙含量

被测个体	起初	1 年后	2 年后	3 年后
1	87.3	86.9	86.7	75.5
2	59.0	60.2	60.0	53.6
3	76.7	76.5	75.7	69.5
4	70.6	76.1	72.1	65.3
5	54.9	55.1	57.2	49.0
6	78.2	75.3	69.1	67.6
7	73.7	70.8	71.8	74.6
8	61.8	68.7	68.2	57.4
9	85.3	84.4	79.2	67.0
10	82.3	86.9	79.4	77.4
11	68.6	65.4	72.3	60.8
12	67.8	69.2	66.3	57.9
13	66.2	67.0	67.0	56.2
14	81.0	82.3	86.8	73.9
15	72.3	74.6	75.3	66.1
均值	72.38	73.29	72.47	64.79

资料来源：数据经 Everett Smith 许可使用。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在时刻 $t_1, t_2, \cdots, t_p$，对所有个体进行 p 次测量后，波托夫-罗伊的二次生长模型就变为

$$E[\mathbf{X}] = E\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 + \beta_1 t_1 + \beta_2 t_1^2 \\ \beta_0 + \beta_1 t_2 + \beta_2 t_2^2 \\ \vdots \\ \beta_0 + \beta_1 t_p + \beta_2 t_p^2 \end{bmatrix}$$

其中第 i 个均值为 t_i 的二次函数。

通常需要对各组进行比较，表 6.6 给出第二组（姑称之为处理组）妇女（即接受一项饮食调节和定期锻炼计划的老年妇女）主尺骨中的钙含量测量值。

表 6.6　主尺骨中的钙含量（处理组）

被测个体	起初	1 年后	2 年后	3 年后
1	83.8	85.5	86.2	81.2
2	65.3	66.9	67.0	60.6
3	81.2	79.5	84.5	75.2
4	75.4	76.7	74.3	66.7
5	55.3	58.3	59.1	54.2
6	70.3	72.3	70.6	68.6
7	76.5	79.9	80.4	71.6
8	66.0	70.9	70.3	64.1
9	76.7	79.0	76.9	70.3
10	77.2	74.0	77.8	67.9
11	67.3	70.7	68.9	65.9
12	50.3	51.4	53.6	48.0
13	57.7	57.0	57.5	51.5
14	74.3	77.7	72.6	68.0
15	74.0	74.7	74.5	65.7
16	57.3	56.0	64.7	53.0
均值	69.29	70.66	71.18	64.53

资料来源：数据经 Everett Smith 许可使用。

当一项研究中涉及到多个处理组时，就需要像单因子 MANOVA 模型那样增加一个角标。令 $\mathbf{X}_{l1}, \mathbf{X}_{l2}, \cdots, \mathbf{X}_{ln_l}$ 为第 l 组中 n_l 个个体的 n_l 个测量值向量（$l=1, \cdots, g$）。

假定：所有 $\mathbf{X}_{lj}$ 均相互独立，且有相同的协方差矩阵。

在二次生长模型下，均值向量为

$$E[\mathbf{X}_{lj}] = \begin{bmatrix} \beta_{l0} + \beta_{l1} t_1 + \beta_{l2} t_1^2 \\ \beta_{l0} + \beta_{l1} t_2 + \beta_{l2} t_2^2 \\ \vdots \\ \beta_{l0} + \beta_{l1} t_p + \beta_{l2} t_p^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ 1 & t_2 & t_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_p & t_p^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{l0} \\ \beta_{l1} \\ \beta_{l2} \end{bmatrix} = \mathbf{B}\boldsymbol{\beta}_l$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

其中
$$\mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & t_1 & t_1^2\\ 1 & t_2 & t_2^2\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ 1 & t_p & t_p^2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\beta}_l=\begin{bmatrix}\beta_{l0}\\ \beta_{l1}\\ \beta_{l2}\end{bmatrix} \tag{6-65}$$

若一个 q 次多项式适合此生长数据，则

$$\mathbf{B}=\begin{bmatrix}1 & t_1 & \cdots & t_1^q\\ 1 & t_2 & \cdots & t_2^q\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ \cdot & \cdot & & \cdot\\ 1 & t_p & \cdots & t_p^q\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\beta}_l=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta}_{l0}\\ \boldsymbol{\beta}_{l1}\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\\ \boldsymbol{\beta}_{lq}\end{bmatrix} \tag{6-66}$$

在多元正态的假定下，$\boldsymbol{\beta}_l$ 的极大似然估计量为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_l=(\mathbf{B}'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}'\mathbf{S}_p^{-1}\cdot\overline{\mathbf{X}}_l,\ l=1,2,\cdots,g \tag{6-67}$$

其中，$\mathbf{S}_p=\frac{1}{(N-g)}[(n_1-1)\mathbf{S}_1+\cdots+(n_g-1)\mathbf{S}_g]=\frac{1}{N-g}\mathbf{W}$，$(N=\sum_{l=1}^{g}n_l)$ 为公共协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的融合估计量。该极大似然估计量的协方差的估计量为

$$\widehat{\mathrm{Cov}}\ (\hat{\boldsymbol{\beta}}_l)=\frac{k}{n_l}(\mathbf{B}'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{B})^{-1},\ l=1,2,\cdots,g \tag{6-68}$$

其中　$k=(N-g)(N-g-1)/(N-g-p+q)(N-g-p+q+1)$。

由于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_l$ 与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_h$ 相互独立，$l\neq h$，故它们的协方差为 $\mathbf{0}$。

可以正式地检验 q 次多项式是否合适。模型不加限制就能适合，其误差的平方与交叉乘积之和恰好是自由度为 $N-g$ 的 $\mathbf{W}$ 中的组成部分。在 q 次多项式条件下，误差的平方与交叉乘积之和

$$\mathbf{W}_q=\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{X}_{lj}-\mathbf{B}\hat{\boldsymbol{\beta}}_l)(\mathbf{X}_{lj}-\mathbf{B}\hat{\boldsymbol{\beta}}_l)' \tag{6-69}$$

的自由度为 $n_g-g+p-q-1$。“q 次多项式是合适的”这一零假设的似然比检验，可建立在威尔克斯 Λ 统计量

$$\Lambda^*=\frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{W}_q|} \tag{6-70}$$

之上。在多项式生长模型中，对 g 组中的每一组，均由 $q+1$ 项取代 p 个均值，故有 $(p-q-1)g$ 个参数。对大样本情形，若

$$-\left(N-\frac{1}{2}(p-q-2-g)\right)\ln\Lambda^*>\chi^2_{(p-q-1)g}(\alpha) \tag{6-71}$$

则在水平 α 下拒绝“多项式是合适的”这一零假设。

例 6.13　（拟合钙损失的二次生长曲线）

参看表 6.5 与表 6.6 中的数据。试拟合二次生长模型。

用计算机可算出

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$[\hat{\boldsymbol{\beta}}_1, \hat{\boldsymbol{\beta}}_2] = \begin{bmatrix} 73.0701 & 70.1387 \\ 3.6444 & 4.0900 \\ -2.0274 & -1.8534 \end{bmatrix}$$

这样估计出的生长曲线为

原先组：$73.07 + 3.64t - 2.03t^2$
(2.58) (0.83) (0.28)

处理组：$70.14 + 4.09t - 1.85t^2$
(2.50) (0.80) (0.27)

其中

$$\mathbf{B}'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 93.1744 & -5.8368 & 0.2184 \\ -5.8368 & 9.5699 & -3.0240 \\ 0.2184 & -3.0240 & 1.1051 \end{bmatrix}$$

根据式(6-68)，参数估计值下方的标准误差可通过将其对角元素除以 n_l 再开方后得出。

对估计值和标准误差的考察表明需要 t^2 项。对这两个组都预测了 3 年后的钙损失量，而且发现这两组之间似乎没有任何实质性差别。

检验"二次多项式生长模型是合适的"这一零假设所用的威尔克斯 Λ 检验统计量为

$$\Lambda = \frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{W}_2|} = \frac{\left|\begin{bmatrix} 2726.282 & 2660.749 & 2369.308 & 2335.912 \\ 2660.749 & 2756.009 & 2343.514 & 2327.961 \\ 2369.308 & 2343.514 & 2301.714 & 2098.544 \\ 2335.912 & 2327.961 & 2098.544 & 2277.452 \end{bmatrix}\right|}{\left|\begin{bmatrix} 2781.017 & 2698.589 & 2363.228 & 2362.253 \\ 2698.589 & 2832.430 & 2331.235 & 2381.160 \\ 2363.228 & 2331.235 & 2303.687 & 2089.996 \\ 2362.253 & 2381.160 & 2089.996 & 2314.485 \end{bmatrix}\right|} = 0.7627$$

对 $\alpha=0.01$，由于

$$-\left[N - \frac{1}{2}(p - q - 2 + g)\right]\ln\Lambda^* = -\left[31 - \frac{1}{2}(4 - 2 - 2 + 2)\right]\ln 0.7627$$
$$= 8.15 < \chi^2_{(4-2-1)\times 2}(0.01) = 9.21$$

故在显著性水平 $\alpha=0.01$ 下我们不能拒绝二次多项式拟合的合适性。但由于 P 值小于 0.05，有迹象表明二次多项式拟合不是非常好。

利用轮廓分析方法，我们不用对二次多项式损失施加限制，就能检验主尺骨中钙量损失的轮廓的平行性和相合性。

对于比单因子 MANOVA 更一般的实验设计，波托夫与罗伊的生长曲线模型也适用。但此时 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_l$ 不再由式(6-67)给出，而且其协方差矩阵的表达式远比式(6-68)复杂。至于更多的例子和进一步的检验，建议读者参阅[12]。

对我们所考虑的模型还有许多改进方法，其中包括：

(a) 解除对多项式生长的限制。采用非线性参数模型或者甚至采用非参数样条分析。

(b) 限定协方差阵取某种特殊形式，使得对相同的个体有等相关的响应。

(c) 对相同的个体，在某一时段观测一个以上的响应变量，这就导致生长曲线模型的多元形式。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

6.9 对分析多元模型的透视和建议

我们强调指出，对多个指标特征，控制作出任何错误决策的总概率是很重要的。正如本章中的那些例子所指明的那样，在检验两种或两种以上处理的相等性时，这点尤为重要。对具有单一 P 值的检验问题，作一个多元检验要比完成大量一元检验更可取。这一结果告诉我们：通过变量分析和分批进行的办法去接近某一个变量究竟是否值得。

我们建议采用一个多元检验，而非 p 个一元检验，因为下一个例子将说明，一元检验忽略了一些重要的信息，因而可能给出误导的结论。

例 6.14 （对均值差比较多元检验与一元检验）

假定从两个组分别随机选取 10 个实验单元，并收集两个变量 X_1 与 X_2 的测量值。下面列出这两个变量的假想数据，这些数据的散布图和边际点图如图 6.6 所示。

x_1	x_2	组别
5.0	3.0	1
4.5	3.2	1
6.0	3.5	1
6.0	4.6	1
6.2	5.6	1
6.9	5.2	1
6.8	6.0	1
5.3	5.5	1
6.6	7.3	1
7.3	6.5	1
4.6	4.9	2
4.9	5.9	2
4.0	4.1	2
3.8	5.4	2
6.2	6.1	2
5.0	7.0	2
5.3	4.7	2
7.1	6.6	2
5.8	7.8	2
6.8	8.0	2

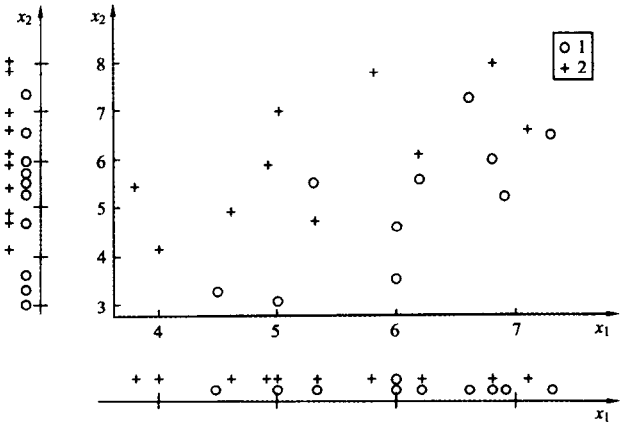


图 6.6 两组数据的散布图和边际点图

从水平的边际点图可以清楚看出，这两组数据在 x_1 值中有较多的重迭。类似地，垂直的边际点图显示出两组数据在 x_2 值中存在较多重迭。这些散布图暗示，对每一个组来说，两个变量之间都有相当强的正相关，而且虽然有重迭现象发生，但组 1 的测量数据大多位于组 2 的数据的东南方。

设 $\boldsymbol{\mu}_1'=[\mu_{11},\mu_{12}]$ 为第一组的总体均值向量，$\boldsymbol{\mu}_2'=[\mu_{21},\mu_{22}]$ 为第二组的总体均值向量，利用 x_1 的观测值，由一元方差分析知 $F=2.46$，且其自由度为 $v_1=1$ 和 $v_2=18$。故在任一合理的显著性水平下 $[F_{1,18}(0.10)=3.01]$，我们不能拒绝假设 $H_0:\mu_{11}=\mu_{21}$。而利用 x_2 的观测值，由一元方差分析知 $F=2.68$，且其自由度为 $v_1=1$ 和 $v_2=18$，同样在任一合理的显著性水平下，我们不能拒绝假设 $H_0:\mu_{12}=\mu_{22}$。故一元检验表明两组总体的均值分量间无显著差异，因而得出 $\boldsymbol{\mu}_1=\boldsymbol{\mu}_2$ 的结论。

另一方面，如果我们用霍特林 T^2 来检验均值向量的相等性，则可以发现 $T^2=17.29$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$>c^2=\frac{18\times 2}{7}F_{2,17}(0.01)=2.118\times 6.11=12.94$，因此，在显著性水平 1%下，我们拒绝 $H_0:\mu_1=\mu_2$。多元检验考虑了每组的两个测量值之间的正相关性，而这一重要信息在一元检验中却不幸被忽略了。上述 T^2 检验等价于式(6-38)的 MANOVA 检验。

例 6.14 阐明了多元检验与相应一元检验之间的相对功效，用例 6.1 的数据同样有这种情形出现。

当从多个总体抽取随机样本时(回顾 6.4 节的单因子 MANOVA)，多元检验是以下列矩阵为依据：

$$\mathbf{W}=\sum_{l=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_l}(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)(\mathbf{x}_{lj}-\bar{\mathbf{x}}_l)' \text{ 与 } \mathbf{B}=\sum_{l=1}^{g}n_l(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_l-\bar{\mathbf{x}})'$$

在整个这一章中，我们使用的检验统计量为

$$\text{威尔克斯 } \Lambda \text{ 统计量} \quad \Lambda^*=\frac{|\mathbf{W}|}{|\mathbf{B}+\mathbf{W}|}$$

它等价于似然比检验。但在许多统计软件包的输出中，还经常会遇到下面三个多元检验统计量：

劳雷-霍特林迹统计量$=\mathrm{tr}[\mathbf{BW}^{-1}]$

皮莱迹统计量$=\mathrm{tr}[\mathbf{B}(\mathbf{B}+\mathbf{W})^{-1}]$

罗伊最大根统计量$=\mathbf{W}(\mathbf{B}+\mathbf{W})^{-1}$的最大特征根

当样本容量非常大时，所有这四种检验方法几乎是等价的。对中等大小的样本容量，所有比较均以通过模拟来研究的少数最必要的案例为依据。从到此刻为止所报导的那些模拟中可知，前三种检验具有相似的功效，而罗伊最大根检验却与它们有差别，仅当存在一个非零特征根时，它的功效才最佳，同时也是最大。这接近于下面这种情形：较大的差别恰好存在于某一特征指标中，即存在于一个组与其余各组之间。这里还有某些迹象表明，皮莱迹检验对非正态性的适应能力要比其余方法稍强些。但是，当残差具有非正态性时，我们还是建议先对原始数据作变换。

所有这四个检验统计量均可应用于双因子情形，甚至应用于更为复杂的 MANOVA 中，详细的讨论将在第 7 章的多元回归模型中给出。

当且仅当多元检验表明有差异或者同零假设有偏离时，我们才较深入地探查其原因。我们建议对所有组对及所有特征计算庞弗罗尼区间。典型的情况是：由置信椭球的投影确定的联合置信区间太大。单一区间也许对值得进一步研究的那些差异有启发性，但就现有数据而论，尚不能将这些区间当成作出“存在差异”这种结论的证据。我们就本章提出的比较各种处理的方法作一小结。第一步是利用目测法和计算方法检查一下数据，看看是否存在离群值。

对各种处理进行多元比较的策略

1. **识别离群值**。对数据进行分批检查，看有无离群值，同时对来自任何经过拟合的模型的所有残差向量进行检查，看有无离群值。

2. **对假设完成多元检验**。我们选择似然比检验，它等价于威尔克斯 Λ 检验。

3. **计算庞弗罗尼联合置信区间**。如果多元检验揭示存在某种差异，则对所有的组对或处理以及所有的特征指标，计算它们的庞弗罗尼置信区间。如果所有差异均不显著，那就对包含差异的较大的响应集与响应对之和求庞弗罗尼区间。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

对上面提出的策略必须注意一点，即差异可能仅出现在许多特征指标中的某一个之中。此外，差异仅出现在很少的一些处理组合之中。于是，这少数起作用的差异有可能消失在所有不起作用的差异之中。也就是说，整体检验可能显示不显著，而在对某一特定的起作用变量作一元检验时，就会发现有差异存在。避免出现这种情况的方法是要构造一个好的实验设计。当一个特定变量预期会产生差异时，就设计一个有效的实验，使它不把太多的预期不会显示诸处理之间差异的其他变量包括进去。

练　　习

6.1　利用例 6.1 中的污水数据及结论，构造并画出均值向量差 $\boldsymbol{\delta}$ 的 95%联合置信区域。注意到 $\boldsymbol{\delta}=\mathbf{0}$ 这个点落在 95%置信区域之外，试问这一结果是否与例 6.1 中考虑的假设 $H_0:\boldsymbol{\delta}=\mathbf{0}$ 的检验结果一致？请作解释。

6.2　利用例 6.1 提供的信息，构造均值差向量 $\boldsymbol{\delta}$ 诸分量的 95%庞弗罗尼联合置信区间，并将这些区间的宽度与例 6.1 中所给的联合置信区间的宽度作比较。

6.3　与表 6.1 中的样本 8 相对应的数据似乎大得异常。摒弃样本 8，构造均值差向量 $\boldsymbol{\delta}$ 的 95%联合置信域以及该向量诸分量的 95%庞弗罗尼联合置信区间，结论是否与 $H_0:\boldsymbol{\delta}=\mathbf{0}$ 的检验相一致？试作讨论。这一离群数据是否会使这些数据的分析产生差异？

6.4　参照例 6.1

(a) 对例 6.1 中各对观测值作对数变换后，重新进行分析。

(b) 对变换后的变量，构造其均值差向量 $\boldsymbol{\delta}$ 诸分量的 95%庞弗罗尼联合置信区间。

(c) 对变换后数据的差值向量而言，关于二元正态分布这一假定是否有可能遭到破坏？

6.5　一名研究人员用三个指标来衡量心脏病发作的严重程度，从某医院急诊室的 $n=40$名心脏病患者测得这些指标，其样本均值向量与协方差阵分别为

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}46.1\\57.3\\50.4\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}101.3 & 63.0 & 71.0\\63.0 & 80.2 & 55.6\\71.0 & 55.6 & 97.4\end{bmatrix}$$

(a) 对每个患者均测量这三个指标。试利用式(6-16)在 $\alpha=0.05$ 水平下检验三个均值指标的相等性。

(b) 利用 95%联合置信区间，判断各对平均指标之间有无差异[见式(6-18)]。

6.6　利用练习 6.8 中处理 2 和处理 3 的数据：

(a) 计算 $\mathbf{S}_p$。

(b) 用双样本方法以 $\alpha=0.01$ 检验 $H_0:\boldsymbol{\mu}_2-\boldsymbol{\mu}_3=\mathbf{0}$。

(c) 构造 $\mu_{2i}-\mu_{3i}, i=1,2$ 的 99%联合置信区间。

6.7　利用例 6.4 中的电力需求数据的汇总统计数字计算 T^2，并检验假设 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$。(假定 $\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2, \alpha=0.05$)。另外，确定对拒绝 H_0 起关键作用的均值分量的线性组合。

6.8　对三种处理收集了两种响应的观测值，观测值向量 $\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}$ 为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

处理 1：$\begin{bmatrix}6\\7\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}5\\9\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}8\\6\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}4\\9\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}7\\9\end{bmatrix}$

处理 2：$\begin{bmatrix}3\\3\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}1\\6\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}2\\3\end{bmatrix}$

处理 3：$\begin{bmatrix}2\\3\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}5\\1\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}3\\1\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}2\\3\end{bmatrix}$

(a) 像式(6-35)一样，把观测值分解为总平均、处理效应和残差三个部分。对每个变量构造相应的矩阵(见例 6.8)。

(b) 利用(a)中的信息，构造单因子 MANOVA 表。

(c) 计算威尔克斯 Λ 统计量 Λ^*，并利用表 6.3 检验处理效应(取 $\alpha=0.01$)。再利用带巴特利特修正的 χ^2 近似重新检验上述假设[见式(6-39)]，并比较这两个结论。

6.9　用式(6-13)的对照阵 $\mathbf{C}$，验证式(6-14)中的关系式：$\mathbf{d}_i=\mathbf{C}\mathbf{x}_j$，$\mathbf{d}=\mathbf{C}\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\mathbf{S}_d=\mathbf{CSC}'$。

6.10　考虑由式(6-30)给出的观测值 x_{lj} 的一元单因子分解式，证明均值向量 $\bar{x}$ 恒垂直于处理效应向量 $(\bar{x}_1-\bar{x})\mathbf{u}_1+(\bar{x}_2-\bar{x})\mathbf{u}_2+\cdots+(\bar{x}_g-\bar{x})\mathbf{u}_g$，此处

$$\mathbf{u}_1=\begin{bmatrix}1\\ \vdots\\ 1\\ 0\\ \vdots\\ 0\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix}\left.\vphantom{\begin{matrix}1\\ \vdots\\ 1\end{matrix}}\right\}n_1,\quad \mathbf{u}_2=\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ 1\\ \vdots\\ 1\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix}\left.\vphantom{\begin{matrix}1\\ \vdots\\ 1\end{matrix}}\right\}n_2\cdots,\mathbf{u}_g=\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ 0\\ \vdots\\ 0\\ 1\\ \vdots\\ 1\end{bmatrix}\left.\vphantom{\begin{matrix}1\\ \vdots\\ 1\end{matrix}}\right\}n_g$$

6.11　考虑两个具有公共协方差矩阵的正态总体，我们可用两独立样本的融合协方差阵来估计它们的公共协方差阵，这一估计方法还得到似然估计法的支持。设 $L(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma})$ 为来自两个正态总体 $N_p(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\Sigma})$ 和 $N_p(\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma})$ 的样本容量分别为 n_1 和 n_2 的独立随机样本的似然函数，试证 $L(\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2,\boldsymbol{\Sigma})$ 的最大值在 $\hat{\boldsymbol{\mu}}_1=\bar{\mathbf{x}}$，$\hat{\boldsymbol{\mu}}_2=\bar{\mathbf{x}}_2$ 及

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\frac{1}{n_1+n_2}[(n_1-1)\mathbf{S}_1+(n_2-1)\mathbf{S}_2]=\left(\frac{n_1+n_2-2}{n_1+n_2}\right)\mathbf{S}_p$$

时达到。

6.12　(已知轮廓平行时对线性轮廓的检验。)设 $\boldsymbol{\mu}_1'=[\mu_{11},\mu_{12},\cdots,\mu_{1p}]$，$\boldsymbol{\mu}_2'=[\mu_{21},\mu_{22},\cdots,\mu_{2p}]$ 分别为总体 1 与总体 2 的 p 个处理的响应均值，假定这两个均值向量给出的轮廓是平行的。

(a) 证明“轮廓是线性的”这一假设可写为

$$H_0:(\mu_{1i}+\mu_{2i})-(\mu_{1i-1}+\mu_{2i-1})=(\mu_{1i-1}+\mu_{2i-1})-(\mu_{1i-2}+\mu_{2i-2}),\quad i=3,\cdots,p$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

或 $H_0:\mathbf{C}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)=\mathbf{0}$，其中

$$\mathbf{C}=\begin{bmatrix}1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1\end{bmatrix}$$

(b) 通过类似于得求式(6-62)的讨论可得：若

$$T^2=(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{C}'\left[\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right)\mathbf{C}\mathbf{S}_p\mathbf{C}'\right]^{-1}\mathbf{C}(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)>c^2$$

则在显著性水平 α 下拒绝 $H_0:\mathbf{C}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)=\mathbf{0}$，其中

$$c^2=\frac{(n_1+n_2-2)(p-2)}{n_1+n_2-p+1}F_{p-2,n_1+n_2-p+1}(\alpha)$$

设 $n_1=30,n_2=30,\bar{\mathbf{x}}_1'=[6.4,6.8,7.3,7.0],\bar{\mathbf{x}}_2'=[4.3,4.9,5.3,5.1]$，且

$$\mathbf{S}_p=\begin{bmatrix}0.61 & 0.26 & 0.07 & 0.16\\ 0.26 & 0.64 & 0.17 & 0.14\\ 0.07 & 0.17 & 0.81 & 0.03\\ 0.16 & 0.14 & 0.03 & 0.31\end{bmatrix}$$

假定两个轮廓平行，试检验这两轮廓是否为线性(取 $\alpha=0.05$)。

6.13 (无重复的双因子 MANOVA)考虑以下面的双因子表形式给出的(注意，对因子水平的每一种组合中仅有一个观测值向量响应 x_1 和 x_2 的观测值)：

		因子 2			
		水平 1	水平 2	水平 3	水平 4
因子 1	水平 1	$\begin{bmatrix}6\\8\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}4\\6\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}8\\12\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}2\\6\end{bmatrix}$
	水平 2	$\begin{bmatrix}3\\8\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-3\\2\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}4\\3\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-4\\3\end{bmatrix}$
	水平 3	$\begin{bmatrix}-3\\2\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-4\\-5\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}3\\-3\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-4\\-6\end{bmatrix}$

无重复的双因子 MANOVA 模型为

$$\mathbf{X}_{lk}=\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{\tau}_l+\boldsymbol{\beta}_k+\mathbf{e}_{lk};\quad \sum_{l=1}^{g}\boldsymbol{\tau}_l=\sum_{k=1}^{b}\boldsymbol{\beta}_k=\mathbf{0}$$

其中 $\mathbf{e}_{lk}$ 与独立 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$ 随机向量。

(a) 与例 6.8 类似，将两变量中的每一个变量的观测值分解为

$$x_{lk}=\bar{x}+(\bar{x}_{l\cdot}-\bar{x})+(\bar{x}_{\cdot k}-\bar{x})+(x_{lk}-\bar{x}_{l\cdot}+\bar{x}_{\cdot k}+\bar{x})$$

对每一个响应，这个分解会产生几个 3×4 矩阵，这里 $\bar{x}$ 为总平均，$\bar{x}_{l\cdot}$ 为因子 1 的第 l 个水平下的平均值，而 $\bar{x}_{\cdot k}$ 为因子 2 的第 k 个水平下的平均。

(b) 把(a)中矩阵的每一行看成一个串成的“长”向量，并计算平方和

$$\mathrm{SS}_{总}=\mathrm{SS}_{平均}+\mathrm{SS}_{因子1}+\mathrm{SS}_{因子2}+\mathrm{SS}_{残差}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

及交叉乘积和

$$SCP_{总} = SCP_{平均} + SCP_{因子1} + SCP_{因子2} + SCP_{残差}$$

于是，得到自由度分别为 $gb-1$，$g-1$，$b-1$ 及 $(g-1)(b-1)$ 的矩阵 $SSP_{总}$，$SSP_{因子1}$，$SSP_{因子2}$ 及 $SSP_{残差}$。

(c) 把(b)中的计算概括在 MANOVA 表中。

提示：$n=1$ 时，比较因子及因子间交互作用的双因子 MANOVA 表与我们的 MANOVA 表一致。注意，当 $n=1$ 时，一般双因子 MANOVA 表中的 $SSP_{残差}$ 为自由度为 0 的零矩阵。故交互作用的平方与交叉乘积和矩阵就成了残差的平方与交叉乘积矩阵之和。

(d) 给定(c)中的结果，检验因子 1 和因子 2 的主效应(取 $\alpha=0.05$)。

提示：利用式(6-56)和式(6-58)的结论，用 $(g-1)(b-1)$ 代替其中的 $gb(n-1)$。

注：检验要求 $p\leqslant(g-1)(b-1)$，故 $SSP_{残差}$ 为正定阵(概率为 1)。

6.14　重复练习 6.13 中的试验，得到如下的数据：

		因子 2			
		水平 1	水平 2	水平 3	水平 4
因子 1	水平 1	$\begin{bmatrix}14\\8\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}6\\2\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}8\\2\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}16\\-4\end{bmatrix}$
	水平 2	$\begin{bmatrix}1\\6\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}5\\12\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0\\15\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}2\\7\end{bmatrix}$
	水平 3	$\begin{bmatrix}3\\-2\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-2\\7\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-11\\1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-6\\6\end{bmatrix}$

(a) 利用这些数据，将观测值向量中两个测量值分别分解成如下形式：

$$x_{lk} = \bar{x} + (\bar{x}_{l\cdot} - \bar{x}) + (\bar{x}_{\cdot k} - \bar{x}) + (x_{lk} - \bar{x}_{l\cdot} - \bar{x}_{\cdot k} + \bar{x})$$

其中，$\bar{x}$ 为总平均，$\bar{x}_{l\cdot}$ 为因子 1 的第 l 个水平下的观测值平均，而 $\bar{x}_{\cdot k}$ 为因子 2 的第 k 个水平下的观测值平均。

(b) 结合前面的数据和例 6.13 中的数据，完成必要的计算，构造出双因子 MANOVA 表。

(c) 结定(b)的结论，检验交互效应是否存在。若不存在，检验因子 1 和因子 2 的主效应。采用似然比检验法(取 $\alpha=0.05$)。

(d) 若主效应存在，而交互效应不存在，试构造因子效应参数的分量差的 95%庞弗罗尼联合置信区间，并用以考察主效应的本质。

6.15　参看例 6.11。

(a) 取 $\alpha=0.05$，对因子 1 和因子 2 的效应作近似的 χ^2(似然比)检验。并与例 6.11 中精确 F 检验的结论作比较。解释两者的差别。

(b) 对三个响应中的每一对响应，试用式(6-59)构造因子 1 的诸效应参数之差的 95%联合置信区间。对因子 2 的效应参数也作同样的计算。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

下面的练习需要使用计算机

6.16　对 30 块木板中的每一块的硬度指标的四次测量结果列于表 4.3(参见例 4.14),对一块给定的木板,测量可重复进行。假设硬度的测量值由 4 个处理产生,用重复测量设计中的方法检验处理的相等性(取 $\alpha=0.05$),并对均值水平的对照构造 95%联合置信区间,此处均值水平代表动态测量值与静态测量值的比较。

6.17　朱利可和莫西曼[11]曾对彩龟的大小与形状之间的关系进行过研究。表 6.7 列出了 24 只雄龟壳与 24 只雌龟壳的测量值。

表 6.7　彩龟的龟壳测量值(毫米)

雌龟			雄龟		
长(x_1)	宽(x_2)	高(x_3)	长(x_1)	宽(x_2)	高(x_3)
98	81	38	93	74	37
103	84	38	94	78	35
103	86	42	96	80	35
105	86	42	101	84	39
109	88	44	102	85	38
123	92	50	103	81	37
123	95	46	104	83	39
133	99	51	106	83	39
133	102	51	107	82	38
133	102	51	112	89	40
134	100	48	113	88	40
136	102	49	114	86	40
138	98	51	116	90	43
138	99	51	117	90	41
141	105	53	117	91	41
147	108	57	119	93	41
149	107	55	120	89	40
153	107	56	120	93	44
155	115	63	121	95	42
155	117	60	125	93	45
158	115	62	127	96	45
159	118	63	128	95	45
162	124	61	131	95	46
177	132	67	135	106	47

(a) 取 $\alpha=0.05$,试检验两总体均值向量是否相等。

(b) 如果(a)中的假设被拒绝,试找出导致拒绝零假设 H_0 的均值分量的线性组合。

(c) 求出均值分量差的联合置信区间,并与其庞弗罗尼区间进行比较。

提示:考虑对原始数据作对数变换。

6.18　在一项以牛奶从农场运到奶制品厂的运费问题为内容的研究工作的第一阶

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

段，考虑以下三项费用：X_1=燃料费，X_2=车辆维修费，X_3=资本。这些费用均以每英里的费用计量，表 6.8 中列出了 $n_1=36$ 辆汽油车和 $n_2=23$ 辆柴油车的测量数据。

表 6.8　牛奶运输费用数据

汽油卡车			柴油卡车		
x_1	x_2	x_3	x_1	x_2	x_3
16.44	12.43	11.23	8.50	12.26	9.11
7.19	2.70	3.92	7.42	5.13	17.15
9.92	1.35	9.75	10.28	3.32	11.23
4.24	5.78	7.78	10.16	14.72	5.99
11.20	5.05	10.67	12.79	4.17	29.28
14.25	5.78	9.88	9.60	12.72	11.00
13.50	10.98	10.60	6.47	8.89	19.00
13.32	14.27	9.45	11.35	9.95	14.53
29.11	15.09	3.28	9.15	2.94	13.68
12.68	7.61	10.23	9.70	5.06	20.84
7.51	5.80	8.13	9.77	17.86	35.18
9.90	3.63	9.13	11.61	11.75	17.00
10.25	5.07	10.17	9.09	13.25	20.66
11.11	6.15	7.61	8.53	10.14	17.45
12.17	14.26	14.39	8.29	6.22	16.38
10.24	2.59	6.09	15.90	12.90	19.09
10.18	6.05	12.14	11.94	5.69	14.77
8.88	2.70	12.23	9.54	16.77	22.66
12.34	7.73	11.68	10.43	17.65	10.66
8.51	14.02	12.01	10.87	21.52	28.47
26.16	17.44	16.89	7.13	13.22	19.44
12.95	8.24	7.18	11.88	12.18	21.20
16.93	13.37	17.59	12.03	9.22	23.09
14.70	10.78	14.58			
10.32	5.16	17.00			
8.98	4.49	4.26			
9.70	11.59	6.83			
12.72	8.63	5.59			
9.49	2.16	6.23			
8.22	7.95	6.72			
13.70	11.22	4.91			
8.21	9.85	8.17			
15.86	11.42	13.06			
9.18	9.18	9.49			
12.49	4.67	11.94			
17.32	6.86	4.44			

资料来源：数据经 M. Keaton 许可使用。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(a) 取 $\alpha=0.01$，试检验两个费用均值向量是否相等。

(b) 如果(a)中的费用均值向量的相等性假设被拒绝，试找出导致拒绝该假设的均值分量的线性组合。

(c) 对每对均值分量，构造其 99%联合置信区间，哪些费用看上去有显著差异(若有的话)?

(d) 对你在分析中所用的那些假定的正确性作出评论。特别应注意汽油卡车的第 9 和第 21 个观测值被识别为多元离群值(参见练习 5.20 和[2])。将这两观测值删除，重做(a)的检验。对所得结果作出评论。

6.19　对 45 只雄性钩镰鸢的尾长 x_1(毫米)和翅长 x_2(毫米)进行测量，其结果见表 6.9，对雌性钩镰鸢的尾长及翅长的测量结果已在表 5.11 中给出。

表 6.9　雄性钩镰鸢数据

x_1 (尾长)	x_2 (翅长)	x_1 (尾长)	x_2 (翅长)	x_1 (尾长)	x_2 (翅长)
180	278	185	282	284	277
186	277	195	285	176	281
206	308	183	276	185	287
184	290	202	308	191	295
177	273	177	254	177	267
177	284	177	268	197	310
176	267	170	260	199	299
200	281	186	274	190	273
191	287	177	272	180	278
193	271	178	266	189	280
212	302	192	281	194	290
181	254	204	276	186	287
195	297	191	290	191	286
187	281	178	265	187	288
190	284	177	275	186	275

资料来源：数据经 S. Temple 许可使用。

(a) 画出雄性钩镰鸢数据的散布图，并检验有无离群数据。(特别注意第 31 个观察值 $x_1=284$)。

(b) 检验雄性和雌性钩镰鸢两个总体均值向量的相等性(取 $\alpha=0.05$)。如果 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$ 被拒绝，试找出导致拒绝 H_0 的均值分量的线性组合。(对雄性钩镰鸢数据，在进行检验之前可将在(a)中发现的离群值删除。另一种做法是你可以认为第 31 个观察值 $x_1=284$ 是打印错误，将此数据改为 $x_1=184$，重作检验。对雄性钩镰鸢第 31 个观察值的以上两种处理方法有没有差别?)

(c) 确定 $\mu_1-\mu_2$ 的 95%置信域及 $\mu_1-\mu_2$ 的分量的 95%联合置信区间。

(d) 是否雄性(或雌性)钩镰鸢一般要大些?

6.20　利用穆迪的债券信用等级分类方法，选取了 20 种 Aa 级公司债券和 20 种 Baa 级公司债券作样本，对每家公司均记录下列比值：

X_1＝流动比率(短期流动性的量度)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

X_2=长期利率(利息偿付能力的量度)

X_3=负债与股权比(财务风险和杠杆率的量度)

X_4=股本收益率(盈利性的量度)

今测得这些公司的汇总统计数字如下:

债券为 Aa 级的公司:$n_1=20, \bar{\mathbf{x}}_1=[2.287, 12.600, 0.347, 14.830]'$,

$$\mathbf{S}_1=\begin{bmatrix} 0.459 & 0.254 & -0.026 & -0.244 \\ 0.254 & 27.465 & -0.589 & -0.267 \\ -0.026 & -0.589 & 0.030 & 0.102 \\ -0.244 & -0.267 & 0.102 & 6.854 \end{bmatrix}$$

债券为 Baa 级的公司:$n_1=20, \bar{\mathbf{x}}_2=[2.404, 7.155, 0.524, 12.840]'$,

$$\mathbf{S}_2=\begin{bmatrix} 0.944 & -0.089 & 0.002 & -0.719 \\ -0.089 & 16.432 & -0.400 & 19.044 \\ 0.002 & -0.400 & 0.024 & -0.094 \\ -0.719 & 19.044 & -0.094 & 61.854 \end{bmatrix}$$

而且,

$$\mathbf{S}_p=\begin{bmatrix} 0.701 & 0.083 & -0.012 & -0.481 \\ 0.083 & 21.949 & -0.494 & 9.388 \\ -0.012 & -0.494 & 0.027 & 0.004 \\ -0.481 & 9.388 & 0.004 & 34.354 \end{bmatrix}$$

(a) 这里的融合是否显得合理?对这种情形下的融合方法进行讨论。

(b) 债券为 Aa 级的公司与债券为 Baa 级的公司的财务特征是否有差异?利用融合的协方差矩阵检验均值向量的相等性(取 $\alpha=0.05$)。

(c) 求出导致(b)中的 $H_0: \boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$ 被拒绝的均值分量的线性组合。

(d) 债券评级公司对公司在债务到期时的偿债能力感兴趣。在对债券的评级中,前述的财务比率指标是否有用?请作解释。

6.21 一些研究工作者对评估非病人群的肺功能感兴趣,为此要求被测试者在跑步机上跑到筋疲力尽为止。在测试过程中,按一定的时间间隔收集空气样本,然后分析气体成分。对 25 名男性和 25 名女性的耗氧量的 4 个测量结果列在表 6.10 中。变量为

X_1=氧气剩余量(升/分钟)

X_2=氧气剩余量(毫升/公斤/分钟)

X_3=最大含氧量(升/分钟)

X_4=最大含氧量(毫升/公斤/分钟)

(a) 通过检验均值的相等性,说明是否有性别上的差异存在?取 $\alpha=0.05$。如果拒绝了 $H_0: \boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2=\mathbf{0}$,试求出导致 H_0 被拒绝的分量的线性组合。

(b) 对每一个 $\mu_{1i}-\mu_{2i}, i=1,2,3,4$,构造它们的 95%联合置信区间,并将这些区间同相应的庞弗罗尼区间作比较。

(c) 表 6.10 中的数据,采自一批研究生志愿者,因而不能代表一个随机样本。试对这一信息的可能涵义作出评论。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 6.10 耗氧量数据

男性				女性		
x_1 剩余氧气量（升/分钟）	x_2 剩余氧气量（毫升/千克/分钟）	x_3 最大氧气量（升/分钟）	x_4 最大氧气量（毫升/千克/分钟）	x_1 剩余氧气量（升/分钟）	x_2 剩余氧气量（毫升/千克/分钟）	x_3 最大氧气量（升/分钟）
0.34	3.71	2.87	30.87	0.29	5.04	1.93
0.39	5.08	3.38	43.85	0.28	3.95	2.51
0.48	5.13	4.13	44.51	0.31	4.88	2.31
0.31	3.95	3.60	46.00	0.30	5.97	1.90
0.36	5.51	3.11	47.02	0.28	4.57	2.32
0.33	4.07	3.95	48.50	0.11	1.74	2.49
0.43	4.77	4.39	48.75	0.25	4.66	2.12
0.48	6.69	3.50	48.86	0.26	5.28	1.98
0.21	3.71	2.82	48.92	0.39	7.32	2.25
0.32	4.35	3.59	48.38	0.37	6.22	1.71
0.54	7.89	3.47	50.56	0.31	4.20	2.76
0.32	5.37	3.07	51.15	0.35	5.10	2.10
0.40	4.95	4.43	55.34	0.29	4.46	2.50
0.31	4.97	3.56	56.67	0.33	5.60	3.06
0.44	6.68	3.86	58.49	0.18	2.80	2.40
0.32	4.80	3.31	49.99	0.28	4.01	2.58
0.50	6.43	3.29	42.25	0.44	6.69	3.05
0.36	5.99	3.10	51.70	0.22	4.55	1.85
0.48	6.30	4.80	63.30	0.34	5.73	2.43
0.40	6.00	3.06	46.23	0.30	5.12	2.58
0.42	6.04	3.85	55.08	0.31	4.77	1.97
0.55	6.45	5.00	58.80	0.27	5.16	2.03
0.50	5.55	5.23	57.46	0.66	11.05	2.32
0.34	4.27	4.00	50.35	0.37	5.23	2.48
0.40	4.58	2.82	32.48	0.35	5.37	2.25

资料来源：数据经 S. Rokicki 许可使用。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

6.22　利用表 11.5 中鸢尾花数据的宽度测量值构造单因子 MANOVA 表，并对每对总体两个响应的均值分量差构造 95%联合置信区间。讨论假设 $\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2=\boldsymbol{\Sigma}_3$ 是否合理。

6.23　对表 11.7 中的原油数据构造单因子 MANOVA 表。构造 95%联合置信区间，以确定哪些总体的均值分量有差别。（可考虑对原始数据作变换，使它更符合 MANOVA 的假定。）

6.24　为调查威斯康星州格林湾的消费者对用电时间定价方案的反应，设计了一个研究计划。该计划对某些消费者规定高峰时间的电力价格等于非高峰时间的 8 倍。在 7 月份的某个大热天，对测试组和控制组每小时测量一次他们的用电量（千瓦时），并将结果与实验价格实施前类似一天的基准用电量进行比较。响应为：

$$\log(\text{当前用电量})-\log(\text{基准用电量})$$

对于到上午 9 点、11 点（高峰时间）及下午 1 点、3 点（高峰时间）为止所得到的响应测量值，产生汇总统计数字如下：

测试组：$n_1=28$，$\bar{\mathbf{x}}_1=[0.153,-0.231,-0.322,-0.339]'$

控制组：$n_2=58$，$\bar{\mathbf{x}}_2=[0.151,0.180,0.256,0.257]'$

且

$$\mathbf{S}_p=\begin{bmatrix}0.804 & 0.355 & 0.228 & 0.232\\ 0.355 & 0.722 & 0.233 & 0.199\\ 0.228 & 0.233 & 0.592 & 0.239\\ 0.232 & 0.199 & 0.239 & 0.479\end{bmatrix}$$

试完成轮廓分析。实施用电时间定价方案对电力消费是否有影响？如果有，那么，差别的本质是什么？试作讨论。（对任何统计检验均用显著性水平 $\alpha=0.05$）

6.25　作为例 6.12 中爱情与婚姻问题研究的一部分，对一个由若干名丈夫和妻子组成的样本进行了问卷调查，请他们回答下列问题：

(1) 你对伴侣的爱情的“热度”感觉如何？

(2) 伴侣对你的爱情的“热度”感觉如何？

(3) 你对伴侣的爱情的“可结伴”水平感觉如何？

(4) 伴侣对你的爱情的“可结伴”水平感觉如何？

回答均采用如下 5 级记分制：

没有	很小	有些	很大	非常大
1	2	3	4	5

30 名丈夫与 30 名妻子的回答列于表 6.11，其中：

X_1＝对问题 1 的 5 级分制回答

X_2＝对问题 2 的 5 级分制回答

X_3＝对问题 3 的 5 级分制回答

X_4＝对问题 4 的 5 级分制回答

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 6.11　配偶数据

丈夫对妻子				妻子对丈夫			
x_1	x_2	x_3	x_4	x_1	x_2	x_3	x_4
2	3	5	5	4	4	5	5
5	5	4	4	4	5	5	5
4	5	5	5	4	4	5	5
4	3	4	4	4	5	5	5
3	3	5	5	4	4	5	5
3	3	4	5	3	3	4	4
3	4	4	4	4	3	5	4
4	4	5	5	3	4	5	5
4	5	5	5	4	4	5	4
4	4	3	3	3	4	4	4
4	4	5	5	4	5	5	5
5	5	4	4	5	5	5	5
4	4	4	4	4	4	5	5
4	3	5	5	4	4	4	4
4	4	5	5	4	4	5	5
3	3	4	5	3	4	4	4
4	5	4	4	5	5	5	5
5	5	5	5	4	5	4	4
5	5	4	4	3	4	4	4
4	4	4	4	5	3	4	4
4	4	4	4	5	3	4	4
4	4	4	4	4	5	4	4
3	4	5	5	2	5	5	5
5	3	5	5	3	4	5	5
5	5	3	3	4	3	5	5
3	3	4	4	4	4	4	4
4	4	4	4	4	4	5	5
3	3	5	5	3	4	4	4
4	4	3	3	4	4	5	4
4	4	5	5	4	4	5	5

资料来源：数据经 E. Hatfield 许可使用。

(a) 画出丈夫及妻子们均值向量的样本轮廓。

(b) "丈夫对妻子"的轮廓是否平行于"妻子对丈夫"的轮廓？在 $\alpha=0.05$ 下检验轮廓的平行性。如果轮廓平行，在相同的显著性水平下检验轮廓的相合性。最后，如果轮廓是相合的，则在 $\alpha=0.05$ 下检验轮廓的水平性。从以上分析中能得出什么结论？

6.26　有两类叮人蝇(窄头蝇属)形态非常相似，以致多年来人们一直以为它们属于同一类。现在发现这两类蝇在幼蝇的性别比和叮人习惯方面存在生物学上的差异。试问：表 6.12 列出的部分分类数据和计算机磁盘上的全部分类数据是否说明这两类蝇(C 蝇和 T 蝇)有差别？取 $\alpha=0.05$，检验这两个总体均值向量的相等性。如果相等性假设被拒绝，试找出导致拒绝该假设的均值分量(或均值分量的线性组合)。讨论你对这些数据采用正态方法的合理性。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 6.12　叮人蝇数据

	x_1 (翅膀长度)	x_2 (翅膀宽度)	x_3 (第 3 触须长度)	x_4 (第 3 触须宽度)	x_5 (第 4 触须长度)	x_6 (第 12 触角段的长度)	x_7 (第 13 触角段的长度)
	85	41	31	13	25	9	8
	87	38	32	14	22	13	13
	94	44	36	15	27	8	9
	92	43	32	17	28	9	9
	96	43	35	14	26	10	10
	91	44	36	12	24	9	9
	90	42	36	16	26	9	9
	92	43	36	17	26	9	9
	91	41	36	14	23	9	9
	87	38	35	11	24	9	10
蝇 T	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	106	47	38	15	26	10	10
	105	46	34	14	31	10	11
	103	44	34	15	23	10	10
	100	41	35	14	24	10	10
	109	44	36	13	27	11	10
	104	45	36	15	30	10	10
	95	40	35	14	23	9	10
	104	44	34	15	29	9	10
	90	40	37	12	22	9	10
	104	46	37	14	30	10	10
	86	19	37	11	25	9	9
	94	40	38	14	31	6	7
	103	48	39	14	33	10	10
	82	41	35	12	25	9	8
	103	43	42	15	32	9	9
	101	43	40	15	25	9	9
	103	45	44	14	29	11	11
	100	43	40	18	31	11	10
	99	41	42	15	31	10	10
	100	44	43	16	34	10	10
蝇 C	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	99	42	38	14	33	9	9
	110	45	41	17	36	9	10
	99	44	35	16	31	10	10
	103	43	38	14	32	10	10
	95	46	36	15	31	8	8
	101	47	38	14	37	11	11
	103	47	40	15	32	11	11
	99	43	37	14	23	11	10
	105	50	40	16	33	12	11
	99	47	39	14	34	7	7

资料来源：数据经 William Atchley 许可使用。

6.27　利用表 1.6 中的骨骼无机物含量数据，检验控制组和非控制组均值向量的相等性。

(a) 在 $\alpha=0.05$ 下检验该假设。

(b) 构造均值差的 95%联合置信区间。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(c) 构造相应的 95%庞弗罗尼置信区间，并与(b)中的置信区间进行比较。

6.28　对表 1.6 中的前 24 名测试对象在他们参加实验计划一年后再次进行测试，所得骨骼中无机物含量数据列于表 6.13。比较此两表的数据以判断骨骼中的无机物含量是否有损失。

表 6.13　骨骼中无机物含量(1 年后)

被测对象	主桡骨	桡骨	主肱骨	肱骨	主尺骨	尺骨
1	1.027	1.051	2.268	2.246	0.869	0.964
2	0.857	0.817	1.718	1.710	0.602	0.689
3	0.875	0.880	1.953	1.756	0.765	0.738
4	0.873	0.698	1.668	1.443	0.761	0.698
5	0.811	0.813	1.643	1.661	0.551	0.619
6	0.640	0.734	1.396	1.378	0.753	0.515
7	0.947	0.865	1.851	1.686	0.708	0.787
8	0.886	0.806	1.742	1.815	0.687	0.715
9	0.991	0.923	1.931	1.776	0.844	0.656
10	0.977	0.925	1.933	2.106	0.869	0.789
11	0.825	0.826	1.609	1.651	0.654	0.726
12	0.851	0.765	2.352	1.980	0.692	0.526
13	0.770	0.730	1.470	1.420	0.670	0.580
14	0.912	0.875	1.846	1.809	0.823	0.773
15	0.905	0.826	1.842	1.579	0.746	0.729
16	0.756	0.727	1.747	1.860	0.656	0.506
17	0.765	0.764	1.923	1.941	0.693	0.740
18	0.932	0.914	2.190	1.997	0.883	0.785
19	0.843	0.782	1.242	1.228	0.577	0.627
20	0.879	0.906	2.164	1.999	0.802	0.769
21	0.673	0.537	1.573	1.330	0.540	0.498
22	0.949	0.900	2.130	2.159	0.804	0.779
23	0.463	0.637	1.041	1.265	0.570	0.634
24	0.776	0.743	1.442	1.411	0.585	0.640

资料来源：数据经 Everett Smith 许可使用。

(a) 在 $\alpha=0.05$ 下检验上述假设。

(b) 构造均值差的 95%联合置信区间。

(c) 构造 95%的庞弗罗尼联合置信区间，并与(b)中的置信区间进行比较。

6.29　花生是美国南部部分地区的重要农作物。为改进花生的种植方法，农作物学家们对若干个变量不断地比较花生品种，表 6.14 中给出了一个双因子实验的结果数据。在两块土地(1,2)上交替种植三个品种的花生(品种 5,6 和 8)，并且测量能代表产品的三个变量和两个重要的谷物等级指标。三个变量分别是

X_1＝产量

X_2＝花生仁的成熟程度(250 克花生的果仁重量，单位克)

X_3＝种子大小(100 颗种子的重量，单位为克)

实验重复两次。

(a) 利用表 6.14 中的数据，完成双因子 MANOVA。检验地块效应、品种效应和地块-品种交互效应的显著性(取 $\alpha=0.05$)。

(b) 分析残差，通常的 MANOVA 假定是否满足？试作讨论。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(c) 利用(a)的结论，能否得出如下的结论：地块(或品种)效应是可加的？如不可加，在哪些变量上有交互效应存在，哪些不存在？通过做三个独立的双因子一元 ANOVA 来检验。

(d) 较大的数字对应于高的产量和较好的等级指标。在地块 2 中，是否能得出这样的结论：有一个品种的每个指标均优于其余两个品种？利用各对品种的 95%庞弗罗尼联合置信区间说明你的结论。

表 6.14 花生数据

因子 1 地块	因子 2 品种	x_1 产量	x_2 果仁成熟度	x_3 种子大小
1	5	195.3	153.1	51.4
1	5	194.3	167.7	53.7
2	5	189.7	139.5	55.5
2	5	180.4	121.1	44.4
1	6	203.0	156.8	49.8
1	6	195.9	166.0	45.8
2	6	202.7	166.1	60.4
2	6	197.6	161.8	54.1
1	8	193.5	164.5	57.8
1	8	187.0	165.1	58.6
2	8	201.5	166.8	65.0
2	8	200.0	173.8	67.2

数据来源：数据经 Yolanda Lopez 许可使用。

6.30 参看例 6.13。

(a) 在同一图上分别画出 $\bar{\mathbf{x}}_1$ 的分量和 $\bar{\mathbf{x}}_2$ 的分量对时间的轮廓，进行比较，并对比较结果作出评论。

(b) 取 $\alpha=0.01$，检验线性生长假设是否合适？

6.31 参看例 6.13，但要把所有的 31 个对象当作一个组来处理。$(q+1)\times 1$ 阶向量 $\boldsymbol{\beta}$ 的极大似然估计量为：$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{B}'\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}'\mathbf{S}^{-1}\bar{\mathbf{x}}$，其中 $\mathbf{S}$ 为样本协方差阵。

极大似然估计的协方差的估计量为

$$\widehat{\mathrm{Cov}}\ (\hat{\boldsymbol{\beta}})=\frac{(n-1)(n-2)}{(n-1-p+q)(n-p+q)n}(\mathbf{B}'\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B})^{-1}$$

用二次生长曲线拟合这组数据，并加以讨论。

参 考 文 献

1. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.
2. Bacon-Shone, J., and W. K. Fung. "A New Graphical Method for Detecting Single and Multiple Outliers in Univariate and Multivariate Data." *Applied Statistics*, 36, no. 2 (1987), 153～162.
3. Bartlett, M. S. "Properties of Sufficiency and Statistical Tests." *Proceedings of the Royal Society of London* (*A*), 160 (1937), 268～282.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

4. Bartlett, M. S. "Further Aspects of the Theory of Multiple Regression." *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 34 (1938), 33～40.
5. Bartlett, M. S. "Multivariate Analysis." *Journal of the Royal Statistical Society Supplement (B)*, 9 (1947), 176～197.
6. Bartlett, M. S. "A Note on the Multiplying Factors for Various χ^2 Approximations." *Journal of the Royal Statistical Society (B)*, 16 (1954), 296～298.
7. Bhattacharyya, G. K., and R. A. Johnson. *Statistical Concepts and Methods*. New York: John Wiley, 1997.
8. Box, G. E. P., and N. R. Draper. *Evolutionary Operation: A Statistical Method for Process Improvement*. New York: John Wiley, 1969.
9. Box, G. E. P., W. G. Hunter, and J. S. Hunter. *Statistics for Experimenters*. New York: John Wiley, 1978.
10. John, P. W. M. *Statistical Design and Analysis of Experiments*. New York: Macmillan, 1971.
11. Jolicoeur, P., and J. E. Mosimann. "Size and Shape Variation in the Painted Turtle: A Principal Component Analysis." *Growth*, 24 (1960), 339～354.
12. Kshirsagar, A. M., and W. B. Smith, *Growth Curves*, New York: Marcel Dekker. 1995.
13. Morrison, D. F. *Multivariate Statistical Methods* (2d ed.). New York: McGraw-Hill, 1976.
14. Pearson, E. S., and H. O. Hartley, eds. *Biometrika Tables for Statisticians*, vol. II. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1972.
15. Potthoff, R. F. and S N. Roy, "A generalized multivariate analysis of variance model useful especially for growth curve problems", *Biometrika* 51 (1964), 313～326.
16. Scheffé, H. *The Analysis of Variance*. New York: John Wiley, 1959.
17. Tiku, M, L., and N. Balakrishnan. "Testing the Equality of Variance-Covariance Matrices the Robust Way." *Communications in Statistics—Theory and Methods*, 14, no. 12 (1985), 3033～3051.
18. Tiku, M. L., and M. Singh. "Robust Statistics for Testing Mean Vectors of Multivariate Distributions." *Communications in Statistics—Theory and Methods*, 11, no. 9(1982), 985～1001.
19. Timm, N. H. *Multivariate Analysis with Applications in Education and Psychology*. Monterey, California: Brooks/Cole, 1975.
20. Wilks, S. S. "Certain Generalizations in the Analysis of Variance." *Biometrika*, 24 (1932), 471～494.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第7章 线性回归

7.1 引言

回归分析是一种通过一组预测变量(自变量)来预测一个或多个响应变量(因变量)的统计方法。它也可用于评估预测变量对响应变量的效果。不幸的是,回归这一名称来源于F·高尔顿[13]就这一研究课题发表的第一篇论文的题目,既没有充分反映这种方法的重要性,也没有反映这种方法应用的广泛性。

在本章中,我们首先讨论预测一个响应变量的多重回归①,然后将这个模型推广到预测若干个因变量的情形。由于在这方面存在大量文献,我们的讨论肯定是简明扼要的。(若你有兴趣深入研究回归分析,可参考以下各种按难度递增顺序排列的著作:Bowerman and O'Connell[5], Neter, Kutner, Nachtsheim, and Wasserman[16], Draper and Smith[11], Seber[19], and Goldberger[14]。)我们对回归分析的简要讨论重点在以下几方面:模型的假定及其后果,回归模型的一些不同表述方式,以及回归方法在看上去非常不同的场合下的一般应用。

7.2 经典线性回归模型

设 $z_1, z_2, \cdots, z_r$ 为 r 个预测变量,设想它们与一个响应变量 $\mathbf{Y}$ 有关系。例如,对 $r=4$,我们可能有

$\mathbf{Y}$=住房的当前市场价值

z_1=居住面积(平方英尺)

z_2=位置(城市区域的指标)

z_3=去年的评估价值

z_4=建筑质量(每平方英尺价格)

经典线性回归模型假定 $\mathbf{Y}$ 由一个均值和一个随机误差 ε 合成,其中均值为诸 z_i 的连续函数,而 ε 则考虑测量误差和其余未被明确考虑在模型中的变量所产生的效应。在实验中被

① 译者注:这里,"Multiple regression"是指有多个自变量(回归变量)的回归模型,我们译为"多重回归",而"Multivariate regression"是指有多个响应变量(因变量)的回归模型,我们译为"多元回归"。读者应注意这二者间的区别。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

记录下来的或由研究者设定的预测变量的值被视为**固定**值。误差被看成是随机变量(因而响应变量也是随机变量),其行为由一组关于分布的假定来表征。

具体地说,单个响应的线性回归模型取如下形式:

$$\mathbf{Y} = \beta_0 + \beta_1 z_1 + \cdots + \beta_r z_r + \varepsilon$$

$$(\text{响应}) = [\text{均值(依赖于 } z_1, \cdots, z_r)] + (\text{误差})$$

线性一词指均值为未知参数 $\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_r$ 的线性函数,预测变量在模型中不一定是一阶项。

如将模型用 $\mathbf{Y}$ 的 n 个观测值和与之相联系的诸 z_i 值来表示时,则整个模型变为

$$\begin{aligned} Y_1 &= \beta_0 + \beta_1 z_{11} + \beta_2 z_{12} + \cdots + \beta_r z_{1r} + \varepsilon_1 \\ Y_2 &= \beta_0 + \beta_1 z_{21} + \beta_2 z_{22} + \cdots + \beta_r z_{2r} + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ Y_n &= \beta_0 + \beta_1 z_{n1} + \beta_2 z_{n2} + \cdots + \beta_r z_{nr} + \varepsilon_n \end{aligned} \tag{7-1}$$

其中误差项假定具有以下性质:

1. $E(\varepsilon_j)=0$;
2. $\mathrm{Var}(\varepsilon_j)=\sigma^2$(常数); (7-2)
3. $\mathrm{Cov}(\varepsilon_j, \varepsilon_k))=0,\ j \neq k.$

用矩阵形式表示,式(7-1)变成

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & z_{11} & z_{12} & \cdots & z_{1r} \\ 1 & z_{21} & z_{22} & \cdots & z_{2r} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z_{n1} & z_{n2} & \cdots & z_{nr} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

或

$$\underset{(n\times 1)}{\mathbf{Y}} = \underset{(n\times(r+1))}{\mathbf{Z}} \underset{((r+1)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}} + \underset{(n\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

而式(7-2)中的假定可表为:

1. $E(\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{0}$;
2. $\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})=E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')=\sigma^2\mathbf{I}$.

注意**设计矩阵** $\mathbf{Z}$ 的第一列为常数项 β_0 的系数。习惯上引入一个人工变量 $z_{j0}=1$,使得

$$\beta_0 + \beta_1 z_{j1} + \cdots + \beta_r z_{jr} = \beta_0 z_{j0} + \beta_1 z_{j1} + \cdots + \beta_r z_{jr}$$

$\mathbf{Z}$ 的每一列由相应预测变量的 n 个值组成,而 $\mathbf{Z}$ 的第 j 行则包含第 j 次试验中所有预测变量的值。

经典线性回归模型

$$\underset{(n\times 1)}{\mathbf{Y}} = \underset{(n\times(r+1))}{\mathbf{Z}} \underset{((r+1)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}} + \underset{(n\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}},$$

$$E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \underset{(n\times 1)}{\mathbf{0}},\ \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \underset{(n\times n)}{\sigma^2\mathbf{I}}, \tag{7-3}$$

其中 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 为未知参数,设计矩阵 $\mathbf{Z}$ 的第 j 行为 $[z_{j0}, z_{j1}, \cdots, z_{jr}]$。

虽然式(7-2)中关于误差项的假定很宽松,但稍后我们将增添一个正态性假定,以便能构造置信区间和进行假设检验。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

下面提供一些有关线性回归模型的例子。

例 7.1 （拟合直线回归模型）

用数据

z_1	0	1	2	3	4
y	1	4	3	8	9

拟合直线

$$\text{响应均值} = E(Y) = \beta_0 + \beta_1 z_1$$

在观测到响应 $\mathbf{Y}=[Y_1,Y_2,\cdots,Y_5]'$ 时，误差 $\boldsymbol{\varepsilon}=[\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_5]'$ 是随机的，因此我们有

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Z}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

其中

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_5 \end{bmatrix}, \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & z_{11} \\ 1 & z_{21} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & z_{51} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_5 \end{bmatrix}$$

对这个模型的数据包含在观测到的响应向量 $\mathbf{y}$ 和设计阵 $\mathbf{Z}$ 之中，此处

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 3 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix}, \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$$

注意，我们可以对响应均值引入一个二次项 $\beta_2 z_2$，其中 $z_2=z_1^2$，从而得到一个二次式。这时，对第 j 次试验的线性回归模型为

$$Y_j = \beta_0 + \beta_1 z_{j1} + \beta_2 z_{j2} + \varepsilon_j$$

或

$$Y_j = \beta_0 + \beta_1 z_{j1} + \beta_2 z_{j1}^2 + \varepsilon_j$$

例 7.2 （单因子 ANOVA 作为回归模型的设计阵）

若线性回归模型被用于例 6.6 中的单因子 ANOVA 场合，确定设计矩阵。

我们定义三个**虚拟变量**来处理三个总体均值 $\mu_1=\mu+\tau_1$，$\mu_2=\mu+\tau_2$，及 $\mu_3=\mu+\tau_3$。令

$$z_1 = \begin{cases} 1, & \text{若观测值来自总体 1} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

$$z_2 = \begin{cases} 1, & \text{若观测值来自总体 2} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

$$z_3 = \begin{cases} 1, & \text{若观测值来自总体 3} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

并令 $\beta_0=\mu$，$\beta_1=\tau_1$，$\beta_2=\tau_2$，$\beta_3=\tau_3$。此时

$$Y_j = \beta_0 + \beta_1 z_{j1} + \beta_2 z_{j2} + \beta_3 z_{j3} + \varepsilon_j, \quad j = 1,2,\cdots,8$$

这里，我们将观测值按三个总体的顺序排列，这样就得到观测到的响应向量和设计矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\underset{(8\times1)}{\mathbf{Y}}=\begin{bmatrix}9\\6\\9\\0\\2\\3\\1\\2\end{bmatrix};\quad \underset{(8\times4)}{\mathbf{Z}}=\begin{bmatrix}1&1&0&0\\1&1&0&0\\1&1&0&0\\1&0&1&0\\1&0&1&0\\1&0&0&1\\1&0&0&1\\1&0&0&1\end{bmatrix}$$

如同在例 7.2 中那样，通过构造适当的拟变量，可将整个方差分析纳入多重线性回归的框架。

7.3 最小二乘估计

回归分析的目标之一是得出一个方程，使研究者可根据给定的预测变量值来预测响应变量值。这就需要将模型(7-3)同数据 y_j 及相应的已知值 $1,z_{j1},\cdots,z_{jr}$"拟合"。也就是说，我们必须确定与数据相容的**回归系数** $\boldsymbol{\beta}$ 和**误差方差** σ^2 的值。

设 $\mathbf{b}$ 为 $\boldsymbol{\beta}$ 的一个尝试值，考虑响应变量的观测值 y_j 与在 $\boldsymbol{\beta}=\mathbf{b}$ 时的期望值 $b_0+b_1z_{j1}+\cdots+b_rz_{jr}$ 之差 $y_j-b_0-b_1z_{j1}-\cdots-b_rz_{jr}$。一般这个差值不会是零，因为响应值会以误差项的那些假定所表征的方式围绕其期望值波动。**最小二乘法**选择这样的 $\mathbf{b}$，使上述差值的平方和达到极小：

$$\begin{aligned}S(\mathbf{b})&=\sum_{j=1}^{n}(y_j-b_0-b_1z_{j1}-\cdots-b_rz_{jr})^2\\&=(\mathbf{y}-\mathbf{Zb})'(\mathbf{y}-\mathbf{Zb})\end{aligned}\tag{7-4}$$

由最小二乘准则选定的参数 $\mathbf{b}$ 称为 $\boldsymbol{\beta}$ 的**最小二乘估计**。今后将记最小二乘估计为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$，以强调它是 $\boldsymbol{\beta}$ 的估计值。

系统 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 在下述意义下与数据相容：由 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 得出的响应均值的估计值(拟合值) $\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1z_{j1}+\cdots+\hat{\beta}_rz_{jr}$ 与观测值 y_j 之差的平方和已达到最小。偏差

$$\hat{\varepsilon}_j=y_j-\hat{\beta}_0-\hat{\beta}_1z_{j1}-\cdots-\hat{\beta}_rz_{jr},\quad j=1,2,\cdots,n\tag{7-5}$$

称为**残差**。残差向量 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=y-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 中包含关于另一未知参数 σ^2 的信息。(见结论 7.2。)

结论 7.1 设 $\mathbf{Z}$ 有满秩 $r+1\leqslant n$①，式(7-3)中的 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}$$

设 $\hat{\mathbf{y}}=\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{Hy}$ 为 $\mathbf{y}$ 的**拟合值**，其中 $\mathbf{H}=\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'$ 称为"帽子"矩阵，此时残差

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{y}=(\mathbf{I}-\mathbf{H})\mathbf{y}$$

---

① 若 $\mathbf{Z}$ 不是满秩矩阵，则可用 $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-$ 来代替 $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$，其中 $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-$ 为 $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ 的广义逆。(见练习 7.6。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

满足 $\mathbf{Z}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=0$，及 $\hat{\mathbf{y}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=0$。另外，

$$\text{残差平方和}=\sum_{j=1}^{n}(y_j-\hat{\beta}_0-\hat{\beta}_1z_{j1}-\cdots-\hat{\beta}_rz_{jr})^2=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

$$=\mathbf{y}'[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{y}=\mathbf{y}'\mathbf{y}-\mathbf{y}'\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$

证明 设 $\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}$，则 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}}=\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{y}$。矩阵 $[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']=[\mathbf{I}-\mathbf{H}]$ 满足：

1. $[\mathbf{I}-\mathbf{H}]'=[\mathbf{I}-\mathbf{H}]$（对称性）；
2. $[\mathbf{I}-\mathbf{H}][\mathbf{I}-\mathbf{H}]=\mathbf{I}-2\mathbf{H}+\mathbf{H}^2=\mathbf{I}-2\mathbf{H}+\mathbf{H}=\mathbf{I}-\mathbf{H}$（幂等性）；　　(7-6)
3. $\mathbf{Z}'[\mathbf{I}-\mathbf{H}]=\mathbf{Z}'-\mathbf{Z}'=0$。

因此，$\mathbf{Z}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{Z}'(\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}})=\mathbf{Z}'[\mathbf{I}-\mathbf{H}]\mathbf{y}=\mathbf{0}$，故 $\hat{\mathbf{y}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{Z}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{0}$。此外，$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{y}'[\mathbf{I}-\mathbf{H}][\mathbf{I}-\mathbf{H}]\mathbf{y}=\mathbf{y}'[\mathbf{I}-\mathbf{H}]\mathbf{y}=\mathbf{y}'\mathbf{y}-\mathbf{y}'\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$。为验证 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为最小二乘估计，我们有

$$\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b}=\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}+\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{Z}\mathbf{b}=\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}+\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})$$

故

$$\begin{aligned}\mathbf{S}(\mathbf{b})&=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\mathbf{b})\\&=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})+(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})\\&\quad+2(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})\\&=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})+(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})\end{aligned}$$

因为 $(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{Z}=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\mathbf{Z}=\mathbf{0}'$。上式右端的第一项不依赖于 $\mathbf{b}$，第二项为 $\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})$ 的平方长度。由于 $\mathbf{Z}$ 是满秩的，若 $\hat{\boldsymbol{\beta}}\neq\mathbf{b}$，则 $\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{b})\neq\mathbf{0}$。可见平方和的最小值在 $\mathbf{b}=\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}$ 时达到，而且是惟一的。注意 $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$ 存在，因为 $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ 有秩 $r+1\leqslant n$。（若 $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ 不满秩，则对某个 $\mathbf{a}\neq\mathbf{0}$ 有 $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\mathbf{a}\neq\mathbf{0}$，这样 $\mathbf{a}'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\mathbf{a}=\mathbf{0}$，或 $\mathbf{Z}\mathbf{a}=\mathbf{0}$。这与 $\mathbf{Z}$ 有满秩 $r+1$ 的前提相矛盾。）

结论 7.1 证明了最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 可通过样本矩阵运算由设计矩阵 $\mathbf{Z}$ 和响应向量 $\mathbf{y}$ 得出。

例 7.3 （计算最小二乘估计、残差及残差平方和）

计算模型

$$\mathbf{Y}_j=\beta_0+\beta_1z_{j1}+\varepsilon_j$$

对数据

z_1	0	1	2	3	4
y	1	4	3	8	9

拟合的最小二乘估计 $\hat{\beta}$、残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 及残差平方和。我们有

$\mathbf{Z}'$	$\mathbf{y}$	$\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$	$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$	$\mathbf{Z}'\mathbf{y}$
$\begin{bmatrix}1&1&1&1&1\\0&1&2&3&4\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}1\\4\\3\\8\\9\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}5&10\\10&30\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0.6&-0.2\\-0.2&0.1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}25\\70\end{bmatrix}$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

因此，

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.6 & -0.2 \\ -0.2 & 0.1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 25 \\ 70 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

于是拟合的方程为

$$\hat{\mathbf{y}} = 1 + 2z_1$$

拟合值(预测值)向量为

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}$$

故

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 3 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

残差平方和为

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0^2 + 1^2 + (-2)^2 + 1^2 + 0^2 = 6$$

平方和的分解

根据结论 7.1，$\hat{\mathbf{y}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0$，故总的响应变量平方和 $\mathbf{y}'\mathbf{y} = \sum_{j=1}^{n} y_j^2$ 满足

$$\mathbf{y}'\mathbf{y} = (\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})'(\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) = (\hat{\mathbf{y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}})'(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \hat{\mathbf{y}}'\hat{\mathbf{y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{7-7}$$

由于 Z 的第一列为 $\mathbf{1}$，条件 $Z'\hat{\varepsilon} = \mathbf{0}$ 意味着 $0 = \mathbf{1}'\hat{\varepsilon} = \sum_{j=1}^{n}\hat{\varepsilon}_j = \sum_{j=1}^{n} y_j - \sum_{j=1}^{n}\hat{y}_i$，或 $\bar{y} = \bar{\hat{y}}$。从式(7-7)两边同时减去 $n\bar{y}^2 = n(\bar{\hat{y}})^2$，便得到关于均值平方和的基本分解式：

$$\mathbf{y}'\mathbf{y} - n\bar{y}^2 = \hat{\mathbf{y}}'\hat{\mathbf{y}} - n(\bar{\hat{y}})^2 + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

或

$$\sum_{j=1}^{n}(y_j - \bar{y})^2 = \sum_{j=1}^{n}(\hat{y}_j - \bar{y})^2 + \sum_{j=1}^{n}\hat{\varepsilon}_j^2 \tag{7-8}$$

$$\begin{pmatrix} \text{均值的总} \\ \text{平方和} \end{pmatrix} = (\text{回归平方和}) + \begin{pmatrix} \text{残差(误差)} \\ \text{平方和} \end{pmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

这个平方和分解式表明模型拟合的质量可以用**决定系数**来量度，其定义为

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{n} \hat{\varepsilon}_j^2}{\sum_{j=1}^{n} (y_j - \bar{y})^2} = \frac{\sum_{j=1}^{n} (\hat{y}_j - \bar{y})^2}{\sum_{j=1}^{n} (y_j - \bar{y})^2} \tag{7-9}$$

R^2 这个量给出 $y_j, j=1,\cdots,n$ 的总变差中由预测变量 $z_1, z_2, \cdots, z_r$ 的"解释"或所贡献的部分所占的比例。若拟合方程通过所有数据点，即对所有 j 有 $\hat{\varepsilon}_j=0$，此时 R^2（或**多重相关系数** $R=+\sqrt{R^2}$）等于 1。另一极端是当 $\hat{\beta}_0=\bar{y}$ 和 $\hat{\beta}_1=\hat{\beta}_2=\cdots=\hat{\beta}_r=0$ 时 R^2 等于 0。在这种场合，预测变量 $z_1, z_2, \cdots, z_r$ 对响应变量没有影响。

最小二乘几何

最小二乘法的几何解释能使我们更好地理解这个概念的本质。根据经典线性回归模型，

$$\text{响应均值向量} = E(\mathbf{Y}) = \mathbf{Z}\boldsymbol{\beta} = \beta_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} + \beta_1 \begin{bmatrix} z_{11} \\ z_{21} \\ \vdots \\ z_{n1} \end{bmatrix} + \cdots + \beta_r \begin{bmatrix} z_{1r} \\ z_{2r} \\ \vdots \\ z_{nr} \end{bmatrix}$$

这样，$E(\mathbf{Y})$为 $\mathbf{Z}$ 的列向量的线性组合。当 $\boldsymbol{\beta}$ 取所有可能值时，$\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}$ 张成由所有可能线性组合构成的模型平面。通常，观测值向量 $\mathbf{y}$ 不会处于模型平面内，这是随机误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 所致。也就是说，$\mathbf{y}$（严格地说）不是 $\mathbf{Z}$ 的列向量的线性组合。回顾

$$\underset{\begin{pmatrix}\text{响应}\\\text{向量}\end{pmatrix}}{\mathbf{Y}} = \underset{\begin{pmatrix}\text{模型平面}\\\text{内的向量}\end{pmatrix}}{\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}} + \underset{\begin{pmatrix}\text{误差}\\\text{向量}\end{pmatrix}}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

一旦得到了观测值，最小二乘解由偏差向量

$$\mathbf{y} - \mathbf{Zb} = (\text{观测值向量}) - (\text{模型平面内的向量})$$

导出。偏差的平方长度$(\mathbf{y}-\mathbf{Zb})'(\mathbf{y}-\mathbf{Zb})$便是平方和 $S(\mathbf{b})$。如图 7.1 所示，当 $\mathbf{b}$ 选得使 $\mathbf{Zb}$ 成为在模型平面内距 $\mathbf{y}$ 最近的一点时，$S(\mathbf{b})$达到最小。这个点就是 $\mathbf{y}$ 向量到模型平面的垂

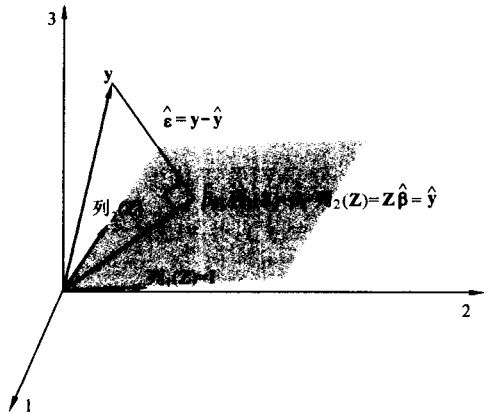


图 7.1　将最小二乘看作投影的示意图（$n=3, r=1$ 的情形）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

线的垂足。也就是说，选择 $\mathbf{b}=\hat{\boldsymbol{\beta}}$，$\hat{\mathbf{y}}=\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$便是 $\mathbf{y}$ 在模型平面上的**投影**，而残差向量 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}}$ 则垂直于模型平面。这个几何解释即使在 $\mathbf{Z}$ 不满秩时也成立。

当 $\mathbf{Z}$ 满秩时，投影运算的解析表达是乘以矩阵 $\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'$。为说明这点，我们用式(2-16)的谱分解得到

$$\mathbf{Z}'\mathbf{Z}=\lambda_1\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1'+\lambda_2\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2'+\cdots+\lambda_{r+1}\mathbf{e}_{r+1}\mathbf{e}_{r+1}'$$

其中 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_{r+1}\geqslant 0$ 为 $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ 的特征值，$\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{r+1}$为相应的特征向量。如果 $\mathbf{Z}$ 满秩，就有

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}=\frac{1}{\lambda_1}\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1'+\frac{1}{\lambda_2}\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2'+\cdots+\frac{1}{\lambda_{r+1}}\mathbf{e}_{r+1}\mathbf{e}_{r+1}'$$

考虑 $\mathbf{q}_i=\lambda_i^{-1/2}\mathbf{Z}\mathbf{e}_i$，$\mathbf{q}_i$ 为 $\mathbf{Z}$ 的各列的线性组合。此时当 $i\neq k$，有 $\mathbf{q}_i'\mathbf{q}_k=\lambda_i^{-1/2}\lambda_k^{-1/2}\mathbf{e}_i'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\mathbf{e}_k=\lambda_i^{-1/2}\lambda_k^{-1/2}\mathbf{e}_i'\lambda\mathbf{e}_k=0$；当 $i=k$，则等于 1。也就是说，这 $r+1$ 个向量 $\mathbf{q}_i$，$i=1,2,\cdots,r+1$ 相互垂直且为单位长度。它们的线性组合张成由 $\mathbf{Z}$ 的诸列组成的所有线性组合的空间。此外，

$$\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'=\sum_{i=1}^{r+1}\lambda_i^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\mathbf{Z}'=\sum_{i=1}^{r+1}\mathbf{q}_i\mathbf{q}_i'$$

根据结论 2A.2 和定义 2A.12，$\mathbf{y}$ 到$\{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\cdots,\mathbf{q}_{r+1}\}$ 的线性组合的投影为 $\sum_{i=1}^{r+1}(\mathbf{q}_i'\mathbf{y})\mathbf{q}_i=\left(\sum_{i=1}^{r+1}\mathbf{q}_i\mathbf{q}_i'\right)\mathbf{y}=\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}=\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$。这样，乘以 $\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'$相当于将一个向量投影到 $\mathbf{Z}$ 的诸列所张成的线性空间①。

类似地，$[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']$是将 $\mathbf{y}$ 投影到与 $\mathbf{Z}$ 的诸列所张成平面垂直的平面上的矩阵。

经典最小二乘估计量的抽样性质

最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 与残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 的抽样性质在下述结论中详加讨论。

结论 7.2 在一般线性回归模型(7-3)下，参数的最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}$ 满足

$$E(\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{\beta}\quad 和\quad \mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}})=\sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$$

残差向量 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 有性质

$$E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})=\mathbf{0}\quad 和\quad \mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})=\sigma^2(\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']=\sigma^2[\mathbf{I}-\mathbf{H}]$$

还有 $E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})=(n-r-1)\sigma^2$，故可定义

$$s^2=\frac{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}{n-(r+1)}=\frac{\mathbf{Y}'[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Y}}{n-r-1}=\frac{\mathbf{Y}'[\mathbf{I}-\mathbf{H}]\mathbf{Y}}{n-r-1}$$

---

① 若 $\mathbf{Z}$ 不满秩，可以用广义逆$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-=\sum_{i=1}^{r_1+1}\lambda_i^{-1}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'$，其中 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\lambda_{r_1+1}>0=\lambda_{r_1+2}=\cdots=\lambda_{r+1}$，如练习 7.6 中所描述的那样。此时$\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'=\sum_{i=1}^{r_1+1}\mathbf{q}_i\mathbf{q}_i'$有秩 r_1+1，因而产生 $\mathbf{y}$ 在由 $\mathbf{Z}$ 的线性独立列张成的空间的惟一投影。这个结论对任何$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$ 的广义逆均成立。(见[19]。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

我们有

$$E(s^2) = \sigma^2$$

此外，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 不相关。

证明 响应 $\mathbf{Y}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$ 在被观测之前是一个随机向量。现在

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\beta}} &= (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'(\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\boldsymbol{\varepsilon} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} &= [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Y} \\ &= [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'][\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}] = [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon}\end{aligned} \tag{7-10}$$

因为$[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Z}=\mathbf{Z}-\mathbf{Z}=\mathbf{0}$。由式(2-24)和式(2-25)，

$$\begin{aligned}E(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\beta} \\ \mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} = \sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} \\ &= \sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} \\ E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) &= [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']E(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbf{0} \\ \mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) &= [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']' \\ &= \sigma^2[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\end{aligned}$$

其中最后一个等式从式(7-6)得出。还有，因为 $\mathbf{Z}'[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']=\mathbf{0}$，

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}},\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) &= E[(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'] = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] \\ &= \sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] = \mathbf{0}\end{aligned}$$

由式(7-10)、式(7-6)及结论 4.9，可得

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'][\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon} \\ &= \boldsymbol{\varepsilon}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon} \\ &= \mathrm{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')\boldsymbol{\varepsilon}] \\ &= \mathrm{tr}([\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')\end{aligned}$$

对任一 $n\times n$ 随机矩阵 $\mathbf{W}$，有

$$\begin{aligned}E(\mathrm{tr}(\mathbf{W})) &= E(W_{11} + W_{22} + \cdots + W_{nn}) \\ &= E(W_{11}) + E(W_{22}) + \cdots + E(W_{nn}) = \mathrm{tr}[E(\mathbf{W})]\end{aligned}$$

于是利用结论 2A.12 得到

$$\begin{aligned}E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) &= \mathrm{tr}([\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')) \\ &= \sigma^2\mathrm{tr}[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] \\ &= \sigma^2\mathrm{tr}(\mathbf{I}) - \sigma^2\mathrm{tr}[\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] \\ &= \sigma^2 n - \sigma^2\mathrm{tr}[(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Z}] \\ &= n\sigma^2 - \sigma^2\mathrm{tr}[\underset{(r+1)\times(r+1)}{\mathbf{I}}] \\ &= \sigma^2(n - r - 1)\end{aligned}$$

由此可得出 $S^2=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}/(n-r-1)$的结论。

最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 具有最小方差，这一性质最初是由高斯(Gauss)确立的①。下一个

① 晚于高斯很久，马尔可夫(Markov)证明了一个不够一般的结论，这使许多著者误用他的名字来命名这个定理。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

结论涉及线性参数函数 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}=\mathbf{c}_0\boldsymbol{\beta}_0+\mathbf{c}_1\boldsymbol{\beta}_1+\cdots+\mathbf{c}_r\boldsymbol{\beta}_r$(对任意 $\mathbf{c}$)的"最佳"估计量问题。

结论 7.3 (高斯最小二乘定理) 设 $\mathbf{Y}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$,其中 $E(\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{0}$,$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})=\sigma^2\mathbf{I}$,且 $\mathbf{Z}$ 有满秩 $r+1$。对任意 $r+1$ 维常向量 $\mathbf{c}$,对于线性函数 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$,在所有形如

$$\mathbf{a}'\mathbf{Y}=a_1Y_1+a_2Y_2+\cdots+a_nY_n$$

的线性无偏估计量中,估计量

$$\mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}}=c_0\hat{\beta}_0+c_1\hat{\beta}_1+\cdots+c_r\hat{\beta}_r$$

的方差最小。

证明 对任意给定的 $\mathbf{c}$,设 $\mathbf{a}'\mathbf{Y}$ 为 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$ 的一个线性无偏估计量。此时 $E(\mathbf{a}'\mathbf{Y})=\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$,对任何 $\boldsymbol{\beta}$ 值均成立。又由假定知 $E(\mathbf{a}'\mathbf{Y})=E(\mathbf{a}'\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\mathbf{a}'\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{a}'\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}$,因此,对任意 $\boldsymbol{\beta}$ 有 $\mathbf{a}'\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}=\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$,这意味着 $\mathbf{c}'=\mathbf{a}'\mathbf{Z}$。

现在 $\mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{c}'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}=\mathbf{a}^{*\prime}\mathbf{Y}$,其中 $\mathbf{a}^*=\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{C}$。又由结论 7.2 知 $E(\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{\beta}$,故 $\mathbf{c}'\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{a}^{*\prime}\mathbf{Y}$ 为 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$ 的无偏估计量。这样,对任意满足无偏性要求 $\mathbf{c}'=\mathbf{a}'\mathbf{Z}$ 的 $\mathbf{a}$,因为 $(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*)'\mathbf{a}^*=(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*)'\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{c}=0$,故

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(\mathbf{a}'\mathbf{Y})&=\mathrm{Var}(\mathbf{a}'\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\mathbf{a}'\boldsymbol{\varepsilon})=\mathrm{Var}(\mathbf{a}'\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{a}'\mathbf{I}\sigma^2\mathbf{a}\\&=\sigma^2(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*+\mathbf{a}^*)'(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*+\mathbf{a}^*)\\&=\sigma^2[(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*)'(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*)+\mathbf{a}^{*\prime}\mathbf{a}^*]\end{aligned}$$

由于 $\mathbf{a}^*$ 是固定的,且 $(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*)'(\mathbf{a}-\mathbf{a}^*)\geqslant 0$,当 $\mathbf{a}=\mathbf{a}^*$ 时 $=0$,$\mathrm{Var}(\mathbf{a}'\mathbf{Y})$ 在 $\mathbf{a}=\mathbf{a}^*$ 时达到最小。

这个有力的结果说明,对任何有意义的参数线性函数 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$,最优估计是用 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 代替 $\boldsymbol{\beta}$。用统计术语来说,估计量 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$ 称为 $\mathbf{c}'\boldsymbol{\beta}$ 的**最佳线性无偏估计量**(BLUE)。

7.4 回归模型的推断

我们根据经典线性回归模型(7-3)以及附加的对误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的正态假定来描述推断方法。检验模型的一般适用性的方法将在 7.6 节中考虑。

关于回归参数的推断

在评估**回归函数**

$$E(Y)=\beta_0+\beta_1z_1+\cdots+\beta_rz_r \tag{7-11}$$

中特定变量的重要性之前,必须确定 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 及残差平方和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 的抽样分布。为此我们将假定误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布。

结论 7.4 设 $\mathbf{Y}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$,其中 $\mathbf{Z}$ 有满秩 $r+1$,且 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从 $N_n(\mathbf{0},\sigma^2\mathbf{I})$分布。此时 $\boldsymbol{\beta}$ 的极大似然估计量就是最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$。进而有

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}\text{ 服从 }N_{r+1}(\boldsymbol{\beta},\sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1})\text{ 分布,}$$

且 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 与残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 独立。此外,

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$n\hat{\sigma}^2 = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \text{ 服从 } \sigma^2\chi^2_{n-r-1} \text{ 分布，}$$

其中 $\hat{\sigma}^2$ 为 σ^2 的极大似然估计量。

证明 给定数据和误差的正态性假定，$\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的似然函数为

$$L(\boldsymbol{\beta},\sigma^2) = \prod_{j=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\varepsilon_j^2/2\sigma^2} = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sigma^n} e^{-\boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{\varepsilon}/2\sigma^2}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sigma^n} e^{-(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})/2\sigma^2}$$

对某个固定的 σ^2 值，似然函数的最大化由 $(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})$ 的最小化得到。这个最小化产生不依赖于 σ^2 的最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}$。因此，在正态性假定下，$\boldsymbol{\beta}$ 的极大似然法和最小二乘法提供相同的估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$。然后，将 $L(\hat{\boldsymbol{\beta}},\sigma^2)$ 对 σ^2 求极大值[见式(4-18)]，得到

$$L(\hat{\boldsymbol{\beta}},\hat{\sigma}^2) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}(\hat{\sigma}^2)^{n/2}} e^{-n/2}, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})}{n} \tag{7-12}$$

根据式(7-10)，我们可以将 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 表为正态变量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的线性组合。具体地说，

$$\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\beta}} \\ \hline \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\boldsymbol{\varepsilon} \\ \hline [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \hline \mathbf{0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}' \\ \hline \mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}' \end{bmatrix}\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{A}\boldsymbol{\varepsilon}$$

由于 $\mathbf{Z}$ 固定，结论 4.3 意味着 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 的联合正态性。它们的均值向量和协方差矩阵在结论 7.2 中均已得出。再次利用式(7-6)，得到

$$\mathrm{Cov}\left(\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{\beta}} \\ \hline \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \end{bmatrix}\right) = \mathbf{A}\,\mathrm{Cov}\,(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{A}' = \sigma^2\begin{bmatrix} (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}' & \mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}' \end{bmatrix}$$

由于对正态随机变量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 有 $\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}},\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \mathbf{0}$ 这两个向量彼此独立。(见结论 4.5。)

下一步，令 $(\lambda,\mathbf{e})$ 为 $\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'$ 的特征值-特征向量对。这时由式(7-6)，$[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']^2 = [\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']$，故 $\lambda\mathbf{e} = [\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{e} = [\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']^2\mathbf{e} = \lambda[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{e} = \lambda^2\mathbf{e}$。也就是说，$\lambda = 0$ 或 1。又由 $\mathrm{tr}[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] = n-r-1$(见结论 7.2 的证明)和结论 4.9，$\mathrm{tr}[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] = \lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n$，其中 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$ 为 $[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']$ 的特征值。因此，恰有 $n-r-1$ 个特征值 λ_i 为 1，其余都为 0。于是由谱分解有

$$[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] = \mathbf{e}_1\mathbf{e}_1' + \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2' + \cdots + \mathbf{e}_{n-r-1}\mathbf{e}_{n-r-1}' \tag{7-13}$$

其中 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{n-r-1}$ 为与特征值 $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{n-r-1} = 1$ 相联系的标准化特征向量。令

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_{n-r-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1' \\ \hline \mathbf{e}_2' \\ \hline \vdots \\ \hline \mathbf{e}_{n-r-1}' \end{bmatrix}\boldsymbol{\varepsilon}$$

于是 $\mathbf{V}$ 服从正态分布，均值向量为 $\mathbf{0}$，且

$$\mathrm{Cov}(V_i,V_k) = \begin{cases} \mathbf{e}_i'\sigma^2\mathbf{I}\mathbf{e}_k = \sigma^2\mathbf{e}_i'\mathbf{e}_k = \sigma^2, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

也就是说 V_i 为独立 $N(0,\sigma^2)$变量，且由式(7-10)，

$$n\hat{\sigma}^2 = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon} = V_1^2 + V_2^2 + \cdots + V_{n-r-1}^2$$

服从 $\sigma^2\chi^2_{n-r-1}$分布。

$\boldsymbol{\beta}$ 的置信椭球很容易构造，它可用估计的协方差矩阵 $s^2(Z'Z)^{-1}$来表示，其中 $s^2=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}/(n-r-1)$。

结论 7.5 设 $\mathbf{Y}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$，其中 $\mathbf{Z}$ 有满秩 $r+1$，且 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为 $N_n(\mathbf{0},\sigma^2\mathbf{I})$。此时 $\boldsymbol{\beta}$ 的 $100(1-\alpha)\%$置信域为

$$(\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \leqslant (r+1)s^2F_{r+1,n-r-1}(\alpha)$$

其中 $F_{r+1,n-r-1}(\alpha)$为自由度为 $r+1$ 和 $n-r-1$ 的 F 分布的第 100α 个上百分位点。

还有，$\beta_i, i=1,\cdots,r$ 的**联合**置信区间为

$$\hat{\beta}_i \pm \sqrt{\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\beta}_i)}\sqrt{(r+1)F_{r+1,n-r-1}(\alpha)}, \quad i = 0,1,\cdots,r$$

其中 $\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\beta}_i)$为 $s^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z}^{-1})$对应于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i$ 的对角元。

证明 考虑对称平方根矩阵$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{1/2}$。[见式(2-22)。]令 $\mathbf{V}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{1/2}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ 并注意 $E(\mathbf{V})=\mathbf{0}$，

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{V}) = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{1/2}\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}})(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{1/2} = \sigma^2(Z'Z)^{1/2}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{1/2} = \sigma^2\mathbf{I}$$

且 $\mathbf{V}$ 服从正态分布，因为它由诸 $\boldsymbol{\beta}_i$ 的线性组合构成。因此，$\mathbf{V}'\mathbf{V}=(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{1/2}\cdot(\mathbf{Z}'\cdot\mathbf{Z})^{1/2}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})=(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$服从 $\sigma^2\chi^2_{r+1}$分布。根据结论 7.4，$(n-r-1)s^2=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 服从 $\sigma^2\chi^2_{n-r-1}$分布，独立于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 因而也独立于 $\mathbf{V}$。因此$[\chi^2_{r+1}/(r+1)]/[\chi^2_{n-r-1}/(n-r-1)]=[\mathbf{V}'\mathbf{V}/(r+1)]/s^2$ 服从 $F_{r+1,n-r-1}$分布，且可得到 $\boldsymbol{\beta}$ 的置信椭球。用结论 5A.1，令 $\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{Z}'\mathbf{Z}/s^2$，$c^2=(r+1)F_{r+1,n-r-1}(\alpha)$，及 $\mathbf{u}=[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]'$，将此置信椭球对$(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$投影，便得到 $|\beta_i-\hat{\beta}_i|\leqslant\sqrt{(r+1)F_{r+1,n-r-1}(\alpha)}\sqrt{\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\beta}_i)}$，其中 $\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\beta}_i)$为 $s^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$ 对应于 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i$ 的对角元。

上述的置信椭球以极大似然估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为中心，其方向和大小均由 $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ 的特征向量和特征值所决定。若某个特征根接近于零，则置信椭球在相应特征向量的方向上会变得很长。

实际工作者往往忽略结论 7.5 中区间估计的“联合”置信性质。事实上，他们用“每次一个”的 t 值 $t_{n-r-1}(\alpha/2)$来代替$(r+1)F_{r+1,n-r-1}(\alpha)$，用区间

$$\hat{\beta} \pm t_{n-r-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\beta}_i)} \tag{7-14}$$

来搜索重要的预测变量。

例 7.4 （用房地产数据拟合回归模型）

表 7.1 中的数据来自威斯康星州密尔沃基一个住宅区的 20 个家庭。记 z_1=总居住面积(以百平方英尺为单位)，z_2=评估价值(千美元)，及 Y=售价(千美元)。用最小二乘法拟合模型

$$Y_j = \beta_0 + \beta_1 z_{j1} + \beta_2 z_{j2} + \varepsilon_j$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

用计算机得到

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}=\begin{bmatrix} 5.1523 & & \\ 0.2544 & 0.0512 & \\ -0.1463 & -0.0172 & 0.0067 \end{bmatrix}$$

及

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}=\begin{bmatrix} 30.967 \\ 2.634 \\ 0.045 \end{bmatrix}$$

表 7.1　房地产数据

z_1 总居住面积(100 平方英尺)	z_2 估价(1000 美元)	Y 售价(1000 美元)
15.31	57.3	74.8
15.20	63.8	74.0
16.25	65.4	72.9
14.33	57.0	70.0
14.57	63.8	74.9
17.33	63.2	76.0
14.48	60.2	72.0
14.91	57.7	73.5
15.25	56.4	74.5
13.89	55.6	73.5
15.18	62.6	71.5
14.44	63.4	71.0
14.87	60.2	78.9
18.63	67.2	86.5
15.20	57.1	68.0
25.76	89.6	102.0
19.05	68.6	84.0
15.37	60.1	69.0
18.06	66.3	88.0
16.35	65.8	76.0

这样，拟合的方程为

$$\hat{y}=\underset{(7.88)}{30.967}+\underset{(0.785)}{2.634}z_1+\underset{(0.285)}{0.045}z_2$$

其标准差 $s=3.473$。上式下边括号中的数字为相应参数估计值的标准差估计值。此外，$R^2=0.834$指示数据间有很强的回归关系。(见显示板 7.1，其中有 SAS 统计软件包对这组数据的回归分析结果。)若残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 通过了诊断检查(见 7.6 节)，则此拟合方程便可用于根据此居民区内其他住宅的居住面积和估价来预测其售价。我们注意到 β_2 的 95%置信区间[见式(7-14)]为

$$\hat{\beta}_2 \pm t_{17}(0.025)\sqrt{\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\beta}_2)}=0.045\pm 2.110\times 0.285$$

或

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$(-0.556,\ 0.647)$$

由于置信区间包含 $\beta_2=0$，变量 z_2 可以从回归模型中剔除，然后对单个预测变量 z_1 重作回归拟合。给定居住面积，看来评估价值对售价的预测并无多大贡献。

显示板 7.1　对例 7.4 采用程序设计时的 SAS 分析

```
title 'Regression Analysis';
data estate;
infile 'T7-1.dat';
input z1 z2 y;
proc reg data=estate;
model y=z1 z2;
```

PROGRAM COMMANDS

OUTPUT

Model :MODEL1
Dependent Variable: Y

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
Model	2	1032.87506	516.43753	42.828	0.0001
Error	17	204.99494	12.05853		
C Total	19	1237.87000			

Root MSE	3.47254	R-square	0.8344
Deep Mean	76.55000	Adj R-sq	0.8149
C. V.	4.53630		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	T for H0: Parameter=0	Prob>|T|
INTERCEP	1	30.966566	7.88220844	3.929	0.0011
z1	1	2.634400	0.78559872	3.353	0.0038
z2	1	0.045184	0.28518271	0.158	0.8760

回归参数的似然比检验

回归分析的部分内容涉及评估特定预测变量对响应变量的影响。有一个人们感兴趣的零假设是说某些 z_i 对响应 Y 没有影响。可将 $z_{q+1},z_{q+2},\cdots,z_r$。对 Y 无影响这种说法表示成统计假设

$$H_0:\beta_{q+1}=\beta_{q+2}=\cdots=\beta_r=0 \quad H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0} \tag{7-15}$$

其中 $\boldsymbol{\beta}_{(2)}=[\beta_{q+1},\beta_{q+2},\cdots,\beta_r]'$。令

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{Z}=\left[\underset{n\times(q+1)}{\mathbf{Z}_1}\ \vdots\ \underset{n\times(r-q)}{\mathbf{Z}_2}\right],\quad \boldsymbol{\beta}=\begin{bmatrix}\underset{((q+1)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}_{(1)}}\\ \cdots\cdots\\ \underset{((r-q)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}_{(2)}}\end{bmatrix}$$

我们可将一般线性模型表为

$$\mathbf{Y}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}=[\mathbf{Z}_1\ \vdots\ \mathbf{Z}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta}_{(1)}\\ \cdots\\ \boldsymbol{\beta}_{(2)}\end{bmatrix}+\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\mathbf{Z}_2\boldsymbol{\beta}_{(2)}+\boldsymbol{\varepsilon}$$

在假设 $H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$ 下，$\mathbf{Y}=\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\boldsymbol{\varepsilon}$。$H_0$ 的似然比检验的依据是

$$\begin{aligned}\text{额外的平方和}&=\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}_1)-\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z})\\ &=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})-(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})\end{aligned}\tag{7-16}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}=(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{y}$。

结论 7.6 设 $\mathbf{Z}$ 有满秩 $r+1$，且 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从 $N_n(\mathbf{0},\sigma^2\mathbf{I})$ 分布。假设 $H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$ 的似然比检验等价于 H_0 按式(7-16)中额外平方和以及 $s^2=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})/(n-r-1)$ 所作的检验。特别是似然比检验对 H_0 的拒绝域为

$$\frac{(\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}_1)-\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}))/(r-q)}{s^2}>F_{r-q,n-r-1}(\alpha)$$

其中 $F_{r-q,n-r-1}(\alpha)$ 为自由度为 $r-q$ 和 $n-r-1$ 的 F 分布第 100α 个上百分位数。

证明 给定数据和正态性假定，参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的似然函数为

$$L(\boldsymbol{\beta},\sigma^2)=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sigma^n}\mathrm{e}^{-(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})/2\sigma^2}\leqslant\frac{1}{(2\pi)^{n/2}\hat{\sigma}^n}\mathrm{e}^{-n/2}$$

最大值在 $\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}$，及 $\hat{\sigma}^2=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})/n$ 时达到。而在零假设的约束下，$\mathbf{Y}=\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\boldsymbol{\varepsilon}$ 且

$$\max_{\boldsymbol{\beta}_{(1)},\sigma^2}L(\boldsymbol{\beta}_{(1)},\sigma^2)=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}\hat{\sigma}_1^n}\mathrm{e}^{-n/2}$$

其中最大值在 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}=(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{y}$ 时出现，此外，

$$\hat{\sigma}_1^2=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})/n$$

似然比为

$$\frac{\max\limits_{\boldsymbol{\beta}_{(1)},\sigma^2}L(\boldsymbol{\beta}_{(1)},\sigma^2)}{\max\limits_{\boldsymbol{\beta},\sigma^2}L(\boldsymbol{\beta},\sigma^2)}=\left(\frac{\hat{\sigma}_1^2}{\hat{\sigma}^2}\right)^{-n/2}=\left(\frac{\hat{\sigma}^2+\hat{\sigma}_1^2-\hat{\sigma}^2}{\hat{\sigma}^2}\right)^{-n/2}=\left(1+\frac{\hat{\sigma}_1^2-\hat{\sigma}^2}{\hat{\sigma}^2}\right)^{-n/2}$$

当似然比值很小时拒绝 $H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$，这等价于当 $(\hat{\sigma}_1^2-\hat{\sigma}^2)/\hat{\sigma}^2$ 值很大时拒绝 H_0，或当

$$\frac{n(\hat{\sigma}_1^2-\hat{\sigma}^2)/(r-q)}{n\hat{\sigma}^2/(n-r-1)}=\frac{(\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}_1)-\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}))/(r-q)}{s^2}=F$$

值很大时拒绝 H_0。上述的 F 比服从自由度为 $r-q$ 和 $n-r-1$ 的 F 分布。(见[18]或结论 7.11，$m=1$。)

评注 似然比检验如下建立。要检验一个子集中的系数是否全为零，在模型中有这些系数或没有这些系数(假设为零)两种情况下拟合模型。将残差平方和的改进(额外的平方和)与全模型下的残差平方和作比较，得到 F 比。同样的程序也适用于方差分析场合，不

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

过这时 $\mathbf{Z}$ 是不满秩的①。

更一般的做法是对 $r-q$ 个 $\boldsymbol{\beta}$ 的线性组合陈述形如 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\mathbf{A}_0$ 的零假设。设 $(r-q)\times(r+1)$ 矩阵 $\mathbf{C}$ 为满秩，$\mathbf{A}_0=\mathbf{0}$，考虑假设

$$H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$$

（当 $\mathbf{C}=\left[\begin{array}{c|c}\mathbf{0} & \mathbf{I}_{(r-q)\times(r-q)}\end{array}\right]$ 时，零假设就简化成这种形式。）

在全模型下，$\hat{\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}}$ 的分布为 $N_{r-q}(\mathbf{C}\boldsymbol{\beta},\sigma^2\mathbf{C}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{C}')$。若 $\mathbf{0}$ 不在 $\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 置信椭圆中，我们在水平 α 下拒绝 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$。等价地，若

$$\frac{(\mathbf{C}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{C}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{C}')^{-1}(\mathbf{C}\hat{\boldsymbol{\beta}})}{s^2}>(r-q)F_{r-q,n-r-1}(\alpha) \tag{7-17}$$

我们便拒绝 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$，此处 $s^2=(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})/(n-r-1)$，而 $F_{r-q,n-r-1}(\alpha)$ 则为自由度为 $r-q$ 和 $n-r-1$ 的 F 分布第 (100α) 个上百分位数。式(7-17)中的检验便是似然比检验，而 F 比的分子正好是全模型在 $\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\mathbf{0}$ 这一约束条件下的额外残差平方和。（见[21]。）

下一个例子说明如何用上面所述的一般理论来方便地处理不平衡实验设计。

例 7.5 （用额外平方和方法检验添加预测量的重要性）

男性和女性主顾对一家大型连锁饭店的三家分店进行服务质量打分。表 7.2 给出 $n=18$ 个顾客的打分。在表 7.2 中，每个数据点根据分店位置分为三类(1,2,3)，并按性别分为两类(男=0，女=1)。这个交叉分类产生一个二维的表，其中每个格中的观测值数不同。例如，对位置 1 和男性的组合有 5 个响应观测值，而对位置 2 和女性的组合只有两个响应观测值。

表 7.2 饭店服务数据

位置	性别	服务(Y)
1	0	15.2
1	0	21.2
1	0	27.3
1	0	21.2
1	0	21.2
1	1	36.4
1	1	92.4
2	0	27.3
2	0	15.2
2	0	9.1
2	0	18.2
2	0	50.0
2	1	44.0
2	1	63.6
3	0	15.2
3	0	30.3
3	1	36.4
3	1	40.9

① 当 $\mathbf{Z}$ 不满秩时，在结论 7.6 中用秩($\mathbf{Z}$)代替 $r+1$，并用秩($\mathbf{Z}_1$)代替 $q+1$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

引进 3 个虚拟变量以考虑(三个)不同分店(位置),再引进两个虚拟变量以考虑性别。借助于这些虚拟变量,我们可得出一个回归模型,将服务质量指标 Y 与位置、性别以及它们之间的"交互效应"通过设计矩阵联接起来。设计矩阵为

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccccccccccc} \text{常数} & \text{位置} & & & \text{性别} & & \text{交互效应} & & & & & \end{array} \\
\mathbf{Z}= & \left[\begin{array}{cccccccccccc}
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{array}\right]
\begin{array}{l}
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} 5\text{ 个响应} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \end{array}\right\} 2\text{ 个响应} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} 5\text{ 个响应} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \end{array}\right\} 2\text{ 个响应} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \end{array}\right\} 2\text{ 个响应} \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \end{array}\right\} 2\text{ 个响应}
\end{array}
\end{array}
$$

系数向量可设为

$$\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \tau_1, \tau_2, \gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{21}, \gamma_{22}, \gamma_{31}, \gamma_{32}]'$$

其中诸 $\beta_i(i>0)$ 代表分店位置对服务质量($\mathbf{Y}$)的效应,诸 τ_i 代表性别对服务质量指标的不同的效应,而诸 γ_{ik} 则代表位置-性别的交互效应。

设计矩阵 $\mathbf{Z}$ 不是满秩的。(例如,第 1 列等于第 2～4 列之和,也等于第 5～6 列之和。)事实上,秩($\mathbf{Z}$)=6。

对于全模型,通过计算机计算得到

$$\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}) = 2977.4$$

及 $n-$秩($\mathbf{Z}$)=18−6=12。

不包含交互效应的模型的设计阵 $\mathbf{Z}_1$ 为 $\mathbf{Z}$ 的前 6 列。我们有

$$\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}_1) = 3419.1,$$

$n-$秩($\mathbf{Z}_1$)=18−4=14。为了检验假设 $H_0: \gamma_{11}=\gamma_{12}=\gamma_{21}=\gamma_{22}=\gamma_{31}=\gamma_{32}=0$(无位置-性别交互效应),我们计算

$$F = \frac{(\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}_1) - \mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}))/(6-4)}{s^2} = \frac{(\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}_1) - \mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z}))/2}{\mathrm{SS}_{残差}(\mathbf{Z})/12}$$

$$= \frac{(3419.1 - 2977.4)/2}{2977.4/12} = 0.89$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

此 F 比可与自由度为 2 和 12 的 F 分布的百分位数作比较。对任一合理的显著性水平 α，这个 F 比均不显著。(评者注：例如对 $\alpha=0.10$，$F_{2,12}(0.10)=2.81>F=0.89$。)结果我们认为服务质量指标不受位置-性别的交互作用的影响，因此这些项可从模型中剔除。

用额外平方和方法可以验证，位置之间没有显著差别(无位置效应)，但性别间的差异是显著的。也就是说，男性和女性顾客对同样的服务不会打出相同的分数。

在方差分析场合，当设计不均衡(交叉分类表每格中响应值的数目不同)时，不同预测变量及它们的交互作用对响应所造成的变差(平方和)通常不能分解成相互独立的量。在这种情况下，要评估预测变量对响应的相对影响，就必须对包含这些项和不包含这些项的模型分别进行拟合，并计算额外的平方和并构造适当的 F 比统计量，进行 F 检验。

7.5 由估计的回归函数作推断

一旦某个研究者对拟合的回归模型感到满意，就可用它来解决两个预测问题。设 $\mathbf{z}_0=[1,z_{01},\cdots,z_{0r}]'$ 为选定的预测变量值。则 $\mathbf{z}_0$ 和 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 可用来：(1) 估计在 $\mathbf{z}_0$ 点的回归函数 $\beta_0+\beta_1z_{01}+\cdots+\beta_rz_{0r}$；(2) 估计响应 $\mathbf{Y}$ 在 z_0 点的值。(译者注：在(2)的情况下，我们通常不说“估计”，而说“预测”。)

估计回归函数在 $\mathbf{z}_0$ 点的值

设 $\mathbf{Y}_0$ 为在 $\mathbf{z}_0=[1,\mathbf{z}_{01},\cdots,\mathbf{z}_{0r}]'$ 点的响应值。根据模型(7-3)，$\mathbf{Y}_0$ 的期望值为

$$E(Y_0|\mathbf{z}_0)=\beta_0+\beta_1z_{01}+\cdots+\beta_rz_{0r}=\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta} \tag{7-18}$$

它的最小二乘估计为 $\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}$。

结论 7.7 对线性回归模型(7-3)，$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为 $E(\mathbf{Y}_0|\mathbf{z}_0)$ 的线性无偏估计量，且具有最小方差 $\mathrm{Var}(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}_0\sigma^2$。若误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布，则 $E(\mathbf{Y}_0|\mathbf{z}_0)=\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ 置信区间为

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}\pm t_{n-r-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{((\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)s^2}$$

其中 $t_{n-r-1}(\alpha/2)$ 为自由度 $n-r-1$ 的 t 分布第 $100(\alpha/2)$ 个上百分位数。

证明 对固定的 $\mathbf{z}_0$，$\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}$ 恰为诸 β_i 的一个线性组合，故可利用结论 7.3。又，$\mathrm{Var}(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\mathbf{z}_0'\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}})\mathbf{z}_0=\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\sigma^2$，因由结论 7.2 有 $\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}})=\sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$。在进一步假定 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布的前提下，结论 7.4 断言 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 服从 $N_{r+1}(\boldsymbol{\beta},\sigma^2(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1})$ 分布，且与 s^2/σ^2 相互独立，后者服从 $\chi^2_{n-r-1}/(n-r-1)$ 分布。因此，线性组合 $\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 服从分布 $N(\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta},\sigma^2\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)$，且

$$\frac{(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta})/\sqrt{\sigma^2\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}}{\sqrt{s^2/\sigma^2}}=\frac{(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}-\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta})}{\sqrt{s^2(\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)}}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

服从 t_{n-r-1} 分布。由此得出置信区间。

预测 $\mathbf{z}_0$ 点的新观测值

在点 $\mathbf{z}_0=[1,z_{01},\cdots,z_{0r}]'$ 预测一个新的响应观测值 Y_0，比估计其期望值有更大的不确定性。根据回归模型(7-3)，

$$\mathbf{Y}_0=\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}_0$$

或

$$(\text{新响应 } \mathbf{Y}_0)=(\mathbf{Y}_0 \text{ 在 } \mathbf{z}_0 \text{ 的期望值})+(\text{新误差})。$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ 服从 $N(0,\sigma^2)$ 分布，且与 $\boldsymbol{\varepsilon}=[\boldsymbol{\varepsilon}_1,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n]'$ 相互独立。因此 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ 与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和 s^2 也独立。误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 通过响应 $\mathbf{Y}$ 影响估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和 s^2，但 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ 不影响。

结论 7.8 给定线性回归模型(7-3)，一个新的观测值 $\mathbf{Y}_0$ 有**无偏预测量**

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1z_{01}+\cdots+\hat{\beta}_rz_{0r}$$

预测误差 $Y_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的方差为

$$\mathrm{Var}(Y_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\sigma^2(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)$$

当 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布时，$\mathbf{Y}_0$ 的 $100(1-\alpha)\%$ **预测区间**为

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}\pm t_{n-r-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sqrt{s^2(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)}$$

其中 $t_{n-r-1}(\alpha/2)$ 为自由度为 $n-r-1$ 的 t 分布上 $100(\alpha/2)$ 百分位数。

证明 我们用的估计 $\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}E(\mathbf{Y}_0|\mathbf{z}_0)$ 来预测 $\mathbf{Y}_0$，由结论 7.7，$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 有 $E(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\mathbf{Z}_0\boldsymbol{\beta}$，且 $\mathrm{Var}(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\sigma^2$。这样预测误差为 $Y_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{\varepsilon}_0+\mathbf{z}_0'(\boldsymbol{\beta}-\hat{\boldsymbol{\beta}})$。于是 $E(\mathbf{Y}_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=E(\boldsymbol{\varepsilon}_0)+E[\mathbf{z}_0'(\boldsymbol{\beta}-\hat{\boldsymbol{\beta}})]=0$。可见预测量是无偏的。由于 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ 和 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 彼此独立。$\mathrm{Var}(\mathbf{Y}_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\mathrm{Var}(\boldsymbol{\varepsilon}_0)+\mathrm{Var}(\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})=\sigma^2+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\sigma^2=\sigma^2(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)$。如果进一步假定 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布，则 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 服从正态分布，因此线性组合 $\mathbf{Y}_0-\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}$ 也服从正态分布。于是，$(Y_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})/\sqrt{\sigma^2(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)}$ 的分布为 $N(0,1)$。再对此量除以 $\sqrt{s^2/\sigma^2}$，其分布为 $\sqrt{\chi^2_{n-r-1}/(n-r-1)}$，我们得到

$$\frac{(Y_0-\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}})}{\sqrt{s^2(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)}}$$

其分布为 t_{n-r-1}。预测区间即可由此分布得到。

$\mathbf{Y}_0$ 的预测区间宽于其期望值 $E(\mathbf{Y}_0|\mathbf{z}_0)=\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}$ 的置信区间。在预测 $\mathbf{Y}_0$ 时，增加的不确定性来自未知误差项 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$。

例 7.6 （平均响应和未来响应的区间估计）

准备购买计算机的公司必须先估计它们的未来需求，以确定适当的设备。某计算机科学家从 7 个相似的公司中收集了一批数据，旨在开发计算机硬件需求的预测方程。数据在表 7.3 中给出，其中的变量如下：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

z_1=用户订单(千)

z_2=增删项目数(千)

Y=CPU(中央处理器)时间(小时)

对平均 CPU 时间 $E(\mathbf{Y}_0|\mathbf{z}_0)=\boldsymbol{\beta}_0+\boldsymbol{\beta}_1\mathbf{z}_{01}+\boldsymbol{\beta}_2\mathbf{z}_{02}$ 在 $\mathbf{z}_0=[1,130,7.5]'$ 点构造 95%置信区间，并在同一点上求一台新设备的 CPU 时间 $\mathbf{Y}_0$ 的 95%预测区间。

表 7.3 计算机数据

z_1 (订单)	z_2 (增减项目)	Y (CPU 时间)
123.5	2.108	141.5
146.1	9.213	168.9
133.9	1.905	154.8
128.5	0.815	146.5
151.5	1.061	172.8
136.2	8.603	160.1
92.0	1.125	108.5

计算机程序所提供的估计的回归方程为

$$\hat{y}=8.42+1.08z_1+0.42z_2$$

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}=\begin{bmatrix} 8.17969 & & \\ -0.06411 & 0.00052 & \\ 0.08831 & -0.00107 & 0.01440 \end{bmatrix}$$

及 $s=1.204$。于是，

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}=8.42+1.08\times130+0.42\times7.5=151.97\cdot$$

以及 $s\sqrt{\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}=1.204\times0.58928=0.71$，我们有 $t_4(0.025)=2.776$，故平均 CPU 时间的 95%置信区间为

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}\pm t_4(0.025)s\sqrt{\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}=151.97\pm2.776\times0.71$$

或(150.00,153.94)。

由于 $s\sqrt{1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}=1.204\times1.16071=1.40$，在条件 $\mathbf{z}_0$ 下新设备的 CPU 时间的 95%预测区间为

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}\pm t_4(0.025)s\sqrt{1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}=151.97\pm2.776\times1.40$$

或(148.08,155.86)。

7.6 模型检查及回归中的其他问题

模型合适吗

假定模型是“正确”的，就可利用估计的回归函数来作推断。当然，在估计的回归函数

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

成为决策程序的固定组成部分之前，必须检查模型的合适性。

关于拟合不良的全部样本信息均包含在残差之中：

$$\hat{\varepsilon}_1 = y_1 - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 z_{11} - \cdots - \hat{\beta}_r z_{1r}$$
$$\hat{\varepsilon}_2 = y_2 - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 z_{21} - \cdots - \hat{\beta}_r z_{2r}$$
$$\vdots$$
$$\hat{\varepsilon}_n = y_n - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 z_{n1} - \cdots - \hat{\beta}_r z_{nr}$$

或

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{y} = [\mathbf{I} - \mathbf{H}]\mathbf{y} \tag{7-19}$$

若模型成立，则每个 $\hat{\varepsilon}_j$ 均为误差项 ε_j 的估计。后者被假定服从正态分布，均值为 0，方差为 σ^2。虽然残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 有均值向量 $\mathbf{0}$，其协方差阵 $\sigma^2[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']=\sigma^2[\mathbf{I}-\mathbf{H}]$却不是对角阵。残差有不同的方差和非零相关系数。幸运的是，相关系数往往很小，而且各个方差也接近于相等。

由于残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 有协方差阵 $\sigma^2[\mathbf{I}-\mathbf{H}]$，如果 $\mathbf{H}$ 的诸对角元 h_{jj}(杠杆率)有很大的差别，诸 ε_i 的方差就会有很大变化。因此，许多统计学家宁愿用学生化残差来做图形诊断。用残差均方 s^2 作为 σ^2 的估计，我们有

$$\widehat{\mathrm{Var}}\ (\hat{\varepsilon}_j) = s^2(1 - h_{jj}), \quad j = 1,2,\cdots,n \tag{7-20}$$

而**学生化残差**为：

$$\hat{\varepsilon}_j^* = \frac{\hat{\varepsilon}_j}{\sqrt{s^2(1 - h_{jj})}}, \quad j = 1,2,\cdots,n \tag{7-21}$$

我们预期学生化残差会大致看上去像是从 $N(0.1)$中抽取的独立样本。某些统计软件包更进一步，在定义学生化残差时使用“删除一个”方差估计值来估计 σ^2。也就是说，利用将第 j 个观测值从分析中剔除后得出的残差均方 $s(j)$来估计 σ^2。

为了发现可能存在的异常现象，应将残差用各种方式作图。对一般的诊断目的来说，下面各种图形是有用的。

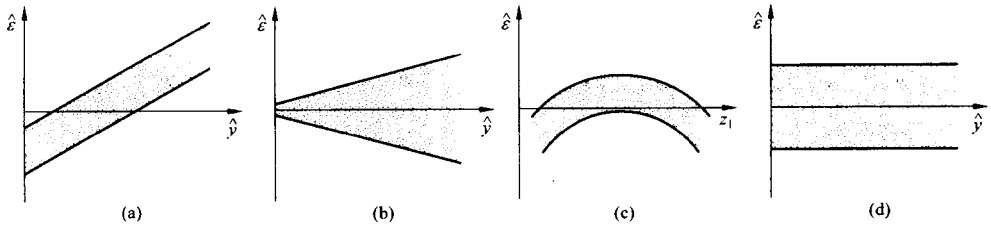


图 7.2　残差图

1. **将残差 $\hat{\varepsilon}_j$ 对预测值 $\hat{y}=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1 z_{j1}+\cdots+\hat{\beta}_r z_{jr}$的标绘图**。对模型假定的偏离常表现在以下两种典型现象之中：

(a) **残差对预测值的依赖性**。这可从图 7.2(a)得到说明。引起这种现象的原因是数值计算不正确，或常数项 β_0 在模型中被忽略了。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(b) **方差不是常数**。残差的模式可能是喇叭状，如图 7.2(b)所示。因此 $\hat{y}$ 值增大时变差也增大，$\hat{y}$ 值变小时变差亦小。在这种场合，误差方差不是常数。这时要求采用适当的变换或采用加权最小二乘法，也可二者同时采用。(见练习 7.3)。

在图 7.2(d)中，残差形成一条水平带。这是理想状态，表明残差的方差相等且不依赖于 $\hat{y}$。

2. 残差 $\hat{\varepsilon}_j$ 对某个预测量(例如 z_1)或预测量的乘积(如 z_1^2 或 z_1z_2)的标绘图。这些标绘图中的某种系统变化模式暗示需要在模型中加入更多的项。这个情况由图 7.2(c)中说明。

3. ***Q-Q* 图和直方图**。误差是否显示正态分布？为了回答此问题，残差 $\hat{\varepsilon}_j$ 或 $\hat{\varepsilon}_j^*$ 可用 4.6 节中所讨论的方法来检查。*Q-Q* 图、直方图和点图有助于发现非正常数据或对正态性的严重偏离(这在分析中需要特点注意)。若 n 很大，则对正态性的少许偏离不会对 β 的推断产生太大影响。

4. **残差对时间的标绘图**。关于独立性的假定十分重要，但难于检查。若数据按自然的时间顺序排列，则残差对时间的标绘有可能揭示某种系统模式。(残差对空间位置的标绘也可能揭示诸误差之间的联系。)例如，残差随时间增大表明存在某种强正相关性。独立性的统计检验可以通过一阶自相关系数

$$r_1 = \frac{\sum_{j=1}^{n} \hat{\varepsilon}_j \hat{\varepsilon}_{j-1}}{\sum_{j=1}^{n} \hat{\varepsilon}_j^2} \tag{7-22}$$

来构造。一种常用的检验方法以统计量 $\sum_{j=2}^{n}(\hat{\varepsilon}_j - \hat{\varepsilon}_{j-1})^2 \Big/ \sum_{j=1}^{n}\hat{\varepsilon}_j^2 \doteq 2(1 - r_1)$ 为依据，这种检验称为**德宾-沃森**(Durbin-Watson)**检验**。(有关这种检验的详细介绍和临界值表见[12]。)

例 7.7 (残差图)

例 7.6 中所讨论的计算机数据的三个残差图示于图 7.3。样本容量 $n=7$ 实在太小，无法做出明确判断。不过从图中还是能看出回归假定大体上是成立的。

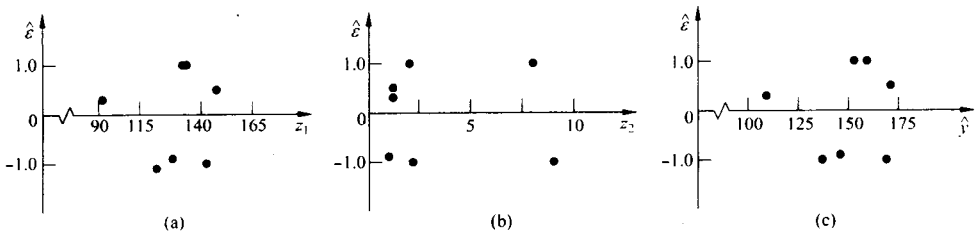


图 7.3 例 7.6 中计算机数据的残差图

若对**同一些**预测变量值能得到若干个响应观测值，则可以作一个拟合不足的形式检验。(见[11]中关于**纯误差**拟合不足检验的讨论。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

杠杆率与影响

虽然残差分析对评价模型的拟合情况很有用，但是对回归模型的偏离往往隐藏在拟合过程之中。例如，响应变量或解释变量的数据中可能存在“离群值”，它们对分析会产生很大影响，但在考察残差图时却不易被发现。事实上，这些离群值可能对拟合结果起决定作用。

杠杆率 h_{jj} 与第 j 个数据点相联系，在解释变量空间中，它量度第 j 个观测值离其余 $n-1$ 个观测有多远。对只有一个解释变量 z 的简单线性回归，

$$h_{jj}=\frac{1}{n}+\frac{(z_j-\bar{z})^2}{\sum_{j=1}^{n}(z_j-\bar{z})^2}$$

平均杠杆率为 $(r+1)/n$。（见练习 7.8。）

对于一个有高杠杆率的点，h_{jj} 接近于 1。这时在 z_j 点的预测差不多完全由 y_j 来决定，其余的数据几乎不起作用。这是因为，当其他 y 值固定时，$(\hat{y}_j$ 的变化$)=h_{jj}(y_j$ 的变化$)$。

数据中对分析结果有显著影响的那些观测值称为**有影响的**观测值。评估影响大小的方法是根据被考察的观测值被剔除后，参数估计值向量 $\hat{\beta}$ 的变化程度。以杠杆率与影响分析统计量为基础的图，以及它们在诊断性检查中的应用可在文献[2]，[4]和[9]中找到。

如果在诊断性检查后没有发现对模型假定的严重背离，我们就可以对 β 和未来的 Y 值作推断，并在某种程度上能保证不会被误导。

线性回归中的其他问题

我们来简单讨论一下回归中的几个重要问题。这些问题在回归分析的专著中得到了很大篇幅的讨论。（见[11]，[19]和[8]）。

从一个大集合中选择预测变量 实践中往往很难立刻就得到一个合适的回归函数。哪些预测变量应被包含在模型中？回归函数应取何种形式？

当可能的预测变量非常多时，并非所有变量都应进入模型，现在很容易找到选择“最佳”预测量子集的方法及有关计算机程序。一类好办法是试用所有子集：只用 z_1，只用 z_2，用 z_1 和 z_2，…等等。最佳选择通过检查某个准则来确定，常用的一个选择量是 R^2。[见式(7-9)]。但是，R^2 总是随着模型中变量的增加而增加。虽然这个问题可以用修正的 R^2 即 $\bar{R}^2=1-(1-R^2)(n-1)/(n-r-1)$ 来缓解，但更好的变量选择准则可能应该是马罗(Mallow)的 C_p 统计量(见[10])：

$$C_p=\left\{\frac{\left[\begin{array}{l}\text{包括常数项在内含 } p \text{ 个参数}\\ \text{的子模型的残差平方和}\end{array}\right]}{(\text{全模型的残差方差})}\right\}-(n-2p)$$

对每个预测量子集作 (p,C_p) 标绘图，此图将显示出能很好预测响应观测值的模型。典型的情况是：好模型的 (p,C_p) 坐标在 45°线附近。在图 7.4 中，我们用小圆圈来表示“最佳”预测变量子集。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

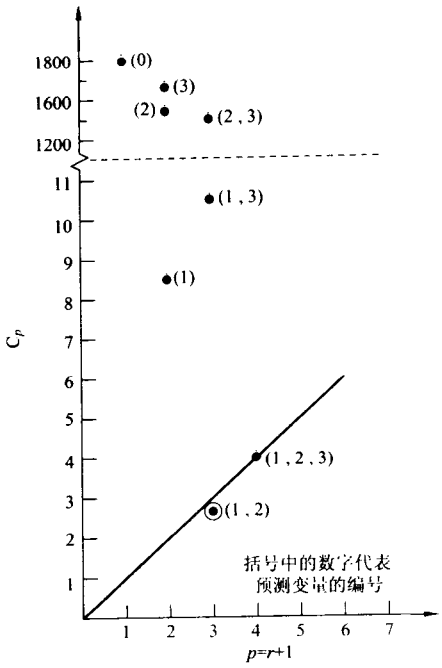


图 7.4　例 7.6 中计算机数据的 C_p 标绘图(z_1=订单数,z_2=增删项目数,z_3=项目数)

如果预测变量的数目非常多,费用方面的考虑使能考察的模型个数受到限制。另一种方法称为**逐步回归法**(见[11]),这种方法力图选择重要的预测量而不考虑所有可能性。这种方法可用下列基本步骤来描述:

步骤 1. 考虑所有可能的**简单**线性回归。能够解释最大部分 Y 变差的预测变量(即与响应 Y 相关最强的变量)是应首先被列入回归函数的变量。

步骤 2. 下一个应被列入模型的变量是模型外变量中对回归平方和做出最显著贡献的那个变量。贡献的显著性由 F 检验确定。(见结论 7.6。)在一个变量的贡献被认为显著之前必须超过的那个 F 统计量的值,常被称为 **F 临界值**。

步骤 3. 一旦又有某个变量进入了模型,则应利用 F 检验来检验回归方程中每一个原有变量对回归平方和贡献的显著性。若 F 统计量小于某个与指定显著性水平相对应的临界值,就应将相应变量从回归函数中剔除。

步骤 4. 将步骤 2 与步骤 3 不断重复,直到所有可能增添的变量均不显著,所有可能剔除的变量均显著时为止。

由于整个程序是一步一步进行的,不能保证这种方法能选出比如说三个"最佳"预测变量。另一个缺点是:这种(自动)选择方法不能显示在什么情况下变量的变换是有用的。

共线性　若 $\mathbf{Z}$ 不满秩,则某些线性组合,例如 $\mathbf{Za}$,必为 $\mathbf{0}$。在这种情况下,就说这些列是**共线**的。这意味着 $\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$ 没有逆阵。就大多数回归分析而言,不大可能恰好有 $\mathbf{Za}=\mathbf{0}$。但如果 $\mathbf{Z}$ 矩阵诸列的线性组合接近于零,则 $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$ 的计算值不稳定。典型的情况是,$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$ 的对角元将很大。这就使某些 $\hat{\beta}_i$ 的方差也很大,这时很难发现"显著的"回归系数

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

β_i。由共线性所引起的问题可通过下列方法得到一定程度的改善：(1) 将两个彼此强相关的预测变量之一剔除；或(2)将响应 $\mathbf{Y}$ 与预测变量的**主成分**联系起来。也就是说，将 $\mathbf{Z}$ 的各行 $\mathbf{z}_j'$ 看成一个样本，按后面 8.3 节中将描述的方法计算前几个主成分。然后用这些主成分作为新的"回归变量"对 $\mathbf{Y}$ 作回归。

由模型定型错误引起的偏倚 假定某些重要的预测变量未被选进模型，也就是说，假定**真正的**模型应该是 $\mathbf{Z}=[\ \mathbf{Z}_1 \vdots \mathbf{Z}_2]$，秩为 $r+1$，且

$$\underset{(n\times 1)}{\mathbf{Y}} = \left[\underset{(n\times(q+1))}{\mathbf{Z}_1} \vdots \underset{(n\times(r-q))}{\mathbf{Z}_2}\right] \begin{bmatrix} \underset{((q+1)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}_{(1)}} \\ \cdots\cdots \\ \underset{((r-q)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}_{(2)}} \end{bmatrix} + \underset{(n\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{7-23}$$

$$= \mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)} + \mathbf{Z}_2\boldsymbol{\beta}_{(2)} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

其中 $E(\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{0}$，且 $\mathrm{Var}(\boldsymbol{\varepsilon})=\sigma^2\mathbf{I}$。但是，研究者在使误差平方和 $(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)})'(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)})$ 极小化时只用了前 q 个变量。$\boldsymbol{\beta}_{(1)}$ 的最小二乘估计量为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}=(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{Y}$。这时，与模型正确定型时的情形不同，

$$\begin{aligned} E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}) &= (\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'E(\mathbf{Y}) = (\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'(\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)} + \mathbf{Z}_2\boldsymbol{\beta}_{(2)} + E(\boldsymbol{\varepsilon})) \\ &= \boldsymbol{\beta}_{(1)} + (\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_2\boldsymbol{\beta}_{(2)} \end{aligned} \tag{7-24}$$

也就是说，除非 $\mathbf{Z}_1$ 的列与 $\mathbf{Z}_2$ 的列相互垂直(也就是说，$\mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_2=0$)，$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}$ 为 $\boldsymbol{\beta}_{(1)}$ 的有偏估计量。若重要的变量被遗弃在模型之外，最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_1$ 可能会把人引入歧途。

7.7 多元多重回归

在本节中，我们考虑 m 个响应变量 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_m$ 与同一个预测变量集 $z_1,z_2,\cdots,z_r$ 之间的关系。假定每个响应有自己的回归模型：

$$\begin{aligned} Y_1 &= \beta_{01} + \beta_{11}z_1 + \cdots + \beta_{r1}z_r + \varepsilon_1 \\ Y_2 &= \beta_{02} + \beta_{12}z_1 + \cdots + \beta_{r2}z_r + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ Y_m &= \beta_{0m} + \beta_{1m}z_1 + \cdots + \beta_{rm}z_r + \varepsilon_m \end{aligned} \tag{7-25}$$

误差项 $\boldsymbol{\varepsilon}=[\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_m]'$ 有 $E(\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{0}$ 和 $\mathrm{Var}(\boldsymbol{\varepsilon})=\sum$。这样，与不同响应相联系的误差项可以彼此相关。

为建立与经典线性回归模型相一致的符号体系，以 $[z_{j0},z_{j1},\cdots,z_{jr}]$ 代表第 j 次试验中的预测变量值，以 $\mathbf{Y}_j=[Y_{j1},Y_{j2},\cdots,Y_{jm}]$ 代表响应，以 $\boldsymbol{\varepsilon}_j=[\varepsilon_{j1},\varepsilon_{j2},\cdots,\varepsilon_{jm}]'$ 代表误差。用矩阵表示时，设计阵

$$\underset{(n\times(r+1))}{\mathbf{Z}} = \begin{bmatrix} z_{10} & z_{11} & \cdots & z_{1r} \\ z_{20} & z_{21} & \cdots & z_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{n0} & z_{n1} & \cdots & z_{nr} \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

与单响应回归模型的情况相同。[见式(7-3)。]其他矩阵量皆有多元对应量。令

$$\underset{(n\times m)}{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & \cdots & Y_{1m} \\ Y_{21} & Y_{22} & \cdots & Y_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_{n1} & Y_{n2} & \cdots & Y_{nm} \end{bmatrix} = [\mathbf{Y}_{(1)} \vdots \mathbf{Y}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \mathbf{Y}_{(m)}]$$

$$\underset{((r+1)\times m)}{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} \beta_{01} & \beta_{02} & \cdots & \beta_{0m} \\ \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{r1} & \beta_{r2} & \cdots & \beta_{rm} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{\beta}_{(1)} \vdots \boldsymbol{\beta}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \boldsymbol{\beta}_{(m)}]$$

$$\underset{(n\times m)}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \cdots & \varepsilon_{1m} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \cdots & \varepsilon_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varepsilon_{n1} & \varepsilon_{n2} & \cdots & \varepsilon_{nm} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{\varepsilon}_{(1)} \vdots \boldsymbol{\varepsilon}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \boldsymbol{\varepsilon}_{(m)}]$$

$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1' \\ \hdashline \boldsymbol{\varepsilon}_2' \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \boldsymbol{\varepsilon}_n' \end{bmatrix}$$

多元线性回归模型

$$\underset{(n\times m)}{\mathbf{Y}} = \underset{(n\times(r+1))}{\mathbf{Z}}\underset{((r+1)\times m)}{\boldsymbol{\beta}} + \underset{(n\times m)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{7-26}$$

其中 $E(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)})=\mathbf{0}$，$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)},\boldsymbol{\varepsilon}_{(k)})=\sigma_{ik}\mathbf{I}\quad i,k=1,2,\cdots,m$

第 j 次试验的 m 个观测值有协方差阵 $\sum=\{\sigma_{ik}\}$，但来自不同试验的观测值不相关。这里 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ_{ik} 是未知参数，设计阵 $\mathbf{Z}$ 的第 j 行为 $[z_{j0},z_{j1},\cdots,z_{jr}]$。

简单地说，第 i 个响应 $\mathbf{Y}_{(i)}$ 服从线性回归模型

$$\mathbf{Y}_{(i)} = \mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}_{(i)} + \boldsymbol{\varepsilon}_{(i)},\quad i=1,2,\cdots,m \tag{7-27}$$

且 $\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)})=\sigma_{ii}\mathbf{I}$。但同一次试验中不同响应的误差可以相关。

给定预测变量的值 $\mathbf{Z}$ 和结果变量 $\mathbf{Y}$，我们只用第 i 个响应的观测值 $\mathbf{Y}_{(i)}$ 来确定 $\boldsymbol{\beta}_{(i)}$ 的最小二乘估计。为保持与单响应解一致，我们取

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}_{(i)} \tag{7-28}$$

将这些单变量最小二乘估计放在一起，我们有

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = [\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)} \vdots \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(m)}] = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'[\mathbf{Y}_{(1)} \vdots \mathbf{Y}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \mathbf{Y}_{(m)}]$$

或

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y} \tag{7-29}$$

对参数的任一选择 $\mathbf{B}=[\mathbf{b}_{(1)} \vdots \mathbf{b}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \mathbf{b}_{(m)}]$，误差矩阵为 $\mathbf{Y}-\mathbf{ZB}$。误差的平方与交叉乘积之和的矩阵为

$(\mathbf{Y}-\mathbf{ZB})'(\mathbf{Y}-\mathbf{ZB})$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= \begin{bmatrix} (Y_{(1)} - Zb_{(1)})'(Y_{(1)} - Zb_{(1)}) \cdots (Y_{(1)} - Zb_{(1)})'(Y_{(m)} - \mathbf{Zb}_{(m)}) \\ \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \\ (\mathbf{Y}_{(m)} - \mathbf{Zb}_{(m)})'(\mathbf{Y}_{(1)} - \mathbf{Zb}_{(1)}) \cdots (\mathbf{Y}_{(m)} - \mathbf{Zb}_{(m)})'(\mathbf{Y}_{(m)} - \mathbf{Zb}_{(m)}) \end{bmatrix} \tag{7-30}$$

选择 $\mathbf{b}_{(i)} = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 能使第 i 个对角平方和 $(\mathbf{Y}_{(i)} - \mathbf{Zb}_{(i)})'(\mathbf{Y}_{(i)} - \mathbf{Zb}_{(i)})$ 极小化。因而，当选择 $\mathbf{B} = \hat{\boldsymbol{\beta}}$ 时，$\mathrm{tr}[(\mathbf{Y} - \mathbf{ZB})'(\mathbf{Y} - \mathbf{ZB})]$ 达到最小。同时，广义方差 $|(\mathbf{Y} - \mathbf{ZB})'(\mathbf{Y} - \mathbf{ZB})|$ 也在最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 处达到最小。（其他广义平方和性质见练习 7.11。）

用最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$，我们可以构造以下两个矩阵：

$$\text{预测值矩阵：} \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}$$

$$\text{残差矩阵：} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} = [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Y} \tag{7-31}$$

在经典线性回归中残差、预测值和 $\mathbf{Z}$ 的各列之间的正交性在多元多重回归中也成立。这是由于 $\mathbf{Z}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] = \mathbf{Z}' - \mathbf{Z}' = \mathbf{0}$ 之故。具体说，

$$\mathbf{Z}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Z}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Y} = \mathbf{0} \tag{7-32}$$

故残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)}$ 垂直于 $\mathbf{Z}$ 的各列。又因

$$\hat{\mathbf{Y}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{Z}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Y} = \mathbf{0} \tag{7-33}$$

由此确认第 i 个响应的预测值垂直于残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)}$。由于 $\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$，

$$\mathbf{Y}'\mathbf{Y} = (\hat{\mathbf{Y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}})'(\hat{\mathbf{Y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{0} + \mathbf{0}'$$

或

$$\begin{matrix} \mathbf{Y}'\mathbf{Y} & = & \hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}} & + & \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \begin{pmatrix}\text{总的平方与}\\ \text{交叉乘积之和}\end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix}\text{预测的平方与}\\ \text{交叉乘积之和}\end{pmatrix} & + & \begin{pmatrix}\text{误差的平方与}\\ \text{交叉乘积之和}\end{pmatrix} \end{matrix} \tag{7-34}$$

残差平方与交叉乘积之和也可写成

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}} \tag{7-35}$$

例 7.8 （拟合多元直线回归模型）

为说明 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$，$\hat{\mathbf{Y}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 的计算，我们拟合有两个响应 Y_1, Y_2 及一个预测量 z_1 的直线回归模型

$$Y_{j1} = \beta_{01} + \beta_{11}z_{j1} + \varepsilon_{j1}$$

$$Y_{j2} = \beta_{02} + \beta_{12}z_{j1} + \varepsilon_{j2}, \quad j = 1, 2, \cdots, 5$$

所用数据为例 7.3 中的数据再加上一个响应变量的观测值：

z_1	0	1	2	3	4
y_1	1	4	3	8	9
y_2	−1	−1	2	3	2

设计矩阵与在单响应变量问题中一样。我们有

$$\mathbf{Z}' = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \quad (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1} = \begin{bmatrix} 0.6 & -0.2 \\ -0.2 & 0.1 \end{bmatrix}$$

及

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{Z}'\mathbf{y}_{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 2 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 20 \end{bmatrix}$$

故

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}_{(2)} = \begin{bmatrix} 0.6 & -0.2 \\ -0.2 & 0.1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

由例 7.3，

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}_{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

因此，

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = [\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)} \vdots \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}] = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'[\mathbf{y}_{(1)} \vdots \mathbf{y}_{(2)}]$$

于是预测方程为 $\hat{y}_1 = 1 + 2z_1$，及 $\hat{y}_2 = -1 + z_1$。用矩阵表示，

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 3 & 0 \\ 5 & 1 \\ 7 & 2 \\ 9 & 3 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}'$$

注意到

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 3 & 0 \\ 5 & 1 \\ 7 & 2 \\ 9 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

由于

$$\mathbf{Y}'\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 3 & 8 & 9 \\ -1 & -1 & 2 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 4 & -1 \\ 3 & 2 \\ 8 & 3 \\ 9 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 171 & 43 \\ 43 & 19 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}} = \begin{bmatrix} 165 & 45 \\ 45 & 15 \end{bmatrix} \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}$$

平方与交叉乘积之和的分解式

$$\mathbf{Y}'\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

很容易验证。

显示板 7.2　用 PROC. GLM 程序对例 7.8 中数据所做的 SAS 分析

```
title 'Multivariate Regression Analysis';
data mra;
infile 'E7-8.dat';
input y1 y2 z1;
proc glm data=mra;
model y1 y2=z1/ss3;
manova h=z1/printe;
```

PROGRAM COMMANDS

General Linear Models Procedure

Dependent Variable: Y1　　OUTPUT

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr>F
Model	1	40.00000000	40.00000000	20.00	0.0208
Error	3	6.00000000	2.00000000		
Corrected Total	4	46.00000000			

R-Square	C.V.	Root MSE	Y1 Mean
0.869565	28.28427	1.414214	5.00000000

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr>F
Z1	1	40.00000000	40.00000000	20.00	0.0208

Parameter	Estimate	T for H0: Parameter=0	Pr>|T|	Std Error of Estimate
INTERCEPT	1.000000000	0.91	0.4286	1.09544512
Z1	2.000000000	4.47	0.0208	0.44721360

Dependent Variable: Y2

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr>F
Model	1	10.00000000	10.00000000	7.50	0.0714
Error	3	4.00000000	1.33333333		
Corrected Total	4	14.00000000			

R-Square	C.V.	Root MSE	Y2 Mean
0.714286	115.4701	1.154701	1.00000000

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr>F
Z1	1	10.00000000	10.00000000	7.50	0.0714

Parameter	Estimate	T for H0: Parameter=0	Pr>|T|	Std Error of Estimate
INTERCEPT	−1.000000000	−1.12	0.3450	0.89442719
Z1	1.000000000	2.74	0.0714	0.36514837

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 7.2(续表)

E=Error SS $ CP Matrix

	Y1	Y2
Y1	6	−2
Y2	−2	4

Manova Test Criteria and Exact F Statistics for
the Hypothesis of no Overall Z1 Effect
H=Type III SS&CP Matrix for Z1 E=Error SS&CP Matrix
S=1 M=0 N=0

Statistic	Value	F	Num DF	Den DF	Pr>F
Wilks' Lambda	0.06250000	15.0000	2	2	0.0625
Pillai's Trace	0.93750000	15.0000	2	2	0.0625
Hotelling-Lawley Trace	15.00000000	15.0000	2	2	0.0625
Roy's Greatest Root	15.00000000	15.0000	2	2	0.0625

结论 7.9 对模型(7-26)及满秩$(\mathbf{Z})=r+1<n$，最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}=[\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)} \vdots \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(m)}]$满足

$$E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})=\boldsymbol{\beta}_{(i)} \quad E(\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{\beta}$$

且

$$\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)},\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)})=\sigma_{ik}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}, \quad i,k=1,2,\cdots,m$$

残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=[\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(1)} \vdots \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(m)}]=\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$，满足 $E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)})=0$ 且 $E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'_{(i)}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(k)})=(n-r-1)\sigma_{ik}$，故

$$E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})=\mathbf{0} \qquad E\left(\frac{1}{n-r-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\right)=\boldsymbol{\Sigma}$$

此外，$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 不相关。

证明 第 i 个响应服从多重回归模型

$$\mathbf{Y}_{(i)}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}_{(i)}+\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}, E(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)})=\mathbf{0}, \quad E(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}\boldsymbol{\varepsilon}'_{(i)})=\sigma_{ii}\mathbf{I}$$

又，如同式(7-10)中那样有

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)} \tag{7-36}$$

及

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)}=\mathbf{Y}_{(i)}-\hat{\mathbf{Y}}_{(i)}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Y}_{(i)}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}$$

故 $E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})=\boldsymbol{\beta}_{(i)}$ 且 $E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)})=\mathbf{0}$。接下来，有

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)},\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)})&=E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)})(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)}-\boldsymbol{\beta}_{(k)})'\\&=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'E(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}\boldsymbol{\varepsilon}'_{(k)})\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}=\sigma_{ik}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\end{aligned}$$

用结论 4.9 及结论 7.2 的证明，对任意随机向量 $\mathbf{U}$ 和常数阵 $\mathbf{A}$，我们有 $E[\mathbf{U}'\mathbf{A}\mathbf{U}]=E[\mathrm{tr}(\mathbf{A}\mathbf{U}\mathbf{U}')]=\mathrm{tr}[\mathbf{A}E(\mathbf{U}\mathbf{U}')]$。因此。如同结论 7.2 的证明那样，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$E(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'_{(i)}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(k)}) = E(\boldsymbol{\varepsilon}'_{(i)}(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')\boldsymbol{\varepsilon}_{(k)}) = \mathrm{tr}[(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')\sigma_{ik}\mathbf{I}]$$
$$= \sigma_{ik}\mathrm{tr}[(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')] = \sigma_{ik}(n - r - 1)$$

对 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 的每个元素 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'_{(i)}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(k)}$ 除以 $n-r-1$，我们得到 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的无偏估计量。最后，

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(k)}) &= E[(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}\boldsymbol{\varepsilon}'_{(k)}(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')] \\ &= (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'E(\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}\boldsymbol{\varepsilon}'_{(k)})(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}') \\ &= (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\sigma_{ik}\mathbf{I}(\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}') \\ &= \sigma_{ik}((\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}' - (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}') = \mathbf{0}\end{aligned}$$

故 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 中的每个元素与 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 中的每个元素不相关。

结论 7.9 中确定的均值向量和协方差阵能使我们得出最小二乘预测量的抽样性质。

我们首先考虑当预测变量取值 $\mathbf{z}_0=[1,z_{01},\cdots,z_{0r}]'$ 时均值向量的估计问题。第 i 个响应变量的均值是 $\mathbf{z}'_0\boldsymbol{\beta}_{(i)}$，可用 $\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$（拟合回归关系的第 i 个分量）来估计。因此

$$\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}} = [\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)} \vdots \mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)} \vdots \cdots \vdots \mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(m)}] \tag{7-37}$$

为 $\mathbf{z}'_0\boldsymbol{\beta}$ 的无偏估计量，因为对每个分量均有 $E(\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})=\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$。由 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)}$ 的协方差阵得到估计误差 $\mathbf{z}'_0\boldsymbol{\beta}_{(i)}-\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 的协方差为

$$\begin{aligned}E[\mathbf{z}'_0(\boldsymbol{\beta}_{(i)} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})(\boldsymbol{\beta}_{(k)} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)})'\mathbf{z}_0] &= \mathbf{z}'_0(E(\boldsymbol{\beta}_{(i)} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})(\boldsymbol{\beta}_{(k)} - \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)})')\mathbf{z}_0 \\ &= \sigma_{ik}\mathbf{z}'_0(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\end{aligned} \tag{7-38}$$

与此有关的问题是在 $\mathbf{z}_0$ 点预测新的观测值向量 $\mathbf{Y}_0=[Y_{01},Y_{02},\cdots,Y_{0m}]'$。根据回归模型，$Y_{0i}=\mathbf{z}'_0\boldsymbol{\beta}_{(i)}+\varepsilon_{0i}$，其中“新”误差 $\boldsymbol{\varepsilon}_0=[\varepsilon_{01},\varepsilon_{02},\cdots,\varepsilon_{0m}]'$ 独立于误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$，并满足 $E(\varepsilon_{0i})=0$，且 $\mathrm{Cov}(\varepsilon_{0i},\varepsilon_{0k})=\sigma_{ik}$，对 $\mathbf{Y}_0$ 的第 i 个分量的预测误差为

$$\begin{aligned}Y_{0i} - \mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} &= \mathbf{Y}_{0i} - \mathbf{z}'_0\boldsymbol{\beta}_{(i)} + \mathbf{z}'_0\boldsymbol{\beta}_{(i)} - \mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} \\ &= \varepsilon_{0i} - z'_0(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} - \boldsymbol{\beta}_{(i)})\end{aligned}$$

故 $E(Y_{0i}-\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})=E(\varepsilon_{0i})-\mathbf{z}'_0E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)})=0$，说明 $\mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 为 Y_{0i} 的**无偏预测量**。预测误差具有协方差

$$\begin{aligned}&E(Y_{0i} - \mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)})(Y_{0k} - \mathbf{z}'_0\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)}) \\ &\quad = E(\varepsilon_{0i} - \mathbf{z}'_0(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} - \boldsymbol{\beta}_{(i)}))(\varepsilon_{0k} - \mathbf{z}'_0(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)} - \boldsymbol{\beta}_{(k)})) \\ &\quad = E(\varepsilon_{0i}\varepsilon_{0k}) + \mathbf{z}'_0E(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} - \boldsymbol{\beta}_{(i)})(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)} - \boldsymbol{\beta}_{(k)})'\mathbf{z}_0 \\ &\qquad - \mathbf{z}'_0E((\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} - \boldsymbol{\beta}_{(i)})\varepsilon_{0k}) - E(\varepsilon_{0i}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)} - \boldsymbol{\beta}_{(k)})')\mathbf{z}_0 \\ &\quad = \sigma_{ik}(1 + \mathbf{z}'_0(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)\end{aligned} \tag{7-39}$$

注意 $E[(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)})\varepsilon_{0k}]=\mathbf{0}$，因为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}+\boldsymbol{\beta}_{(i)}$ 与 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ 独立。类似的结论对 $E[\varepsilon_{0i}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)}-\boldsymbol{\beta}_{(k)})']$ 也成立。

当误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布时，可得出极大似然估计量及其分布。

结论 7.10 设式(7-26)中的多元多重回归模型成立，有满秩$(\mathbf{Z})=r+1$，$n\geqslant(r+1)+m$，且误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布。此时

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

为 $\boldsymbol{\beta}$ 的极大似然估计量，且 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 服从正态分布，均值 $E(\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{\beta}$，且 $\mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)},\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(k)})=\sigma_{ik}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}$。此外，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 独立于正定矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计量

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\frac{1}{n}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\frac{1}{n}(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})$$

且 $n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 服从分布 $W_{p,n-r-1}(\boldsymbol{\Sigma})$。

证明 根据回归模型，似然函数由数据 $\mathbf{Y}=[\mathbf{Y}_1,\mathbf{Y}_2,\cdots,\mathbf{Y}_n]'$ 确定，其中 $\mathbf{Y}_j(j=1,\cdots,n)$ 独立，且服从分布 $N_m(\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j,\boldsymbol{\Sigma})$。我们首先注意到 $\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}=[\mathbf{Y}_1-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_1,\mathbf{Y}_2-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_2,\cdots,\mathbf{Y}_n-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_n]'$，故

$$(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{Y}_i-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)'$$

且

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)&=\sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)]\\&=\sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)(\mathbf{Y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)']\\&=\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})']\end{aligned}\tag{7-40}$$

另一个初等计算使我们可以将似然函数以简单形式表示出来。由于 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 满足 $\mathbf{Z}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=\mathbf{0}$ [见式(7-32)]，

$$\begin{aligned}&(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})\\&=[\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}+\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})]'[\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}+\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})]\\&=(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})+(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\\&=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}+(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\end{aligned}\tag{7-41}$$

利用式(7-40)和式(7-41)，我们得到似然函数

$$\begin{aligned}L(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\Sigma})&=\prod_{j=1}^{n}\frac{1}{(2\pi)^{m/2}}\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}_i-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y}_j-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_j)}\\&=\frac{1}{(2\pi)^{mn/2}}\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}+(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})]}\\&=\frac{1}{(2\pi)^{mn/2}}\frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}]-\frac{1}{2}tr[\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}']}\end{aligned}$$

矩阵 $\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}'$ 形如 $\mathbf{A}'\mathbf{A}$，其中 $\mathbf{A}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}'$，且为非负定矩阵(见练习 2.16)。因此，它的特征值亦非负。因为根据结论 4.9，$\mathrm{tr}[\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}']$ 为特征值之和，这个迹将在 $\boldsymbol{\beta}=\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 时达到最小值 0。这个解是惟一的，因为 $\mathbf{Z}$ 满秩与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)}\neq\mathbf{0}$ 意味着 $\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}-\boldsymbol{\beta}_{(i)})\neq\mathbf{0}$，在这种情况下，$\mathrm{tr}[\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\mathbf{Z}']\geqslant\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{c}>0$，其中 $\mathbf{c}'$ 为 $\mathbf{Z}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ 的任意非零行。用结论 4.10 并取 $\mathbf{B}=\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$，$\mathbf{b}=n/2$，及 $p=m$，我们发现 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=n^{-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 分别为 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的极大似然估计量，因而

$$L(\hat{\boldsymbol{\beta}},\hat{\boldsymbol{\Sigma}})=\frac{1}{(2\pi)^{mn/2}}\frac{(n)^{mn/2}}{|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}|^{n/2}}\mathrm{e}^{-nm/2}=\frac{\mathrm{e}^{-nm/2}}{(2\pi)^{mn/2}|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|^{n/2}}\tag{7-42}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

还需要建立关于分布的结论。根据式(7-36),我们知道 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)}$ 为 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的线性组合。具体地说,

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)} + \boldsymbol{\beta}_{(i)}$$
$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(i)} = [\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}, \qquad i = 1,2,\cdots,m$$

因此,由结论 4.3,$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)},\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)},\cdots,\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(m)},\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(1)},\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(2)},\cdots,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{(m)}$ 服从联合正态分布。它们的均值向量和协方差矩阵在结论 7.9 中给出。由于 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 有零协方差阵,据结论 4.5,它们是独立的。进而,如同式(7-13)中那样,$[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'] = \sum_{l=1}^{n-r-1}\mathbf{e}_l\mathbf{e}_l'$,其中 $\mathbf{e}_l'\mathbf{e}_k = 0, l \neq k$,且 $\mathbf{e}_l'\mathbf{e}_l = 1$。令 $\mathbf{V}_l = \boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{e}_l = [\boldsymbol{\varepsilon}_{(1)}'\mathbf{e}_l,\boldsymbol{\varepsilon}_{(2)}'\mathbf{e}_l,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_{(m)}',\mathbf{e}_l]' = \mathbf{e}_{l1}\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \mathbf{e}_{l2}\boldsymbol{\varepsilon}_2 + \cdots + \mathbf{e}_{ln}\boldsymbol{\varepsilon}_n$。由于 $\mathbf{V}_l(l = 1,2,\cdots,n-r-1)$ 为 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 诸元素的线性组合,它们服从联合正态分布,$E(\mathbf{V}_l)=E(\boldsymbol{\varepsilon}')\mathbf{e}_l=\mathbf{0}$。又由结论 4.8,当 $l\neq k$,$\mathbf{V}_l$ 和 $\mathbf{V}_k$ 有协方差矩阵 $(\mathbf{e}_l'\mathbf{e}_k)\boldsymbol{\Sigma}=(\mathbf{0})\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{0}$。因此,诸 $\mathbf{V}_l$ 相互独立,同 $N_m(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$ 分布。最后

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon}'[\mathbf{I} - \mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{l=1}^{n-r-1}\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{e}_l\mathbf{e}_l'\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{l=1}^{n-r-1}\mathbf{V}_l\mathbf{V}_l'$$

由式(4-22)知 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 服从 $W_{p,n-r-1}(\boldsymbol{\Sigma})$ 分布。

结论 7.10 为最小二乘估计的采用提供了进一步支持。当误差服从正态分布时,$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 与 $n^{-1}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 分别是 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的最大似然估计量。因此,对大样本情形,它们具有最小的可能方差。

评注 多元多重回归模型并没有提出新的计算问题。最小二乘(极大似然)估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{y}_{(i)}$ 是对每个响应变量逐个计算的。然而请注意:模型要求对所有响应变量使用同一组预测变量。

一旦用数据拟合了一个多元多重回归模型,就应该用 7.6 节中所介绍的诊断方法对这个模型做检查。根据 4.6 节中介绍的方法,考察残差向量 $[\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j1},\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j2},\cdots,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{jm}]$ 便可检查正态性是否满足或离群值是否存在。

本节剩余部分用来对正态理论下多元多重回归模型的推断做一简要讨论。这些问题的展开讨论见[1]和[21]。

回归参数的似然比检验

单响应回归模型中的假设(7-15)的内容是:响应变量不依赖于 $\mathbf{z}_{q+1},\mathbf{z}_{q+2},\cdots,\mathbf{z}_r$。设在多响应情况下该假设变为

$$H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)} = \mathbf{0} \quad 其中 \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \underset{((q+1)\times m)}{\boldsymbol{\beta}_{(1)}} \\ \hdashline \underset{((r-q)\times m)}{\boldsymbol{\beta}_{(2)}} \end{bmatrix} \tag{7-43}$$

令 $\mathbf{Z}=\left[\underset{(n\times(q+1))}{\mathbf{Z}_1} \;\vdots\; \underset{(n\times(r-q))}{\mathbf{Z}_2}\right]$,我们可将一般模型写成

$$E(\mathbf{Y}) = \mathbf{Z}\boldsymbol{\beta} = [\mathbf{Z}_1 \;\vdots\; \mathbf{Z}_2]\begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_{(1)} \\ \hdashline \boldsymbol{\beta}_{(2)} \end{bmatrix} = \mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)} + \mathbf{Z}_2\boldsymbol{\beta}_{(2)}$$

在假设 $H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$ 下,$\mathbf{Y}=\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\boldsymbol{\varepsilon}$,$H_0$ 的似然比检验建立在额外的平方与交叉乘积之

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

和的基础之上：

$$= (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})'(\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}) - (\mathbf{Y} - \mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})'(\mathbf{Y} - \mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}})$$
$$= n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 - \hat{\boldsymbol{\Sigma}})$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)} = (\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{Y}$，$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 = n^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})'(\mathbf{Y} - \mathbf{Z}_1\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})$。根据式(7-42)，可将似然比 Λ 表为广义方差之比：

$$\Lambda = \frac{\max\limits_{\boldsymbol{\beta}_{(1)},\boldsymbol{\Sigma}} L(\boldsymbol{\beta}_{(1)},\boldsymbol{\Sigma})}{\max\limits_{\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\Sigma}} L(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\Sigma})} = \frac{L(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)},\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1)}{L(\hat{\boldsymbol{\beta}},\hat{\boldsymbol{\Sigma}})} = \left(\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1|}\right)^{n/2} \tag{7-44}$$

因此可等价地采用威尔克斯 Λ 统计量

$$\Lambda^{2/n} = \frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1|}$$

结论 7.11 设式(7-26)中的多元多重回归模型成立，有满秩$(\mathbf{Z}) = r+1$，且 $r+1+m \leqslant n$。设误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从正态分布。在假设 $H_0: \boldsymbol{\beta}_{(2)} = \mathbf{0}$ 下，$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 服从 $W_{p,n-r-1}(\boldsymbol{\Sigma})$ 分布，与 $n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 - \hat{\boldsymbol{\Sigma}})$ 独立，而后者则服从 $W_{p,r-q}(\boldsymbol{\Sigma})$ 分布。H_0 的似然比检验等价于当

$$-2\ln\Lambda = -n\ln\left(\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1|}\right) = -n\ln\frac{|n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|n\hat{\boldsymbol{\Sigma}} + n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 - \hat{\boldsymbol{\Sigma}})|}$$

的值很大时拒绝 H_0。对大的 n①，修正的统计量

$$-\left[n - r - 1 - \frac{1}{2}(m - r + q + 1)\right]\ln\left(\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1|}\right)$$

作为相当好的近似，服从自由度为$(r-q)$的 χ^2 分布。

证明 （见补充 7A。）

若 $\mathbf{Z}$ 并非满秩，而是秩为 r_1+1，则 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{Y}$，此处$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-$为$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$的**广义逆**，这在[18]中有详细讨论。(又见练习 7.6)。结论 7.11 中有关分布的结论仍然正确，但要用 r_1 代替 r，及用秩$(\mathbf{Z}_1)$代替 $q+1$。然而在这种情况下并非所有关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的假设都是可以检验的。这是因为由 $\mathbf{Z}$ 的各列之间的相依性所造成的 $\boldsymbol{\beta}$ 的识别不具备惟一性。尽管如此，广义逆使得所有重要的 MANOVA 模型都可以作为多元多重回归模型的特殊情况来分析。

例 7.9 （在多元响应下检验附加预测变量的重要性）

一个大型连锁饭店处于不同地点的三个分店的服务由一批男性和女性主顾根据两个质量指标进行了评估。第一个服务质量指标已在例 7.5 中给出。假定一个回归模型考虑了位置、性别和位置-性别交互作用三者对两个服务质量指标产生的效应。设计矩阵(见例 7.5)对两个响应均保持不变。我们用结论 7.11 来说明对“无位置-性别交互作用”这一假设的检验。计算机程序给出

$$\begin{pmatrix}\text{残差的平方与}\\ \text{交叉乘积之和}\end{pmatrix} = n\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \begin{bmatrix}2977.39 & 1021.72\\ 1021.72 & 2050.95\end{bmatrix}$$

① 从技术上说，$n-r$ 和 $n-m$ 也都应足够大，才能得到好的 χ^2 近似。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\begin{pmatrix}\text{额外的平方与}\\ \text{交叉乘积之和}\end{pmatrix} = n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 - \hat{\boldsymbol{\Sigma}}) = \begin{bmatrix}441.76 & 246.16\\ 246.16 & 366.12\end{bmatrix}$$

令 $\boldsymbol{\beta}_{(2)}$ 为两个响应的交互作用参数矩阵。虽然样本容量 $n=18$ 不大，我们来说明结论 7.11 所提供的检验假设 $H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$ 时所涉及的计算。令 $\alpha=0.05$，我们将

$$-\left[n-r_1-1-\frac{1}{2}(m-r_1+q_1+1)\right]\ln\left(\frac{|n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}+n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})|}\right)$$

$$=-\left[18-5-1-\frac{1}{2}\times(2-5+3+1)\right]\times\ln(0.7605)=3.28$$

与自由度为 $m(r_1-q_1)=2\times2=4$ 的卡方百分点作比较，以检验 H_0。由于 $3.28<\chi_4^2(0.05)=9.49$，我们在 5%的水平下不拒绝 H_0。也就是说，不需要交互作用项。

更一般的情形是，我们可以考虑一个形如 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\Gamma}_0$ 的零假设，其中 $\mathbf{C}$ 为 $(r-q)\times(r+1)$ 常数阵，且有满秩 $(r-q)$。对 $\mathbf{C}=[\mathbf{0}\ \vdots\ \mathbf{I}]$ 及 $\boldsymbol{\Gamma}_0=\mathbf{0}$ 两种选择，这个零假设变成 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$，即前面讨论的情况。可以证明，由假设 H_0 所产生的额外平方与交叉乘积之和为

$$n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})=(\mathbf{C}\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\Gamma}_0)'(\mathbf{C}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{C}')^{-1}(\mathbf{C}\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\Gamma}_0)$$

在零假设下，统计量 $n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})$ 为 $W_{r-q}(\boldsymbol{\Sigma})$ 分布，且与 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 独立。这一分布理论可用来得出对假设 $H_0:\mathbf{C}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\Gamma}_0$ 的检验，即类似于结论 7.11 中的检验。（见[21]。）

其他多元检验统计量

在多元多重回归模型中，除似然比检验外，还提出过一些别的对假设 $H_0:\boldsymbol{\beta}_{(2)}=\mathbf{0}$ 的检验。

流行的计算机程序包通常只计算四种多元检验统计量。为了同它们的输出相联系，我们引进另一些符号。以 $\mathbf{E}$ 代表 $p\times p$ 误差，或残差的平方与交叉乘积之和矩阵

$$\mathbf{E}=n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$$

它可由拟合全模型得到。$p\times p$ 假设或额外的平方与交叉乘积之和矩阵

$$\mathbf{H}=n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})$$

上述统计量可直接由 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{H}$ 来定义，或者由 $\mathbf{HE}^{-1}$ 的非零特征值 $\eta_1\geqslant\eta_2\geqslant\cdots\geqslant\eta_s$ 来定义，此处 $s=\min(p,r-q)$。等价地，它们是 $|(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})-\eta\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|=0$ 的根。这些统计量的定义为：

$$\text{威尔克斯 }\Lambda=\prod_{i=1}^{s}\frac{1}{1+\eta_i}=\frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{E}+\mathbf{H}|}$$

$$\text{皮莱迹}=\sum_{i=1}^{s}\frac{\eta_i}{1+\eta_i}=\mathrm{tr}[\mathbf{H}(\mathbf{H}+\mathbf{E})^{-1}]$$

$$\text{霍特林-劳雷迹}=\sum_{i=1}^{s}\eta_i=\mathrm{tr}[\mathbf{HE}^{-1}]$$

$$\text{罗伊最大根}=\frac{\eta_1}{1+\eta_1}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

罗伊检验选择系数向量 $\mathbf{a}$，使得基于 $\mathbf{a}'\mathbf{Y}_j$ 的单变量 F 统计量达到最大的可能值。当存在几个中等大小的特征值 η_i 时，罗伊检验与其他三种检验相比表现较差。模拟研究表明，它的功效在只有一个大特征值时最大。罗伊检验的图和临界值的表皆可得到。（见[17]和[15]。）威尔克斯 Λ、罗伊最大根和霍特林-劳雷迹检验在大样本情形下几乎是等价的。

如果对这四个检验所报导的 P 值有很大歧异，则特征值和特征向量可能会提供解释。在本书中，我们提供威尔克斯 Λ 统计量，即似然比检验。

多元多重回归预测

假定模型 $\mathbf{Y}=\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}$ 有正态误差 $\boldsymbol{\varepsilon}$，并经过拟合和适合性的检查。如果模型适合，就可用于预测目的。

一个问题是对给定的预测变量值 $\mathbf{z}_0$ 预测平均响应。对平均响应做推断可利用结论 7.10 中的分布理论。根据这个结论，我们有

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0 \text{ 服从 } N_m(\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0, \mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\boldsymbol{\Sigma}) \text{ 分布}$$

及

$$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}} \text{ 独立地服从 } W_{n-r-1}(\boldsymbol{\Sigma}) \text{ 分布}$$

回归函数在 $\mathbf{z}_0$ 的值是 $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0$。因此，根据 5.2 节中所讨论的 T^2 统计量可以写出

$$T^2=\left(\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0}{\sqrt{\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}}\right)'\left(\frac{n}{n-r-1}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right)^{-1}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0}{\sqrt{\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0}}\right) \tag{7-45}$$

而 $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0$ 的 $100(1-\alpha)\%$**置信椭球**为

$$\begin{aligned}&(\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0)'\left(\frac{n}{n-r-1}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right)^{-1}(\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0)\\&\leqslant \mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\left[\left(\frac{m(n-r-1)}{n-r-m}\right)F_{m,n-r-m}(\alpha)\right]\end{aligned} \tag{7-46}$$

其中 $F_{m,n-r-m}(\alpha)$ 为自由度为 m 和 $n-r-m$ 的 F 分布第 100α 个上百分位数。

对 $E(Y_i)=\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}_{(i)}$，$100(1-\alpha)\%$**联合置信区间**为

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}\pm\sqrt{\left(\frac{m(n-r-1)}{n-r-m}\right)F_{m,n-r-m}(\alpha)}\sqrt{\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0\left(\frac{n}{n-r-1}\hat{\sigma}_{ii}\right)},\quad i=1,2,\cdots,m \tag{7-47}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$ 为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的第 i 列，$\hat{\sigma}_{ii}$ 为 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 的第 i 个对角元。

第二个预测问题是在 $\mathbf{z}_0$ 点预测新的响应 $\mathbf{Y}_0=\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0+\boldsymbol{\varepsilon}_0$。这里 $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ 独立于 $\boldsymbol{\varepsilon}$。现在，

$$\mathbf{Y}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0=(\boldsymbol{\beta}-\hat{\boldsymbol{\beta}})'\mathbf{z}_0+\boldsymbol{\varepsilon}_0 \quad \text{服从分布} \quad N_m(\mathbf{0},(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)\boldsymbol{\Sigma})$$

且独立于 $n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$，故 $\mathbf{Y}_0$ 的 $100(1-\alpha)\%$**预测椭球**为

$$\begin{aligned}&(\mathbf{Y}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0)'\left(\frac{n}{n-r-1}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\right)^{-1}(\mathbf{Y}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0)\\&\leqslant(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)\left[\left(\frac{m(n-r-1)}{n-r-m}\right)F_{m,n-r-m}(\alpha)\right]\end{aligned} \tag{7-48}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

单个响应 $\mathbf{Y}_{0i}$ 的 $100(1-\alpha)\%$ **联合预测区间**为

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} \pm \sqrt{\left(\frac{m(n-r-1)}{n-r-m}\right)F_{m,n-r-m}(\alpha)}\sqrt{(1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0)\left(\frac{n}{n-r-1}\hat{\sigma}_{ii}\right)},$$
$$i=1,2,\cdots,m \tag{7-49}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)}$，$\hat{\sigma}_{ii}$ 和 $F_{m,n-r-m}(\alpha)$ 与式(7-47)中相应的量相同。比较式(7-47)和式(7-49)，我们看到响应变量**实际**值的预测区间要比**期望**值的预测区间宽。附加的宽度反映了随机误差 ε_{0i} 的存在。

例 7.10 （对二元响应构造置信椭圆和预测椭圆）

对例 7.6 中讨论的计算机需求问题测量了第二个响应变量。响应变量 Y_2 为硬盘容量，与该例中 z_1 和 z_2 值相对应的观测值为

$$\mathbf{y}_2=[301.8,396.1,328.2,307.4,362.4,369.5,229.1]'$$

对具有组态 $\mathbf{z}_0=[1,130,7.5]'$ 的场所，求 $\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0$ 的 95%置信椭圆和 $\mathbf{Y}_0=[Y_{01},Y_{02}]'$ 的 95%预测椭圆。

计算机计算提供拟合方程

$$\hat{y}_2=14.14+2.25z_1+5.67z_2$$

及 $s=1.812$。于是 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}=[14.14,2.25,5.67]'$。由例 7.6

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}=[8.42,1.08,42]',\ \mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}=151.97 \quad 及\ \mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0=0.34725$$

我们发现

$$\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}=14.14+2.25\times130+5.67\times7.5=349.17$$

及

$$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\begin{bmatrix}(\mathbf{y}_{(1)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})'(\mathbf{y}_{(1)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}) & (\mathbf{y}_{(1)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)})'(\mathbf{y}_{(2)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)})\\(\mathbf{y}_{(2)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)})'(\mathbf{y}_{(1)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}) & (\mathbf{y}_{(2)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)})'(\mathbf{y}_{(2)}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)})\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}5.80 & 5.30\\5.30 & 13.13\end{bmatrix}$$

由于

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_0=\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}'\\ \hline \hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}'\end{bmatrix}\mathbf{z}_0=\begin{bmatrix}\mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(1)}\\ \hline \mathbf{z}_0'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}151.97\\349.17\end{bmatrix}$$

$n=7$，$r=2$ 及 $m=2$，由式(7-46)，$\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}_0$ 的 95%置信椭圆为

$$[\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}_{(1)}-151.97,\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}_{(2)}-349.17](4)\begin{bmatrix}5.80 & 5.30\\5.30 & 13.13\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}_{(1)}-151.97\\ \mathbf{z}_0'\boldsymbol{\beta}_{(2)}-349.17\end{bmatrix}$$
$$\leqslant(0.34725)\left[\left(\frac{2\times4}{3}\right)F_{2,3}(0.05)\right]$$

其中 $F_{2,3}(0.05)=9.55$。这个椭圆的中心是(151.97,349.17)。它的方向及长短轴的长度可以由 $n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 的特征值和特征向量来确定。

将式(7-46)与式(7-48)相比较，我们发现，计算**预测**椭圆与计算**置信**椭圆的惟一差别是用 $1+\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0=1.34725$ 来代替 $\mathbf{z}_0'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{z}_0=0.34725$。这样，$\mathbf{Y}_0=[Y_{01},Y_{02}]'$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的 95% 预测椭圆也以(151.97,349.17)为中心,但大于置信椭圆。这两个椭圆均示于图 7.5。

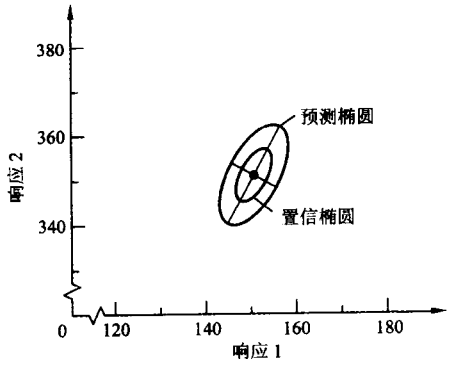


图 7.5 有两个响应的计算机数据的 95% 置信椭圆和预测椭圆

对给定的 $\mathbf{z}_0$,决定某一特定场所计算机需求的正是预测椭圆。

7.8 线性回归的概念

经典线性回归模型考虑单个因变量 Y 与一组预测变量 $z_1,z_2,\cdots,z_r$ 之间的联系。我们前面所考虑的回归模型将 Y 作为随机变量来处理,其均值依赖于诸 z_i 的固定值。这个均值被假定为回归系数 $\beta_0,\beta_1,\cdots,\beta_r$ 的线性函数。

线性回归模型也可以从不同假定中产生。设变量 $Y,Z_1,Z_2,\cdots,Z_r$ 都是随机变量,因而有一个未必是正态的联合分布,其均值向量为 $\boldsymbol{\mu}$,协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$。将 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 分块,便可有

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\underset{(1\times1)}{\mu_Y}\\ \hdashline \underset{(r\times1)}{\boldsymbol{\mu}_Z}\end{bmatrix}\quad 和\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\underset{(1\times1)}{\sigma_{YY}} & \underset{(1\times r)}{\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}}\\ \hdashline \underset{(r\times1)}{\boldsymbol{\sigma}_{ZY}} & \underset{(r\times r)}{\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}}\end{bmatrix}$$

其中

$$\boldsymbol{\sigma}_{ZY}=[\sigma_{YZ_1},\sigma_{YZ_2},\cdots,\sigma_{YZ_r}]' \tag{7-50}$$

$\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}$可取得满秩①。考虑对 Y 的预测问题,采用

$$线性预测量=b_0+b_1Z_1+\cdots+b_rZ_r=b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z} \tag{7-51}$$

对形如(7-51)的给定预测量,Y 的预测误差为

$$预测误差=Y-b_0-b_1Z_1-\cdots-b_rZ_r=Y-b_0-\mathbf{b}'\mathbf{Z} \tag{7-52}$$

由于这个误差是随机的,常选择 b_0 和 $\mathbf{b}$,使

$$均方误差=E(Y-b_0-\mathbf{b}'\mathbf{Z})^2 \tag{7-53}$$

达到极小。现在均方误差仅通过参数 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 依赖于 Y 和 $\mathbf{Z}$ 的联合分布,因而有可能将"最

① 若 $\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}$不满秩,则有一个变量,比如说 $\mathbf{Z}_k$,可表为其余 $\mathbf{Z}_i$ 的线性组合,因而这个变量在构造线性回归函数 $\mathbf{Z}'\boldsymbol{\beta}$ 时是多余的。也就是说,$\mathbf{Z}$ 可以用其分量的一个子集代替,其协方差阵满秩,且与 $\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}$的秩相同。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

优”线性预测量用这些参数表示出来。

结论 7.12 在响应 Y 的所有线性预测量中，系数为

$$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}, \quad \beta_0 = \mu_Y - \boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\mu}_Z$$

的线性预测量 $\beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z}$ 的均方误差最小。这一均方误差为

$$E(Y-\beta_0-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z})^2 = E(Y-\mu_Y-\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{Z}-\boldsymbol{\mu}_Z))^2 = \sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}$$

此外，$\beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z}=\mu_Y+\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{Z}-\boldsymbol{\mu}_Z)$ 是与 $\mathbf{Y}$ 有最大相关系数的线性预测量，即有

$$\begin{aligned}\mathrm{Corr}(Y,\beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z}) &= \max_{b_0,\mathbf{b}}\mathrm{Corr}(Y,b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z})\\ &= \sqrt{\frac{\boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\boldsymbol{\beta}}{\sigma_{YY}}} = \sqrt{\frac{\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}}{\sigma_{YY}}}\end{aligned}$$

证明 先写出恒等式 $b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z}=b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z}-(\mu_Y-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_z)+(\mu_Y-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_z)$，我们有

$$\begin{aligned}E(Y-b_0-\mathbf{b}'\mathbf{Z})^2 &= E[Y-\mu_Y-(\mathbf{b}'\mathbf{Z}-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_Z)+((\mu_Y-b_0-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_Z)]^2\\ &= E(Y-\mu_Y)^2+E(\mathbf{b}'(\mathbf{Z}-\boldsymbol{\mu}_Z))^2+(\mu_Y-b_0-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_Z)^2\\ &\qquad -2E[\mathbf{b}'(\mathbf{Z}-\boldsymbol{\mu}_Z)(Y-\mu_Y)]\\ &= \sigma_{YY}+\mathbf{b}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\mathbf{b}+(\mu_Y-b_0-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_Z)^2-2\mathbf{b}'\boldsymbol{\sigma}_{ZY}\end{aligned}$$

加减 $\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}$，得到

$$\begin{aligned}E(Y-b_0-\mathbf{b}'\mathbf{Z})^2 &= \sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}+(\mu_Y-b_0-\mathbf{b}'\boldsymbol{\mu}_Z)^2\\ &\quad +(\mathbf{b}-\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY})'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}(\mathbf{b}-\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY})\end{aligned}$$

均方误差在上式右端最后两项为零时达到极小，这可通过先取 $\mathbf{b}=\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}=\boldsymbol{\beta}$，然后取 $b_0=\mu_Y-(\boldsymbol{\Sigma}_{zz}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY})'\boldsymbol{\mu}_z=\beta_0$ 来实现。于是最小均方误差为 $\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'-\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}$。

其次，注意到 $\mathrm{Cov}(b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z},Y)=\mathrm{Cov}(\mathbf{b}'\mathbf{Z},Y)=\mathbf{b}'\boldsymbol{\sigma}_{ZY}$，故对所有 b_0 和 $\mathbf{b}$ 有

$$[\mathrm{Corr}(b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z},Y)]^2 = \frac{[\mathbf{b}'\boldsymbol{\sigma}_{ZY}]^2}{\sigma_{YY}(\mathbf{b}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\mathbf{b})}$$

应用推广的柯西-施瓦茨不等式(2-49)，并取 $\mathbf{B}=\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}$，得到

$$(\mathbf{b}'\boldsymbol{\sigma}_{ZY})^2 \leqslant \mathbf{b}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}$$

或

$$[\mathrm{Corr}(b_0+\mathbf{b}'\mathbf{Z},Y)]^2 \leqslant \frac{\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}}{\sigma_{YY}}$$

其中等号对 $\mathbf{b}=\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}=\boldsymbol{\beta}$ 成立。最大相关的另一种表达式由 $\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}=\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\boldsymbol{\beta}$ 得到。

Y 与其最佳线性预测量之间的相关系数称为**总体多重相关系数**

$$\rho_{Y(\mathbf{Z})} = +\sqrt{\frac{\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}}{\sigma_{YY}}} \tag{7-54}$$

总体多重相关系数的平方 $\rho_{Y(\mathbf{Z})}^2$ 称为**总体决定系数**。注意，与两个变量的相关系数不同，多重相关系数为正的平方根，故 $0\leqslant\rho_{Y(\mathbf{Z})}\leqslant 1$。

总体决定系数有一个重要解释。根据结论 7.12，用 $\beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z}$ 预测 Y 时的均方误差为

$$\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY} = \sigma_{YY}-\sigma_{YY}\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}}{\sigma_{YY}}\right) = \sigma_{YY}(1-\rho_{Y(\mathbf{Z})}^2) \tag{7-55}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

若 $\rho^2_{Y(\mathbf{Z})}=0$，则 $\mathbf{Z}$ 没有预测 $\mathbf{Y}$ 的能力。另一个极端 $\rho^2_{Y(\mathbf{Z})}=1$ 意味着 Y 可以无误差地被预测。

例 7.11 （最佳线性预测量及其均方误差与多重相关系数的确定）

给定 Y, Z_1 和 Z_2 的均值向量和协方差矩阵

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\mu_Y\\ \hdashline \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5\\ \hdashline 2\\ 0\end{bmatrix}\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma_{YY} & \boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\\ \hdashline \boldsymbol{\sigma}_{ZY} & \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}10 & 1 & -1\\ \hdashline 1 & 7 & 3\\ -1 & 3 & 2\end{bmatrix}$$

试确定(a)最佳线性预测量 $\beta_0+\beta_1Z_1+\beta_2Z_2$，(b)这个预测量的均方误差，(c)多重相关系数。此外，验证均方误差等于 $\sigma_{YY}(1-\rho^2_{Y(\mathbf{Z})})$。

首先，

$$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}=\begin{bmatrix}7 & 3\\ 3 & 2\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.4 & -0.6\\ -0.6 & 1.4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ -2\end{bmatrix}$$

$$\beta_0=\mu_Y-\boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}=5-[1,\ -2]\begin{bmatrix}2\\ 0\end{bmatrix}=3$$

故最佳线性预测量为 $\beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z}=3+2Z_1-2Z_2$。均方误差为

$$\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}=10-[1,\ -1]\begin{bmatrix}0.4 & -0.6\\ -0.6 & 1.4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}=10-3=7$$

多重相关系数为

$$\rho_{Y(\mathbf{Z})}=\sqrt{\frac{\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}}{\sigma_{YY}}}=\sqrt{\frac{3}{10}}=0.548$$

注意 $\sigma_{YY}(1-\rho^2_{Y(\mathbf{Z})})=10\times(1-3/10)=7$ 等于均方误差。

可以证明(见练习 7.5)

$$1-\rho^2_{Y(\mathbf{Z})}=\frac{1}{\rho^{YY}} \tag{7-56}$$

其中 ρ^{YY} 为协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 之逆 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的左上角元素。

之所以将预测量限制为线性函数，这与正态性假定紧密相关。若取

$$\begin{bmatrix}Y\\ Z_1\\ Z_2\\ \vdots\\ Z_r\end{bmatrix}\quad \text{服从联合分布}\quad N_{r+1}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$$

则给定 $z_1,z_2,\cdots,z_r$ 时 Y 的条件分布(见结论 4.6)为

$$N(\mu_Y+\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}),\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY})$$

这一条件分布的期望就是结论 7.12 中的线性预测量：

$$\begin{aligned}E(Y\mid z_1,z_2,\cdots,z_r)&=\mu_Y+\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})\\ &=\beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}\end{aligned} \tag{7-57}$$

由此得出结论：当总体为 $N_{r+1}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 时，$E(Y\mid z_1,z_2,\cdots,z_r)$ 为 Y 的最佳线性预测量。式(7-57)中 Y 的条件期望称为**线性回归函数**。

当总体非正态时，回归函数 $E(Y\mid z_1,z_2,\cdots,z_r)$ 未必具有线性形式。但可以证明(见[18])，不论其形式如何，$E(Y\mid z_1,z_2,\cdots,z_r)$ 皆以最小均方误差预测 Y。幸运的是，这一在

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

所有估计量中比较广泛的最优性在正态总体的情况下为线性函数所具备。

结论 7.13 假定 Y 和 $\mathbf{Z}$ 的联合分布为 $N_{r+1}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$。令

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\begin{bmatrix}\bar{Y}\\ \hline \bar{\mathbf{Z}}\end{bmatrix}\quad \mathbf{S}=\left[\begin{array}{c|c}S_{YY} & \mathbf{s}'_{ZY}\\ \hline \mathbf{s}_{ZY} & \mathbf{S}_{ZZ}\end{array}\right]$$

分别为来自这个总体的容量为 n 的随机样本的均值向量和协方差矩阵。此时线性预测量中系数的极大似然估计量为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{s}_{ZY},\qquad \hat{\beta}_0=\bar{Y}-\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\bar{\mathbf{Z}}=\bar{Y}-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\bar{\mathbf{Z}}$$

因此，线性回归函数的极大似然估计量为

$$\hat{\beta}_0+\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}=\bar{Y}+\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{z}-\bar{\mathbf{Z}})$$

而均方误差 $E[Y-\beta_0-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z}]^2$ 的极大似然估计量为

$$\hat{\sigma}_{YY\cdot\mathbf{z}}=\frac{n-1}{n}(s_{YY}-\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{s}_{ZY})$$

证明 我们采用结论 4.11 和极大似然估计量的不变性[见式(4-20)]。因为由结论 7.12 知

$$\beta_0=\mu_Y-(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY})'\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}},$$

$$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY},\quad \beta_0+\boldsymbol{\beta}'\mathbf{z}=\mu_Y+\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})$$

及

$$\text{均方误差}=\sigma_{YY\cdot\mathbf{z}}=\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}$$

则结论可通过将极大似然估计量

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\begin{bmatrix}\bar{Y}\\ \hline \bar{\mathbf{Z}}\end{bmatrix}\quad 与\quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\left[\begin{array}{c|c}\hat{\sigma}_{YY} & \hat{\boldsymbol{\sigma}}'_{ZY}\\ \hline \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{ZY} & \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{ZZ}\end{array}\right]=\left(\frac{n-1}{n}\right)\mathbf{S}$$

代替参数

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\mu_Y\\ \hline \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}\end{bmatrix}\quad 与\quad \boldsymbol{\Sigma}=\left[\begin{array}{c|c}\sigma_{YY} & \boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\\ \hline \boldsymbol{\sigma}_{ZY} & \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\end{array}\right]$$

而得到。

习惯的作法是将均方误差 $\sigma_{YY\cdot\mathbf{z}}=E(Y-\beta_0-\boldsymbol{\beta}'\mathbf{Z})^2$ 的估计量的除数 n 用 $n-(r+1)$ 来代替，以获得**无偏**估计量：

$$\left(\frac{n-1}{n-r-1}\right)(s_{YY}-\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{s}_{ZY})=\frac{\sum_{j=1}^{n}(Y_j-\hat{\beta}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{Z}_j)^2}{n-r-1}\tag{7-58}$$

例 7.12 （单响应回归函数的极大似然估计）

对例 7.6 中给出计算机数据，Y(CPU 时间)，Z_1(订单)和 Z_2(增删项目)的 $n=7$ 个观测值所给出的样本均值向量和样本协方差矩阵为

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\begin{bmatrix}\bar{y}\\ \hline \bar{\mathbf{Z}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}150.44\\ \hline 130.24\\ 3.547\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{S}=\left[\begin{array}{c|c}s_{YY} & \mathbf{s}'_{ZY}\\ \hline \mathbf{s}_{ZY} & \mathbf{S}_{ZZ}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c|cc}467.913 & 418.763 & 35.983\\ \hline 418.763 & 377.200 & 28.034\\ 35.983 & 28.034 & 13.657\end{array}\right]$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

假定 Y, Z_1 和 Z_2 是联合正态变量，求估计的回归函数和估计的均方误差。

结论 7.13 给出极大似然估计值

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{s}_{ZY} = \begin{bmatrix} 0.003128 & -0.006422 \\ -0.006422 & 0.086404 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 418.763 \\ 35.983 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.079 \\ 0.420 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}'\bar{\mathbf{z}} = 150.44 - [1.079, 0.420]\begin{bmatrix} 130.24 \\ 3.547 \end{bmatrix} = 150.44 - 142.019$$

$$= 8.421$$

于是估计的回归函数为

$$\hat{\beta}_0 + \hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z} = 8.42 - 1.08z_1 + 0.42z_2$$

用回归函数预测 Y 的均方误差为

$$\left(\frac{n-1}{n}\right)(s_{YY} - \mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{s}_{ZY})$$

$$= \left(\frac{6}{7}\right)\left(467.913 - [418.763, 35.983]\begin{bmatrix} 0.003128 & -0.006422 \\ -0.006422 & 0.086404 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 418.763 \\ 35.983 \end{bmatrix}\right)$$

$$= 0.894$$

若干个变量的预测

上述结论可直截了当地推广到若干个响应 $Y_1, Y_2, \cdots, Y_m$ 的预测问题。我们对正态总体给出此种推广。

设

$$\begin{bmatrix} \underset{(m\times 1)}{\mathbf{Y}} \\ \hdashline \underset{(r\times 1)}{\mathbf{Z}} \end{bmatrix} \text{ 的联合分布为 } N_{m+r}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

其中

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \overset{(m\times 1)}{\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}} \\ \hdashline \underset{(r\times 1)}{\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}} \end{bmatrix}, \text{ 及 } \boldsymbol{\Sigma} = \left[\begin{array}{c:c} \underset{(m\times m)}{\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}}} & \underset{(m\times r)}{\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}} \\ \hdashline \underset{(r\times m)}{\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZY}}} & \underset{(r\times r)}{\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}} \end{array}\right]$$

由结论 4.6，当预测变量的值 $z_1, z_2, \cdots, z_r$ 给定时，$[Y_1, Y_2, \cdots, Y_m]'$ 的条件期望为

$$E[\mathbf{Y} \mid z_1, z_2, \cdots, z_r] = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} + \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}) \tag{7-59}$$

该条件期望称为向量 $\mathbf{Y}$ 对 $\mathbf{Z}$ 的**多元回归**。它由 m 个一元回归构成。例如，条件均值向量的第一个分量为 $\mu_{Y_1} + \boldsymbol{\Sigma}_{Y_1\mathbf{Z}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}) = E(Y_1 \mid z_1, z_2, \cdots, z_r)$，它使预测 Y_1 的均方误差最小化。$m \times r$ 矩阵 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}$ 称为**回归系数阵**。

预测向量的误差

$$\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})$$

有平方与交叉乘积期望阵

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}\cdot\mathbf{Z}} &= E[\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})][\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})]' \\ &= \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}})' - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZY}} + \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}})' \\ &= \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZY}} \end{aligned} \tag{7-60}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

由于 $\boldsymbol{\mu}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 一般是未知的，它们必须用一个随机样本来估计，以构造多元线性预测量并确定期望预测误差。

结论 7.14 设 $\mathbf{Y}$ 和 $\mathbf{Z}$ 的分布为 $N_{m+r}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，此时 $\mathbf{Y}$ 对 $\mathbf{Z}$ 的回归为

$$\boldsymbol{\beta}_0+\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{Z}}=\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}}+\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\mathbf{z}=\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}+\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})$$

误差的平方与交叉乘积期望矩阵为

$$E(\mathbf{Y}-\boldsymbol{\beta}_0-\boldsymbol{\beta}\mathbf{Z})(\mathbf{Y}-\boldsymbol{\beta}_0-\boldsymbol{\beta}\mathbf{Z})'=\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}\cdot\mathbf{Z}}=\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}}-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZY}}$$

建立在一个容量为 n 的随机样本基础上的回归函数的极大似然估计量为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_0+\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathbf{Z}}=\bar{\mathbf{Y}}+\mathbf{S}_{\mathbf{YZ}}\mathbf{S}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{z}-\bar{\mathbf{Z}})$$

而 $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}\cdot\mathbf{Z}}$ 的极大似然估计量则为

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{YY}\cdot\mathbf{Z}}=\left(\frac{n-1}{n}\right)(\mathbf{S}_{\mathbf{YY}}-\mathbf{S}_{\mathbf{YZ}}\mathbf{S}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\mathbf{S}_{\mathbf{ZY}})$$

证明 回归函数和预测误差的协方差矩阵由结论 4.6 得到。利用关系式

$$\boldsymbol{\beta}_0=\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}},\quad \boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}$$

$$\boldsymbol{\beta}_0+\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{Z}}=\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}+\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{z}-\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Z}})$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}\cdot\mathbf{Z}}=\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}}-\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YZ}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZY}}=\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}}-\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{ZZ}}\boldsymbol{\beta}'$$

可由不变性[见式(4-20)]得到上述量的极大似然估计量，只需进行下列替代即可：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\begin{bmatrix}\bar{\mathbf{Y}}\\ \hline \bar{\mathbf{Z}}\end{bmatrix};\quad \hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\left[\begin{array}{c:c}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{YY}} & \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{YZ}}\\ \hdashline \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{ZY}} & \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{ZZ}}\end{array}\right]=\left(\frac{n-1}{n}\right)\mathbf{S}=\left(\frac{n-1}{n}\right)\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{S}_{\mathbf{YY}} & \mathbf{S}_{\mathbf{YZ}}\\ \hdashline \mathbf{S}_{\mathbf{ZY}} & \mathbf{S}_{\mathbf{ZZ}}\end{array}\right]$$

可以证明，$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}\cdot\mathbf{Z}}$ 的无偏估计量为

$$\left(\frac{n-1}{n-r-1}\right)(\mathbf{S}_{\mathbf{YY}}-\mathbf{S}_{\mathbf{YZ}}\mathbf{S}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}\mathbf{S}_{\mathbf{ZY}})$$

$$=\frac{1}{n-r-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{Y}_j-\hat{\boldsymbol{\beta}}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}\mathbf{Z}_j)(\mathbf{Y}_j-\hat{\boldsymbol{\beta}}_0-\hat{\boldsymbol{\beta}}\mathbf{Z}_j)' \qquad (7\text{-}61)$$

例 7.13 （双响应回归函数的极大似然估计）

我们回到例 7.6 和例 7.10 的计算机数据。对 Y_1=CPU 时间，Y_2=硬盘 I/O 容量，Z_1=订单，Z_2=增删项目，我们有

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\begin{bmatrix}\bar{\mathbf{y}}\\ \hline \bar{\mathbf{z}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}150.44\\ 327.79\\ \hdashline 130.24\\ 3.547\end{bmatrix}$$

及

$$\mathbf{S}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{S}_{\mathbf{YY}} & \mathbf{S}_{\mathbf{YZ}}\\ \hdashline \mathbf{S}_{\mathbf{ZY}} & \mathbf{S}_{\mathbf{ZZ}}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc:cc}467.913 & 1148.556 & 418.763 & 35.983\\ 1148.556 & 3072.491 & 1008.976 & 140.558\\ \hdashline 418.763 & 1008.976 & 377.200 & 28.034\\ 35.983 & 140.558 & 28.034 & 13.657\end{array}\right]$$

假定正态性，我们得到估计的回归函数为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_0+\hat{\boldsymbol{\beta}}\mathbf{z}=\bar{\mathbf{y}}+\mathbf{S}_{\mathbf{YZ}}\mathbf{S}_{\mathbf{ZZ}}^{-1}(\mathbf{z}-\bar{\mathbf{z}})$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\begin{bmatrix}150.44\\327.79\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}418.763 & 35.983\\1008.976 & 140.558\end{bmatrix}$$

$$\times\begin{bmatrix}0.003128 & -0.006422\\-0.006422 & 0.086404\end{bmatrix}\begin{bmatrix}z_1-130.24\\z_2-3.547\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}150.44\\327.79\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1.079(z_1-130.24)+0.420(z_2-3.547)\\2.254(z_1-130.24)+5.665(z_2-3.547)\end{bmatrix}$$

这样，Y_1 的最小均方误差预测量为

$$150.44+1.079(z_1-130.24)+0.420(z_2-3.547)=8.42+1.08z_1+0.42z_2$$

类似地，Y_2 的最佳预测量为

$$14.14+2.25z_1+5.67z_2$$

误差的平方与交叉乘积期望矩阵 $\mathbf{\Sigma}_{YY\cdot Z}$ 的极大似然估计值为

$$\left(\frac{n-1}{n}\right)(\mathbf{S}_{YY}-\mathbf{S}_{YZ}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{S}_{ZY})$$

$$=\left(\frac{6}{7}\right)\left(\begin{bmatrix}467.913 & 1148.536\\1148.536 & 3072.491\end{bmatrix}\right.$$

$$\left.-\begin{bmatrix}418.763 & 35.983\\1008.976 & 140.558\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.003128 & -0.006422\\-0.006422 & 0.086404\end{bmatrix}\begin{bmatrix}418.763 & 1008.976\\35.983 & 140.558\end{bmatrix}\right)$$

$$=\left(\frac{6}{7}\right)\begin{bmatrix}1.043 & 1.042\\1.042 & 2.572\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.894 & 0.893\\0.893 & 2.205\end{bmatrix}$$

第一个估计的回归函数 $8.42+1.08z_1+0.42z_2$ 及与之相联系的均方误差 0.894 与例 7.12 中单响应情形下的结果相同。类似地，第二个估计的回归函数 $14.14+2.25z_1+5.67z_2$，与例 7.10 中所给的结果一致。

我们看到，用这组数据预测 Y_1 时，其误差比预测 Y_2 时的误差小。正的协方差 0.893 指出，对 CPU 时间的过度预测（不足预测）易伴随有硬盘容量过度预测（不足预测）。

评论 结论 7.14 认为，对整个变量集合 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_m,Z_1,Z_2,\cdots,Z_r$ 的联合正态性假定得到预测方程

$$\hat{y}_1=\hat{\beta}_{01}+\hat{\beta}_{11}z_1+\cdots+\hat{\beta}_{r1}z_r$$
$$\hat{y}_2=\hat{\beta}_{02}+\hat{\beta}_{12}z_1+\cdots+\hat{\beta}_{r2}z_r$$
$$\vdots$$
$$\hat{y}_m=\hat{\beta}_{0m}+\hat{\beta}_{1m}z_1+\cdots+\hat{\beta}_{rm}z_r$$

我们提醒以下两点：

1. 用同一组 $z_1,z_2,\cdots,z_r$ 值预测每个 Y_i。
2. $\hat{\beta}_{ik}$ 为回归系数阵 $\boldsymbol{\beta}=\mathbf{\Sigma}_{YZ}\mathbf{\Sigma}_{ZZ}^{-1}$ 的第 (i,k) 个元素（对 $i,k\geqslant 1$）。

我们通过引进一个新的相关系数来结束本节对回归问题的讨论。

偏相关系数

考虑利用最佳线性预测量预测 Y_1 和 Y_2 时所得出的一对误差

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$Y_1 - \mu_{Y1} - \boldsymbol{\Sigma}_{Y1Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z)$$
$$Y_2 - \mu_{Y2} - \boldsymbol{\Sigma}_{Y2Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z)$$

它们的相关系数由误差协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{YY\cdot Z}=\boldsymbol{\Sigma}_{YY}-\boldsymbol{\Sigma}_{YZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZY}$ 决定。这个相关系数所量度的是排除 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_r$ 的影响后，Y_1 与 Y_2 之间的关联性。

我们将排除 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_r$ 的影响后 Y_1 与 Y_2 之间的**偏相关系数**定义为

$$\rho_{Y_1Y_2\cdot Z} = \frac{\sigma_{Y_1Y_2\cdot Z}}{\sqrt{\sigma_{Y_1Y_1\cdot Z}}\sqrt{\sigma_{Y_2Y_2\cdot Z}}} \tag{7-62}$$

其中 $\sigma_{Y_iY_k\cdot Z}$ 为矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{YY\cdot Z}=\boldsymbol{\Sigma}_{YY}-\boldsymbol{\Sigma}_{YZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZY}$ 的第 (i,k) 个元素。相应的**样本偏相关系数**为

$$r_{Y_1Y_2\cdot Z}\ \frac{s_{Y_1Y_2\cdot Z}}{\sqrt{s_{Y_1Y_1\cdot Z}}\sqrt{s_{Y_2Y_2\cdot Z}}} \tag{7-63}$$

其中 $s_{Y_iY_k\cdot Z}$ 为 $\mathbf{S}_{YY}-\mathbf{S}_{YZ}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{S}_{ZY}$ 的 (i,k) 个元素。假定 $\mathbf{Y}$ 和 $\mathbf{Z}$ 有联合多元正态分布，我们发现(7-63)中的样本偏相关系数是式(7-62)中的偏相关系数的极大似然估计量。

例 7.14 偏相关系数的计算

由例 7.13 的计算机数据知

$$\mathbf{S}_{YY} - \mathbf{S}_{YZ}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}\mathbf{S}_{ZY} = \begin{bmatrix} 1.043 & 1.042 \\ 1.042 & 2.572 \end{bmatrix}$$

因此有

$$r_{Y_1Y_2\cdot Z} = \frac{s_{Y_1Y_2\cdot Z}}{\sqrt{s_{Y_1Y_1\cdot Z}}\sqrt{s_{Y_2Y_2\cdot Z}}} = \frac{1.042}{\sqrt{1.043}\times\sqrt{2.572}} = 0.64$$

计算普通相关系数，得 $r_{Y_1Y_2}=0.96$。比较这两个相关系数，我们发现在排除变量 $\mathbf{Z}$ 对两个响应的影响后，Y_1 与 Y_2 之间的相关性被大幅削减。

7.9 比较回归模型的两种表述方式

在 7.2 和 7.7 节，我们分别介绍了对一个和多个响应变量的多重回归模型。在这些处理中，预测变量在第 j 次试验中有固定的值 $\mathbf{z}_j$。作为另一种选择，我们可以如 7.8 节中那样，从一组有联合正态分布的变量开始。在给定一个变量子集的条件下预测另一个子集的值的过程导致求条件期望，亦即多重回归模型。这两种多重回归的方法是相互联系的。为直接说明这种联系，我们引进两种略有差异的回归模型表述方式。

回归模型的均值修正形式

对任一响应变量 Y，多重回归模型假定

$$Y_j = \beta_0 + \beta_1 z_{1j} + \cdots + \beta_r z_{rj} + \varepsilon_j$$

预测变量可以减去其均值，从而“中心化”。例如，$\beta_1 z_{1j}=\beta_1(z_{1j}-\bar{z}_1)+\beta_z\bar{z}_1$，我们有

$$Y_j = (\beta_0 + \beta_1\bar{z}_1 + \cdots + \beta_r\bar{z}_r) + \beta_1(z_{1j} - \bar{z}_1) + \cdots + \beta_r(z_{rj} - \bar{z}_r) + \varepsilon_j$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= \beta_* + \beta_1(z_{1j} - \bar{z}_1) + \cdots + \beta_r(z_{rj} - \bar{z}_r) + \varepsilon_j \tag{7-64}$$

其中 $\beta_* = \beta_0 + \beta_1\bar{z}_1 + \cdots + \beta_r\bar{z}_r$。对应于式(7-64)中的参数变换，**均值修正**设计矩阵为

$$\mathbf{Z}_c = \begin{bmatrix} 1 & z_{11} - \bar{z}_1 & \cdots & z_{1r} - \bar{z}_r \\ 1 & z_{21} - \bar{z}_1 & \cdots & z_{2r} - \bar{z}_r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z_{n1} - \bar{z}_1 & \cdots & z_{nr} - \bar{z}_r \end{bmatrix}$$

其中后 r 列均垂直于第一列，这是因为

$$\sum_{j=1}^{n} 1(z_{ji} - \bar{z}_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, r$$

进一步，令 $\mathbf{Z}_c = [\mathbf{1} \vdots \mathbf{Z}_{c2}]$，其中 $\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{1} = \mathbf{0}$，我们有

$$\mathbf{Z}_c'\mathbf{Z}_c = \begin{bmatrix} \mathbf{1}'\mathbf{1} & \mathbf{1}'\mathbf{Z}_{c2} \\ \mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{1} & \mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \mathbf{0}' \\ \mathbf{0} & \mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2} \end{bmatrix}$$

故

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_* \\ \hline \hat{\beta}_1 \\ \vdots \\ \hat{\beta}_r \end{bmatrix} = (\mathbf{Z}_c'\mathbf{Z}_c)^{-1}\mathbf{Z}_c'\mathbf{y}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{n} & \mathbf{0}' \\ \mathbf{0} & (\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{1}'\mathbf{y} \\ \mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} \\ \hline (\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2})^{-1}\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{y} \end{bmatrix} \tag{7-65}$$

也就是说，回归系数 $[\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r]'$，由 $(\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2})^{-1}\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{y}$ 无偏估计，而 β_* 则由 $\bar{y}$ 估计。由于在式(7-64)的参数变换中 $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r$ 的定义不变，它们的由设计矩阵 $\mathbf{Z}_c$ 计算的最佳估计与由设计阵 $\mathbf{Z}$ 所计算的最佳估计完全相同。于是，令 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_c = [\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \cdots, \hat{\beta}_r]'$，$Y$ 的线性预测量可以写为

$$\hat{y} = \hat{\beta}_* + \hat{\boldsymbol{\beta}}_c'(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}) = \bar{y} + \mathbf{y}'\mathbf{Z}_{c2}(\mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Z}_{c2})^{-1}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}) \tag{7-66}$$

其中 $(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}) = [z_1 - \bar{z}_1, z_2 - \bar{z}_2, \cdots, z_r - \bar{z}_r]'$。最后

$$\begin{bmatrix} \mathrm{Var}(\hat{\beta}_*) & \mathrm{Cov}(\hat{\beta}_*, \hat{\boldsymbol{\beta}}_c) \\ \mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_c, \hat{\beta}_*) & \mathrm{Cov}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_c) \end{bmatrix} = (\mathbf{Z}_c'\mathbf{Z}_c)^{-1}\sigma^2 = \begin{bmatrix} \frac{\sigma^2}{n} & \mathbf{0}' \\ \mathbf{0} & (\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2})^{-1}\sigma^2 \end{bmatrix} \tag{7-67}$$

评注 **多元**多重回归模型对每个响应变量产生相同的均值修正设计阵。对第 i 个响应变量的系数向量的最小二乘估计为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(i)} = \begin{bmatrix} \bar{y}_{(i)} \\ \hline (\mathbf{Z}_{c2}'\mathbf{Z}_{c2})^{-1}\mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{y}_{(i)} \end{bmatrix}, \quad i = 1, 2, \cdots, m \tag{7-68}$$

有时，为了得到更好的数值稳定性，在模型中采用“**标准化**”的输入变量 $(z_{ji} - \bar{z}_i) \Big/ \sqrt{\sum_{j=1}^{n}(z_{ji} - \bar{z}_i)^2} = (z_{ji} - \bar{z}_i)/\sqrt{(n-1)s_{z_i z_i}}$。在这种场合，回归模型的系数 β_i 用

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\tilde{\beta}_i=\beta_i\sqrt{(n-1)s_{z_iz_i}}$代替，其最小二乘估计为$\tilde{\hat{\beta}}_i=\hat{\beta}_i\cdot\sqrt{(n-1)s_{z_iz_i}}$，$i=1,2,\cdots,r$。这些关系对多元多重回归场合的每个响应变量也成立。

两种表述方式的联系

当变量$Y,Z_1,Z_2,\cdots,Z_r$服从联合正态分布时，估计的Y预测量(见结论7.13)为

$$\hat{\beta}_0+\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}=\bar{y}+\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{z}-\bar{\mathbf{z}})=\hat{\mu}_Y+\hat{\boldsymbol{\sigma}}'_{ZY}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{ZZ}^{-1}(\mathbf{z}-\hat{\boldsymbol{\mu}}_Z) \tag{7-69}$$

这里，估计方法自然地引出中心化的z_i。

回顾回归模型的均值修正形式，Y的最佳线性预测量[见式(7-66)]为

$$\hat{y}=\hat{\beta}_*+\hat{\boldsymbol{\beta}}'_c(\mathbf{z}-\bar{\mathbf{z}})$$

其中$\hat{\beta}_*=\bar{y}$，$\hat{\boldsymbol{\beta}}'_c=y'\mathbf{Z}_{c2}(\mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Z}_{c2})^{-1}$。比较式(7-66)与式(7-69)，我们看到$\hat{\beta}_*=\bar{y}=\hat{\beta}_0$和$\hat{\boldsymbol{\beta}}_c=\hat{\boldsymbol{\beta}}$，因为①

$$\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}=\mathbf{y}'\mathbf{Z}_{c2}(\mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Z}_{c2})^{-1} \tag{7-70}$$

因此，正态理论的条件均值和经典回归模型方法产生同一个线性预测量。

类似的讨论指出，在这两种多元多重回归模型的方案中，响应变量的最佳线性预测量是相同的。

例7.15 (两种方法产生相同的线性预测量)

在例7.6中，用经典线性回归模型对单响应计算机数据Y=CPU时间进行了分析。同一组数据在例7.12中重新进行了分析，但假定变量Y_1、Z_1和Z_2服从联合正态分布，所以Y_1的最佳预测量为给定Z_1和Z_2时Y_1的条件期望。两种方法产生同一个预测量

$$\hat{y}=8.42+1.08z_1+0.42z_2$$

虽然线性预测问题的两种表述方式产生相同的预测量方程，但它们在概念上却有相当大的差异。对于式(7-3)或式(7-26)中的模型，输入变量的值是由试验者设定的。而对式(7-57)或式(7-59)的条件期望模型，预测变量则为随机变量，它们的值是与响应变量的值一起被观测的。第二种方法的假定更严格，在这个假定下得出的是所有可能的预测量中的**最优**预测量，而不仅仅是线性预测量中的最优预测量。

在结束本节时，我们注意到多元回归的计算无论在哪一种情况下均可以采用样本均值向量$\bar{\mathbf{y}}$和$\bar{\mathbf{z}}$及样本平方与交叉乘积之和：

$$\left[\begin{array}{c:c}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{y}_j-\bar{\mathbf{y}})(\mathbf{y}_j-\bar{\mathbf{y}})' & \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{y}_j-\bar{\mathbf{y}})(\mathbf{z}_j-\bar{\mathbf{z}})' \\ \hdashline \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{z}_j-\bar{\mathbf{z}})(\mathbf{y}_j-\bar{\mathbf{y}})' & \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{z}_j-\bar{\mathbf{z}})(\mathbf{z}_j-\bar{\mathbf{z}})'\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{Y}'_c\mathbf{Y}_c & \mathbf{Y}'_c\mathbf{Z}_{c2} \\ \hdashline \mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Y}_c & \mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Z}_{c2}\end{array}\right]$$

---

① 式(7-70)可这样得出：令$\mathbf{y}=(\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1})+\bar{y}\mathbf{1}$，此时有

$$\mathbf{y}'\mathbf{Z}_{c2}=(\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1})'\mathbf{Z}_{c2}+\bar{y}\mathbf{1}'\mathbf{Z}_{c2}=(\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1})'\mathbf{Z}_{c2}+\mathbf{0}'=(\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1})'\mathbf{Z}_{c2}$$

从而

$$\mathbf{y}\mathbf{Z}_{c2}(\mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Z}_{c2})^{-1}=(\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1}')'\mathbf{Z}_{c2}(\mathbf{Z}'_{c2}\mathbf{Z}_{c2})^{-1}=(n-1)\mathbf{s}'_{ZY}[(n-1)\mathbf{S}_{ZZ}]^{-1}=\mathbf{s}'_{ZY}\mathbf{S}_{ZZ}^{-1}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= n \begin{bmatrix} \Sigma_{YY} & \hat{\Sigma}_{YZ} \\ \Sigma_{ZY} & \hat{\Sigma}_{ZZ} \end{bmatrix}$$

这种形式来完成。这是计算参数估计值和它们的协方差估计值所必需的全部信息。当然，回归分析的一个重要部分是模型检查。这需要用残差(误差)，它们需要用所有原始数据来计算。

7.10 有时间相关误差的多重回归模型

对于随时间推移而收集的数据，不同时期的观测往往是有关联的，或者说是自相关的。因此，在回归模型中，因变量的观测值(或误差)不可能独立。如我们在 5.8 节中讨论相依性时所指出的那样，诸观测值之间的时间相依性会使建立在独立性假定基础上的推断不成立。类似地，当用回归模型去拟合按时间顺序排序的数据并使用标准回归假定时，回归分析的结论会产生误导。这个问题很重要。因此在下面的例子中，我们不仅要说明如何去发现数据中的时间相依性，而且要说明如何将这种相依性容纳到多重回归模型之中。

例 7.16 (在回归模型中容纳时间相关误差)

电力公司必须有足够的天然气来使其客户的住宅和办公场所获得温暖，特别是在一年中最寒冷的日子里。规划过程的一个主要部分是对天然气输送量与诸如温度等因素之间的关系建立一个回归模型。天然气消费量显然与温度有关，寒冷的日子需要较多的天然气。在处理实际问题时习惯上不用日平均温度，而用“日加热度”(DHD)＝65°F－日平均温度。DHD 值越大，天气越冷。24 小时平均风速也可能是影响天然气输送量的因素。由于许多公司在周末停止营业，通常周末的天然气需求量较小。表 7.4 列出某北方大城市的这些变量在一个冬天的部分数据。

表 7.4 天然气数据

Y 输送量	Z_1 DHD	Z_2 DHD 滞后值	Z_3 风速	Z_4 周末
227	32	30	12	1
236	31	32	8	1
228	30	31	8	0
252	34	30	8	0
238	28	34	12	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
333	46	41	8	0
266	33	46	8	0
280	38	33	18	0
386	52	38	22	0
415	57	52	18	0

首先，我们建立一个反映天然气输送量(Y)与 DHD、风速和周末虚拟变量之间关系的回归模型。其他可能对天然气消费有某种影响的变量，如云覆盖百分比等均被吸收到误差项中。经过几次尝试性拟合后，我们决定在模型中不仅要加进当前的 DHD 值，而且要

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

加进前一天的 DHD 值(在表 7.4 中,DHD 滞后值表示前一天的 DHD 值)。得到的拟合模型为

$$\text{天然气输送量}=1.858+5.874\ \text{DHD}+1.405\text{DHD 滞后值}$$
$$+1.315\ \text{风速}-15.857\ \text{周末}$$

决定系数为 $R^2=0.952$。除去常数项,所有的系数均显著。拟合看起来很成功。(模型中的常数项可以摒弃,这对结果不会有实质性影响。)然而,如果我们计算相邻两期残差之间的相关系数,即计算一阶自相关系数,我们却得到

$$\text{一阶自相关系数}=r_1(\hat{\varepsilon})=\frac{\sum_{j=2}^{n}\hat{\varepsilon}_j\hat{\varepsilon}_{j-1}}{\sum_{j=1}^{n}\hat{\varepsilon}_j^2}=0.52$$

0.52 这个自相关系数值太大,不可忽视。前 15 阶残差自相关图表明,在相隔 7 期(一周)的诸误差之间也许还存在某种相依性。这种相依性使模型系数的 t 检验和与之相联系的 P 值无效。

修正这个模型的第一步,是将回归模型中的独立误差用可能有的相依噪音项序列 N_j 代替。也就是说,我们对 N_j 构造一个模型,将每一个 N_j 与其前一天的值 N_{j-1},前一周的值 N_{j-7},以及独立误差 ε_j 建立联系。这样,我们考虑

$$N_j=\phi_1N_{j-1}+\phi_7N_{j-7}+\varepsilon_j$$

其中 ε_j 为独立正态随机变量,均值为 0,方差为 σ^2。N_j 所满足上述的方程形式称为**自回归模型**。(见[7]。)对天然气输送量的这一组合式回归模型(其噪音部分采用自回归模型),其计算的 SAS 命令和部分拟合结果的输出见显示板 7.3。

拟合的模型为

$$\text{天然气输出}=2.130+5.810\ \text{DHD}+1.426\text{DHD 滞后值}$$
$$+1.207\ \text{风速}-10.109\ \text{周末}$$

而噪音项的时间相依性由下式估计:

$$N_j=0.470N_{j-1}+0.240N_{j-7}+\varepsilon_j$$

ε 的方差估计值为 $\hat{\sigma}^2=228.89$。

由显示板 7.3 我们看到,在扩充的模型中,残差间的自相关系数全部可以忽略。每个残差自相关系数都落在位于 0 两侧的两个标准误差估计值之间。还有,一组阶数接连增大的残差自相关系数的加权平方和并不大,这可根据这个统计量的 P 值来判断。也就是说,没有理由拒绝假设"一组阶数接连增大的自相关系数同时为 0"。在显示板 7.3 中,考察了自相关阶数为 1~6,1~12,1~18 和 1~24 的四个组。

现已对噪音恰当地建立了模型,对每个预测量的系数以及回归的显著性等等的检验,现在都成立①。常数项在最终模型中可以略去。当这样做时,在最终模型中几乎不会引起什么变化。扩充的模型有更好的预测能力,而且现在可用来对给定的预测变量值预测天然气的输送量。我们这里不准备进一步讨论预测问题,因为这样做所涉及的一些思想已超出本书范围。(见[7]。)

---

① 这些检验是用额外平方和方法得出的,不过应将这种方法应用于回归加自回归噪音模型。这就是计算机输出中所描述的检验。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 7.3　用 PROC ARIMA 程序对例 7.16 作 SAS 分析

```
data a;
  infile 'T7-4.dat';
    time =_n_;
    input obsend dhd dhdlag wind xweekend;

proc arima data=a;
    identify var=obsend crosscor=(
    dhd dhdlag wind xweekend );
  estimate p=(1 7) metod=ml input=(
    dhd dhdlag wind xweekend )plot;
  estimate p=(1 7) noconstant method =ml input=(
    dhd dhdlag wind xweekend) plot;
```

PROGRAM COMMANDS

ARIMA Procedure

Maximum Likeilhood Estimation　　**OUTPUT**

Parameter	Estimate	Approx. Std Error	T Ratio	Lag	Variable	Shift
MU	2.12957	13.12340	0.16	0	OBSEND	0
AR1,1	0.47008	0.11779	3.99	1	OBSEND	0
AR1,2	0.23986	0.11528	2.08	7	OBSEND	0
NUM1	5.80976	0.24047	24.16	0	DHD	0
NUM2	1.42632	0.24932	5.72	0	DHDLAG	0
NUM3	1.20740	0.44681	2.70	0	WIND	0
NUM4	−10.10890	6.03445	−1.68	0	XWEEKEND	0

Constant Estimate　=　0.61770069

Variance Estimate　=　228.894028

Std Error Estimate　=　15.1292441

AIC　=　528.490321

SBC　=　543.492264

Number of Residuals　=　63

Autocorrelation Check of Residuals

To Lag	Chi Square	DF	Prob	Autocorrelations					
6	6.04	4	0.196	0.079	0.012	0.022	0.192	−0.127	0.161
12	10.27	10	0.417	0.144	−0.067	−0.111	−0.056	−0.056	−0.108
18	15.92	16	0.458	0.013	0.106	−0.137	−0.170	−0.079	0.018
24	23.44	22	0.377	0.018	0.004	0.250	−0.080	−0.069	−0.051

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 7.3(续表)

Autocorrelation Plot of Residuals

Lag	Covariance	Correlation	−1 9 8 7 6 5 4 3 2 1 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 1
0	228.894	1.00000	| | ********** |
1	18.194945	0.07949	| . | ** . |
2	2.763255	0.01207	| . | . |
3	5.038727	0.02201	| . | . |
4	44.059835	0.19249	| . | **** . |
5	−29.118892	−0.12722	| . *** | . |
6	36.904291	0.16123	| . | *** . |
7	33.008858	0.14421	| . | *** . |
8	−15.424015	−0.06738	| . * | . |
9	−25.379057	−0.11088	| . ** | . |
10	−12.890888	−0.05632	| . * | . |
11	−12.777280	0.05582	| . * | . |
12	−24.825623	−0.10846	| . ** | . |
13	2.970197	0.01298	| . | . |
14	24.150168	0.10551	| . | ** . |
15	−31.407314	−0.13721	| . *** | . |

". " marks two standard errors

当建模中要使用按时间顺序排序的数据时，在回归模型中加入允许时间相依的噪音结构往往很有益。现代的统计软件包如 SAS 等，都能使分析人员轻而易举地对这些扩展模型进行拟合。

补充 7A　多元多重回归模型的似然比的分布

本补充中的推导结果支持结论 7.11。

我们知道 $n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\mathbf{Y}'(\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')\mathbf{Y}$，并且在假设 H_0 下 $n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1=\mathbf{Y}'[\mathbf{I}-\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\cdot\mathbf{Z}_1']\mathbf{Y}$，其中 $\mathbf{Y}=\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\boldsymbol{\varepsilon}$。令 $\mathbf{P}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']$。由于 $\mathbf{0}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Z}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'][\mathbf{Z}_1 \vdots \mathbf{Z}_2]=[\mathbf{P}\mathbf{Z}_1 \vdots \mathbf{P}\mathbf{Z}_2]$，$\mathbf{Z}$ 的各列皆垂直于 $\mathbf{P}$。这样，我们有

$$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = (\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon})'\mathbf{P}(\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{P}\boldsymbol{\varepsilon}$$

$$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1 = (\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\boldsymbol{\varepsilon})'\mathbf{P}_1(\mathbf{Z}_1\boldsymbol{\beta}_{(1)}+\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{P}_1\boldsymbol{\varepsilon}$$

其中 $\mathbf{P}_1=\mathbf{I}-\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'$。于是我们可用格拉姆-施密特过程(见结论 2A.3)构造 $\mathbf{Z}_1$ 诸列的一组标准正交向量 $[g_1,g_2,\cdots,g_{q+1}]=\mathbf{G}$。然后，我们继续从 $[\mathbf{G},\mathbf{Z}_2]$ 得到标准正交基。最后再加上正交于前述向量的 $n-r-1$ 个标准正交向量，完成 n 维正交基的构造。因而，我

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

们有

$$\underbrace{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\cdots,\mathbf{g}_{q+1}}_{\text{来自 }\mathbf{Z}_1\text{ 的列}},\ \underbrace{\mathbf{g}_{q+2},\mathbf{g}_{q+3},\cdots,\mathbf{g}_{r+1}}_{\text{来自 }\mathbf{Z}_2\text{ 的列，但垂直于 }\mathbf{Z}_1\text{ 的列}},\ \underbrace{\mathbf{g}_{r+2},\mathbf{g}_{r+3},\cdots,\mathbf{g}_n}_{\text{垂直于 }\mathbf{Z}\text{ 的列的任意一组标准正交向量}}$$

设$(\boldsymbol{\lambda},\mathbf{e})$为$\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'$的特征值-特征向量对。由于$[\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'][\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1']=\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1$，有

$$\boldsymbol{\lambda}\mathbf{e}=\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{e}=(\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1')^2\mathbf{e}=\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1')\mathbf{e}=\boldsymbol{\lambda}^2\mathbf{e}$$

且$\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'$的特征值为 0 或 1。进一步有，$\mathrm{tr}(\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1')=\mathrm{tr}((\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)=\mathrm{tr}(\underset{(q+1)\times(q+1)}{\mathbf{I}})=q+1=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_{q+1}$，其中$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_{q+1}>0$为$\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'$的特征值。这说明$\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'$有$q+1$个特征值为 1。由于$(\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1')\mathbf{Z}_1=\mathbf{Z}_1$，故任一单位长度的线性组合$\mathbf{Z}_1\mathbf{b}_l$为对应于特征值 1 的特征向量。因此，标准正交向量$\mathbf{g}_l(l=1,2,\cdots,q+1)$为$\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'$的特征向量，因为它们为$\mathbf{Z}_1$诸列的特定的线性组合。根据谱分解(2-16)，我们有$\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'=\sum_{l=1}^{q+1}\mathbf{g}_l\mathbf{g}_l'$。类似地，由于$(\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}')\mathbf{Z}=\mathbf{Z}$，我们立刻发现线性组合$\mathbf{Z}\mathbf{b}_l=\mathbf{g}_l$为$\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'$的特征向量，对应特征值$\lambda=1$，故$\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'=\sum_{l=1}^{r+1}\mathbf{g}_l\mathbf{g}_l'$。

接下来，我们有$\mathbf{PZ}=[\mathbf{I}-\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}']\mathbf{Z}=\mathbf{Z}-\mathbf{Z}=\mathbf{0}$，故$\mathbf{g}_l=\mathbf{Z}\mathbf{b}_l,l\leqslant r+1$，为$\mathbf{P}$的特征向量，对应特征值 0。还有，由$\mathbf{g}_l(l>r+1)$的构造方法知$\mathbf{Z}'\mathbf{g}_l=\mathbf{0}$，故$\mathbf{P}\mathbf{g}_l=\mathbf{g}_l$。因此，这些$\mathbf{g}_l$为$\mathbf{P}$的对应于单位特征值的$n-r-1$个特征向量。由谱分解(2-16)知$\mathbf{P}=\sum_{l=r+2}^{n}\mathbf{g}_l\mathbf{g}_l'$，因而

$$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{P}\boldsymbol{\varepsilon}=\sum_{l=r+2}^{n}(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{g}_l)(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{g}_l)'=\sum_{l=r+2}^{n}\mathbf{V}_l\mathbf{V}_l'$$

其中，由于$\mathrm{Cov}(V_{li},V_{jk})=E(\mathbf{g}_l'\boldsymbol{\varepsilon}_{(i)}\boldsymbol{\varepsilon}_{(k)}'\mathbf{g}_j)=\sigma_{ik}\mathbf{g}_l'\mathbf{g}_j=0,l\neq j,\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{g}_l=\mathbf{V}_l=[V_{l1},\cdots,V_{li},\cdots,V_{lm}]'$独立地服从$N_m(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$分布。因此由式(4-22)知$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$服从$W_{p,n-r-1}(\boldsymbol{\Sigma})$分布。用同样方法，

$$\mathbf{P}_1\mathbf{g}_l=\begin{cases}\mathbf{g}_l & l>q+1\\ \mathbf{0} & l\leqslant q+1\end{cases}$$

故$P_1=\sum_{l=q+2}^{n}\mathbf{g}_l\mathbf{g}_l'$。我们可以将额外平方与交叉乘积和写成

$$n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})=\boldsymbol{\varepsilon}'(\mathbf{P}_1-\mathbf{P})\boldsymbol{\varepsilon}=\sum_{l=q+2}^{r+1}(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{g}_l)(\boldsymbol{\varepsilon}'\mathbf{g}_l)'=\sum_{l=q+2}^{r+1}\mathbf{V}_l\mathbf{V}_l'$$

其中$\mathbf{V}_l$独立地服从$N_m(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma})$分布。由式(4-22)，$n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})$为$W_{p,r-q}(\boldsymbol{\Sigma})$分布，且独立于$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$，因为$n(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1-\hat{\boldsymbol{\Sigma}})$所包含的是另外一组独立的$\mathbf{V}_l$。

由结论 5.2，$-\left[n-r-1-\frac{1}{2}(m-r+q+1)\right]\ln(|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|/|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}_1|)$的大样本分布为$\chi^2$，自由

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

度为 $v-v_0=m(m+1)/2+m(r+1)-m(m+1)/2-m(q+1)=m(r-q)$。在统计量中用 $\left[n-r-1-\frac{1}{2}(m-r+q+1)\right]$ 代替 n 是源于巴特利特[3]，它改进了 χ^2 近似。

练　　习

7.1　已知数据

z_1	10	5	7	19	11	8
y	15	9	3	25	7	13

拟合线性回归模型 $Y_j=\beta_0+\beta_1 z_{j1}+\varepsilon_j, j=1,2,\cdots,6$。具体说，计算出最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$，拟合的响应值 $\hat{\mathbf{y}}$，残差 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$，以及残差平方和 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$。

7.2　已知数据

z_1	10	5	7	19	11	8
z_2	2	3	3	6	7	9
y	15	9	3	25	7	13

拟合回归模型

$$Y_j=\beta_1 z_{j1}+\beta_2 z_{j2}+\varepsilon_j,\quad j=1,2,\cdots,6.$$

并要求事先将变量 y,z_1 和 z_2 标准化。(见式(7-68)后的一段。)由这个拟合结果导出对原变量(标准化之前)的回归方程。

7.3　(加权最小二乘估计量。)设

$$\underset{(n\times 1)}{\mathbf{Y}}=\underset{(n\times(r+1))}{\mathbf{Z}}\underset{((r+1)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}}+\underset{(n\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

其中 $E(\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{0}, E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}')=\sigma^2\mathbf{V}, \mathbf{V}(n\times n)$ 为正定矩阵。对满秩的 $\mathbf{V}$，证明：加权最小二乘估计量为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_W=(\mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{Y}$$

若 σ^2 未知，则其无偏估计量为 $(n-r-1)^{-1}\times(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_W)'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{Y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}_W)$。

提示：令 $\mathbf{Y}^*=\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{Y}, \mathbf{Z}^*=\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{Z}$，及 $\boldsymbol{\varepsilon}^*=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\varepsilon}$，则 $\mathbf{Y}^*=\mathbf{Z}^*\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\varepsilon}^*$ 为经典线性回归形式，其中 $E(\boldsymbol{\varepsilon}^*)=\mathbf{0}$，$E(\boldsymbol{\varepsilon}^*\boldsymbol{\varepsilon}^{*\prime})=\sigma^2\mathbf{I}$。这样，$\hat{\boldsymbol{\beta}}_W=\hat{\boldsymbol{\beta}}^*=(\mathbf{Z}^*\mathbf{Z}^*)^{-1}\mathbf{Z}^{*\prime}\mathbf{Y}^*$。

7.4　用练习 7.3 中的加权最小二乘估计量导出如下模型的参数估计表达式：$Y_j=\beta z_j+\varepsilon_j, j=1,2,\cdots,n$，其中(a)$\mathrm{Var}(\varepsilon_j)=\sigma^2$，(b)$\mathrm{Var}(\varepsilon_j)=\sigma^2 z_j$，及(c)$\mathrm{Var}(\varepsilon_j)=\sigma^2 z_j^2$。对不相等的误差方差对 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_W$ 最佳选择的影响方式作出评论。

7.5　证明式(7-56)：$\rho^2_{Y(\mathbf{Z})}=1-1/\rho^{YY}$。

提示：由式(7-55)和练习 4.9 可得，

$$1-\rho^2_{Y(\mathbf{Z})}=\frac{\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY}}{\sigma_{YY}}=\frac{|\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}|}{|\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}|}\frac{(\sigma_{YY}-\boldsymbol{\sigma}'_{ZY}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{ZY})}{\sigma_{YY}}=\frac{|\boldsymbol{\Sigma}|}{|\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}|\sigma_{YY}}$$

根据结论 2A.8(c)，$\sigma^{YY}=|\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}|/|\boldsymbol{\Sigma}|$，其中 σ^{YY} 为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 的第(1,1)位元素。由于(见练习

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

2.23)$\mathbf{P}=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{-1/2}$及$\rho^{-1}=(\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{-1/2})^{-1}=\mathbf{V}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{V}^{1/2}$，$\rho^{-1}$中(1,1)位元素为$\rho^{YY}=\sigma^{YY}\sigma_{YY}$。

7.6 （$\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$的广义逆。）一个矩阵$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-$称为$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})$的广义逆，若$\mathbf{Z}'\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{Z}=\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$。设$r_1+1=$秩$(\mathbf{Z})$，并设$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_{r_1+1}>0$为$\mathbf{Z}'\mathbf{Z}$的非零特征根，对应的特征向量为$\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{r_1+1}$。

(a) 证明

$$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-=\sum_{i=1}^{r_1+1}\lambda_i^{-1}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'$$

(b) 最小化平方误差$(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{y}-\mathbf{Z}\boldsymbol{\beta})$的系数$\hat{\boldsymbol{\beta}}$满足正规方程组$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{Z}'\mathbf{y}$。证明：对任意$\hat{\boldsymbol{\beta}}$，若$\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$为$\mathbf{y}$到$\mathbf{Z}$的列空间的投影，则$\hat{\boldsymbol{\beta}}$满足正规方程组。

(c) 证明$\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{y}$为$\mathbf{y}$到$\mathbf{Z}$的列空间的投影。

(d) 直接验证$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'\mathbf{y}$为正规方程$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\hat{\boldsymbol{\beta}}=\mathbf{Z}'\mathbf{y}$的一个解。

提示：若$\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$为投影，则$\mathbf{y}-\mathbf{Z}\hat{\boldsymbol{\beta}}$垂直于$\mathbf{Z}$的列。

(e) $(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})(\lambda_i^{-1}\mathbf{e}_i)=\mathbf{e}_i$，$i\leqslant r_1+1$，及$0=\mathbf{e}_i'(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})\mathbf{e}_i$，$i>r_1+1$。因此$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})(\lambda_i^{-1}\mathbf{e}_i)\mathbf{e}_i'\mathbf{Z}=\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\mathbf{Z}'$。由于$\mathbf{e}_i'\mathbf{Z}'=\mathbf{0}$，当$i>r_1+1$时对$i$求和得到

$$\begin{aligned}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^-\mathbf{Z}'&=\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\Big(\sum_{i=1}^{r_1+1}\lambda_i^{-1}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\Big)\mathbf{Z}'\\&=\Big(\sum_{i=1}^{r_1+1}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\Big)\mathbf{Z}'=\Big(\sum_{i=1}^{r+1}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i'\Big)\mathbf{Z}'=\mathbf{I}\mathbf{Z}'=\mathbf{Z}'\end{aligned}$$

7.7 假定经典回归模型写为

$$\underset{(n\times 1)}{\mathbf{Y}}=\underset{(n\times(q+1))}{\mathbf{Z}_1}\underset{((q+1)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}_{(1)}}+\underset{(n\times(r-q))}{\mathbf{Z}_2}\underset{((r-q)\times 1)}{\boldsymbol{\beta}_{(2)}}+\underset{(n\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

其中秩$(\mathbf{Z})=r+1$，意味着秩$(\mathbf{Z}_1)=q+1$，秩$(\mathbf{Z}_2)=r-q$。若事先确定的参数$\boldsymbol{\beta}_{(2)}$为所关心的参数，证明$\boldsymbol{\beta}_{(2)}$的$100(1-\alpha)\%$置信域为

$$(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}-\boldsymbol{\beta}_{(2)})'[\mathbf{Z}_2'\mathbf{Z}_2-\mathbf{Z}_2'\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_2](\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}-\boldsymbol{\beta}_{(2)})\leqslant s^2(r-q)F_{r-q,n-r-1}(\alpha)$$

提示：在练习4.10中，将1和2交换，有

$$\mathbf{C}^{22}=[\mathbf{Z}_2'\mathbf{Z}_2-\mathbf{Z}_2'\mathbf{Z}_1(\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_1)^{-1}\mathbf{Z}_1'\mathbf{Z}_2]^{-1},$$

其中$(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}=\begin{bmatrix}\mathbf{C}^{11} & \mathbf{C}^{12}\\ \mathbf{C}^{21} & \mathbf{C}^{22}\end{bmatrix}$。两边同时乘以$(\mathbf{C}^{22})^{-1/2}$，并证明$(\mathbf{C}^{22})^{-1/2}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}-\boldsymbol{\beta}_{(2)})/\sigma^2$为$N(\mathbf{0},\mathbf{I})$，故

$$(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}-\boldsymbol{\beta}_{(2)})'(\mathbf{C}^{22})^{-1}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(2)}-\boldsymbol{\beta}_{(2)})\text{ 为 }\sigma^2\chi^2_{r-q}$$

7.8 回顾“帽子阵”的定义为$\mathbf{H}=\mathbf{Z}(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'$，其对角元记为$h_{jj}$。

(a) 证明$\mathbf{H}$为一个幂等阵[见结论7.1和式(7-6)。]

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(b) 证明 $0<h_{jj}<1, j=1,2,\cdots,n$，且 $\sum_{j=1}^{n} h_{jj}=r+1$，其中 r 为回归模型中自变量的个数。(事实上，$(1/n)\leqslant h_{jj}<1$。)

(c) 对一个自变量 z 的简单线性回归模型，验证杠杆率 h_{jj} 的计算式为

$$h_{jj}=\frac{1}{n}+\frac{(z_j-\bar{z})^2}{\sum_{j=1}^{n}(z_j-\bar{z})^2}$$

7.9 考虑下面关于一个预测变量 z_1 和两个响应变量 y_1 和 y_2 的数据：

z_1	-2	-1	0	1	2
y_1	5	3	4	2	1
y_2	-3	-1	-1	2	3

对直线回归模型

$$Y_{j1}=\beta_{01}+\beta_{11}z_{j1}+\varepsilon_{j1}$$
$$Y_{j2}=\beta_{02}+\beta_{12}z_{j1}+\varepsilon_{j2},\quad j=1,2,3,4,5$$

求参数的最小二乘估计值。计算拟合值矩阵 $\hat{\mathbf{Y}}=[\hat{\mathbf{y}}_1 \vdots \hat{\mathbf{y}}_2]$ 和残差阵 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}=[\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_1 \vdots \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_2]$。验证平方与交叉乘积之和的分解式

$$\mathbf{Y}'\mathbf{Y}=\hat{\mathbf{Y}}'\hat{\mathbf{Y}}+\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

7.10 用练习 7.9 中的结果计算下列的内容：

(a) 对平均响应 $E(Y_{01})=\beta_{01}+\beta_{11}z_{01}$，在 $z_{01}=0.5$ 时计算 95%置信区间。

(b) 对响应 Y_{01} 在 $Z_{01}=0.5$ 时计算 95%的预测区间。

(c) 对响应 Y_{01} 和 Y_{02} 在 $z_{01}=0.5$ 时计算 95%的联合预测域。

7.11 (多元多重回归的广义最小二乘估计。)设 $\mathbf{A}$ 为正定阵，故 $d_j^2(\mathbf{B})=(\mathbf{y}_j-\mathbf{B}'\mathbf{z}_j)'\cdot\mathbf{A}(\mathbf{y}_j-\mathbf{B}'\mathbf{z}_j)$ 为观测 $\mathbf{y}_j$ 对它的回归 $\mathbf{B}'\mathbf{Z}_j$ 的平方统计距离。证明：对任意正定的 $\mathbf{A}$($\mathbf{A}$ 包括 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 和 $\mathbf{I}$)，$\mathbf{B}=\hat{\boldsymbol{\beta}}=(\mathbf{Z}'\mathbf{Z})^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Y}$ 使平方统计距离之和 $\sum_{j=1}^{n} d_j^2(\mathbf{B})$ 达到极小。

7.12 给定 Y, Z_1 和 Z_2 的均值向量和协方差阵

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{bmatrix}\mu_Y\\ \hline \boldsymbol{\mu}_Z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\ \hline 3\\ -2\end{bmatrix}\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma_{YY} & \boldsymbol{\sigma}_{ZY}'\\ \boldsymbol{\sigma}_{ZY} & \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}9 & 3 & 1\\ 3 & 2 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

确定下列诸量：

(a) Y 的最佳线性预测量 $\beta_0+\beta_1Z_1+\beta_2Z_2$。

(b) 该最佳线性预测量的均方误差。

(c) 总体多重相关系数。

(d) 偏相关系数 $\rho_{YZ_1\cdot Z_2}$。

7.13 例 5.5 中大学生考试成绩的样本均值和样本协方差阵为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\bar{\mathbf{z}}=\begin{bmatrix}\bar{z}_1\\ \bar{z}_2\\ \bar{z}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}527.74\\ 54.69\\ 25.13\end{bmatrix},\quad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}5691.34 & & \\ 600.51 & 126.05 & \\ 217.25 & 23.37 & 23.11\end{bmatrix}$$

假定存在联合正态性。

(a) 对于由 Z_2 和 Z_3 预测 Z_1 的参数求其极大似然估计值。

(b) 计算估计的多重相关系数 $R_{Z_1}(Z_2,Z_3)$。

(c) 计算估计的偏相关系数 $R_{Z_1,Z_2\cdot Z_3}$。

7.14　对 25 名组合投资管理人员的经营水平进行了评估。设 Y 代表某一期内的回报率；Z_1 为管理人员对风险的态度，由"非常保守"到"非常冒险"的五级制量度；Z_2 为从事投资业年限。观测到的各对变量之间的相关系数为

$$\mathbf{R}=\begin{array}{c}\begin{array}{ccc}Y & Z_1 & Z_2\end{array}\\ \begin{bmatrix}1.0 & -0.35 & 0.82\\ -0.35 & 1.0 & -0.60\\ 0.82 & -0.60 & 1.0\end{bmatrix}\end{array}$$

(a) 解释样本相关系数 $r_{YZ_1}=-0.35$ 及 $r_{YZ_2}=0.82$。

(b) 计算偏相关系数 $r_{YZ_1\cdot Z_2}$并做出解释，将它与(a)中 r_{YZ_1}的解释作比较。

下面的练习需要使用计算机。

7.15　利用表 7.1 中的房地产数据及例 7.4 中的线性回归模型，

(a) 验证例 7.4 中的结果。

(b) 分析残差，检查模型的合适性。(见 7.6 节。)

(c) 当总居住面积 $Z_1=17$ 和评估价值 $Z_2=46$ 时求销售价(Y_0)的 95%预测区间。

(d) 对假设 $H_0:\beta_2=0$，作显著性水平 $\alpha=0.05$ 的似然比检验。原来的模型是否需要修改？请讨论。

7.16　对表 7.1 中房地产数据可能的线性回归模型计算相应的 C_P 图。

7.17　考虑练习 1.4 中的"财富 500"数据。

(a) 对这组数据拟合线性回归模型，用利润作因变量，而销售额和资产总额作为自变量。

(b) 分析残差，检查模型的合适性。计算与各数据点相联系的杠杆率。在这些公司中，是否有一个(或多个)在自变量集合的数据点中表现为离群值？

(c) 在销售额为 40 000(百万美元)及资产总额 70 000(百万美元)时，求利润的 95%预测区间。

(d) 对假设 $H_0:\beta_2=0$，作显著性水平 $\alpha=0.05$ 的似然比检验。原来的模型是否应修改？请讨论。

7.18　对练习 1.4 中的"财富 500"数据的各种可能的回归作 C_p 图。

7.19　卫星应用推动了银-锌电池的发展。表 7.5 中列出了表征电池在其寿命周期内的性能失效数据。利用这些数据

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 7.5 电池失效数据

Z_1 充电率（安）	Z_2 放电率（安）	Z_3 放电深度（在安培小时计算值中所占百分比(%)）	Z_4 温度（℃）	Z_5 充电电压极限（伏）	Y 失效周期
0.375	3.13	60.0	40.	2.00	101.
1.000	3.13	76.8	30.	1.99	141.
1.000	3.13	60.0	20.	2.00	96.
1.000	3.13	60.0	20.	1.98	125.
1.625	3.13	43.2	10.	2.01	43.
1.625	3.13	60.0	20.	2.00	16.
1.625	3.13	60.0	20.	2.02	188.
0.375	5.00	76.8	10.	2.01	10.
1.000	5.00	43.2	10.	1.99	3.
1.000	5.00	43.2	30.	2.01	386.
1.000	5.00	100.0	20.	2.00	45.
1.625	5.00	76.8	10.	1.99	2.
0.375	1.25	76.8	10.	2.01	76.
1.000	1.25	43.2	10.	1.99	78.
1.000	1.25	76.8	30.	2.00	160.
1.000	1.25	60.0	0.	2.00	3.
1.625	1.25	43.2	30.	1.99	216.
1.625	1.25	60.0	20.	2.00	73.
0.375	3.13	76.8	30.	1.99	314.
0.375	3.13	60.0	20.	2.00	170.

资料来源：选自 S. Sidik, H. Leibecki, J. Bozek, Failure of Silver-Zinc Cells with Competing Failure Modes-Preliminary Data Analysis, NASA Technical Memorandum 81556 (Cleveland: Lewis Research Center)。

(a) 求 $\ln(Y)$ 对一个适当的（“最佳的”）预测变量子集的线性回归方程（估计的）。

(b) 对(a)中拟合的模型作残差图，用以检查正态性假定。

7.20 用表 7.4 中的电池失效数据作 $\ln(Y)$ 对预测变量 $z_1, z_2, \cdots, z_5$ 的第一主成分的线性回归。（见 8.3 节。）将结果与练习 7.19(a)中拟合的模型作比较。

7.21 考虑表 1.3 中的空气污染数据。令 $Y_1 = NO_2$，和 $Y_2 = O_3$ 为两个响应变量（污染物），相应预测变量 Z_1 = 风，及 Z_2 = 太阳辐射。

(a) 只用第一个响应 Y_1 作回归分析。

(i) 提出并拟合适当的线性回归模型。

(ii) 分析残差。

(iii) 对 $Y_1 = NO_2$ 在 $Z_1 = 10$ 和 $Z_2 = 80$ 时构造 95%预测区间。

(b) 用两个响应 Y_1, Y_2 做多元多重回归分析。

(i) 提出并拟合适当的线性回归模型。

(ii) 分析残差

(iii) 在 $z_1 = 10$ 和 $z_2 = 80$ 处对 $Y_1 = NO_2$ 和 $Y_2 = O_3$ 作 95%的预测椭圆。将此椭圆与(a)中(iii)的预测区间比较，并作评论。

7.22 用表 1.8 中的骨骼中矿物含量数据：

(a) 用主桡骨作响应变量对其他 4 种骨骼作回归。

(i) 提出并拟合适当的回归模型。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(ii) 分析残差

(b) 用两种桡骨作响应变量对其他 3 种骨骼做多元多重回归。

7.23 用表 1.8 中在拍卖中出售的公牛特征数据，

(a) 做回归分析，用 Y_1=Sale Pr 作响应变量，其他变量作预测变量。

(i) 通过只保留有单独显著性的预测变量来确定“最佳”回归方程。

(ii) 用最佳拟合模型，对预测变量的一组值(不在原始数据中)构造 Y_1=销售价格的 95%预测区间。

(iii) 考察最佳拟合模型的残差。

(b) 用 Y_1=ln(Sale Pr)作响应变量，重复(a)中的分析。你倾向于哪一种分析方法？为什么？

7.24 用表 1.8 中拍卖出售公牛的特征数据，

(a) 进行回归分析，响应变量为 Y_1=SaleHt，预测变量为 Z_1=YrHgt，和 Z_2=FtFrBody。

(i) 拟合适当的模型并分析残差。

(ii) 当 $z_1=50.5$ 和 $z_2=970$ 时，求 Y_1=Sale Ht 的 95%的预测区间。

(b) 以 Y_1=Sale Ht，和 Y_2=SaleWt 作响应变量，$Z_1=Y_r$ Hgt 和 Z_2=FtFr Body 作预测变量，进行多元回归分析。

(i) 拟合适当的多元模型并分析残差。

(ii) 对 $z_1=50.5$ 和 $z_2=970$，求 Y_1 和 Y_2 的 95%预测椭圆。将此椭圆与(a)(ii)中的预测区间作比较，并加以评论。

7.25 化学物质 AMT 被某些心理医生用作抗忧郁剂。然而，这种药物有一些副作用，会引起心律不齐、血压异常和不规则的心电图波形等等。对 17 个使用过量 AMT 的病人搜集了一组数据，列于表 7.6。两个响应变量为

Y_1=总的 TCAD 血浆水平(TOT)

Y_2=在 TCAD 血浆水平中的 AMT 含量(AMI)

五个预测变量为

Z_1=性别(GEN)：1 为女性，0 为男性

Z_2=超剂量时抗忧郁剂的量(AMT)

Z_3=PR 波测量值(PR)

Z_4=扩张血压(DIAP)

Z_5=QRS 波测量值(QRS)

(a) 只用第一个响应 Y_1 作回归分析。

(i) 提出并拟合适当的线性回归模型。

(ii) 分析残差

(iii) 当 $z_1=1$，$z_2=1200$，$z_3=140$，$z_4=70$，及 $z_5=85$ 时对 Y_1 构造 95%预测区间。

(b) 用第二个响应 Y_2 重复(a)。

(c) 用两个响应 Y_1 和 Y_2 做多元多重回归。

(i) 提出并拟合适当的线性回归模型。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(ii) 分析残差。

(iii) 对(a)(iii)中的预测变量值构造两个响应变量的95%预测椭圆。将此椭圆与(a)和(b)中的预测区间作比较，并作出评论。

表 7.6 抗忧郁剂数据

y_1 TOT	y_2 AMI	z_1 GEN	z_2 AMT	z_3 PR	z_4 DIAP	z_5 QRS
3389	3149	1	7500	220	0	140
1101	653	1	1975	200	0	100
1131	810	0	3600	205	60	111
596	448	1	675	160	60	120
896	844	1	750	185	70	83
1767	1450	1	2500	180	60	80
807	493	1	350	154	80	98
1111	941	0	1500	200	70	93
645	547	1	375	137	60	105
628	392	1	1050	167	60	74
1360	1283	1	3000	180	60	80
652	458	1	450	160	64	60
860	722	1	1750	135	90	79
500	384	0	2000	160	60	80
781	501	0	4500	180	0	100
1070	405	0	1500	170	90	120
1754	1520	1	3000	180	0	129

资料来源：见[20]。

参 考 文 献

1. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.
2. Atkinson, A. C. *Plots. Transformations and Regression.* Oxford, England: Oxford University Press, 1985.
3. Bartlett, M. S. "A Note on Multiplying Factors for Various Chi-Squared Approximations." *Journal of the Royal Statistical Society* (*B*), 16 (1954), 296～298. .
4. Belsley, D. A., E. Kuh, and R. E. Welsh. *Regression Diagnostics.* New York: John Wiley, 1980.
5. Bowerman, B. L., and R. T. O'Connell. *Linear Statistical Models: An Applied Approach* (2d ed.). Boston: PWS-Kent, 1990.
6. Box, G. E. P. "A General Distribution Theory for a Class of Likelihood Criteria." *Biometrika*, 36 (1949), 317～346.
7. Box, G. E. P., G. M. Jenkins, and G. C. Reinsel. *Time Series Analysis: Forecasting and Control* (3d ed.). Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1994.
8. Chatterjee, S., and B. Price. *Regression Analysis by Example.* New York: John Wiley, 1977.
9. Cook, R. D., and S. Weisberg. *Residuals and Influence in Regression.* London: Chapman and Hall, 1982.
10. Daniel, C., and F. S. Wood. *Fitting Equations to Data* (2d ed.). New York: John Wiley, 1980.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

11. Draper, N. R., and H. Smith. *Applied Regression Analysis* (2d ed.). New York: John Wiley, 1981.
12. Durbin, J., and G. S. Watson. "Testing for Serial Correlation in Least Squares Regression, II." *Biometrika*, 38 (1951), 159～178.
13. Galton, F. "Regression Toward Mediocrity in Heredity Stature." *Journal of the Anthropological Institute*, 15(1885), 246～263.
14. Goldberger, A. S. *Econometric Theory*. New York: John Wiley, 1964.
15. Heck, D. L. "Charts of Some Upper Percentage Points of the Distribution of the Largest Characteristic Root." *Annals of Mathematical Statistics*, 31 (1960), 625～642.
16. Neter, J., M. Kutner, C. Nachtsheim and W. Wassermann. *Applied Linear Regression Models* (3d ed.). Chicago: Richard D. Irwin, 1996.
17. Pillai, K. C. S. "Upper Percentage Points of the Largest Root of a Matrix in Multivariate Analysis." *Biometrika*, 54 (1967), 189～193.
18. Rao, C. R. *Linear Statistical Inference and Its Applications*. (2d ed.). New York: John Wiley, 1973.
19. Seber, G. A. F. *Linear Regression Analysis*. New York: John Wiley, 1977.
20. Rudorfer, M. V. "Cardiovascular Changes and Plasma Drug Levels after Amitriptyline Overdose." *Journal of Toxicology-Clinical Toxicology*, 19(1882), 67～71.
21. Timm, N. H. *Multivariate Analysis with Applications in Education and Psychology*. Monterey. CA: Brooks/Cole, 1975.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第三部分

协方差结构分析

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

8.1 引言

主成分分析所关心的问题，是通过一组变量的几个线性组合来解释这组变量的方差-协方差结构。它的一般目的是：(1) 数据的压缩；(2) 数据的解释。

虽然要求 p 个成分可以再现全系统的变异性，但大部分变异性常常只用少数 k 个主成分就可说明。出现这种情况时，这 k 个主成分中所包含的信息和那 p 个原变量所包含的(几乎)一样多。于是这 k 个主成分就可以用来取代那初始的 p 个变量，并且由对 p 个变量的 n 次测量值所组成的原数据集，就压缩为对 k 个主成分的 n 次测量值所组成的数据集。

主成分分析常常揭示出一些先前不曾料想到的关系，因而会对数据给出一些不同寻常的解释。例 8.5 讨论的股票市场数据，提供了这方面的一个好例子。

主成分分析更多地是一种达到目的的方法，而非目的本身。这是因为主成分分析频繁地用作许多大型调研的中间步骤，例如，可以将主成分分析插到多重回归(见第 7 章)或聚类分析(见第 12 章)中去；此外还因为(尺度)主成分是第 9 章考虑的因子分析模型中协方差矩阵的一个“分解因子”。

8.2 总体主成分

主成分，在代数学上是 p 个随机变量 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的一些特殊的线性组合，而在几何学上这些线性组合代表选取一个新坐标系，它是以 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 为坐标轴的原坐标系旋转后得到的。新坐标轴代表数据变异性最大的方向，并且提供对协方差结构的一个较为简单但更精炼的刻画。

我们将会看到，主成分只依赖于 $X_1, X_2, \cdots, X_p$ 的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$(或相关矩阵 $\boldsymbol{\rho}$)。它们的进一步讨论不需要多元正态的假定。另一方面，对由多元正态总体导出的主成分可用**常数密度椭球**来作有用的阐明。进而，当总体是多元正态时，可由样本分量作出推断(见 8.5 节)。

设随机向量 $\mathbf{X}' = [X_1, X_2, \cdots, X_p]$ 有协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，其特征值 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_p \geqslant 0$。

考虑线性组合

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{aligned}
Y_1 &= \mathbf{a}_1'\mathbf{X} = a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \cdots + a_{1p}X_p \\
Y_2 &= \mathbf{a}_2'\mathbf{X} = a_{21}X_1 + a_{22}X_2 + \cdots + a_{2p}X_p \\
&\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
Y_p &= \mathbf{a}_p'\mathbf{X} = a_{p1}X_1 + a_{p2}X_2 + \cdots + a_{pp}X_p
\end{aligned} \tag{8-1}
$$

则由式(2-45),我们得到

$$\mathrm{Var}(Y_i) = \mathbf{a}_i'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_i \qquad i = 1,2,\cdots,p \tag{8-2}$$

$$\mathrm{Cov}(Y_i,Y_k) = \mathbf{a}_i'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_k \qquad i,k = 1,2,\cdots,p \tag{8-3}$$

主成分是那些不相关的线性组合 $Y_1,Y_2,\cdots,Y_p$,它们能使在式(8-2)中的方差尽可能地大。

第一主成分是有最大方差的线性组合,也即它使 $\mathrm{Var}(Y_1)=\mathbf{a}_1'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_1$ 最大化。显然,$\mathrm{Var}(Y_1)=\mathbf{a}_1'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_1$ 会因为任何 $\mathbf{a}_1$ 乘以某个常数而增大。为消除这种不确定性,一个方便的办法是只关注有单位长度的系数向量。我们因此定义

第一主成分=线性组合 $\mathbf{a}_1'\mathbf{X}$,在 $\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_1=1$ 时,它使 $\mathrm{Var}(\mathbf{a}_1'\mathbf{X})$最大

第二主成分=线性组合 $\mathbf{a}_2'\mathbf{X}$,在 $\mathbf{a}_2'\mathbf{a}_2=1$ 和 $\mathrm{Cov}(\mathbf{a}_1'\mathbf{X},\mathbf{a}_2'\mathbf{X})=0$ 时,它使 $\mathrm{Var}(\mathbf{a}_2'\mathbf{X})$最大

在第 i 步,

第 i 个主成分=线性组合 $\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$,在 $\mathbf{a}_i'\mathbf{a}_i=1$ 和 $\mathrm{Cov}(\mathbf{a}_i'\mathbf{X},\mathbf{a}_k'\mathbf{X})=0(k<i)$时,它使 $\mathrm{Var}(\mathbf{a}_i'\mathbf{X})$最大

结论 8.1 设 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是随机向量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,\cdots,X_p]$的协方差矩阵。它有特征值-特征向量对$(\lambda_1,\mathbf{e}_1),(\lambda_2,\mathbf{e}_2),\cdots,(\lambda_p,\mathbf{e}_p)$,其中 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_p\geqslant0$。则第 i 个主成分由

$$Y_i = \mathbf{e}_i'\mathbf{X} = e_{i1}X_1 + e_{i2}X_2 + \cdots + e_{ip}X_p, \qquad i = 1,2,\cdots,p \tag{8-4}$$

给出。此时,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Var}(Y_i) &= \mathbf{e}_i'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i = \lambda_i \qquad i = 1,2,\cdots,p \\
\mathrm{Cov}(Y_i,Y_k) &= \mathbf{e}_i'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_k = 0 \qquad i \neq k
\end{aligned} \tag{8-5}
$$

如有某些 λ_i 相等,那么对应的系数向量 $\mathbf{e}_i$ 的选取从而 Y_i 的选取,就都不是惟一的。

证明 从式(2-51),取 $\mathbf{B}=\boldsymbol{\Sigma}$,我们知道

$$\max_{\mathbf{a}\neq0}\frac{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\mathbf{a}} = \lambda_1 \qquad (\text{当 } \mathbf{a} = \mathbf{e}_1 \text{ 时达到最大值})$$

但是既然特征向量已规范化了,$\mathbf{e}_1'\mathbf{e}_1=1$,这样,

$$\max_{\mathbf{a}\neq0}\frac{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\mathbf{a}} = \lambda_1 = \frac{\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_1}{\mathbf{e}_1'\mathbf{e}_1} = \mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_1 = \mathrm{Var}(Y_1)$$

类似地,利用式(2-52),我们得到

$$\max_{\mathbf{a}\perp\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_k}\frac{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\mathbf{a}} = \lambda_{k+1} \qquad k = 1,2,\cdots,p-1$$

对于选取 $\mathbf{a}=\mathbf{e}_{k+1}$使 $\mathbf{e}_{k+1}'\mathbf{e}_i=0,i=1,2,\cdots,k$ 和 $k=1,2,\cdots,p-1$,

$$\mathbf{e}_{k+1}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_{k+1}/\mathbf{e}_{k+1}'\mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{e}_{k+1}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_{k+1} = \mathrm{Var}(Y_{k+1})$$

但 $\mathbf{e}_{k+1}'(\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_{k+1})=\lambda_{k+1}\mathbf{e}_{k+1}'\mathbf{e}_{k+1}=\lambda_{k+1}$故 $\mathrm{Var}(Y_{k+1})=\lambda_{k+1}$。还需要证明 $\mathbf{e}_i$ 与 $\mathbf{e}_k$ 垂直(也即 $\mathbf{e}_i'\mathbf{e}_k=0,i\neq k$)将给出 $\mathrm{Cov}(Y_i,Y_k)=0$。现在,如果 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 全都不同,则 $\boldsymbol{\Sigma}$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的特征向量是相互正交的，而如 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值不是全不相同，则对应共同特征值的特征向量可以选为正交的。因此，对于任意特征向量 $\mathbf{e}_i$ 和 $\mathbf{e}_k$，$\mathbf{e}_i'\mathbf{e}_k=0, i\neq k$。既然 $\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_k=\lambda_k\mathbf{e}_k$，用 $\mathbf{e}_i'$ 去乘，便得到对于任意的 $i\neq k$，有

$$\mathrm{Cov}(Y_i,Y_k)=\mathbf{e}_i'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_k=\mathbf{e}_i'\lambda_k\mathbf{e}_k=\lambda_k\mathbf{e}_i'\mathbf{e}_k=0$$

证毕。

由结论 8.1 可知，主成分都是不相关的，而且它们的方差等于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值。

结论 8.2 设随机向量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,\cdots,X_p]$ 有协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，其特征值-特征向量对 $(\lambda_1,\mathbf{e}_1),(\lambda_2,\mathbf{e}_2),\cdots,(\lambda_p,\mathbf{e}_p)$，其中 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_p\geqslant0$。设 $Y_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{X},Y_2=\mathbf{e}_2'\mathbf{X},\cdots,Y_p=\mathbf{e}_p'\mathbf{X}$ 是主成分。则

$$\sigma_{11}+\sigma_{22}+\cdots+\sigma_{pp}=\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(X_i)=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p=\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(Y_i)$$

证明 由定义 2A.28，$\sigma_{11}+\sigma_{22}+\cdots+\sigma_{pp}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma})$。由式(2-20)，取 $\mathbf{A}=\boldsymbol{\Sigma}$，我们可写 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{P}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}'$，其中 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是特征值的对角矩阵，而 $\mathbf{P}=[\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p]$，故有 $\mathbf{P}'\mathbf{P}=\mathbf{P}\mathbf{P}'=\mathbf{I}$。利用结论 2A.12(c)，我们有

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma})=\mathrm{tr}(\mathbf{P}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}')=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}'\mathbf{P})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda})=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p$$

于是

$$\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(X_i)=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Lambda})=\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(Y_i)$$

结论 8.2 说明

$$\begin{aligned}\text{总体总方差}&=\sigma_{11}+\sigma_{22}+\cdots+\sigma_{pp}\\&=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p\end{aligned}\tag{8-6}$$

从而总方差中属于第 k 个主成分(被第 k 个主成分所解释的)的比例为

$$\begin{pmatrix}\text{总方差中属于}\\\text{第 } k \text{ 个主成分}\\\text{的比例}\end{pmatrix}=\frac{\lambda_k}{\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p},\qquad k=1,2,\cdots,p\tag{8-7}$$

如果总方差的相当大的部分(例如 80%到 90%)归因于第一个、前两个或前三个成分，而 p 较大，那么这些成分就可以“取代”原来的 p 个变量，而且信息损失不多。

系数向量 $\mathbf{e}_i'=[e_{i1},\cdots,e_{ik},\cdots,e_{ip}]$ 的每一个分量也值得注意。e_{ik} 的大小量度第 k 个变量对第 i 个主成分的重要程度，而不管其他变量如何。特别地，e_{ik} 与 Y_i 和 X_k 之间的相关系数成比例。

结论 8.3 如果 $Y_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{X},Y_2=\mathbf{e}_2'\mathbf{X},\cdots,Y_p=\mathbf{e}_p'\mathbf{X}$ 是从协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 所得到的主成分，则

$$\rho_{Y_i,X_k}=\frac{e_{ik}\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}\qquad i,k=1,2,\cdots,p\tag{8-8}$$

是成分 Y_i 和变量 X_k 之间的相关系数，此处 $(\lambda_1,\mathbf{e}_1),(\lambda_2,\mathbf{e}_2),\cdots,(\lambda_p,\mathbf{e}_p)$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值-特征向量对。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

证明 设 $\mathbf{a}_k'=[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]$，则由式(2-45)有 $X_k=\mathbf{a}_k'\mathbf{X}$ 和 $\mathrm{Cov}(X_k,Y_i)=\mathrm{Cov}(\mathbf{a}_k'\mathbf{X},\mathbf{e}_i'\mathbf{X})=\mathbf{a}_k'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i$。既然 $\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i=\lambda_i\mathbf{e}_i$，$\mathrm{Cov}(X_k,Y_i)=\mathbf{a}_k'\lambda_i\mathbf{e}_i=\lambda_i e_{ik}$。则由 $\mathrm{Var}(Y_i)=\lambda_i$[见式(8-5)]和 $\mathrm{Var}(X_k)=\sigma_{kk}$得出

$$\rho_{Y_i,X_k}=\frac{\mathrm{Cov}(Y_i,X_k)}{\sqrt{\mathrm{Var}(Y_i)}\sqrt{\mathrm{Var}(X_k)}}=\frac{\lambda_i e_{ik}}{\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\sigma_{kk}}}=\frac{e_{ik}\sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}}}\qquad i,k=1,2,\cdots,p$$

虽然变量和主成分之间的相关系数有助于解释这些成分，但它们只量度单个 X 对成分 Y 的单变量的贡献。这也就是说，在其他那些 X 存在时，它们并不表明该 X 对成分 Y 的重要程度。因为这个理由，某些统计学家(例如，见 Rencher[17])推荐，用于解释主成分时只用成分系数 e_{ik}而不用相关系数。虽说作为变量对已知成分的重要性的测度，系数和相关可能导出不同的重要性等级，但是我们的经验表明，这种等级的差别常常不是大到很明显。在实践中，有较大(按绝对值)系数的变量，趋向于有较大的相关，故这两个重要性的测度(前者为多变量，后者为单变量)经常给出相似的结果。我们建议既考察系数又考察相关，这有助于解释主成分。

下面是一个虚构的例子，用来说明结论 8.1，8.2 和 8.3。

例 8.1 (计算总体主成分)

设随机变量 X_1,X_2 和 X_3 有协方差矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}1 & -2 & 0\\ -2 & 5 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}$$

可以查验特征值-特征向量对为

$$\lambda_1=5.83\qquad \mathbf{e}_1'=[0.383,-0.924,0]$$
$$\lambda_2=2.00\qquad \mathbf{e}_2'=[0,0,1]$$
$$\lambda_3=0.17\qquad \mathbf{e}_3'=[0.924,0.383,0]$$

因此，主成分为

$$Y_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{X}=0.383X_1-0.924X_2$$
$$Y_2=\mathbf{e}_2'\mathbf{X}=X_3$$
$$Y_3=\mathbf{e}_3'\mathbf{X}=0.924X_1+0.383X_2$$

变量 X_3 是主成分之一，因为它与其余的两个变量不相关。

第一主成分可以阐明式(8-5)。例如

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(Y_1)&=\mathrm{Var}(0.383X_1-0.924X_2)\\&=0.383^2\times\mathrm{Var}(X_1)+(-0.924)^2\times\mathrm{Var}(X_2)\\&\quad+2\times0.383\times(-0.924)\times\mathrm{Cov}(X_1,X_2)\\&=0.147\times1+0.854\times5-0.708\times(-2)\\&=5.83=\lambda_1\\\mathrm{Cov}(Y_1,Y_2)&=\mathrm{Cov}(0.383X_1-0.924X_2,X_3)\\&=0.383\mathrm{Cov}(X_1,X_3)-0.924\mathrm{Cov}(X_2,X_3)\end{aligned}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=0.383\times 0-0.924\times 0=0$$

也容易看出

$$\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33}=1+5+2=\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3=5.83+2.00+0.17$$

此例证实式(8-6)正确。总方差中归因于第一主成分的比例为 $\lambda_1/(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)=5.83/8=0.73$。进一步,前两个主成分占总体方差的$(5.83+2)/8=0.98$。此时,两个成分 Y_1 和 Y_2 可以代替原先的三个变量而不会有什么信息损失。

$$\rho_{Y_1,X_1}=\frac{e_{11}\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\sigma_{11}}}=\frac{0.383\times\sqrt{5.83}}{\sqrt{1}}=0.925$$

$$\rho_{Y_1,X_2}=\frac{e_{21}\sqrt{\lambda_1}}{\sqrt{\sigma_{22}}}=\frac{-0.924\times\sqrt{5.83}}{\sqrt{5}}=-0.998$$

注意这里变量 X_2 有系数-0.924,在主成分 Y_1 中拥有最大的权数。它也有与 Y_1 最大(按绝对值)的相关系数。X_1 和 Y_1 的相关系数为 0.925,几乎与前者一样大,这表明此两个变量对第一主成分来说大致同样重要。然而 X_1 和 X_2 的系数的相对大小说明,对于 Y_1 的确定,X_2 的贡献比 X_1 要多。在这种情况下,由于两个系数均相当地大且有相反的正负号,我们将认为这两个变量均有助于解释 Y_1。

最后,

$$\rho_{Y_2,X_1}=\rho_{Y_2,X_2}=0 \text{ 和 } \rho_{Y_2,X_3}=\frac{\sqrt{\lambda_2}}{\sqrt{\sigma_{33}}}=\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}}=1 \qquad \text{(一如所期)}$$

由于第三个成分不重要,所以余下的相关可以忽略。

考虑从多元正态随机变量导出的主成分,会提供大量信息。设 $\mathbf{X}$ 的分布为 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$。我们从式(4-7)知道,在以 $\boldsymbol{\mu}$ 为中心的椭球上,$\mathbf{X}$ 的密度是常数

$$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})=c^2$$

其轴为$\pm c\sqrt{\lambda_i}\mathbf{e}_i, i=1,2,\cdots,p$,其中$(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值-特征向量对。在原点为 $\boldsymbol{\mu}$、坐标轴平行于原坐标轴 $x_1,x_2,\cdots,x_p$ 的坐标系中,位于椭球第 i 条坐标轴上的一点,将有与 $\mathbf{e}_i'=[e_{i1},e_{i2},\cdots,e_{ip}]$成比例的坐标。在下面的讨论中,令 $\boldsymbol{\mu}=\mathbf{0}$ 将是方便的①。

从 2.3 节的讨论,取 $\mathbf{A}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$,我们可有

$$c^2=\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}=\frac{1}{\lambda_1}(\mathbf{e}_1'\mathbf{x})^2+\frac{1}{\lambda_2}(\mathbf{e}_2'\mathbf{x})^2+\cdots+\frac{1}{\lambda_p}(\mathbf{e}_p'\mathbf{x})^2$$

其中 $\mathbf{e}_1'\mathbf{x},\mathbf{e}_2'\mathbf{x},\cdots,\mathbf{e}_p'\mathbf{x}$ 为 $\mathbf{x}$ 的主成分。设 $y_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{x},y_2=\mathbf{e}_2'\mathbf{x},\cdots,y_p=\mathbf{e}_p'\mathbf{x}$,我们有

$$c^2=\frac{1}{\lambda_1}y_1^2+\frac{1}{\lambda_2}y_2^2+\cdots+\frac{1}{\lambda_p}y_p^2$$

并且在具有分别沿 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p$ 方向的坐标轴为 $y_1,y_2,\cdots,y_p$ 的坐标系中,上式定义了一个椭球(由于 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 都是正的)。如果 λ_1 是最大的特征值,那么主轴沿着 $\mathbf{e}_1$ 的方向。

---

① 这样做可不失一般性,因为总可以将正态向量 $\mathbf{X}$ 变换为正态向量 $\mathbf{W}=\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}$ 而有 $E(\mathbf{W})=\mathbf{0}$,而 $\mathrm{Cov}(\mathbf{X})=\mathrm{Cov}(\mathbf{W})$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

余下较次要的坐标轴沿着由 $\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p$ 确定的方向。

总而言之，主成分 $y_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{x}, y_2=\mathbf{e}_2'\mathbf{x},\cdots,y_p=\mathbf{e}_p'\mathbf{x}$ 沿着常数密度椭球的坐标轴方向。因此，在第 i 条椭球轴上任一点 $\mathbf{x}$ 的坐标，与 $\mathbf{e}_i'=[e_{i1},e_{i2},\cdots,e_{ip}]$ 的成比例，并且还必定有形如 $[0,\cdots,0,y_i,0,\cdots,0]$ 的主成分。

当 $\boldsymbol{\mu}\neq\mathbf{0}$ 时，均值中心化主成分 $y_1=\mathbf{e}_i'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$ 的均值为 0，且在 $\mathbf{e}_i$ 的方向上。

图 8.1 表示的是一个均值 $\boldsymbol{\mu}$ 为 $\mathbf{0}$ 和 $\rho=0.75$ 的二元正态随机向量的常数密度椭圆和主成分。我们看到，将原坐标轴旋转一个角度 θ，直到它们与常数密度椭圆的轴重合，就得到主成分。这个结论对 $p>2$ 维时同样成立。

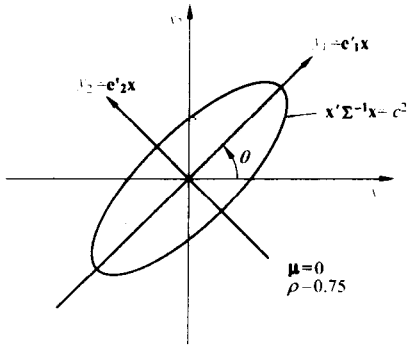


图 8.1 均值为 $\mathbf{0}$ 的二元正态随机向量 $\mathbf{X}$，其常数密度椭圆 $\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}=c^2$ 和主成分 y_1,y_2

从标准化变量得到的主成分

主成分也可以从标准化变量

$$
\begin{aligned}
Z_1 &= \frac{(X_1-\mu_1)}{\sqrt{\sigma_{11}}}\\
Z_2 &= \frac{(X_2-\mu_2)}{\sqrt{\sigma_{22}}}\\
&\vdots\\
Z_p &= \frac{(X_p-\mu_p)}{\sqrt{\sigma_{pp}}}
\end{aligned}
\tag{8-9}
$$

得到。采用矩阵记号

$$\mathbf{Z}=(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}) \tag{8-10}$$

其中对角标准离差矩阵 $\mathbf{V}^{1/2}$ 由式(2-35)定义。由式(2-37)易知 $E(\mathbf{Z})=\mathbf{0}$，且

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{Z})=(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}=\boldsymbol{\rho}$$

$\mathbf{Z}$ 的主成分可从 $\mathbf{X}$ 的相关矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征向量得到。由于各个 Z_i 的方差为 1，我们先前提供的所有结论都有更为简化的表达。我们将继续用记号 Y_i 代表第 i 个主成分，用 $(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$ 代表特征值-特征向量对，不管它是从 $\boldsymbol{\rho}$ 或是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 得到的。然而，由 $\boldsymbol{\Sigma}$ 导出的 $(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$ 和由 $\boldsymbol{\rho}$ 导出的 $(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$，一般来说是不同的。

结论 8.4 有 $\mathrm{Cov}(\mathbf{Z})=\boldsymbol{\rho}$ 的标准化变量 $\mathbf{Z}'=[Z_1,Z_2,\cdots,Z_p]$ 的第 i 主成分由

$$Y_i=\mathbf{e}_i'\mathbf{Z}=\mathbf{e}_i'(\mathbf{V}^{1/2})^{-1}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}),\qquad i=1,2,\cdots,p$$

给出。而且

$$\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(Y_i)=\sum_{i=1}^{p}\mathrm{Var}(Z_i)=p \tag{8-11}$$

$$\rho_{Y_i,Z_k}=e_{ik}\sqrt{\lambda_i}\qquad i,k=1,2,\cdots,p$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

此时，$(\lambda_1,\mathbf{e}_1),(\lambda_2,\mathbf{e}_2),\cdots,(\lambda_p,\mathbf{e}_p)$都是 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征值-特征向量对，且有 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_p\geqslant 0$。

证明 结论 8.4 从结论 8.1，8.2 和 8.3 得到，只要用 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_p$ 代替 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 和用 $\boldsymbol{\rho}$ 代替 $\boldsymbol{\Sigma}$ 即可。

从式(8-11)我们看到，(标准化变量)总体的总方差就是 p，即矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 的对角元之和。利用式(8-7)，用 $\mathbf{Z}$ 取代 $\mathbf{X}$，我们发现，由 $\mathbf{Z}$ 的第 k 个主成分解释的总方差所占的比例是

$$\begin{pmatrix}\text{第 } k \text{ 个主成分}\\ \text{解释的总方差}\\ \text{所占的比例}\end{pmatrix}=\frac{\lambda_k}{p},\qquad k=1,2,\cdots,p \tag{8-12}$$

其中诸 λ_k 都是 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征值。

例 8.2 （从协方差矩阵和从相关矩阵得到的主成分是不同的）

考虑协方差矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}1 & 4\\ 4 & 100\end{bmatrix}$$

和导出的相关矩阵

$$\boldsymbol{\rho}=\begin{bmatrix}1 & 0.4\\ 0.4 & 1\end{bmatrix}$$

自 $\boldsymbol{\Sigma}$ 得出的特征值-特征向量对是

$$\lambda_1=100.16,\qquad \mathbf{e}_1'=[0.040,0.999]$$
$$\lambda_2=0.84,\qquad \mathbf{e}_2'=[0.999,-0.040]$$

类似地，来自 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征值-特征向量对是

$$\lambda_1=1+\rho=1.4,\qquad \mathbf{e}_1'=[0.707,0.707]$$
$$\lambda_2=1-\rho=0.6,\qquad \mathbf{e}_2'=[0.707,-0.707]$$

相应的主成分则分别为

$$\boldsymbol{\Sigma}:\quad \begin{aligned}Y_1&=0.040X_1+0.999X_2\\ Y_2&=0.999X_1-0.040X_2\end{aligned}$$

及

$$\boldsymbol{\rho}:\quad \begin{aligned}Y_1=0.707Z_1+0.707Z_2&=0.707\left(\frac{X_1-\mu_1}{1}\right)+0.707\left(\frac{X_2-\mu_2}{10}\right)\\ &=0.707(X_1-\mu_1)+0.0707(X_2-\mu_2)\\ Y_2=0.707Z_1-0.707Z_2&=0.707\left(\frac{X_1-\mu_1}{1}\right)-0.707\left(\frac{X_2-\mu_2}{10}\right)\\ &=0.707(X_1-\mu_1)-0.0707(X_2-\mu_2)\end{aligned}$$

由于 X_2 的方差大，它完全控制了由 $\boldsymbol{\Sigma}$ 确定的第一主成分。而且，第一主成分解释的总体总方差的比例为

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2}=\frac{100.16}{101}=0.992$$

然而，当变量 X_1 和 X_2 标准化后，所得变量对由 $\boldsymbol{\rho}$ 确定的主成分的贡献却相同。利用结论 8.4，我们得到

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\rho_{Y_1,Z_1} = e_{11}\sqrt{\lambda_1} = 0.707 \times \sqrt{1.4} = 0.837$$

及
$$\rho_{Y_1,Z_2} = e_{21}\sqrt{\lambda_1} = 0.707 \times \sqrt{1.4} = 0.837$$

在这种情况，第一主成分解释(标准化)总体总方差的比例为

$$\frac{\lambda_1}{p} = \frac{1.4}{2} = 0.7$$

最让人吃惊的是，我们看到变量对于，比如说，第一主成分的相对重要性受到标准化的极大影响。当由 $\boldsymbol{\rho}$ 确定的第一主成分用 X_1 和 X_2 表示时，权数的相对大小 0.707 及 0.0707，却与由 $\boldsymbol{\Sigma}$ 确定的主成分中的那些变量所得到的权数的相对大小 0.040 及 0.999，正好相反。

上例表明由 $\boldsymbol{\Sigma}$ 导出主成分与由 $\boldsymbol{\rho}$ 导出的主成分是不同的，而且，一组主成分也不是另外一组主成分的简单函数。这说明，标准化不是无关紧要的。

如果在极其不同的范围内测量变量，或是测量单位不是同量纲的，那么变量可能应该标准化。例如，X_1 代表年销售额，在 10 000 美元到 350 000 美元之间，而 X_2 是比值(年净收入)/(总资产)，它落在 0.01 到 0.60 之间。那么这时总方差会几乎全部归因于销售额。此种情况下，我们会得到单一的(重要的)主成分，且 X_1 权数很大。相反，如果两个变量都标准化，它们的大小将在同一层次上，X_2(或 Z_2)将在主成分结构上起较大的作用。这个性质，在例 8.2 看到过。

有特殊结构的协方差矩阵的主成分

存在某些模式的协方差和相关矩阵，它们的主成分能够表示成简单的形式。设 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是对角矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix} \tag{8-13}$$

令 $\mathbf{e}_i' = [0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]$，第 i 个位置上为 1，我们看到

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1\sigma_{ii} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{或} \quad \boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}_i = \sigma_{ii}\mathbf{e}_i$$

并得到结论：$(\sigma_{ii},\mathbf{e}_i)$是第 i 个特征值-特征向量对。由于线性组合 $\mathbf{e}_i'\mathbf{X} = X_i$，此组主成分正是原来那组不相关随机变量。

对如式(8-13)所示的协方差矩阵，抽取主成分时是什么东西也得不到的。从另一方面看，如果 $\mathbf{X}$ 服从正态分布 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$，常数密度的轮廓线是椭球，其轴已经沿着最大变差方

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

向，于是就没有必要去旋转坐标系了。

对式(8-13)中的 $\boldsymbol{\Sigma}$，标准化基本上不改变上面这种情况。在那种情况下，$\boldsymbol{\rho}=\mathbf{I}$，一个 $p\times p$ 的单位矩阵。易知，$\boldsymbol{\rho}\mathbf{e}_i=1\mathbf{e}_i$，故特征值 1 有 p 重且可方便地取这些特征向量为 $\mathbf{e}_i'=[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]$，$i=1,2,\cdots,p$。于是，由 $\boldsymbol{\rho}$ 确定的主成分也是原变量 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_p$。而且，在特征值相等的情形下，常数密度的多元正态椭球是球体。

另一种模式的协方差矩阵常用于描述诸如生物大小等生态学变量中的对应关系。这种矩阵的一般形式为

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \cdots & \rho\sigma^2\\ \rho\sigma^2 & \sigma^2 & \cdots & \rho\sigma^2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 & \cdots & \sigma^2\end{bmatrix} \tag{8-14}$$

得到的相关矩阵为

$$\boldsymbol{\rho}=\begin{bmatrix}1 & \rho & \cdots & \rho\\ \rho & 1 & \cdots & \rho\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \rho & \rho & \cdots & 1\end{bmatrix} \tag{8-15}$$

也是标准化变量的协方差矩阵。式(8-15)中的矩阵意味着变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 是等相关的。

不难证明(见练习 8.5)，相关矩阵(8-15)的 p 个特征值可以分为两组。当 ρ 为正时，最大特征值为

$$\lambda_1=1+(p-1)\rho \tag{8-16}$$

相联系的特征向量为

$$\mathbf{e}_1'=\left[\frac{1}{\sqrt{p}},\frac{1}{\sqrt{p}},\cdots,\frac{1}{\sqrt{p}}\right] \tag{8-17}$$

其余 $p-1$ 个特征值是

$$\lambda_2=\lambda_3=\cdots=\lambda_p=1-\rho$$

它们的特征向量可以选为

$$\mathbf{e}_2'=\left[\frac{1}{\sqrt{1\times 2}},\frac{-1}{\sqrt{1\times 2}},0,\cdots,0\right]$$

$$\mathbf{e}_3'=\left[\frac{1}{\sqrt{2\times 3}},\frac{1}{\sqrt{2\times 3}},\frac{-2}{\sqrt{2\times 3}},0,\cdots,0\right]$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$\mathbf{e}_i'=\left[\frac{1}{\sqrt{(i-1)i}},\cdots,\frac{1}{\sqrt{(i-1)i}},\frac{-(i-1)}{\sqrt{(i-1)i}},0,\cdots,0\right]$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$\mathbf{e}_p'=\left[\frac{1}{\sqrt{(p-1)p}},\cdots,\frac{1}{\sqrt{(p-1)p}},\frac{-(p-1)}{\sqrt{(p-1)p}}\right]$$

第一主成分

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$Y_1 = \mathbf{e}_1'\mathbf{X} = \frac{1}{\sqrt{p}}\sum_{i=1}^{p} X_i$$

与 p 个原变量之和成比例。它可以看作有等权的“指数”。该主成分解释总体总方差的比例为

$$\frac{\lambda_1}{p} = \frac{1+(p-1)\rho}{p} = \rho + \frac{1-\rho}{p} \tag{8-18}$$

我们看到，ρ 接近 1 或者 p 较大时，$\lambda_1/p=\rho$。例如，若 $\rho=0.80$ 和 $p=5$，第一主成分解释总方差的 84%。当 ρ 近似于 1，后 $p-1$ 个成分对总方差的集体贡献十分小，常可略去。

如果标准化变量 $Z_1,Z_2,\cdots,Z_p$ 服从多元正态分布，协方差矩阵由式(8-15)给出，那么常数密度椭球呈“雪茄烟形”，主轴与第一主成分 $Y_1=(1/\sqrt{p})[1,1,\cdots,1]\mathbf{X}$ 成比例。该主成分是 $\mathbf{X}$ 在等角线 $\mathbf{1}'=[1,1,\cdots,1]$ 上的投影。那些短轴(及余下的主成分)占据球形对称方向，与主轴(及第一主成分)垂直。

8.3 综合主成分的样本变差

现在我们已有了必要的框架来对 p 个变量的 n 次测量研究综合其变差的问题，这 p 个变量已审慎地选出了几个线性组合。

设数据 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 为从均值向量为 $\boldsymbol{\mu}$ 协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的某个 p 维总体中 n 个独立的抽样。这些数据得到样本均值向量 $\bar{\mathbf{x}}$，样本协方差阵 $\mathbf{S}$，以及样本相关阵 $\mathbf{R}$。

本节的目的是构造所测得的特征的不相关线性组合，而这些特征说明了大多数样本变差。有最大方差的不相关线性组合，可称为**样本主成分**。

回忆任意线性组合的 n 个值

$$\mathbf{a}_1'\mathbf{x} = a_{11}x_{j1} + a_{12}x_{j2} + \cdots + a_{1p}x_{jp}, \quad j=1,2,\cdots,n$$

有样本均值 $\mathbf{a}_1'\bar{\mathbf{x}}$ 和样本方差 $\mathbf{a}_1'\mathbf{S}\mathbf{a}_1$。对两个线性组合的数值对 $(\mathbf{a}_1'\bar{\mathbf{x}}_j,\mathbf{a}_2'\bar{\mathbf{x}}_j)$，也有样本协方差 $\mathbf{a}_1'\mathbf{S}\mathbf{a}_2$[见式(3-36)]。

样本主成分被定义为使样本方差最大的那些线性组合。与对总体量所做的一样，我们限制系数向量 $\mathbf{a}_i$ 满足 $\mathbf{a}_i'\mathbf{a}_i=1$。特别地，

第一样本主成分＝使其样本方差最大化的线性组合 $\mathbf{a}_1'\mathbf{X}_j$，约束为 $\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_1=1$

第二样本主成分＝使其样本方差最大化的线性组合 $\mathbf{a}_2'\mathbf{X}_j$，约束为 $\mathbf{a}_2'\mathbf{a}_2=1$ 及数值对 $(\mathbf{a}_1'\mathbf{x}_j,\mathbf{a}_2'\mathbf{x}_j)$ 的协方差为 0

在第 i 步，我们有

第 i(个)样本主成分＝使其样本方差最大化的线性组合 $\mathbf{a}_i'\mathbf{x}_j$，约束为 $\mathbf{a}_i'\mathbf{a}_i=1$ 及所有数值对 $(\mathbf{a}_i'\mathbf{x}_j,\mathbf{a}_k'\mathbf{x}_j)$ 的协方差为 0，$k<i$

第一主成分将 $\mathbf{a}_1'\mathbf{S}\mathbf{a}_1$ 或等价地将

$$\frac{\mathbf{a}_1'\mathbf{S}\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_1} \tag{8-19}$$

最大化。根据式(2-51)，此最大值即是最大的特征值 $\hat{\lambda}_1$，在选取 $\mathbf{a}_1=\mathbf{S}$ 的特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_1$ 时得

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

到。在 $0=\mathbf{a}_i'\mathbf{S}\hat{\mathbf{e}}_k=\mathbf{a}_i'\hat{\lambda}_k\hat{\mathbf{e}}_k$ 或 $\mathbf{a}_i$ 与 $\hat{\mathbf{e}}_k$ 垂直的约束条件下，相继选取 $\mathbf{a}_i$ 使式(8-19)最大化。这样，像结论 8.1～8.3 的证明一样，我们得到关于样本主成分的下述结论：

若 $\mathbf{S}=\{s_{ij}\}$ 是特征值-特征向量对为 $(\hat{\lambda}_1,\hat{\mathbf{e}}_1),(\hat{\lambda}_2,\hat{\mathbf{e}}_2),\cdots,(\hat{\lambda}_p,\hat{\mathbf{e}}_p)$ 的 $p\times p$ 样本协方差阵，则第 i 个样本主成分由

$$\hat{y}_i=\hat{\mathbf{e}}_i'\mathbf{x}=\hat{e}_{i1}x_1+\hat{e}_{i2}x_2+\cdots+\hat{e}_{ip}x_p,\qquad i=1,2,\cdots,p$$

给出，其中 $\hat{\lambda}_1\geqslant\hat{\lambda}_2\geqslant\cdots\geqslant\hat{\lambda}_p\geqslant 0$，而 $\mathbf{x}$ 是变量 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的任一观察，同时还有

$$\text{样本方差}(\hat{y}_k)=\hat{\lambda}_k,\quad k=1,2,\cdots,p \tag{8-20}$$

$$\text{样本协方差}(\hat{y}_i,\hat{y}_k)=0,\quad i\neq k$$

此外，

$$\text{样本总方差}=\sum_{i=1}^{p}s_{ii}=\hat{\lambda}_1+\hat{\lambda}_2+\cdots+\hat{\lambda}_p$$

且

$$r_{\hat{y}_i,x_k}=\frac{\hat{\mathbf{e}}_{ik}\sqrt{\hat{\lambda}_i}}{\sqrt{s_{kk}}},\qquad i,k=1,2,\cdots,p$$

我们把样本主成分记为 $\hat{y}_1,\hat{y}_2,\cdots,\hat{y}_p$，不管它们是由 $\mathbf{S}$ 还是由 $\mathbf{R}$ 得到的①。从 $\mathbf{S}$ 和从 $\mathbf{R}$ 构造的主成分，一般说是不同的，但从上下文会清楚究竟用的是哪个矩阵，而为方便只用一个记号 $\hat{y}_i$。在两种情况下，将成分系数向量表示为 $\hat{\mathbf{e}}_i$，将成分方差表示为 $\hat{\lambda}_i$，也是方便的。

常常从观察值 $\mathbf{x}_j$ 中减去 $\bar{\mathbf{x}}$ 而使其"中心化"。这不影响样本协方差阵 $\mathbf{S}$，并给出任一观察值向量 $\mathbf{x}$ 的第 i 个主成分

$$\hat{y}_i=\hat{\mathbf{e}}_i'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}),\qquad i=1,2,\cdots,p \tag{8-21}$$

若我们考虑在式(8-21)中以各个观察值 $\mathbf{x}_j$ 代替任意的 $\mathbf{x}$，所生成的第 i 个主成分的值

$$\hat{y}_{ji}=\hat{\mathbf{e}}_i'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}),\qquad j=1,2,\cdots,n \tag{8-22}$$

则有

$$\bar{\hat{y}}_i=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\hat{\mathbf{e}}_i'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})=\frac{1}{n}\hat{\mathbf{e}}_i'\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})\right)=\frac{1}{n}\hat{\mathbf{e}}_i'\mathbf{0}=0 \tag{8-23}$$

也即各个主成分的样本均值为 0。样本方差仍如式(8-20)中那样，由诸 $\hat{\lambda}_i$ 给出。

例 8.3 （用两个样本主成分综合样本变异性）

一项调查提供威斯康星的麦迪逊地区各区域关于五个社会经济变量的信息。来自 14 个区域的数据列在本章末练习的表 8.5 中。这些数据产生下列综合统计量：

---

① 如 X_j 服从正态分布，样本主成分也可以从 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\mathbf{S}_n$ 得到，它是协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的最大似然估计。(参看结论 4.11。)此时，只要 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的诸特征值不同，样本主成分就可看作为相应总体主成分的最大似然估计。(参看[1]。)因为本节不要求正态性假定，因此将不考虑 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$。同样地，$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 有特征值 $[(n-1)/n]\hat{\lambda}_i$ 和对应的特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_i$，其中 $(\hat{\lambda}_i,\hat{\mathbf{e}}_i)$ 是 $\mathbf{S}$ 的特征值-特征向量对。这样，无论是 $\mathbf{S}$ 还是 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 都给出相同的样本主成分 $\hat{\mathbf{e}}_i'\mathbf{x}$[见式(8-20)]和相同的解释方差的比例 $\hat{\lambda}_i/(\hat{\lambda}_1+\hat{\lambda}_2+\cdots+\hat{\lambda}_p)$。最后，无论 $\mathbf{S}$ 还是 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 都给出相同的样本相关阵 $\mathbf{R}$，因此只要把变量标准化，选 $\mathbf{S}$ 还是选 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 都无所谓。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\bar{\mathbf{x}}' = [4.32,\ 14.01,\ 1.95,\ 2.17,\ 2.45]$$

总人口（千人）	受教育年限中位数	就业总人数（千人）	健康服务业就业数（千人）	家庭收入中位数（万美元）

和

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 4.308 & 1.683 & 1.803 & 2.155 & -0.253 \\ 1.683 & 1.768 & 0.588 & 0.177 & 0.176 \\ 1.803 & 0.588 & 0.801 & 1.065 & -0.158 \\ 2.155 & 0.177 & 1.065 & 1.970 & -0.357 \\ -0.253 & 0.176 & -0.158 & -0.357 & 0.504 \end{bmatrix}.$$

试问样本的变差能用 1 或 2 个主成分综合吗？

我们发现：

主成分的系数（括号中为相关系数）

变量	$\hat{\mathbf{e}}_1(r_{\hat{y}_1,x_k})$	$\hat{\mathbf{e}}_2(r_{\hat{y}_2,x_k})$	$\hat{\mathbf{e}}_3$	$\hat{\mathbf{e}}_4$	$\hat{\mathbf{e}}_5$
总人口	0.781(0.99)	−0.071(−0.04)	0.004	0.542	−0.302
受教育年限中位数	0.306(0.61)	−0.764(−0.76)	−0.162	−0.545	−0.010
就业总人数	0.334(0.98)	0.083(0.12)	0.015	0.050	0.937
健康服务业就业数	0.426(0.80)	0.579(0.55)	0.220	−0.636	−0.173
家庭收入中位数	−0.054(−0.20)	−0.262(−0.49)	0.962	−0.051	0.024
方差($\hat{\lambda}_i$)：	6.931	1.786	0.390	0.230	0.014
占总方差的累积百分比	74.1	93.2	97.4	99.9	100

第一主成分解释样本总方差的 74.1%，前两个主成分合在一起则解释样本总方差的 93.2%。因此，前两个主成分很好地综合了样本方差，并且将对五个变量的 14 次观测合理地压缩到对两个主成分的 14 次观测。

由前述主成分系数可知，第一主成分实质上是前四个变量的加权平均。从第二主成分看出健康服务业的就业和另两项受教育年限中位数及家庭收入中位数的加权平均形成强烈反差。

正如我们在讨论总体主成分时说过的那样，为了阐明主成分，成分系数 $\hat{e}_{ik}$ 和相关系数 $r_{\hat{y}_i,x_k}$ 都应进行考查。相关系数考虑到了原变量方差的不同，但仅仅量测单个 X 的重要性却未顾及组成该成分的其他 X。然而，从例 8.3 注意到，表中的相关系数的确证实了由成分系数所提供的阐述。

主成分个数

始终有个问题：应保留多少个成分？对此没有一个确切的回答。应考虑的事情包括所说明的样本总方差的量、特征值（样本成分方差）的相对大小以及诸成分的现实题材的阐述。此外，像我们稍后讨论的那样，与一个接近于零的特征值有关的成分，会显得不重要，却可能表示数据中有一个意外的线性依赖关系。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

一种能帮助我们确定主成分合适个数的有用的视觉工具，是所谓的**崖底碎石图**①。将特征值从大到小排列，崖底碎石图就是 $\hat{\lambda}_i$ 对序号 i（即特征值的大小对特征值的号码）的 (i,λ_i) 的图。为确定主成分的合适个数，我们在该图上找拐弯处（弯曲处）。选取一个拐弯点对应的序号，此序号后的特征值全部较小且彼此大小差不多。这样选出的号码数作为主成分的个数。图 8.2 表示有 6 个主成分的崖底碎石图。

图 8.2 中在 $i=3$ 处拐弯。也就是说，此后的特征值全都比较小且彼此大小差不多。在这种情况下，没有其他证据也看得出，两个（也许三个）样本主成分有效地综合了样本总方差。

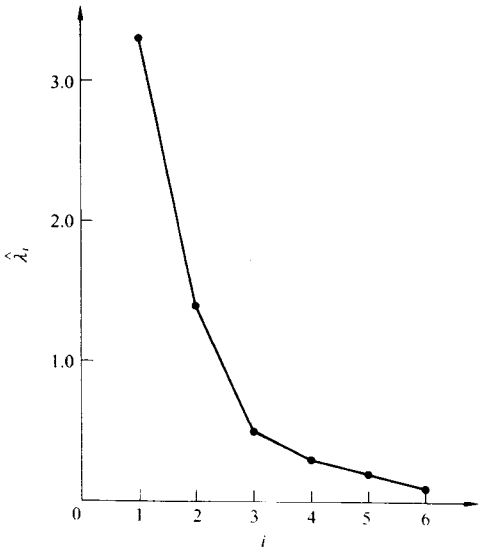


图 8.2　崖底碎石图

例 8.4　（用一个样本主成分综合样本变异性）

为研究海龟的大小和形状间的关系，朱利科叶尔（Julicoeur）和莫西曼（Mosimann）[11]测量了龟甲的长、宽和高，他们的数据见练习 6.17 表 6.5 中，建议对数据取对数作分析（朱利科叶尔[10]建议在研究大小和形状关系时一般采用对数变换），并作主成分分析。

24 只雄海龟龟甲大小的自然对数，样本均值向量为 $\bar{\mathbf{x}}'=[4.725, 4.478, 3.703]$，协方差阵为

$$\mathbf{S}=10^{-3}\begin{bmatrix}11.072 & 8.019 & 8.160\\ 8.019 & 6.417 & 6.005\\ 8.160 & 6.005 & 6.773\end{bmatrix}$$

主成分分析（见显示板 8.1 的 SAS 统计软件包的输出）得到下列数据：

主成分系数（括号内为相关系数）

变　　量	$\hat{\mathbf{e}}_1(\hat{r}_{\hat{y}_1,x_k})$	$\hat{\mathbf{e}}_2$	$\hat{\mathbf{e}}_3$
ln(长)	0.683(0.99)	−0.159	−0.713
ln(宽)	0.510(0.97)	−0.594	0.622
ln(高)	0.523(0.97)	0.788	0.324
方差($\hat{\lambda}_i$)：	23.30×10^{-3}	0.60×10^{-3}	0.36×10^{-3}
占总方差的累积百分比	96.1	98.5	100

显示板 8.1（利用 PROC PRINCOMP 对例 8.4 的 SAS 分析）

① 译者注：此图得名于 (i,λ_i) 连线的图形，对应大特征值的点较高，然后陡然下落成“悬崖”状，对应后几个小特征值的点则似崖下一堆碎石。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

```
title 'Principal Component Analysis';
data turtle;
infile 'E8-4.dat';
input length width height;
x1=log(length); x2=log(width); x3=log(height);
proc princomp cov data=turtle out=result;
var x1 x2 x3;
```

PROGRAM COMMANDS

OUTPUT

Principal Components Analysis

24 Observations
3 Variables

Simple Statistics

	X1	X2	X3
Mean	4.725443647	4.477573765	3.703185794
StD	0.105223590	0.080104466	0.082296771

Covariance Matrix

	X1	X2	X3
X1	0.0110720040	0.0080191419	0.0081596480
X2	0.0080191419	0.0064167255	0.0060052707
X3	0.0081596480	0.0060052707	0.0067727585

Total Variance=0.024261488

Eigenvalues of the Covariance Matrix

	Eigenvalue	Difference	Proportion	Cumulative
PRIN1	0.023303	0.022705	0.960508	0.96051
PRIN2	0.000598	0.000238	0.024661	0.98517
PRIN3	0.000360		0.014832	1.00000

Eigenvectors

	PRIN1	PRIN2	PRIN3
X1	0.683102	−0.159479	−0.712697
X2	0.510220	−0.594012	0.621953
X3	0.522539	0.788490	0.324401

图 8.3 画出了崖底碎石图。图上很突出的拐弯发生在 $i=2$ 处。很清楚，有一个支配地位的主成分。

解释 96%总方差的第一主成分，还有一个有趣的题材解释。由于

$$\hat{y}_1 = 0.683\ \ln(\text{长}) + 0.510\ \ln(\text{宽}) + 0.523\ \ln(\text{高})$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=\ln[(\text{长})^{0.683}(\text{宽})^{0.510}(\text{高})^{0.523}]$$

第一主成分可看作修正了量纲的一个盒子容积的自然对数 ln(容积)。例如修正后的高实际是$(\text{高})^{0.523}$，在这种尺寸修正意义上，才给出龟甲为圆形形状一说。

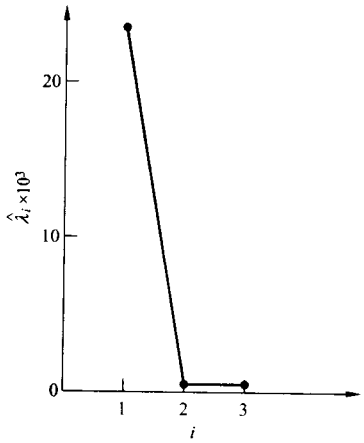


图 8.3　海龟数据的崖底碎石图

样本主成分的解释

样本主成分有几种解释。首先设 $\mathbf{X}$ 的真实分布接近 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$。此时样本主成分 $\hat{y}_i=\hat{\mathbf{e}}_i'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})$是总体主成分 $Y_i=\mathbf{e}_i'(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$的一个实现，后者服从 $N_p(\mathbf{0},\boldsymbol{\Lambda})$分布。对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 有主对角元 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$，而$(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值-特征向量对。

利用样本值 $\mathbf{x}_j$ 我们也可用 $\bar{\mathbf{x}}$ 近似 $\boldsymbol{\mu}$ 而用 $\mathbf{S}$ 近似 $\boldsymbol{\Sigma}$。若 $\mathbf{S}$ 正定，则所有满足

$$(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})=c^2 \tag{8-24}$$

的 $p\times 1$ 向量 $\mathbf{x}$ 所组成的等值轮廓线，估计出真实的正态密度的常数密度等值轮廓线$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})=c^2$。为显示生成数据的正态分布，可以把这些近似的等值轮廓线绘制到散布图上。正态性的假设，对 8.5 节讨论的推断过程是有用的，但对研究在式(8-20)中总结出的样本主成分性质，并不是必需的。

即便在正态性假设很可疑，并且散布图可能偏离椭圆模式的时候，我们仍可从 $\mathbf{S}$ 抽取特征值并得到样本主成分。从几何上看，数据可绘成 p 维空间的 n 个点，然后在新坐标系中表示出数据，这个新坐标系和式(8-24)中等值轮廓线的坐标轴重合。现在，式(8-24)定义一个超椭球，其中心在 $\bar{\mathbf{x}}$ 而轴由 $\mathbf{S}^{-1}$的特征向量给出，或者等价地由 $\mathbf{S}$ 的特征向量给出。(见节 2.3 和结论 4.1，取 $\mathbf{S}$ 代替 $\boldsymbol{\Sigma}$。)这些超椭球轴的长度与$\sqrt{\hat{\lambda}_i}$，$i=1,2,\cdots,p$，成比例，这里 $\hat{\lambda}_1\geqslant\hat{\lambda}_2\geqslant\cdots\geqslant\hat{\lambda}_p\geqslant 0$ 是 $\mathbf{S}$ 的特征值。

因为 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 长度为 1，第 i 个主成分的绝对值$|\hat{y}_i|=|\hat{\mathbf{e}}_i'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})|$，给出向量$(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})$在单位向量 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 上的投影。[见式(2-8)和式(2-9)。]于是，样本主成分 $\hat{y}_i=\hat{\mathbf{e}}_i'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})$，$i=1,2,\cdots,p$，依着在超椭球的轴上，它们的绝对值是 $\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}$ 在轴 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 方向上的投影的长度。因此，样本主成分可看作是将原坐标系的原点变换到 $\bar{\mathbf{x}}$，然后，再旋转坐标轴直到在最大方差的方向上

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

穿过散布线。

样本主成分在几何学上的解释，对 $p=2$ 由图 8.4 给出。图 8.4(a)表明一个常数距离的椭圆，其中心在 $\bar{\mathbf{x}}$，且有 $\hat{\lambda}_1>\hat{\lambda}_2$。这些样本主成分被顺利确定，它们依着椭圆轴线样本方差最大的两个相应垂直方向，图 8.4(b)表明常数距离椭圆，中心在 $\bar{\mathbf{x}}$，且有 $\hat{\lambda}_1=\hat{\lambda}_2$。此时常数距离椭圆(一个圆周)的轴不是惟一确定的，可以沿着任何两个相互垂直的方向，包括原坐标轴的方向。类似地，样本主成分可沿着任何两个垂直方向，包括原坐标轴的方向。当常数距离的轮廓线接近于圆，或等价地，当 $\mathbf{S}$ 的特征值近似相等时，样本方差在所有方向上都是均匀的。这就不可能在维数比 p 维更小的空间里表示数据。

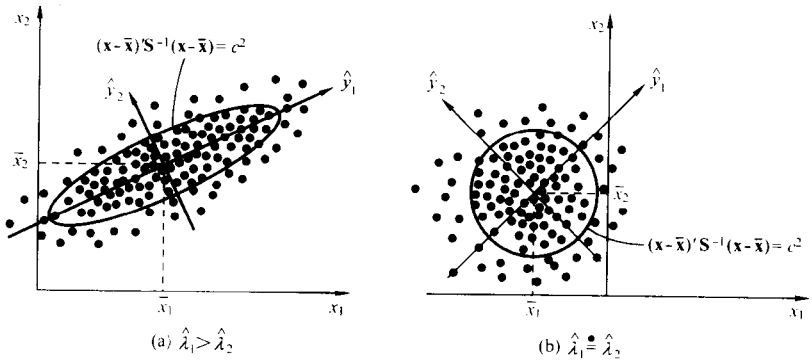


图 8.4　样本主成分和常数密度椭圆

如果后几个特征值 $\hat{\lambda}_i$ 充分小，使得对应 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 方向上的变差微不足道，那这后几个样本主成分常可略去，因而留下的成分就足可近似表达这批数据(见节 8.4)。

最后，在直接对均值中心化数据 $\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}$ 作近似时，补充 8A 对样本主成分所起的作用给出了进一步结论。

样本主成分的标准化

一般说来，样本主成分在尺度改变时不是不变的。(练习 8.2。)正如我们在总体成分处理中提到的，在不同尺度或在同一尺度但变化范围极其不同时所测量的变量，常常要标准化。例如，利用下述构造完成标准化：

$$\mathbf{z}_j=\mathbf{D}^{-1/2}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})=\begin{bmatrix}\dfrac{x_{j1}-\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}}\\ \dfrac{x_{j2}-\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}}\\ \vdots\\ \dfrac{x_{jp}-\bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}}\end{bmatrix}\qquad j=1,2,\cdots,n \tag{8-25}$$

将观测值标准化后的 $n\times p$ 数据矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{Z}=\begin{bmatrix}\mathbf{z}_1'\\ \mathbf{z}_2'\\ \vdots\\ \mathbf{z}_n'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}z_{11} & z_{12} & \cdots & z_{1p}\\ z_{21} & z_{22} & \cdots & z_{2p}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ z_{n1} & z_{n2} & \cdots & z_{np}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\dfrac{x_{11}-\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} & \dfrac{x_{12}-\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}} & \cdots & \dfrac{x_{1p}-\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}}\\ \dfrac{x_{21}-\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} & \dfrac{x_{22}-\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}} & \cdots & \dfrac{x_{2p}-\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{x_{n1}-\bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} & \dfrac{x_{n2}-\bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}} & \cdots & \dfrac{x_{np}-\bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}}\end{bmatrix} \tag{8-26}$$

产生样本均值向量[见式(3-24)]

$$\bar{\mathbf{z}}=\frac{1}{n}(\mathbf{1}'\mathbf{Z})'=\frac{1}{n}\mathbf{Z}'\mathbf{1}=\frac{1}{n}\begin{bmatrix}\sum_{j=1}^{n}\dfrac{x_{j1}-\bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}}\\ \sum_{j=1}^{n}\dfrac{x_{j2}-\bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}}\\ \vdots\\ \sum_{j=1}^{n}\dfrac{x_{jp}-\bar{x}_p}{\sqrt{s_{pp}}}\end{bmatrix}=\mathbf{0} \tag{8-27}$$

和样本协方差矩阵[见式(3-27)]

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_z&=\frac{1}{n-1}\left(\mathbf{Z}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{Z}\right)'\left(\mathbf{Z}-\frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{Z}\right)\\ &=\frac{1}{n-1}(\mathbf{Z}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{z}}')'(\mathbf{Z}-\mathbf{1}\bar{\mathbf{z}}')\\ &=\frac{1}{n-1}\mathbf{Z}'\mathbf{Z}\\ &=\frac{1}{n-1}\begin{bmatrix}\dfrac{(n-1)s_{11}}{s_{11}} & \dfrac{(n-1)s_{12}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}} & \cdots & \dfrac{(n-1)s_{1p}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{pp}}}\\ \dfrac{(n-1)s_{12}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{22}}} & \dfrac{(n-1)s_{22}}{s_{22}} & \cdots & \dfrac{(n-1)s_{2p}}{\sqrt{s_{22}}\sqrt{s_{pp}}}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{(n-1)s_{1p}}{\sqrt{s_{11}}\sqrt{s_{pp}}} & \dfrac{(n-1)s_{2p}}{\sqrt{s_{22}}\sqrt{s_{pp}}} & \cdots & \dfrac{(n-1)s_{pp}}{s_{pp}}\end{bmatrix}=\mathbf{R}\end{aligned} \tag{8-28}$$

标准化观测值的样本主成分由式(8-20)给出，但要用矩阵 **R** 取代 **S**。由于观测值已经由上述构造完成“中心化”，因此不必将主成分写成形如式(8-21)的形式。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

如 $\mathbf{z}_1,\mathbf{z}_2,\cdots,\mathbf{z}_n$ 是协方差矩阵为 $\mathbf{R}$ 的标准化观测值，则第 i 个样本主成分是

$$\hat{y}_i = \hat{\mathbf{e}}_i'\mathbf{z} = \hat{e}_{i1}z_1 + \hat{e}_{i2}z_2 + \cdots + \hat{e}_{ip}z_p, \qquad i = 1,2,\cdots,p$$

其中$(\hat{\lambda}_i,\hat{\mathbf{e}}_i)$是 $\mathbf{R}$ 的第 i 个特征值-特征向量对，且 $\hat{\lambda}_1 \geqslant \hat{\lambda}_2 \geqslant \cdots \geqslant \hat{\lambda}_p \geqslant 0$。另有

$$\text{样本方差}(\hat{y}_i) = \hat{\lambda}_i \qquad i = 1,2,\cdots,p \tag{8-29}$$

$$\text{样本协方差}(\hat{y}_i,\hat{y}_k) = 0 \qquad i \neq k$$

此外，

(标准化)样本总方差$=\mathrm{tr}(\mathbf{R})=p=\hat{\lambda}_1+\hat{\lambda}_2+\cdots+\hat{\lambda}_p$

且

$$r_{\hat{y}_i,z_k} = \hat{e}_{ik}\sqrt{\hat{\lambda}_i}, \qquad i,k = 1,2,\cdots,p$$

利用式(8-29)，我们看到，由第 i 个样本主成分解释的样本总方差的比例是

$$\begin{pmatrix}\text{第 } i \text{ 个样本主成分}\\ \text{解释的(标准化)}\\ \text{样本方差所占的比例}\end{pmatrix} = \frac{\hat{\lambda}_i}{p} \qquad i = 1,2,\cdots,p \tag{8-30}$$

一个经验方法是只保留那些方差大于 1 的成分，或者等价地，只保留那些单独能解释至少 $1/p$ 总方差的成分。然而这个经验准则没有多少理论支持，不应盲目运用。如我们已经提到过的，碎石图对选择合适的成分个数也是有用的。

例 8.5 （来自标准化数据的样本主成分）

曾有人确定了纽约股票交易所的五只股票(阿莱德化学、杜邦、联合碳化物、埃克森、以及德士古)从 1975 年 1 月到 1976 年 12 月期间的周回报率。周回报率定义为(本周五收盘价－上周五收盘价)/上周五收盘价(有拆股和支付股息时进行调整)。此数据列在本章练习的表 8.4 中。连续 100 周的观测值表现出独立分布，但是各股之间的回报率是相关的，这正如人们预期的那样，因为股票根据总的经济状况而有整体变动的倾向。

令 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 分别表示阿莱德化学、杜邦、联合碳化物、埃克森以及德士古的股票周回报率的观测值，则

$$\bar{\mathbf{x}}' = [0.0054, 0.0048, 0.0057, 0.0063, 0.0037]$$

和

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.577 & 0.509 & 0.387 & 0.462 \\ 0.577 & 1.000 & 0.599 & 0.389 & 0.322 \\ 0.509 & 0.599 & 1.000 & 0.436 & 0.426 \\ 0.387 & 0.389 & 0.436 & 1.000 & 0.523 \\ 0.462 & 0.322 & 0.426 & 0.523 & 1.000 \end{bmatrix}$$

注意到 $\mathbf{R}$ 是标准化观测值

$$z_1 = \frac{x_1 - \bar{x}_1}{\sqrt{s_{11}}}, z_2 = \frac{x_2 - \bar{x}_2}{\sqrt{s_{22}}}, \cdots, z_5 = \frac{x_5 - \bar{x}_5}{\sqrt{s_{55}}}$$

的协方差矩阵(注意标准化的相关矩阵就是协方差矩阵——译者注)。$\mathbf{R}$ 的特征值和相应的规范化特征向量，由计算机确定为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\hat{\lambda}_1 = 2.857, \quad \hat{\mathbf{e}}_1' = [0.464, 0.457, 0.470, 0.421, 0.421]$$
$$\hat{\lambda}_2 = 0.809, \quad \hat{\mathbf{e}}_2' = [0.240, 0.509, 0.260, -0.526, -0.582]$$
$$\hat{\lambda}_3 = 0.540, \quad \hat{\mathbf{e}}_3' = [-0.612, 0.178, 0.335, 0.541, -0.435]$$
$$\hat{\lambda}_4 = 0.452, \quad \hat{\mathbf{e}}_4' = [0.387, 0.206, -0.662, 0.472, -0.382]$$
$$\hat{\lambda}_5 = 0.343, \quad \hat{\mathbf{e}}_5' = [-0.451, 0.676, -0.400, -0.176, 0.385]$$

利用标准化变量，我们得到前两个样本主成分

$$\hat{y}_1 = \hat{\mathbf{e}}_1'\mathbf{z} = 0.464z_1 + 0.457z_2 + 0.470z_3 + 0.421z_4 + 0.421z_5$$
$$\hat{y}_2 = \hat{\mathbf{e}}_2'\mathbf{z} = 0.240z_1 + 0.509z_2 + 0.260z_3 - 0.526z_4 - 0.582z_5$$

这些主成分所解释的标准化样本总方差所占比例为

$$\left(\frac{\hat{\lambda}_1 + \hat{\lambda}_2}{p}\right)100\% = \left(\frac{2.857 + 0.809}{5}\right) \times 100\% = 73\%$$

对它们有有趣的解释，粗略地说第一主成分是五种股票的等权的和，或等权的“指数”。这个成分可称为股市总成分，或简称为**市场成分**。

第二成分表明在化工类股票（阿莱德化学、杜邦及联合碳化物）和石油类股票（埃克森和德士古）之间形成鲜明对照。可称它是一个**行业成分**。这样，我们看到这些股票回报率中的大部分变差归因于市场活动和不相关的行业活动。股票价格运动的这一阐述，也为金(King)[12]所提出过。

其余成分不易解释，总的说来它们大约代表各只股票的特别变差。不管怎样，它们对样本总方差都不给出多少解释。

在本例的情况下，保留相应特征值小于 1 的成分($\hat{y}_2$)是明智的。

例 8.6 （来自有特殊结构的相关矩阵的成分）

遗传学常常涉及特征遗传，对这些特征可在动物的生命周期内做数次测量。对 $n=150$ 只雌鼠，在它们生下前 4 只幼鼠后都立即称出雌鼠的体重（单位克）。[①] 样本均值向量和样本相关矩阵分别为

$$\bar{\mathbf{x}}' = [39.88, 45.08, 48.11, 49.95]$$

和

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.7501 & 0.6329 & 0.6363 \\ 0.7501 & 1.000 & 0.6925 & 0.7386 \\ 0.6329 & 0.6925 & 1.000 & 0.6625 \\ 0.6363 & 0.7386 & 0.6625 & 1.000 \end{bmatrix}$$

该矩阵的特征值是

$$\hat{\lambda}_1 = 3.085, \quad \hat{\lambda}_2 = 0.382, \quad \hat{\lambda}_3 = 0.342 \text{ 和 } \hat{\lambda}_4 = 0.217$$

我们注意到第一个特征值近似等于 $1+(p-1)\bar{r}=1+(4-1)\times 0.6854=3.056$，其中 $\bar{r}$ 是 $\mathbf{R}$ 中非对角元的算术平均值。余下的特征值都很小并且差不多相等，虽然 $\hat{\lambda}_4$ 比 $\hat{\lambda}_2$ 和 $\hat{\lambda}_3$ 更小一点。这样就有证据说，对应的总体相关矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 可以是式(8-15)的“等相关”形式。这一概念在例 8.9 将进一步探讨。

---

① 数据经 J. J. 拉特利奇(Rutledge)许可使用。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第一主成分

$$\hat{y}_1 = \hat{\mathbf{e}}_1'\mathbf{z} = 0.49z_1 + 0.52z_2 + 0.49z_3 + 0.50z_4$$

所解释的总方差占 $100(\hat{\lambda}_1/p)\% = 100\times(3.058/4)\% = 76\%$。虽然平均产后体重随时间增加，有(近似)相等系数的第一主成分仍然相当清楚地解释了体重上的变差。

评注 从样本方差或是从相关矩阵得到的最后一个特征值，若特别小，它可能显露出数据集合中一个未被注意到的相依性。若真出现这种情况，一个或多个变量是多余的，应该除去。考虑这一个情况：x_1，x_2 和 x_3 是测验得分，总成绩 $x_4 = x_1 + x_2 + x_3$。此时，虽然线性组合 $\mathbf{e}'\mathbf{x} = [1,1,1,-1]\mathbf{x} = x_1 + x_2 + x_3 - x_4$ 总是零，但计算特征值时一个舍入误差可能导出一个非零的微小数值。如果 x_4 与 (x_1, x_2, x_3) 的线性表达式一开始时被忽略了，那么最小特征值-特征向量对，将提供存在这个线性关系的一个线索。

这样一来，虽然"大"特征值和它相应的特征向量，在主成分分析时是重要的，但很接近于 0 的特征值通常也不应该忽略。与后面这些的特征值相联系的特征向量，可能指出数据集中存在的线性相依关系，而这在随后的分析中可能引出解释和计算方面的问题。

8.4 主成分的图形表示

主成分的图形表示除了能核查正态性假设，还能揭示可疑的观测值。由于主成分是原变量的线性组合，因此期望它们是近似正态就不是没有道理的。当要把前几个主成分作为输入数据而做补充分析时，常常必需确认它们近似是正态的。

最后几个主成分能帮助确认可疑的观测值。各个观测值可以表达成 $\mathbf{S}$ 的全部特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \cdots, \hat{\mathbf{e}}_p$ 的线性组合

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_j &= (\mathbf{x}_j'\hat{\mathbf{e}}_1)\hat{\mathbf{e}}_1 + (\mathbf{x}_j'\hat{\mathbf{e}}_2)\hat{\mathbf{e}}_2 + \cdots + (\mathbf{x}_j'\hat{\mathbf{e}}_p)\hat{\mathbf{e}}_p \\ &= \hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2 + \cdots + \hat{y}_{jp}\hat{\mathbf{e}}_p\end{aligned}$$

这样，后几个主成分的大小就可以决定前几个主成分拟合观测值的好坏程度。这就是说，$\hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2 + \cdots + \hat{y}_{jq-1}\hat{\mathbf{e}}_{q-1}$ 与 $\mathbf{x}_j$ 的差为 $\hat{y}_{jq}\hat{\mathbf{e}}_q + \cdots + \hat{y}_{jp}\hat{\mathbf{e}}_q$，它的长度平方是 $\hat{y}_{jq}^2 + \cdots + \hat{y}_{jp}^2$。可疑观测值常使坐标 $\hat{y}_{jq}, \cdots, \hat{y}_{jp}$ 中至少有一个，对这个平方长度的贡献较大。(更一般的近似结果，见补充 8A。)

下面说法概括了这些观点。

1. 为了检查正态假设，对前面几个主成分对，构造散布图。也可由各个主成分生成的样点值作出 Q-Q 图。

2. 对后几个主成分构造散布图和 Q-Q 图。这些图可以帮助确认可疑的观测值。

例 8.7 (对海龟数据作主成分图)

我们针对例 8.4 中讨论的雄海龟数据，来解说如何作主成分图。三个样本主成分是

$$\hat{y}_1 = 0.683(x_1 - 4.725) + 0.510(x_2 - 4.478) + 0.523(x_3 - 3.703)$$

$$\hat{y}_2 = -0.159(x_1 - 4.725) - 0.594(x_2 - 4.478) + 0.788(x_3 - 3.703)$$

$$\hat{y}_3 = -0.713(x_1 - 4.725) + 0.622(x_2 - 4.478) + 0.324(x_3 - 3.703)$$

其中 $x_1 = \ln(\text{长度})$，$x_2 = \ln(\text{宽度})$，$x_3 = \ln(\text{高度})$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

图 8.5 是 $\hat{y}_2$ 的 Q-Q 图，图 8.6 是$(\hat{y}_1,\hat{y}_2)$的散布图。对第一只海龟的观测值用圆圈圈出，它位于散布图的右下方而在 Q-Q 图的右上方；它可能是一个可疑点。应该核对这个点以查明是否有记录失误，或者测查是否为结构异常。剔掉这只海龟数据后，散布图接近椭圆。其他的主成分对都不表明与正态情况有任何实质性的偏离。

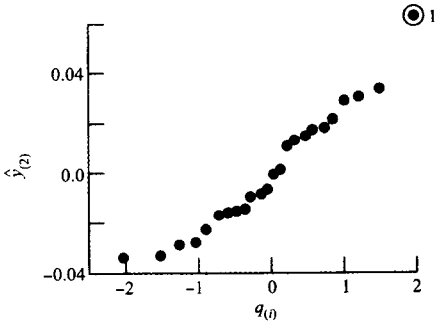


图 8.5　雄海龟数据第二主成分 $\hat{y}_2$ 的 Q-Q 图

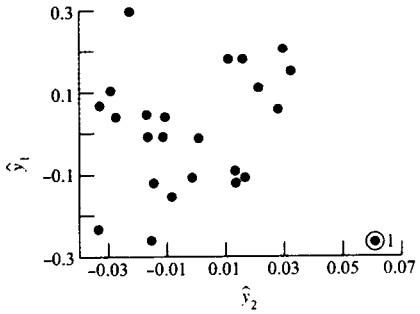


图 8.6　雄海龟数据主成分 $\hat{y}_1$ 和 $\hat{y}_2$ 的散布图

包含主成分的这一特征诊断，可同样有效地运用到核查多元回归模型的假设。事实上，用任何估计法拟合完任意一个模型后，对多元线性模型都要谨慎地考虑

残差向量 =（观测值向量）−（预测值(估计值）向量）

或

$$\underset{(p\times 1)}{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_j} = \underset{(p\times 1)}{\mathbf{y}_j} - \underset{(p\times 1)}{\hat{\boldsymbol{\beta}}'\mathbf{z}_j} \qquad j=1,2,\cdots,n \tag{8-31}$$

从残差协方差矩阵

$$\frac{1}{n-p}\sum_{j=1}^{n}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_j-\bar{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j)(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_j-\bar{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}_j)' \tag{8-32}$$

导出的主成分，可以和从随机样本确定的主成分用同样方式仔细查看。应该清楚，线性回归分析产生的诸残差中存在线性依存关系，所以最后的那些特征值，在舍入误差范围内将是 0。

8.5　大样本推断

我们已经看到，协方差矩阵(相关矩阵)的特征值和特征向量是主成分分析的精髓。特征向量决定最大变异性的方向，而特征值说明方差。当前几个特征值比余下的大得多时，总方差的大部分在低于 p 维空间里得到“解释”。

实际上，必须在从 **S** 或是从 **R** 中抽取的特征值-特征向量对$(\lambda_i,\mathbf{e}_i)$的基础上，去做出认定主成分近似特性的决定。因为抽样的变异，这些特征值和特征向量会与潜在总体的特征值和特征向量有差别。推导 $\hat{\lambda}_i$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的抽样分布是困难的，也超出了本书范围。要是有兴趣，可以在[1]，[2]和[5]中找到对多元正态总体的某些推证。我们将简单总结有关大样本的结论。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\hat{\lambda}_i$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的大样本的性质

目前得到的涉及 $\hat{\lambda}_i$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的大样本置信区间的结论，都假设观测值 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是正态总体的随机样本。也还必定假设 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的(未知的)特征值不同且皆为正，故 $\lambda_1>\lambda_2>\cdots>\lambda_p>0$。一个例外是当相等特征值的个数是已知的时候，除非存在强烈的理由相信 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具有产生相等特征值的特殊结构，否则我们采用的结论通常都是针对有不同特征值的情形。即使违背了正态性假定，用该方法得到的置信区间仍能为 $\hat{\lambda}_i$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的不确定性提供信息。

安德森(Anderson)[2]和格什克(Girshick)[5]已经对 $\mathbf{S}$ 的特征值 $\hat{\lambda}'=[\hat{\lambda}_1,\hat{\lambda}_2,\cdots,\hat{\lambda}_p]$ 和特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_p$，建立了下列大样本分布理论：

1. 令 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 的对角矩阵，则 $\sqrt{n}(\hat{\boldsymbol{\lambda}}-\boldsymbol{\lambda})$ 近似服从分布 $N_p(\mathbf{0},2\boldsymbol{\Lambda}^2)$。

2. 令

$$\mathbf{E}_i=\lambda_i\sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{p}\frac{\lambda_k}{(\lambda_k-\lambda_i)^2}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k'$$

则 $\sqrt{n}(\hat{\mathbf{e}}_i-\mathbf{e}_i)$ 近似服从分布 $N_p(\mathbf{0},\mathbf{E}_i)$。

3. 各个 $\hat{\lambda}_i$ 与相应的 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的诸元独立分布。

结论 1 表明，对大的 n，$\hat{\lambda}_i$ 独立分布。其次，它有近似 $N(\lambda_i,2\lambda_i^2/n)$ 分布。利用这一正态分布，我们得到 $P[|\hat{\lambda}_i-\lambda_i|\leqslant z(\alpha/2)\lambda_i\sqrt{2/n}]=1-\alpha$。$\lambda_i$ 的一个大样本 $100(1-\alpha)\%$ 的置信区间就由

$$\frac{\hat{\lambda}_i}{(1+z(\alpha/2)\sqrt{2/n})}\leqslant\lambda_i\leqslant\frac{\hat{\lambda}_i}{(1-z(\alpha/2)\sqrt{2/n})}\tag{8-33}$$

给出，其中 $z(\alpha/2)$ 是标准正态分布的上 $100(\alpha/2)$ 百分位数。用 $z(\alpha/2m)$ 代替 $z(\alpha/2)$，就对 m 个 λ_i 得到庞弗罗尼型 $100(1-\alpha)\%$ 联合置信区间(见节 5.4)。

结论 2 表明，对大样本，$\hat{\mathbf{e}}_i$ 在相应的 $\mathbf{e}_i$ 附近为正态分布。诸 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的元是相关的，并且这种相关在很大程度上依赖于特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 的划分(划分是未知的)和样本大小 n. 用 $(1/n)\hat{\mathbf{E}}_i$ 的对角元的平方根，给出系数 $\hat{e}_{ik}$ 的近似标准误差，这里 $\hat{\mathbf{E}}_i$ 是在 $\mathbf{E}_i$ 中用 $\hat{\lambda}_i$ 替代 λ_i、用 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 替代 $\mathbf{e}_i$ 后得到的。

例 8.8 (构造 λ_1 的置信区间)

利用表 8.4 中的股票价格数据，我们将得到总体第一主成分方差 λ_1 的一个 95% 的置信区间。

假设股票的回报率是从总体 $N_5(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 中独立抽取，其中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是有不同特征值 $\lambda_1>\lambda_2>\cdots>\lambda_5>0$ 的正定矩阵。由于 $n=100$ 较大，我们可以利用式(8-33)，取 $i=1$，去构造 λ_1 的一个 95% 的置信区间。从练习 8.10 知，$\hat{\lambda}_1=0.0036$ 及 $z(0.025)=1.96$。所以，在具有 95% 的置信度下

$$\frac{0.0036}{\left(1+1.96\times\sqrt{\frac{2}{100}}\right)}\leqslant\lambda_1\leqslant\frac{0.0036}{\left(1-1.96\times\sqrt{\frac{2}{100}}\right)}\quad\text{或}\quad 0.0028\leqslant\lambda_1\leqslant 0.0050$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

无论何时，当大特征值较大，如 100 甚或 1000，由式(8-33)产生的区间，对一个合理的置信水平，即使 n 很大它也可以是相当宽的。一般说，$\hat{\lambda}_i$ 变大，在同样的置信度下置信区间就变宽。于是，基于对 $\hat{\lambda}_i$ 的检测而取舍主成分时必须小心从事。

等相关结构的测试

特殊的相关结构 $\mathrm{Cov}(X_i, X_k) = \sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{kk}}\rho$ 或 $\mathrm{Corr}(X_i, X_k) = \rho$(所有 $i \neq k$)是一个重要结构，此时，$\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征值不是不同的，因此先前的结论不适用。

为检验该结构，令

$$H_0: \boldsymbol{\rho} = \underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\rho}_0} = \begin{bmatrix} 1 & \rho & \cdots & \rho \\ \rho & 1 & \cdots & \rho \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho & \rho & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

及

$$H_1: \boldsymbol{\rho} \neq \boldsymbol{\rho}_0$$

可以基于似然比统计量作一个 H_0 对 H_1 的检验，但劳雷(Lawley)[14]证明了一个等价的检验程序可从 $\mathbf{R}$ 的非对角元构造出来。

劳雷的程序中需要计算如下量

$$\bar{r}_k = \frac{1}{p-1}\sum_{\substack{i=1 \\ i\neq k}}^{p} r_{ik} \quad k = 1, 2, \cdots, p; \quad \bar{r} = \frac{2}{p(p-1)}\sum\sum_{i<k} r_{ik}$$

$$\hat{\gamma} = \frac{(p-1)^2[1-(1-\bar{r})^2]}{p-(p-2)(1-\bar{r})^2} \tag{8-34}$$

显然，$\bar{r}_k$ 是 $\mathbf{R}$ 的第 k 列(或行)上所有非对角元的平均值，而 $\bar{r}$ 是全部非对角元的总平均值。

大样本近似 α 水平检验是，如果

$$T = \frac{(n-1)}{(1-\bar{r})^2}\left[\sum\sum_{i<k}(r_{ik}-\bar{r})^2 - \hat{\gamma}\sum_{k=1}^{p}(\bar{r}_k-\bar{r})^2\right] > \chi^2_{(p+1)(p-2)/2}(\alpha) \tag{8-35}$$

则拒绝 H_0 而接受 H_1，其中 $\chi^2_{(p+1)(p-2)}(\alpha)$ 自由度为 $(p+1)(p-2)/2$ 的 χ^2 分布的第 100α 个上百分位数。

例 8.9 (检验等相关结构)

从例 8.6，由雌性鼠生育后的体重构造的样本相关矩阵是

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.7501 & 0.6329 & 0.6363 \\ 0.7501 & 1.0 & 0.6925 & 0.7386 \\ 0.6329 & 0.6925 & 1.0 & 0.6625 \\ 0.6363 & 0.7386 & 0.6625 & 1.0 \end{bmatrix}$$

我们将用此相关矩阵说明在式(8-35)中的大样本检验。

这里 $p=4$，我们建立假设

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$H_0:\boldsymbol{\rho}=\boldsymbol{\rho}_0=\begin{bmatrix}1 & \rho & \rho & \rho\\ \rho & 1 & \rho & \rho\\ \rho & \rho & 1 & \rho\\ \rho & \rho & \rho & 1\end{bmatrix}$$

$$H_1:\boldsymbol{\rho}\neq\boldsymbol{\rho}_0$$

利用式(8-34)和式(8-35),我们得到

$$\bar{r}_1=\frac{1}{3}\times(0.7501+0.6329+0.6363)=0.6731,\quad \bar{r}_2=0.7271,$$

$$\bar{r}_3=0.6626,\quad \bar{r}_4=0.6791$$

$$\bar{r}=\frac{2}{4\times 3}\times(0.7501+0.6329+0.6363+0.6925+0.7386+0.6625)$$

$$=0.6855$$

$$\sum_{i<k}\sum(r_{ik}-\bar{r})^2=(0.7501-0.6855)^2+(0.6329-0.6855)^2+$$

$$\cdots+(0.6625-0.6855)^2$$

$$=0.01277$$

$$\sum_{k=1}^{4}(\bar{r}_k-\bar{r})^2=(0.6731-0.6855)^2+\cdots+(0.6791-0.6855)^2=0.00245$$

$$\hat{\gamma}=\frac{(4-1)^2\times[1-(1-0.6855)^2]}{4-(4-2)\times(1-0.6855)^2}=2.1329$$

及

$$T=\frac{(150-1)}{(1-0.6855)^2}\times(0.01277-2.1329\times 0.00245)=11.4$$

既然$(p+1)(p-2)/2=(5\times 2)/2=5$,在式(8-35)中,检验的5%临界值是$\chi_5^2(0.05)=11.07$。我们的检验统计量的值近似等于大样本5%的临界点,所以反对H_0(等相关)的证据是有力的,但还不能推翻H_0。

同我们在例8.6见过的那样,最小的特征值$\hat{\lambda}_2$,$\hat{\lambda}_3$及$\hat{\lambda}_4$相差细微,而$\hat{\lambda}_4$是比其他两个更小一点。因此,由于本问题里的大样本容量,来自等相关结构的细小差别在统计上是显著的。

8.6 用主成分监控质量

在5.6节,我们介绍了多元控制图,包括质量椭圆图和T^2图。今天,用电子和其他自动方法收集数据,收集10或20个过程变量的数据,已非罕见之事。大的化学和药品公司据说测量超过100个过程变量,它们包括在生产过程的不同场合下的温度、压力及重量等。即使用10个变量作监控,也可搭配出45对变量生成质量椭圆。显然,要求有新的手段,既能形象化显示重要的变量又依旧能灵敏检测变异的特别原因。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

检查一组已知测量值的稳定性

令 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是从均值 $\boldsymbol{\mu}$、协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的正态分布中抽取的随机样本。我们考虑前两个样本主成分，$\hat{y}_{j1}=\hat{\mathbf{e}}_1'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$ 和 $\hat{y}_{j2}=\hat{\mathbf{e}}_2'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$。可以考虑添加主成分，只是两个样本主成分更容易形象地检查，并且在任何两个成分中，前两个都解释样本总方差最大的累积比。

如果一个过程在全部时间里都是稳定的，只由于共同原因所引起的变化影响所测量的特征，那么在这种情况下，前两个主成分的值应该是稳定的。反之，如果主成分保持全时稳定，那么影响该过程的共同因素有希望保持为常数。为了用主成分监控质量，我们分两步考虑过程。第一步是构造一个数值对 $(\hat{y}_{j1},\hat{y}_{j2})(j=1,2,\cdots,n)$ 的椭圆形式图。

根据式(8-20)，第一主成分 $\hat{y}_1$ 的样本方差由最大特征值 $\hat{\lambda}_1$ 给出，第二主成分 $\hat{y}_2$ 的样本方差由第二大特征值 $\hat{\lambda}_2$ 给出。两个样本主成分是不相关的，故对大的 n，质量椭圆(见5.6节)为满足下述条件的可能的数值对 $(\hat{y}_{j1},\hat{y}_{j2})$ 的点集：

$$\frac{\hat{y}_1^2}{\hat{\lambda}_1}+\frac{\hat{y}_2^2}{\hat{\lambda}_2}\leqslant\chi_2^2(\alpha) \tag{8-36}$$

例 8.10 （基于前两个主成分的椭圆形式图）

参看表5.8给出的警署加班数据。表8.1包含样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$ 的五个规范化了的特征向量和特征值。

前两个样本成分解释总方差的82%。

表 8.1 警署数据的样本协方差矩阵的特征向量和特征值

变量	$\hat{\mathbf{e}}_1$	$\hat{\mathbf{e}}_2$	$\hat{\mathbf{e}}_3$	$\hat{\mathbf{e}}_4$	$\hat{\mathbf{e}}_5$
法定加班出勤时数(x_1)	0.046	−0.048	0.629	−0.643	0.432
特殊事件处理加班时数(x_2)	0.039	0.985	−0.077	−0.151	−0.007
处理遗留人员加班时数(x_3)	−0.658	0.107	0.582	0.250	−0.392
允许补偿的加班时数(x_4)	0.734	0.069	0.503	0.397	−0.213
会议时数(x_5)	−0.155	0.107	0.081	0.586	0.784
$\hat{\lambda}_i$	2 770 226	1 429 206	628 129	221 138	99 824

表 8.2 警署数据的样本主成分的值

期间	$\hat{y}_{j1}$	$\hat{y}_{j2}$	$\hat{y}_{j3}$	$\hat{y}_{j4}$	$\hat{y}_{j5}$
1	2044.9	588.2	425.8	−189.1	−209.8
2	−2143.7	−686.2	883.6	−565.9	−441.5
3	−177.8	−464.6	707.5	736.3	38.2
4	−2186.2	450.5	−184.0	443.7	−325.3
5	−878.6	−545.7	115.7	296.4	437.5
6	563.2	−1045.4	281.2	620.5	142.7
7	403.1	66.8	340.6	−135.5	521.2
8	−1988.9	−801.8	−1437.3	−148.8	61.6
9	132.8	563.7	125.3	68.2	611.5

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

期间	$\hat{y}_{j1}$	$\hat{y}_{j2}$	$\hat{y}_{j3}$	$\hat{y}_{j4}$	$\hat{y}_{j5}$
10	−2787.3	−213.4	7.8	169.4	−202.3
11	283.4	3936.9	−0.9	276.2	−159.6
12	761.6	256.0	−2153.6	−418.8	28.2
13	−498.3	244.7	966.5	−1142.3	182.6
14	2366.2	−1193.7	−165.5	270.6	−344.9
15	1917.8	−782.0	−82.9	−196.8	−89.9
16	2187.7	−373.8	170.1	−84.1	−250.2

表 8.2 表示全部五个成分的样本值。

我们用前两个样本主成分构造 95%椭圆形式图，并画出 16 对成分值的图形。

由 $n=16$，我们找到 $\chi_2^2(0.05)=5.99$，并且这个椭圆为

$$\frac{\hat{y}_1^2}{\hat{\lambda}_1}+\frac{\hat{y}_2^2}{\hat{\lambda}_2}\leqslant 5.99$$

该椭圆及各数据示于图 8.7。

有一个点失去控制，因为对这个点，第二主成分的值较大。查看表 8.2，我们看到这是时间段 11 的值 3936.9。根据表 8.1 中的 $\hat{\mathbf{e}}_2$，这个第二主成分实质上是特别事件的加班小时数。这个主成分方法让我们得到与例 5.9 中相同的结论。

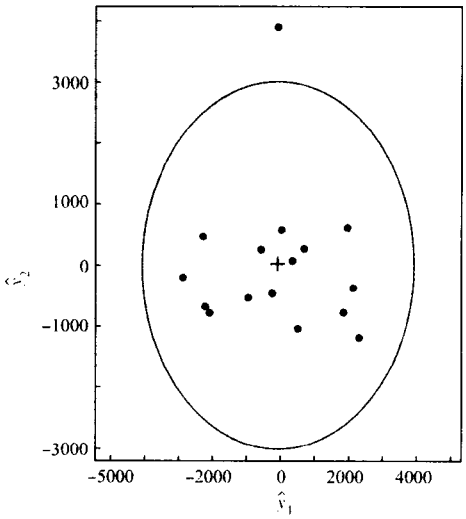


图 8.7 基于加班时数的前两个主成分的 95%控制椭圆

特别的原因很可能对系统产生冲击，这时需要我们两步过程的第二步——也即第二张图。该图由在椭圆形式图里不曾包含到的主成分中的信息生成。

考虑离差向量 $\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}$，并假设 $\mathbf{X}$ 为 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$分布。即便没有正态性假设，$\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu}$ 也可表达为它在 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征向量上的投影之和。

$$\begin{aligned}\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}=&(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1+(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2\\&+(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3+\cdots+(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{e}_p\mathbf{e}_p\end{aligned}$$

或

$$\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}=Y_1\mathbf{e}_1+Y_2\mathbf{e}_2+Y_3\mathbf{e}_3+\cdots+Y_p\mathbf{e}_p \tag{8-37}$$

其中 $Y_i=(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{e}_i$ 是总体的中心化为有均值 0 的第 i 个主成分。用前两个主成分近似 $\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}$，形如 $Y_1\mathbf{e}_1+Y_2\mathbf{e}_2$。剩下一个没有解释的成分是

$$\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}-Y_1\mathbf{e}_1-Y_2\mathbf{e}_2$$

令 $\mathbf{E}=[\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p]$是正交矩阵，它的列是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征向量。这个未解释的部分的正交变换

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{E}'(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}-Y_1\mathbf{e}_1-Y_2\mathbf{e}_2)=\begin{bmatrix}Y_1\\Y_2\\Y_3\\\vdots\\Y_p\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}Y_1\\0\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}0\\Y_2\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\Y_3\\\vdots\\Y_p\end{bmatrix}=\mathbf{Y}_{(2)}$$

所以，作近似误差的正交变换，就得到后 $p-2$ 个主成分。比起基于近似误差的 T^2 图，我们更愿意等价地用后几个主成分的 T^2 图。回忆

$$\mathrm{Var}(Y_i)=\lambda_i,\quad i=1,2,\cdots,p$$

和 $\mathrm{Cov}(Y_i,Y_k)=0, i\neq k$。基于后 $p-2$ 个总体主成分，统计量 $\mathbf{Y}_{(2)}'\sum_{\mathbf{Y}_{(2)},\mathbf{Y}_{(2)}}^{-1}\mathbf{Y}_{(2)}$ 变为

$$\frac{Y_3^2}{\lambda_3}+\frac{Y_4^2}{\lambda_4}+\cdots+\frac{Y_p^2}{\lambda_p}\tag{8-38}$$

这正是 $p-2$ 个独立标准正态分布的平方和，所以服从 $p-2$ 个自由度的 χ^2 分布。

因为采用样本数据，所以必须估计主成分和特征值。由于线性组合 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 的系数也是估计量，因此，即便总体是正态的，主成分也没有服从正态分布。不过，通常根据统计量

$$T_j^2=\frac{\hat{y}_{j3}^2}{\hat{\lambda}_3}+\frac{\hat{y}_{j4}^2}{\hat{\lambda}_4}+\cdots+\frac{\hat{y}_{jp}^2}{\hat{\lambda}_p}$$

生成一个 T^2 图。该统计量包含了估计的特征值和向量。而且，常常借助于由式(8-38)描述的大样本近似，并令 T^2 的上控制限为 $\mathrm{UCL}=c^2=\chi_{p-2}^2(\alpha)$。

该 T^2 统计量是基于高维数据的。例如，当测量 $p=20$ 个变量时，它利用与前两个特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_2$ 相垂直的 18 维空间里的信息。这个基于在原观测中未被解释的变异的 T^2，据报告对挑选变异中的特别原因非常有效。

例 8.11 （用于未被解释的(正交的)加班时数的 T^2 图）

考虑例 8.10 中警署加班时数的质量控制分析。质量监控过程的第一部分，即基于前两个主成分的质量椭圆，曾由图 8.7 给出。为说明两步过程的第二步，我们对其他主成分生成 T^2 图。

既然 $p=5$，此图在 $5-2=3$ 维空间里，并且上控制限是 $\chi_3^2(0.05)=7.81$。在例 8.10 中已经给出主成分各种值，利用它们，我们来画时间序列值

$$T_j^2=\frac{\hat{y}_{j3}^2}{\hat{\lambda}_3}+\frac{\hat{y}_{j4}^2}{\hat{\lambda}_4}+\frac{\hat{y}_{j5}^2}{\hat{\lambda}_5}$$

的图形，这里第一个值是 $T^2=0.891$，其他值如此一一算得。T^2 图示于图 8.8。

由于点 12 和 13 超过或接近这条上控制限，在这些时期内发生过某些事情。我们注意到它们正好属于特殊事件加班时数达到峰值的时间段。

从表 8.2，$\hat{y}_{j3}$ 在时间段 12 里大，而从表 8.1，$\hat{\mathbf{e}}_3$ 的那些大系数则属于法定加班时数、处理遗留人员加班时数和允许补偿的加班时数。跟随在时间段上达到峰值的特殊事件时数之后，有过对这些其他分类的某些调整吗？

控制未来值

前面我们用将前两个主成分和后 $p-2$ 个主成分分开考虑的办法，思考过检查一个

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

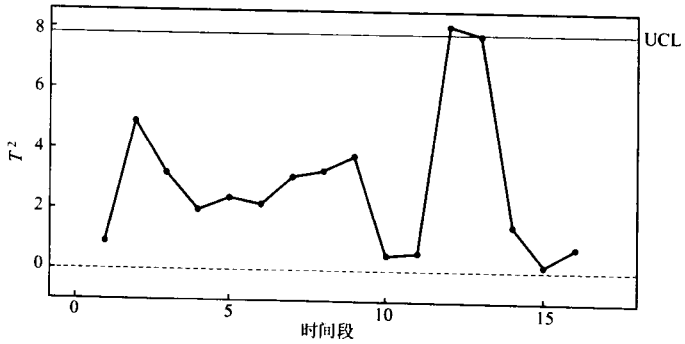


图 8.8　基于加班时数的最后三个主成分的 T^2 图

给定的多元观测值序列是否稳定。因为 χ^2 分布曾用于逼近 T^2 图的 UCL 和逼近椭圆形式图的判别距离，对于监控未来值，不再需要做任何进一步的修改。

例 8.12　（对于未来主成分的控制椭圆）

例 8.10 中，我们确定情况 11 是失控的。我们剔除此点并根据余下的 15 个观测值的协方差，重新计算特征值和特征向量。结果示于表 8.3 中。

表 8.3　来自 15 个稳定观测值的特征向量和特征值

	$\hat{\mathbf{e}}_1$	$\hat{\mathbf{e}}_2$	$\hat{\mathbf{e}}_3$	$\hat{\mathbf{e}}_4$	$\hat{\mathbf{e}}_5$
法定加班出勤时数(x_1)	0.049	0.629	0.304	0.479	0.530
特殊事件加班时数(x_2)	0.007	−0.078	0.939	−0.260	−0.212
处理遗留人员加班时数(x_3)	−0.662	0.582	−0.089	−0.158	−0.437
允许补偿的加班时数(x_4)	0.731	0.503	−0.123	−0.336	−0.291
会议时数(x_5)	−0.159	0.081	−0.058	−0.752	0.632
$\hat{\lambda}_1$	2 964 749.9	672 995.1	396 596.5	194 401.0	92 760.3

主成分已经变了。主要由特殊事件加班组成的成分，现在是第三个主成分，并且不包含在前两个主成分的图中。因为我们最初的样本大小只是 16，剔除其一可能造成实质上的差别。为了设置未来的控制限，对于一个过程的稳定操作，至少需要 50 个或是更多的观测值。

对加班时间的新的前两个主成分的未来数值对，由图 8.9 给出其 99%的预测(8-36)椭圆。15 个稳定的主成分对也示于其中。

在化学和制药行业的多元控制的某些应用中，随时监控的变量超过 100。这些变量既包括质量变量也包括数字化过程变量。典型情况是，与前几个主成分正交的空间，有大于 100 的维数，而某些特征值却很小。为避免用很小的特征值去除小的平方主成分引起的困难，已经成功地采用了另一种构造控制图的方法(见[13])。该方法的实施步骤如下。

对各个稳定的观测值，取它的未曾解释的成分的平方和

$$d_{Uj}^2 = (\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2)'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2)$$

注意，插入 $\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{E}}' = \mathbf{I}$，我们也有

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

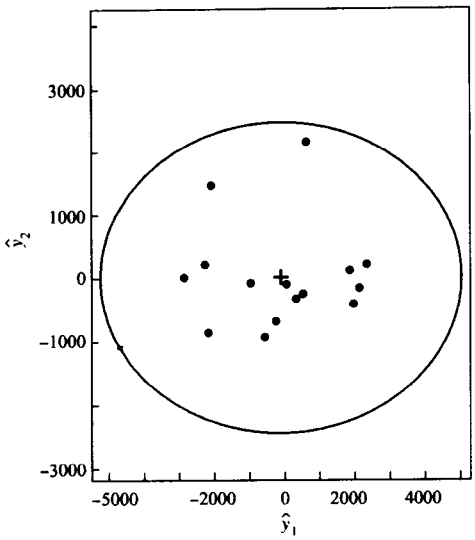


图 8.9　未来加班时间的前两个主成分的 99%椭圆形式图

$$d_{Uj}^2 = (\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2)'\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{E}}'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2) = \sum_{k=3}^{p}\hat{y}_{jk}^2$$

这正是所略去的主成分的平方和。

无论用哪一种形式，画出(j, d_{Uj}^2)曲线生成一张控制图。图的下控制限是 0，而上控制限由 d_{Uj}^2分布的近似来设定，该分布是常数 c 乘以自由度为 v 的 χ^2 变量的分布。

对此 χ^2 近似，常数 c 和自由度 v 的选取要和 $d_{Uj}^2(j=1,2,\cdots,n)$的样本均值及方差相匹配。特别地，我们令

$$\overline{d_U^2} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} d_{Uj}^2 = cv$$

$$s_{d^2}^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(d_{Uj}^2 - \overline{d_U^2})^2 = 2c^2v$$

并确定

$$c = \frac{s_{d^2}^2}{2\,\overline{d_U^2}} \quad 和 \quad v = 2\frac{(\overline{d_U^2})^2}{s_{d^2}^2}$$

上控制限就是 $c\chi_v^2(\alpha)$，其中 $\alpha=0.05$ 或 0.01。

补充 8A　样本主成分近似的几何意义

这个补充里我们将对基于前 r 个样本主成分的数据近似，提供一个解释。对 p 维散布图和 n 维表示的解释，要依赖下述代数结论。我们考虑对形如 $\underset{(n\times p)}{\mathbf{A}} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \cdots, \mathbf{a}_n]'$的矩阵以均值相关数据矩阵近似

$$[\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}}, \mathbf{x}_2 - \bar{\mathbf{x}}, \cdots, \mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}]'$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

近似误差被量化为 np 个平方误差之和

$$\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{a}_j)'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{a}_j)=\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{p}(x_{ji}-\bar{x}_i-a_{ji})^2 \tag{8A-1}$$

结论 8A.1 令 $\mathbf{A}$ 是任一矩阵，秩$(\mathbf{A})\leqslant r<\min(p,n)$。令 $\hat{\mathbf{E}}_r=[\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_r]$，其中 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 是 $\mathbf{S}$ 的第 i 个特征向量。选择

$$\hat{\mathbf{A}}=\begin{bmatrix}(\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}})'\\(\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}})'\\\vdots\\(\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}})'\end{bmatrix}\hat{\mathbf{E}}_r\hat{\mathbf{E}}_r'=[\hat{\mathbf{y}}_1,\hat{\mathbf{y}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{y}}_r]\hat{\mathbf{E}}_r'$$

使式(8A-1)中的近似平方和误差最小化，故其转置 $\hat{\mathbf{A}}'$ 的第 j 列为

$$\hat{\mathbf{a}}_j=\hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1+\hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2+\cdots+\hat{y}_{jr}\hat{\mathbf{e}}_r$$

其中

$$[\hat{y}_{j1},\hat{y}_{j2},\cdots,\hat{y}_{jr}]'=[\hat{\mathbf{e}}_1'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}),\hat{\mathbf{e}}_2'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}),\cdots,\hat{\mathbf{e}}_r'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})]'$$

是前 r 个样本主成分对第 j 个单元的值。其次，

$$\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{a}}_j)'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{a}}_j)=(n-1)(\hat{\lambda}_{r+1}+\cdots+\hat{\lambda}_p)$$

其中 $\hat{\lambda}_{r+1}\geqslant\cdots\geqslant\hat{\lambda}_p$ 是 $\mathbf{S}$ 最小的一些特征值。

证明 首先考虑任一矩阵 $\mathbf{A}$，其转置 $\mathbf{A}'$ 的列 $\mathbf{a}_j$ 是固定一组 r 个相互垂直向量 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r$ 的线性组合，使 $\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r]$满足 $\mathbf{U}'\mathbf{U}=\mathbf{I}$。对固定的 $\mathbf{U}$，$\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}$ 在 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r$ 张成的空间的投影(见结论 2A.3)或者

$$\begin{aligned}&(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1+(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2+\cdots+(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{u}_r\mathbf{u}_r\\&=[\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r]\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})\\\mathbf{u}_2'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})\\\vdots\\\mathbf{u}_r'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})\end{bmatrix}=\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})\end{aligned} \tag{8A-2}$$

是它的最佳近似。这是因为，对任一向量 $\mathbf{b}_j$，

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{U}\mathbf{b}_j&=\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})+\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})-\mathbf{U}\mathbf{b}_j\\&=(\mathbf{I}-\mathbf{U}\mathbf{U}')(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})+\mathbf{U}(\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})-\mathbf{b}_j)\end{aligned}$$

因此误差平方和为

$$\begin{aligned}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{U}\mathbf{b}_j)'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{U}\mathbf{b}_j)&=(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{I}-\mathbf{U}\mathbf{U}')(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})+0\\&\quad+(\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})-\mathbf{b}_j)'(\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})-\mathbf{b}_j)\end{aligned}$$

其中交叉乘积因$(\mathbf{I}-\mathbf{U}\mathbf{U}')\mathbf{U}=\mathbf{U}-\mathbf{U}\mathbf{U}'\mathbf{U}=\mathbf{U}-\mathbf{U}=\mathbf{0}$ 而消失了。最后一项是正的，除非选 $\mathbf{b}_j$ 使 $\mathbf{b}_j=\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$，且 $\mathbf{U}\mathbf{b}_j=\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$是$(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$在平面上的投影。

进而，由于选 $\mathbf{a}_j=\mathbf{U}\mathbf{b}_j=\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$，式(8A-1)变为

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}))'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}-\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}))\\&=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{I}-\mathbf{U}\mathbf{U}')(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})\end{aligned}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$= \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) - \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) \qquad (8A\text{-}3)$$

现在我们可将式(8A-3)中最后一项最大化从而使误差在 $\mathbf{U}$ 上最小。由迹的性质(见结论 2A.12)，

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) &= \sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})] \\ &= \sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[\mathbf{U}\mathbf{U}'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})'] \\ &= (n-1)\mathrm{tr}[\mathbf{U}\mathbf{U}'\mathbf{S}] = (n-1)\mathrm{tr}[\mathbf{U}'\mathbf{S}\mathbf{U}] \qquad (8A\text{-}4)\end{aligned}$$

也即 $\mathbf{U}$ 的最佳选择使 $\mathbf{U}'\mathbf{S}\mathbf{U}$ 对角元之和最大。从式(8-19)，选 $\mathbf{u}_1$ 使 $\mathbf{U}'\mathbf{S}\mathbf{U}$ 的第一个对角元 $\mathbf{u}_1'\mathbf{S}\mathbf{u}_1$ 最大，这给出 $\mathbf{u}_1=\hat{\mathbf{e}}_1$。对垂直于 $\hat{\mathbf{e}}_1$ 的 $\mathbf{u}_2$，用 $\hat{\mathbf{e}}_2$ 使 $\mathbf{u}_2'\mathbf{S}\mathbf{u}_2$ 最大。继续下去，我们找到 $\hat{\mathbf{U}}=[\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_r]=\hat{\mathbf{E}}_r$ 及 $\hat{\mathbf{A}}=\hat{\mathbf{E}}_r\hat{\mathbf{E}}_r'[\mathbf{x}_1-\bar{\mathbf{x}},\mathbf{x}_2-\bar{\mathbf{x}},\cdots,\mathbf{x}_n-\bar{\mathbf{x}}]$，这正如我们所断言的。

由于这一选取，$\hat{\mathbf{U}}'\mathbf{S}\hat{\mathbf{U}}$ 的第 i 个对角元是 $\hat{\mathbf{e}}_i'\mathbf{S}\hat{\mathbf{e}}_i=\hat{\mathbf{e}}_i'(\hat{\lambda}_i\hat{\mathbf{e}}_i)=\hat{\lambda}_i$，故 $\mathrm{tr}[\hat{\mathbf{U}}'\mathbf{S}\hat{\mathbf{U}}]=\hat{\lambda}_1+\hat{\lambda}_2+\cdots+\hat{\lambda}_r$。同样地还有 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})=\mathrm{tr}\left[\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right]=(n-1)\mathrm{tr}(\mathbf{S})=(n-1)(\hat{\lambda}_1+\hat{\lambda}_2+\cdots+\hat{\lambda}_p)$。在式(8A-3)中，令 $\mathbf{U}=\hat{\mathbf{U}}$ 得到误差的界。

p 维几何学阐述

几何学解释涉及确定对 p 维散布图的最佳近似平面。此平面通过原点，由 $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_r$ 决定，且由满足

$$\mathbf{x} = b_1\mathbf{u}_1 + b_2\mathbf{u}_2 + \cdots + b_r\mathbf{u}_r = \mathbf{U}\mathbf{b}，对某个\ \mathbf{b}$$

的所有点 $\mathbf{x}$ 组成，作变换使它通过 $\mathbf{a}$ 之后，此平面对某个 $\mathbf{b}$ 变成 $\mathbf{a}+\mathbf{U}\mathbf{b}$。

我们要选此 r 维平面 $\mathbf{a}+\mathbf{U}\mathbf{b}$ 使观测值 $\mathbf{x}_j$ 与该平面之间的平方距离和 $\sum_{j=1}^{n}d_j^2$ 达到最小。如 $\mathbf{x}_j$ 用 $\mathbf{a}+\mathbf{U}\mathbf{b}_j\left(满足\sum_{j=1}^{n}\mathbf{b}_j=\mathbf{0}\right)$ 来近似①，则由于矩阵 $[\mathbf{U}\mathbf{b}_1,\cdots,\mathbf{U}\mathbf{b}_n]=\mathbf{A}'$ 有秩 $(\mathbf{A})\leqslant r$，故根据结论 8A.1 有

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \mathbf{a} - \mathbf{U}\mathbf{b}_j)'(\mathbf{x}_j - \mathbf{a} - \mathbf{U}\mathbf{b}_j) \\ &= \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \mathbf{U}\mathbf{b}_j + \bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a})'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \mathbf{U}\mathbf{b}_j + \bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}) \\ &= \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \mathbf{U}\mathbf{b}_j)'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \mathbf{U}\mathbf{b}_j) + n(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a})'(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}) \\ &\geqslant \sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{E}}_r\hat{\mathbf{E}}_r'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}))'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{E}}_r\hat{\mathbf{E}}_r'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}))\end{aligned}$$

---

① 如 $\sum_{j=1}^{n}\mathbf{b}_j = n\bar{\mathbf{b}} \neq \mathbf{0}$，就用 $\mathbf{a}+\mathbf{U}\mathbf{b}_j = (\mathbf{a}+\mathbf{U}\bar{\mathbf{b}}) + \mathbf{U}(\mathbf{b}_j - \bar{\mathbf{b}}) = \mathbf{a}^* + \mathbf{U}\mathbf{b}_j^*$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

取 $\mathbf{a}=\bar{\mathbf{x}}$ 达到下界，故此平面通过样本均值，此平面由 $\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_r$ 决定，$\hat{\mathbf{e}}_k$ 的系数为 $\hat{\mathbf{e}}_k'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})=\hat{y}_{jk}$，它是在第 j 个观测值估计的第 k 个样本主成分。

样本主成分的近似平面解释，由图 8.10 表示。

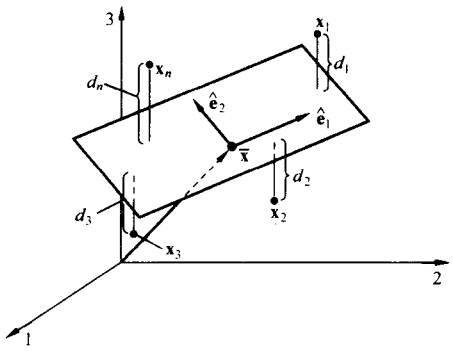


图 8.10　用 $\sum_{j=1}^{n} d_j^2$ 的最小化逼近散布图的 $r=2$ 维平面

可以给出另一个替代的解释。置平面穿过 $\bar{\mathbf{x}}$ 并稍作移动使得观测值在平面的投影达到最大伸长。从式(8A-2)，变差 $\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}$ 在平面 $\mathbf{Ub}$ 的投影是 $\mathbf{v}_j=\mathbf{UU}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$。现在，$\bar{\mathbf{v}}=\mathbf{0}$ 且投影变差的平方长度之和

$$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{v}_j'\mathbf{v}_j=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{UU}'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})=(n-1)\mathrm{tr}[\mathbf{U}'\mathbf{SU}]$$

由 $\mathbf{U}=\hat{\mathbf{E}}$ 得到最大。由于 $\bar{\mathbf{v}}=\mathbf{0}$，也还有

$$(n-1)\mathbf{S}_v=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{v}_j-\bar{\mathbf{v}})(\mathbf{v}_j-\bar{\mathbf{v}})'=\sum_{j=1}^{n}\mathbf{v}_j\mathbf{v}_j'$$

且此平面也使总方差达

$$\mathrm{tr}(\mathbf{S}_v)=\frac{1}{(n-1)}\mathrm{tr}\Big[\sum_{j=1}^{n}\mathbf{v}_j\mathbf{v}_j'\Big]=\frac{1}{(n-1)}\mathrm{tr}\Big[\sum_{j=1}^{n}\mathbf{v}_j'\mathbf{v}_j\Big]$$

最大。

n 维几何学阐述

我们现在来考虑，按列用 $\mathbf{A}$ 逼近均值中心化数据矩阵。对 $r=1$，第 i 列 $[x_{1i}-\bar{x}_i,x_{2i}-\bar{x}_i,x_{ni}-\bar{x}_i]'$ 由一个固定向量 $\mathbf{b}=[b_1,b_2,\cdots,b_n]'$ 的乘积 $c_i\mathbf{b}'$ 来近似。此近似误差的平方长度为

$$L_i^2=\sum_{j=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_i-c_ib_i)^2$$

考虑到 $\underset{(n\times p)}{\mathbf{A}}$ 秩为 1，我们从结论 8A.1 得出：

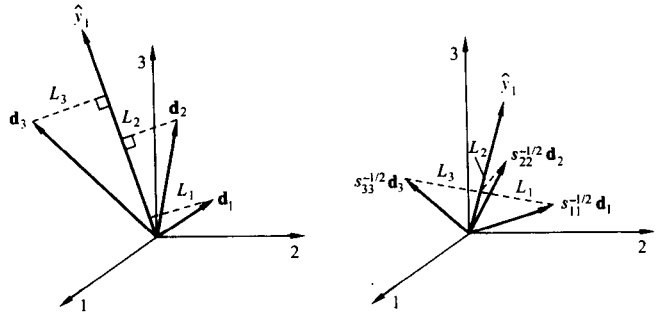
PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_1\hat{\mathbf{e}}_1'(\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}}) \\ \hat{\mathbf{e}}_1\hat{\mathbf{e}}_1'(\mathbf{x}_2 - \bar{\mathbf{x}}) \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{e}}_1\hat{\mathbf{e}}_1'(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}_{11} \\ \hat{y}_{21} \\ \vdots \\ \hat{y}_{n1} \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_1'$$

将平方长度之和 $\sum_{i=1}^{p} L_i^2$ 最小化。也即，第一主成分值的向量决定最佳方向。在图 8.11(a) 中这一点得到了说明。注意，较长的变差向量(更大的 s_{ii}) 对 $\sum_{i=1}^{p} L_i^2$ 的最小化影响最大。

如果先将变量标准化，则对所有的变量，得到的向量 $\left[(x_{1i} - \bar{x}_i)/\sqrt{s_{ii}}, (x_{2i} - \bar{x}_i)/\sqrt{s_{ii}}, \cdots, (x_{ni} - \bar{x}_i)/\sqrt{s_{ii}}\right]$ 长度为 $n - 1$，且每个向量对方向选择的影响相等。[见图 8.11(b)]。

在两种情况下，在 n 维空间中旋转 $\mathbf{b}$ 使平方距离之和 $\sum_{i=1}^{p} L_i^2$ 最小，其中 L_i 是 $[x_{1i} - \bar{x}_i, x_{2i} - \bar{x}_i, \cdots, x_{ni} - \bar{x}_i]'$ 与其在由 $\mathbf{b}$ 决定的直线上的投影之间的平方距离。第二主成分使在与第一次选定向量垂直的所有向量中上述平方距离之和最小。



(a) S的主成分　　(b) R的主成分

图 8.11　第一样本主成分 y_1 使离差向量 $\mathbf{d}_i = [x_{1i} - \bar{x}_i, \cdots, x_{ni} - \bar{x}_i]'$ 到直线的距离平方之和最小化

练　　习

8.1　试确定下述协方差矩阵的总体主成分 Y_1 和 Y_2

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

并计算总体总方差中第一主成分所解释的比例。

8.2　把练习 8.1 中的协方差矩阵换为相关系数矩阵 $\boldsymbol{\rho}$。

(a) 试确定来自 $\boldsymbol{\rho}$ 的主成分 Y_1 和 Y_2，并计算总体总方差中用 Y_1 解释的比例。

(b) 将(a)中求得的成分与练习 8.1 中得到的作比较。它们相同吗？应该相同吗？

(c) 计算相关系数 ρ_{Y_1,Z_1}，ρ_{Y_1,Z_2} 和 ρ_{Y_2,Z_1}。

8.3　令

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}2&0&0\\0&4&0\\0&0&4\end{bmatrix}$$

试确定主成分 Y_1,Y_2 和 Y_3。对彼此相等的特征值所对应的那些特征向量(及主成分)你能说些什么?

8.4 求主成分及总体总方差中用每一个主成分解释的比例,此时协方差矩阵为

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma^2&\sigma^2\rho&0\\\sigma^2\rho&\sigma^2&\sigma^2\rho\\0&\sigma^2\rho&\sigma^2\end{bmatrix},\quad -\frac{1}{\sqrt{2}}<\rho<\frac{1}{\sqrt{2}}$$

8.5 (a)求相关系数矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征值,

$$\boldsymbol{\rho}=\begin{bmatrix}1&\rho&\rho\\\rho&1&\rho\\\rho&\rho&1\end{bmatrix}$$

你的结果与式(8-16)和式(8-17)相一致吗?

(b) 验证式(8-15)给出的 $p\times p$ 矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征值-特征向量对。

8.6 对美国 10 家最大的工业公司 x_1=销售额,x_2=利润的数据列于第 1 章的练习 1.4。由例 4.12,

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}62&309\\2&927\end{bmatrix},\qquad \mathbf{S}=\begin{bmatrix}10\,005.20&255.76\\255.76&14.30\end{bmatrix}\times 10^5$$

(a) 求样本主成分及这些数据的方差。(你可能需要用到二次型去解出 $\mathbf{S}$ 的特征值。)

(b) 求样本总方差中用 $\hat{y}_1$ 解释的比例。

(c) 画出常数密度椭圆 $(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})=1.4$,并在图上标出主成分 $\hat{y}_1$ 和 $\hat{y}_2$。

(d) 计算相关系数 $r_{\hat{y}_1,x_k}$,$k=1,2$。如果可以,你能对第一主成分作什么解释?

8.7 将练习 8.6 中的协方差矩阵 $\mathbf{S}$ 换成样本相关系数矩阵 $\mathbf{R}$。

(a) 求样本主成分 $\hat{y}_1,\hat{y}_2$ 及它们的方差。

(b) 计算全部样本方差中由 $\hat{y}_1$ 解释的比例。

(c) 计算相关系数 $r_{\hat{y}_1,z_k}$,$k=1,2$。解释 $\hat{y}_1$。

(d) 比较由(a)得到的成分和由练习 8.6(a)求得的成分。已知列于练习 1.4 的原始数据,你认为由样本协方差矩阵或样本相关系数矩阵求主成分,哪个会更好些?试说明之。

8.8 利用例 8.5 的结果:

(a) 计算相关系数 $r_{\hat{y}_i,z_k}$,$i=1,2$ 和 $k=1,2,\cdots,5$。这些相关系数是否加强了对前两个成分的解释?试说明之。

(b) 在 5%显著性水平,检验假设

$$H_0:\boldsymbol{\rho}=\boldsymbol{\rho}_0=\begin{bmatrix}1&\rho&\rho&\rho&\rho\\\rho&1&\rho&\rho&\rho\\\rho&\rho&1&\rho&\rho\\\rho&\rho&\rho&1&\rho\\\rho&\rho&\rho&\rho&1\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$H_1: \boldsymbol{\rho} \neq \boldsymbol{\rho}_0$$

列出在完成检验时需要的所有假定。

8.9 （所有变量相互独立的检验。）

(a) 考虑正态理论似然比检验 $H_0: \boldsymbol{\Sigma}$ 为对角阵

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{pp} \end{bmatrix}, \quad \sigma_{ii} > 0$$

证明检验为：若

$$\Lambda = \frac{|\mathbf{S}|^{n/2}}{\prod_{i=1}^{p} s_{ii}^{n/2}} = |\mathbf{R}|^{n/2} < c$$

则拒绝 H_0。

对于大样本，$-2\ln\Lambda$ 近似 $\chi^2_{p(p-1)}$ 分布。巴特利特[3]建议检验统计量以 $-2[1-(2p+11)/6n]\ln\Lambda$ 取代 $-2\ln\Lambda$。这得出一个改善的 χ^2 近似。大样本的 α 临界点为 $\chi^2_{p(p-1)}(\alpha)$。注意，检验 $\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{\Sigma}_0$ 与检验 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{I}$ 是一样的。

(b) 证明对似然比检验 $H_0: \boldsymbol{\Sigma}=\sigma^2\mathbf{I}$，当下式成立则拒绝 H_0

$$\Lambda = \frac{|\mathbf{S}|^{n/2}}{(\mathrm{tr}(\mathbf{S})/p)^{np/2}} = \left[\frac{\prod_{i=1}^{p}\hat{\lambda}_i}{\left(\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\hat{\lambda}_i\right)^p}\right]^{n/2} = \left[\frac{\text{几何均值 } \hat{\lambda}_i}{\text{算术均值 } \hat{\lambda}_i}\right]^{np/2} < c$$

对大容量样本，巴特利特[3]认为 $-2[1-(2p^2+p+2)/6pn]\ln\Lambda$ 近似服从 $\chi^2_{(p-2)(p-1)/2}$。因此，该大样本的 α 临界点是 $\chi^2_{(p+2)(p-1)/2}(\alpha)$。因为当 $\boldsymbol{\Sigma}=\sigma^2\mathbf{I}$ 时，常数密度的轮廓线是球面，因此这个检验称为球性检验。

提示：

(a) $\max\limits_{\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}} L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 由式(5-10)给出，并且 $\max L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 是单变量似然函数的积：

$$\max_{\mu_i\sigma_{ii}}(2\pi)^{-n/2}\sigma_{ii}^{-n/2}\exp\left[-\sum_{j=1}^{n}(x_{ji}-\mu_i)^2/2\sigma_{ii}\right]。所以，\hat{\mu}_i = (1/n)\sum_{j=1}^{n}x_{ji}$$

且 $\hat{\sigma}_{ii} = (1/n)\sum_{j=1}^{n}(x_{ji}-\bar{x}_i)^2$。除数 n 在 Λ 中抵消，故可用 $\mathbf{S}$。

(b) 在 H_0 下验证 $\hat{\sigma}^2 = \left[\sum_{j=1}^{n}(x_{j1}-\bar{x}_1)^2 + \cdots + \sum_{j=1}^{n}(x_{jp}-\bar{x}_p)^2\right]\Big/np$。

在统计量中去掉除数 n，再验证仍然可用 $\mathbf{S}$。利用结论 5.2 计算 χ^2 的自由度。

以下练习需用计算机

8.10 表 8.4 给出在纽约股票交易所交易的五只股票的周回报率。

(a) 构造样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$，并求式(8-20)的样本主成分。（注意，样本均值向量 $\bar{\mathbf{x}}$ 已在例 8.5 中列出了。）

(b) 确定样本总方差中用前三个主成分解释的比例。解释这些成分。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(c) 前三个总体成分 Y_1, Y_2 和 Y_3 的方差为 λ_1, λ_2 和 λ_3，构造它们的庞弗罗尼 90%联合置信区间。

(d) 已知(a)～(c)的结果，你认为要综合股票回报率数据，在小于五维空间中是否可行？试解释。

表 8.4 股票价格数据(周回报率)

周	阿莱德化学	杜邦	联合碳化物	埃克森	德士古
1	0.000000	0.000000	0.000000	0.039473	−0.000000
2	0.027027	−0.044855	−0.003030	−0.014466	0.043478
3	0.122807	0.060773	0.088146	0.086238	0.078124
4	0.057031	0.029948	0.066808	0.013513	0.019512
5	0.063670	−0.003793	−0.039788	−0.018644	−0.024154
6	0.003521	0.050761	0.082873	0.074265	0.049504
7	−0.045614	−0.033007	0.002551	−0.009646	−0.028301
8	0.058823	0.041719	0.081425	−0.014610	0.014563
9	0.000000	−0.019417	0.002353	0.001647	−0.028708
10	0.006944	−0.025990	0.007042	−0.041118	−0.024630
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
91	−0.044068	0.020704	−0.006224	−0.018518	0.004694
92	0.039007	0.038540	0.024988	−0.028301	0.032710
93	−0.039457	−0.029297	−0.065844	−0.015837	−0.045758
94	0.039568	0.024145	−0.006608	0.028423	−0.009661
95	−0.031142	−0.007941	0.011080	0.007537	0.014634
96	0.000000	−0.020080	−0.006579	0.029925	−0.004807
97	0.021429	0.049180	0.006622	−0.002421	0.028985
98	0.045454	0.046375	0.074561	0.014563	0.018779
99	0.050167	0.036380	0.004082	−0.011961	0.009216
100	0.019108	−0.033303	0.008362	0.033898	0.004566

8.11 考虑表 8.5 的人口普查数据。对 X_5＝家庭收入中位数的观察值，用千美元计数而不用万美元。也就是说，将表中第 6 列的所有数字都乘以 10。

(a) 构造人口普查数据的样本协方差矩阵 **S**，此时 X_5＝家庭收入中位数用千美元为单位计数。(注意，这个协方差矩阵可由例 8.3 给出的协方差矩阵得到，将其第 5 行和第 5 列的非对角元乘以 10 并将对角元 s_{55}乘以 100 即可，为什么呢？)

(b) 求特征值-特征向量对及(a)中协方差矩阵的前两个样本主成分。

(c) 计算总方差中用(b)求得的前两个主成分解释的比例，求相关系数 $r_{\hat{y}_i, x_k}$。如果可能的话，解释这些成分，并将所得结果与例 8.3 的结果进行比较。计数尺度上的变化对主成分有什么影响？

8.12 考虑列于表 1.3 的空气污染数据，如果可能请用小于 $p=7$ 维来综合这些数据。用协方差矩阵 **S** 和相关系数矩阵 **R** 对这些数据做主成分分析，可得到什么？选择哪个矩阵作分析有不同吗？这些数据可由三维甚至更少的维数来综合吗？你能解释这些主成分吗？

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

8.13　放射疗法数据在表 1.5 中，对 $p=6$ 个代表病人对放射疗法的反应的变量有 $n=98$次观察值。

(a) 求这些数据的协方差矩阵 **S** 及相关系数矩阵 **R**。

(b) 挑选一个矩阵 **S** 或 **R**(证明你的选择合理)然后求特征值和特征向量。按从大到小的顺序，列表表示每个特征值对样本总方差的贡献百分比。

(c) 已知(b)的结果，确定重要样本主成分的个数，若用单一的反应指标成分来综合放射疗法数据是否可行？请说明。

(d) 列表写出每一个你想保留的主成分与原始数据间的相关系数。如果可能，解释这些成分。

表 8.5　人口普查数据

地区	总人口（千）	受教育年限中位数	总就业数（千）	保健服务业就业数（千）	家庭收入中位数（万美元）
1	5.935	14.2	2.265	2.27	2.91
2	1.523	13.1	0.597	0.75	2.62
3	2.599	12.7	1.237	1.11	1.72
4	4.009	15.2	1.649	0.81	3.02
5	4.687	14.7	2.312	2.50	2.22
6	8.044	15.6	3.641	4.51	2.36
7	2.766	13.3	1.244	1.03	1.97
8	6.538	17.0	2.618	2.39	1.85
9	6.451	12.9	3.147	5.52	2.01
10	3.314	12.2	1.606	2.18	1.82
11	3.777	13.0	2.119	2.83	1.80
12	1.530	13.8	0.798	0.84	4.25
13	2.768	13.6	1.336	1.75	2.64
14	6.585	14.9	2.763	1.91	3.17

注：相邻地区的观察值很可能是相关的，也就是说，这 14 个观察值也许并不构成随机样本。

8.14　用例 5.2 的汗液数据的样本协方差矩阵作主成分分析，做每个重要主成分的 Q-Q 散点图，有可疑的观察值吗？试说明。

8.15　在例 8.6 中讨论过的生育后体重的 4 个样本标准差为

$$\sqrt{s_{11}}=32.9909,\quad \sqrt{s_{22}}=33.5918,\quad \sqrt{s_{33}}=36.5534,\quad \sqrt{s_{44}}=37.3517$$

用这些数据和例 8.6 给定的相关系数，构造样本协方差矩阵 **S**，用 **S** 做主成分分析。

8.16　90 年代，在五年的时间里，以威斯康星的 28 个湖上的渔民作为年度样本，要求他们报告捕鱼花费的时间及捕到的各种类型的鱼的数量，然后把他们反馈的信息转化成对下面几种鱼的每小时的捕捉率，

x_1 = 蓝鳃鱼　　x_2 = 黑刺盖太阳鱼　　x_3 = 小嘴鲈鱼

x_4 = 大嘴鲈鱼　　x_5 = 突眼鱼　　x_6 = 北方狗鱼

估计的相关系数矩阵为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix} 1 & 0.4919 & 0.2636 & 0.4653 & -0.2277 & 0.0652 \\ 0.4919 & 1 & 0.3127 & 0.3506 & -0.1917 & 0.2045 \\ 0.2635 & 0.3127 & 1 & 0.4108 & 0.0647 & 0.2493 \\ 0.4653 & 0.3506 & 0.4108 & 1 & -0.2249 & 0.2293 \\ -0.2277 & -0.1917 & 0.0647 & -0.2249 & 1 & -0.2144 \\ 0.0652 & 0.2045 & 0.2493 & 0.2293 & -0.2144 & 1 \end{bmatrix}$$

它是基于一个容量为 120 的样本(有少量数值丢失了)。

同一个渔夫捕到的鱼都放在一起,因此这些数据可以提供关于鱼群的一些迹象。前四种鱼属于棘臀太阳鱼科,这是数量最丰富的科。突眼鱼则是最受欢迎的食用鱼。

(a) 论述棘臀太阳鱼科内 x_1 至 x_4 的相关系数模型,突眼鱼与其他几种鱼是同一鱼群的吗?

(b) 仅用 x_1 至 x_4 作主成分分析,解释你的结果。

(c) 用全部 6 个变量进行主成分分析。解释得到的结果。

8.17　用表 1.6 中的骨头所含矿物质的数据,作 **S** 的主成分分析。

8.18　国家和地区的女子田径纪录数据列于表 1.7。

(a) 求这些数据的样本相关系数矩阵 **R**,并求它的特征值和特征向量。

(b) 求标准化变量的前两个主成分。列表表示标准化变量的相关系数,并给出主成分及由这两个主成分解释的(标准化)样本总方差累积百分比。

(c) 解释(b)中求得的两个主成分(注意,第一成分实质上是规范化的单位向量,并且可以测量给定国家和地区的运动员的水平。第二成分测量各国家和地区在不同赛跑距离中的相对实力)。

(d) 把国家和地区按它们在第一主成分的得分排列,这种排列与你最初对不同国家和地区运动水平的看法相一致吗?

8.19　参见练习 8.18,用以米每秒为单位的速度代替原表 1.7 中的国家和地区女子田径纪录,注意,800 米、1500 米、3000 米和马拉松的纪录是用分钟标示的。马拉松是 26.2 英里或 42 195 米长。用速度数据的协方差矩阵 **S** 作主成分分析,与练习 8.18 的结果作比较。你对成分的解释有不同吗?若这些国家和地区的名次是以其在第一主成分上的得分来排列的,那么这个序列与练习 8.18 的有所不同吗?为什么?

8.20　表 8.6 列出各国家和地区男子田径纪录的数据,像练习 8.18 那样重复做一次主成分分析,得到的结果是否与那些由女子数据得到的结果一致?

表 8.6　国家和地区男子田径纪录

国家和地区	100 米(秒)	200 米(秒)	400 米(秒)	800 米(分)	1500 米(分)	5000 米(分)	10 000 米(分)	马拉松(分)
阿根廷	10.39	20.81	46.84	1.81	3.70	14.04	29.36	137.72
澳大利亚	10.31	20.06	44.84	1.74	3.57	13.28	27.66	128.30
奥地利	10.44	20.81	46.82	1.79	3.60	13.26	27.72	135.90
比利时	10.34	20.68	45.04	1.73	3.60	13.22	27.45	129.95
百慕大	10.28	20.58	45.91	1.80	3.75	14.68	30.55	146.62

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

国家和地区	100 米（秒）	200 米（秒）	400 米（秒）	800 米（分）	1500 米（分）	5000 米（分）	10 000 米（分）	马拉松（分）
巴西	10.22	20.43	45.21	1.73	3.66	13.62	28.62	133.13
缅甸	10.64	21.52	48.30	1.80	3.85	14.45	30.28	139.95
加拿大	10.17	20.22	45.68	1.76	3.63	13.55	28.09	130.15
智利	10.34	20.80	46.20	1.79	3.71	13.61	29.30	134.03
中国	10.51	21.04	47.30	1.81	3.73	13.90	29.13	133.53
哥伦比亚	10.43	21.05	46.10	1.82	3.74	13.49	27.88	131.35
库克群岛	12.18	23.20	52.94	2.02	4.24	16.70	35.38	164.70
哥斯达黎加	10.94	21.90	48.66	1.87	3.84	14.03	28.81	136.58
捷克斯洛伐克	10.35	20.65	45.64	1.76	3.58	13.42	28.19	134.32
丹麦	10.56	20.52	45.89	1.78	3.61	13.50	28.11	130.78
多米尼加共和国	10.14	20.65	46.80	1.82	3.82	14.91	31.45	154.12
芬兰	10.43	20.69	45.49	1.74	3.61	13.27	27.52	130.87
法国	10.11	20.38	45.28	1.73	3.57	13.34	27.97	132.30
德意志民主共和国	10.12	20.33	44.87	1.73	3.56	13.17	27.42	129.92
德意志联邦共和国	10.16	20.37	44.50	1.73	3.53	13.21	27.61	132.23
大不列颠及北爱尔兰	10.11	20.21	44.93	1.70	3.51	13.01	27.51	129.13
希腊	10.22	20.71	46.56	1.78	3.64	14.59	28.45	134.60
危地马拉	10.98	21.82	48.40	1.89	3.80	14.16	30.11	139.33
匈牙利	10.26	20.62	46.02	1.77	3.62	13.49	28.44	132.58
印度	10.60	21.42	45.73	1.76	3.73	13.77	28.81	131.98
印度尼西亚	10.59	21.49	47.80	1.84	3.92	14.73	30.79	148.83
以色列	10.61	20.96	46.30	1.79	3.56	13.32	27.81	132.35
爱尔兰	10.71	21.00	47.80	1.77	3.72	13.66	28.93	137.55
意大利	10.01	19.72	45.26	1.73	3.60	13.23	27.52	131.08
日本	10.34	20.81	45.86	1.79	3.64	13.41	27.72	128.63
肯尼亚	10.46	20.66	44.92	1.73	3.55	13.10	27.38	129.75
韩国	10.34	20.89	46.90	1.79	3.77	13.96	29.23	136.25
朝鲜人民民主共和国	10.91	21.94	47.30	1.85	3.77	14.13	29.67	130.87
卢森堡	10.35	20.77	47.40	1.82	3.67	13.64	29.08	141.27
马来西亚	10.40	20.92	46.30	1.82	3.80	14.64	31.01	154.10
毛里求斯	11.19	22.45	47.70	1.88	3.83	15.06	31.77	152.23
墨西哥	10.42	21.30	46.10	1.80	3.65	13.46	27.95	129.20
荷兰	10.52	20.95	45.10	1.74	3.62	13.36	27.61	129.02
新西兰	10.51	20.88	46.10	1.74	3.54	13.21	27.70	128.98
挪威	10.55	21.16	46.71	1.76	3.62	13.34	27.69	131.48
巴布亚新几内亚	10.96	21.78	47.90	1.90	4.01	14.72	31.36	148.22
菲律宾	10.78	21.64	46.24	1.81	3.83	14.74	30.64	145.27
波兰	10.16	20.24	45.36	1.76	3.60	13.29	27.89	131.58
葡萄牙	10.53	21.17	46.70	1.79	3.62	13.13	27.38	128.65
罗马尼亚	10.41	20.98	45.87	1.76	3.64	13.25	27.67	132.50

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

国家和地区	100 米（秒）	200 米（秒）	400 米（秒）	800 米（分）	1500 米（分）	5000 米（分）	10 000 米（分）	马拉松（分）
新加坡	10.38	21.28	47.40	1.88	3.89	15.11	31.32	157.77
西班牙	10.42	20.77	45.98	1.76	3.55	13.31	27.73	131.57
瑞士	10.25	20.61	45.63	1.77	3.61	13.29	27.94	130.63
瑞典	10.37	20.46	45.78	1.78	3.55	13.22	27.91	131.20
台北	10.59	21.29	46.80	1.79	3.77	14.07	30.07	139.27
泰国	10.39	21.09	47.91	1.83	3.84	15.23	32.65	149.90
土耳其	10.71	21.43	47.60	1.79	3.67	13.56	28.58	131.50
美国	9.93	19.75	43.86	1.73	3.53	13.20	27.43	128.22
苏联	10.07	20.00	44.60	1.75	3.59	13.20	27.53	130.55
西萨摩亚	10.82	21.86	49.00	2.02	4.24	16.28	34.71	161.83

资料来源：1984 年洛杉矶奥运会 IAAF/ATFS 田径统计手册。

8.21　参见练习 8.20，将表 8.6 中的国家和地区男子田径纪录的速度换成用米每秒表示。注意：记录中 800 米、1500 米、10 000 米和马拉松是以分钟计的。其中，马拉松是 26.2 英里或 42 195 米长。用速度的协方差矩阵 **S** 作主成分分析，同练习 8.20 的结果比较一下，你认为哪一个分析得更好？为什么？

8.22　考虑表 1.8 的公牛数据，利用这 7 个变量 YrHgt，FtFtBody，PrctFFB，Frame，BkFat，SaleHt 及 SaleWt，由协方差矩阵 **S** 和相关系数矩阵 **R** 作主成分分析，你的分析中应包括以下各项：

(a) 确定能有效地综合样本变异性的恰当的成分个数。构造崖底碎石图帮助你的求解。

(b) 解释样本主成分。

(c) 你认为由以上 7 个变量的数据可能得到一个“身体尺寸”或“身体外形”指标吗？请说明一下。

(d) 用前两个主成分的值，将这些数据画在 $\hat{y}_1$ 表示竖轴，$\hat{y}_2$ 表示横轴的二维空间上，你能区分代表三种牛的组吗？有没有离群值？

(e) 用第一主成分作 Q-Q 图。解释该图。

8.23　参见例 8.10 及表 5.8 的数据，添加变量 x_6＝常规加班时数，数值如下（交叉读取）

6187	7336	6988	6964	8425	6778	5922	7307
7679	8259	10954	9353	6291	4969	4825	6019

并重做一遍例 8.10。

8.24　参看例 8.10 的警察加班时数的数据。为了控制由添加的主成分综合在原始观察值中未被解释的方差，基于平方和 d_{Uj}^2，另构造一个控制图。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

参考文献

1. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.
2. Anderson, T. W. "Asymptotic Theory for Principal Components Analysis." *Annals of Mathematical Statistics*, 34 (1963), 122～148.
3. Bartlett, M. S. "A Note on Multiplying Factors for Various Chi-Squared Approximations." *Journal of the Royal Statistical Society* (*B*), 16 (1954), 296～298.
4. Dawkins, B. "Multivariate Analysis of National Track Records." *The American Statistician*, 43 (1989), 110～115.
5. Girschick, M. A. "On the Sampling Theory of Roots of Determinantal Equations." *Annals of Mathematical Statistics*, 10 (1939), 203～224.
6. Hotelling. H. "Analysis of a Complex of Statistical Variables into Principal Components." *Journal of Educational Psychology*, 24 (1933), 417～441, 498～520.
7. Hotelling, H. "The Most Predictable Criterion." *Journal of Educational Psychology*, 26 (1935), 139～142.
8. Hotelling, H. "Simplified Calculation of Principal Components." *Psychometrika*, 1 (1936), 27～35.
9. Hotelling. H. "Relations between Two Sets of Variates." *Biometrika*. 28 (1936),321～377.
10. Jolicoeur, P. "The Multivariate Generalization of the Allometry Equation." *Biometrics*, 19 (1963), 497～499.
11. Jolicoeur, P., and J. E. Mosimann. "Size and Shape Variation in the Painted Turtle: A principal Component Analysis." *Growth*, 24 (1960), 339～354.
12. King, B. "Market and Industry Factors in Stock Price Behavior." *Journal of Business*. 39 (1966), 139～190.
13. Kourti, T., and J. McGregor, "Multivariate SPC Methods for Process and Product Monitoring," *Journal of Quality Technology*, 28 (1996), 409～428.
14. Lawley, D. N. "On Testing a Set of Correlation Coefficients for Equality." *Annals of Mathematical Statistics*, 34 (1963),149～151.
15. Maxwell, A. E. *Multivariate Analysis in Behavioural Research*. London: Chapman and Hall, 1977.
16. Rao, C. R. *Linear Statistical Inference and Its Applications* (2d ed.). New York: John Wiley, 1973.
17. Rencher, A. C. "Interpretation of Canonical Discriminant Functions, Canonical Variates and Principal Components." *The American Statistician*, 46 (1992), 217～225.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第9章 因子分析与对协方差矩阵结构的推断

9.1 引言

因子分析在其全部历史上时时都激起相当激烈的争论。它的现代起源在20世纪早期，K.皮尔逊(Pearson)，C.斯皮尔曼(Spearman)及其他一些学者，为定义和测定智力所作的努力。因为与智力这类概念早有联系，主要由对心理测量学有兴趣的科学家们，培育和发展了因子分析。对几个早期研究的心理学解释的争论以及缺乏强有力的计算工具，阻碍了它作为统计学方法的最新发展。高速计算机的出现，已经重新引发对因子分析的理论和计算方面的兴趣。原先的大部分技巧已经被抛弃，而紧随新近的发展，早期的争论也消退了。无论如何，有一点总是对的：该技术的每一次应用成功与否，都必须由其自身功绩来检测。

因子分析的实质目的是，只要可能，就用几个潜在的但不能观察的随机量去描述许多变量间的协方差关系，这些随机量叫做**因子**。基本上说，因子模型的推动是由于下一命题：假定可用变量间的相关性把它们分组。这就是说，假设在一个特定组内的所有变量，它们之间是高度相关的，而与不同组中的变量却有相对较小的相关性。于是可以想像，各组变量象征有单一的潜在的结构(或因子)，它对观察到的相关负责。例如，由斯皮尔曼收集了古典文学、法语、英语、数学以及音乐的一组测验成绩，从它们的相关性表明存在一个潜在的因子“智力”。另一组变量，表示身体健康得分，只要有效就可以对应为另一个因子。因子分析企图确认的就是这样一种结构。

可以把因子分析想成是主成分分析的一个扩充。两者都可看成为在力图逼近协方差矩阵Σ。然而。基于因子分析模型的近似是更为精细的。因子分析的主要问题是，数据是否与一个规定的结构一致。

9.2 正交因子模型

有p个成分的观测随机向量$\mathbf{X}$，有均值μ和协方差矩阵Σ。因子模型要求$\mathbf{X}$是线性依赖于几个不能观测的称之为**公共因子**的随机变量$F_1, F_2, \cdots, F_m$和p个附加的称之为**误**

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

差或有时也称为**特殊因子**的变差源 $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_p$①。具体地，因子分析模型是

$$\begin{aligned} X_1-\mu_1 &= l_{11}F_1+l_{12}F_2+\cdots+l_{1m}F_m+\varepsilon_1 \\ X_2-\mu_2 &= l_{21}F_1+l_{22}F_2+\cdots+l_{2m}F_m+\varepsilon_2 \\ &\vdots \\ X_p-\mu_p &= l_{p1}F_1+l_{p2}F_2+\cdots+l_{pm}F_m+\varepsilon_p \end{aligned} \tag{9-1}$$

或者写为矩阵形式

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}}-\boldsymbol{\mu}=\underset{(p\times m)}{\mathbf{L}}\underset{(m\times 1)}{\mathbf{F}}+\underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{9-2}$$

称系数 l_{ij} 为第 i 个变量在第 j 个因子上的**载荷**，故矩阵 $\mathbf{L}$ 是**因子载荷阵**。注意，第 i 个特殊因子 ε_i 只与第 i 个响应 X_i 相联系。p 个差 $X_1-\mu_1,X_2-\mu_2,\cdots,X_p-\mu_p$ 用 $p+m$ 个随机变量 $F_1,F_2,\cdots,F_m,\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_p$ 表达，这些随机变量是不能观测到的。这是式(9-2)中因子模型与式(7-26)中的多元回归模型区别所在，后一模型中独立变量[在式(9-2)中用 $\mathbf{F}$ 占据了这个位置]可以被观测到。

由于有如此之多的不能观测量，从 $X_1,X_2,\cdots,X_p$ 的观测值来直接确认这个因子模型，是没有希望的。然而，对随机向量 $\mathbf{F}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 作某些附加假设后，模型(9-2)可推出某种协方差关系，并且这些关系可以得到核查。

我们设

$$E(\mathbf{F})=\underset{(m\times 1)}{\mathbf{0}},\quad \mathrm{Cov}(\mathbf{F})=E[\mathbf{F}\mathbf{F}']=\underset{(m\times m)}{\mathbf{I}}$$

$$E(\boldsymbol{\varepsilon})=\underset{(p\times 1)}{\mathbf{0}},\quad \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})=E[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}']=\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Psi}}=\begin{bmatrix}\psi_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \psi_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \psi_p\end{bmatrix} \tag{9-3}$$

且 $\mathbf{F}$ 与 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 独立，故

$$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon},\mathbf{F})=E(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{F}')=\mathbf{0}$$

这些假设和式(9-2)中的关系构成**正交因子模型**②。

有 m 个公共因子的正交因子模型

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}}=\underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\mu}}+\underset{(p\times m)}{\mathbf{L}}\underset{(m\times 1)}{\mathbf{F}}+\underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

μ_i = 变量 i 的均值

ε_i = 第 i 个特殊因子

F_i = 第 i 个公共因子

l_{ij} = 第 i 个变量在第 j 个因子上的载荷 (9-4)

不能观测的随机因子 $\mathbf{F}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 满足下列条件：

$\mathbf{F}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 独立

$E(\mathbf{F})=\mathbf{0},\mathrm{Cov}(\mathbf{F})=\mathbf{I}$

$E(\boldsymbol{\varepsilon})=\mathbf{0},\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})=\boldsymbol{\Psi}$，$\boldsymbol{\Psi}$ 是对角矩阵

① 正如马克斯韦尔(Maxwell)[22]指出的，在许多调查中，倾向认为 ε_i 是测量误差和惟一地与各单个变量有关的那些因子的组合。

② 允许因子 $\mathbf{F}$ 是相关的，从而 $\mathrm{Cov}(\mathbf{F})$ 不是对角阵，这给出斜交因子模型。斜交模型带来某些额外的估计困难，本书将不作讨论。(可见[20]。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

正交因子模型推出 $\mathbf{X}$ 的协方差结构。从模型(9-4)，

$$\begin{aligned}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})' &= (\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})(\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})' \\ &= (\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})((\mathbf{LF})'+\boldsymbol{\varepsilon}') \\ &= \mathbf{LF}(\mathbf{LF})'+\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{LF})'+\mathbf{LF}\boldsymbol{\varepsilon}'+\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}'\end{aligned}$$

故按照式(9-3)有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma} &= \mathrm{Cov}(\mathbf{X}) = E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})' \\ &= \mathbf{L}E(\mathbf{FF}')\mathbf{L}'+E(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{F}')\mathbf{L}'+\mathbf{L}E(\mathbf{F}\boldsymbol{\varepsilon}')+E(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}') \\ &= \mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}\end{aligned}$$

由模型(9-4)，也有 $(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})\mathbf{F}'=(\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{F}'=\mathbf{LFF}'+\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{F}'$，故 $\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\mathbf{F})=E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})\mathbf{F}'=\mathbf{L}E(\mathbf{FF}')+E(\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{F}')=\mathbf{L}$.

正交因子模型的协方差结构

1. $\mathrm{Cov}(\mathbf{X})=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$

或

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(X_i) &= l_{i1}^2+l_{i2}^2+\cdots+l_{im}^2+\psi_i \\ \mathrm{Cov}(X_i,X_k) &= l_{i1}l_{k1}+l_{i2}l_{k2}+\cdots+l_{im}l_{km}\end{aligned} \tag{9-5}$$

2. $\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\mathbf{F})=\mathbf{L}$

或

$$\mathrm{Cov}(X_i,F_j)=l_{ij}$$

模型 $\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}=\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon}$ 在公共因子中是线性的。如果 p 个响应 $\mathbf{X}$ 事实上是与潜在因子有关，但这关系为非线性的，比如为 $X_1-\mu_1=l_{11}F_1F_3+\varepsilon_1$，$X_2-\mu_2=l_{21}F_2F_3+\varepsilon_2$，等等，那么仅由式(9-5)给出的协方差结构 $\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$ 可能还是不够的。线性假设十分重要，它是传统因子模型公式表达中固有的假设。

由 m 个公共因子贡献的第 i 个变量的方差部分，叫做第 i 个**共性方差**。属于特殊因子的 $\mathrm{Var}(X_i)=\sigma_{ii}$ 部分，常称为**独特方差**或**特殊方差**。用 h_i^2 记第 i 个共性方差，从式(9-5)我们看到

$$\underbrace{\sigma_{ii}}_{\mathrm{Var}(X_i)=} = \underbrace{l_{i1}^2+l_{i2}^2+\cdots+l_{im}^2}_{\text{共性方差}} + \underbrace{\psi_i}_{\text{特殊方差}}$$

或

$$h_i^2 = l_{i1}^2+l_{i2}^2+\cdots+l_{im}^2 \tag{9-6}$$

和

$$\sigma_{ii} = h_i^2+\psi_i, \qquad i=1,2,\cdots,p$$

第 i 个共性方差是第 i 变量在这 m 个公共因子上载荷的平方和。

例 9.1 （对两因子验证关系 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$）

考虑协方差阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}19 & 30 & 2 & 12\\ 30 & 57 & 5 & 23\\ 2 & 5 & 38 & 47\\ 12 & 23 & 47 & 68\end{bmatrix}$$

等式

$$\begin{bmatrix}19 & 30 & 2 & 12\\ 30 & 57 & 5 & 23\\ 2 & 5 & 38 & 47\\ 12 & 23 & 47 & 68\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4 & 1\\ 7 & 2\\ -1 & 6\\ 1 & 8\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 & 7 & -1 & 1\\ 1 & 2 & 6 & 8\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 4 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 3\end{bmatrix}$$

或

$$\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$$

可用矩阵代数来验证。因此，$\boldsymbol{\Sigma}$ 具有由一个 $m=2$ 正交因子模型产生的结构。由于

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix}l_{11} & l_{12}\\ l_{21} & l_{22}\\ l_{31} & l_{32}\\ l_{41} & l_{42}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4 & 1\\ 7 & 2\\ -1 & 6\\ 1 & 8\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Psi}=\begin{bmatrix}\psi_1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \psi_2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \psi_3 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \psi_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 4 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 3\end{bmatrix}$$

从式(9-6)得到 X_1 的共性方差是

$$h_1^2=l_{11}^2+l_{12}^2=4^2+1^2=17$$

而 X_1 的方差可分解为

$$\sigma_{11}=(l_{11}^2+l_{12}^2)+\psi_1=h_1^2+\psi_1$$

或

$$\underbrace{19}_{\text{方差}}=\underbrace{4^2+1^2}_{\text{共性方差}}+\underbrace{2}_{\text{特殊方差}}=17+2$$

对其他变量可作类似处理。

因子模型假设这 $p+p(p-1)/2=p(p+1)/2$ 个变量和 $\mathbf{X}$ 的协方差，可从 pm 个因子载荷 l_{ij} 及 p 个特殊方差 ψ_i 重新得到。当 $m=p$，协方阵矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 可准确复制为 $\mathbf{LL}'$[见式(9-11)]，故 $\boldsymbol{\Psi}$ 可以是零矩阵。然而当 m 相对于 p 较小时的因子分析，是最有用的。此时，因子模型提供 $\mathbf{X}$ 中协同变异的一个“简单”解释，该模型带有的参数个数比 $\boldsymbol{\Sigma}$ 中 $p(p+1)/2$ 个参数要少。例如，若 $\mathbf{X}$ 包含 $p=12$ 个变量，并且具有 $m=2$ 的因子模型(9-4)是合适的，那么 $\boldsymbol{\Sigma}$ 中 $p(p+1)/2=(12\times13)/2=78$ 个元素可以用因子模型的 $mp+p=12\times2+12=36$ 个参数 l_{ij} 和 ψ_i 来刻画。

对因子分析而言不幸的是，大多数协方差矩阵不能作因子化化为 $\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$，且使其中因子数 m 较 p 小得多。下例说明了在试图从观测变量的方差和协方差确定参数 l_{ij} 和 ψ_i

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

时，会引起的问题之一。

例 9.2 （不存在真实解）

令 $p=3$ 和 $m=1$，并设随机变量 X_1, X_2 及 X_3 有正定协方差矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}1 & 0.9 & 0.7\\ 0.9 & 1 & 0.4\\ 0.7 & 0.4 & 1\end{bmatrix}$$

利用因子模型(9-4)，我们得到

$$X_1-\mu_1=l_{11}F_1+\varepsilon_1$$
$$X_2-\mu_2=l_{21}F_1+\varepsilon_2$$
$$X_3-\mu_3=l_{31}F_1+\varepsilon_3$$

式(9-5)中的协方差结构推出

$$\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$$

或

$$\begin{aligned}1&=l_{11}^2+\psi_1 & 0.90&=l_{11}l_{21} & 0.70&=l_{11}l_{31}\\ & & 1&=l_{21}^2+\psi_2 & 0.40&=l_{21}l_{31}\\ & & & & 1&=l_{31}^2+\psi_3\end{aligned}$$

方程组

$$0.70=l_{11}l_{31}$$
$$0.40=l_{21}l_{31}$$

推出

$$l_{21}=\left(\frac{0.40}{0.70}\right)l_{11}$$

将此结果代入方程

$$0.90=l_{11}l_{12}$$

得出 $l_{11}^2=1.575$，或 $l_{11}=\pm 1.255$。既然 $\mathrm{Var}(F_1)=1$（由对称性）和 $\mathrm{Var}(X_1)=1$ 知 $l_{11}=\mathrm{Cov}(X_1,F_1)=\mathrm{Corr}(X_1,F_1)$。但相关系数不能大于 1（按绝对值），故由此知 $|l_{11}|=1.255$ 太大了。此外，等式

$$1=l_{11}^2+\psi_1 \quad 或 \quad \psi_1=1-l_{11}^2$$

给出 $\psi_1=1-1.575=-0.575$。它是不能令人满意的，因为它对 $\mathrm{Var}(\varepsilon_1)=\psi_1$ 给了一个负值。

这样，对 $m=1$ 的本例，得到方程 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$ 的一个惟一数值解是可能的。然而，这个解并没反映系数的统计学解释，故它不是一个真实解。

当 $m>1$，总存在某个内在的与因子模型有关的模棱两可的解释。为弄清这一点，令 $\mathbf{T}$ 是任一 $m\times m$ 正交矩阵，故 $\mathbf{TT}'=\mathbf{T}'\mathbf{T}=\mathbf{I}$。那么表达式(9-2)可写为

$$\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}=\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{LTT}'\mathbf{F}+\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{L}^*\mathbf{F}^*+\boldsymbol{\varepsilon} \tag{9-7}$$

其中

$$\mathbf{L}^*=\mathbf{LT} \text{ 和 } \mathbf{F}^*=\mathbf{T}'\mathbf{F}$$

由于

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$E(\mathbf{F}^*) = \mathbf{T}'E(\mathbf{F}) = \mathbf{0}$$

及

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{F}^*) = \mathbf{T}'\mathrm{Cov}(\mathbf{F})\mathbf{T} = \mathbf{T}'\mathbf{T} = \underset{m\times m}{\mathbf{I}}$$

因此基于 $\mathbf{X}$ 的观测值，要将载荷 $\mathbf{L}$ 与载荷 $\mathbf{L}^*$ 区别开来是不可能的。这就是说，因子 $\mathbf{F}$ 和 $\mathbf{F}^* = \mathbf{T}'\mathbf{F}$ 有同样的统计性质，即使载荷 $\mathbf{L}$ 一般与载荷 $\mathbf{L}^*$ 不同，它们却都有相同的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，即

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{L}\mathbf{L}' + \boldsymbol{\Psi} = \mathbf{L}\mathbf{T}\mathbf{T}'\mathbf{L}' + \boldsymbol{\Psi} = (\mathbf{L}^*)(\mathbf{L}^*)' + \boldsymbol{\Psi}. \tag{9-8}$$

由于正交矩阵对应于 $\mathbf{X}$ 的坐标系的旋转（和反射），这种模棱两可的解释，给“因子旋转”提供了基本理论。

> 因子载荷 $\mathbf{L}$ 只由一个正交阵 $\mathbf{T}$ 决定。这样，载荷
>
> $$\mathbf{L}^* = \mathbf{L}\mathbf{T} \quad 和 \quad \mathbf{L} \tag{9-9}$$
>
> 都给出同一表示。由 $\mathbf{L}\mathbf{L}' = (\mathbf{L}^*)(\mathbf{L}^*)'$ 对角元给出的共性方差，也不因 $\mathbf{T}$ 的选取而改变。

因子模型分析接下来设定条件，使得可以惟一地估计 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$。再对载荷矩阵作旋转（以一个正交矩阵相乘），这里由某个“易于解释”的准则来决定这一旋转。一旦得到载荷和特殊方差，就确认了因子，并且常常可构造出因子自身的估计值（称为**因子得分**）。

9.3 估计方法

已知对 p 个一般为相关的变量的观测值 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$，因子分析是寻求对如下问题的答案：具有小数量因子的因子模型（9-4）可足以代表数据吗？实质上，我们通过验证式（9-5）中的协方差关系，来着手处理这个统计建模问题。

样本协方差阵 $\mathbf{S}$ 是未知总体协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的一个估计量。若 $\mathbf{S}$ 的非对角元较小或者样本相关矩阵 $\mathbf{R}$ 的非对角元实质上为 0，则变量不相关，因子分析便将无用。在这种情况下，特殊因子起着重要作用，而因子分析的主要目的就是要决定几个重要的公共因子。

若 $\boldsymbol{\Sigma}$ 明显背离一个对角阵，那就可准备考虑因子模型了，并且一开始的问题便是估计因子载荷 l_{ij} 和特殊方差 ψ_j。我们将考虑两个最流行的参数估计方法：**主成分**（和有关的**主因子**）**方法**和**最大似然估计方法**。为使因子的阐述简化，从无论哪个方法得到的解，都可作旋转，就像在 9.4 节所描述的那样。多试几种解法总是谨慎的；若该因子模型适于手边的问题，那么各解应该一致。

现行的估计和旋转方法，要求必需在计算机上作迭代计算。有几种计算机程序都可用于此类计算。

主成分（和主因子）方法

谱分解（2-20）为我们提供协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的因子化分解。令 $\boldsymbol{\Sigma}$ 有特征值-特征向量对 $(\lambda_i, \mathbf{e}_i)$，$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_p \geqslant 0$。则

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\boldsymbol{\Sigma} = \lambda_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1' + \lambda_2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2' + \cdots + \lambda_p \mathbf{e}_p \mathbf{e}_p'$$

$$= \left[\sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1 \;\vdots\; \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2 \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \sqrt{\lambda_p}\mathbf{e}_p \right] \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1' \\ \hdashline \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2' \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \sqrt{\lambda_p}\mathbf{e}_p' \end{bmatrix} \tag{9-10}$$

这符合所规定的因子分析模型的协方差结构，该模型有与变量一样多($m=p$)的因子，并且对所有 i 有特殊方差 $\psi_i=0$。载荷矩阵第 j 列为 $\sqrt{\lambda_j}\mathbf{e}_j$。这就是说，我们可有

$$\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}} = \underset{(p\times p)}{\mathbf{L}} \underset{(p\times p)}{\mathbf{L}'} + \underset{(p\times p)}{\mathbf{0}} = \mathbf{LL}' \tag{9-11}$$

不计尺度因子 $\sqrt{\lambda_j}$，在第 j 个因子上的因子载荷是该总体第 j 个主成分的系数。

虽然在式(9-11)中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的因子分析表示是精确的，但它并不很有用：它用到和所有变量一样多的公共因子，并且不允许式(9-4)中特殊因子 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 有任何变异。我们更愿意要以少数几个公共因子解释协方差结构的模型。当后 $p-m$ 个特征值较小时，方法就是略去 $\lambda_{m+1}\mathbf{e}_{m+1}\mathbf{e}_{m+1}' + \cdots + \lambda_p \mathbf{e}_p \mathbf{e}_p'$ 对式(9-10)中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的贡献。略去这一贡献，我们得到近似

$$\boldsymbol{\Sigma} \doteq \left[\sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1 \;\vdots\; \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2 \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \sqrt{\lambda_m}\mathbf{e}_m \right] \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1' \\ \hdashline \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2' \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \sqrt{\lambda_m}\mathbf{e}_m' \end{bmatrix} = \underset{(p\times m)}{\mathbf{L}} \underset{(m\times p)}{\mathbf{L}'} \tag{9-12}$$

式(9-12)中的近似表示假定式(9-4)中诸特殊因子 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是不大重要的，并在 $\boldsymbol{\Sigma}$ 因子化时也可忽略。若此模型中包含特殊因子，那么可取它们的方差为 $\boldsymbol{\Sigma}-\mathbf{LL}'$ 的对角元，这里 $\mathbf{LL}'$ 如式(9-12)定义。

考虑到特殊因子，我们发现这近似变成

$$\boldsymbol{\Sigma} \doteq \mathbf{LL}' + \boldsymbol{\Psi}$$

$$= \left[\sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1 \;\vdots\; \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2 \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \sqrt{\lambda_m}\mathbf{e}_m \right] \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1}\mathbf{e}_1' \\ \hdashline \sqrt{\lambda_2}\mathbf{e}_2' \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \sqrt{\lambda_m}\mathbf{e}_m' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \psi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \psi_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \psi_p \end{bmatrix} \tag{9-13}$$

其中 $\psi_i = \sigma_{ii} - \sum_{j=1}^{m} l_{ij}^2, \quad i = 1,2,\cdots,p$。

为将此法用到数据集 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$，习惯上是先减去样本均值 $\bar{\mathbf{x}}$ 将观测中心化。中心化后的观测值

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} x_{j1} \\ x_{j2} \\ \vdots \\ x_{jp} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \vdots \\ \bar{x}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{j1} - \bar{x}_1 \\ x_{j2} - \bar{x}_2 \\ \vdots \\ x_{jp} - \bar{x}_p \end{bmatrix} \qquad j = 1,2,\cdots,n \tag{9-14}$$

有与原观测值一样的样本协方差阵 $\mathbf{S}$。

在变量的单位不是同量纲的情形下，通常可合适采用标准化变量

$$\mathbf{z}_j = \begin{bmatrix} \dfrac{(x_{j1} - \bar{x}_1)}{\sqrt{s_{11}}} \\ \dfrac{(x_{j2} - \bar{x}_2)}{\sqrt{s_{22}}} \\ \vdots \\ \dfrac{(x_{jp} - \bar{x}_p)}{\sqrt{s_{pp}}} \end{bmatrix}, \qquad j = 1,2,\cdots,n$$

其样本协方差矩阵是观测值 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 的样本相关矩阵 $\mathbf{R}$。大方差变量会不适当地影响因子载荷的确定，标准化可避免这一问题。

当把式(9-13)用到样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$ 或样本相关矩阵 $\mathbf{R}$ 时，它作为**主成分解**是已知的。此名称来自于这一事实：因子载荷是前几个样本主成分的变换一定比例的系数。(见第 8 章)

因子模型的主成分解

样本协方差 $\mathbf{S}$ 的主成分因子分析是以它的特征值-特征向量对 $(\hat{\lambda}_1,\hat{\mathbf{e}}_1),(\hat{\lambda}_2,\hat{\mathbf{e}}_2),\cdots,(\hat{\lambda}_p,\hat{\mathbf{e}}_p)$ 来说明的，这里 $\hat{\lambda}_1 \geqslant \hat{\lambda}_2 \geqslant \cdots \geqslant \hat{\lambda}_p$。令 $m<p$ 是公共因子的个数，则所估计的因子载荷矩阵 $\{\tilde{l}_{ij}\}$ 由

$$\tilde{\mathbf{L}} = \left[\sqrt{\hat{\lambda}_1}\,\hat{\mathbf{e}}_1 \;\vdots\; \sqrt{\hat{\lambda}_2}\,\hat{\mathbf{e}}_2 \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \sqrt{\hat{\lambda}_m}\,\hat{\mathbf{e}}_m\right] \tag{9-15}$$

给出。所估计的特殊方差由矩阵 $\mathbf{S}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'$ 的对角元提供，故

$$\tilde{\boldsymbol{\Psi}} = \begin{bmatrix} \tilde{\psi}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \tilde{\psi}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \tilde{\psi}_p \end{bmatrix}, \text{且 } \tilde{\psi}_i = s_{ii} - \sum_{j=1}^{m} \tilde{l}_{ij}^2 \tag{9-16}$$

共性方差估计值为

$$\tilde{h}_i^2 = \tilde{l}_{i1}^2 + \tilde{l}_{i2}^2 + \cdots + \tilde{l}_{im}^2 \tag{9-17}$$

样本相关矩阵的主成分因子分析，可用 $\mathbf{R}$ 取代 $\mathbf{S}$ 来得到。

对主成分解，当因子数增加时，一个已知因子的估计载荷并不变。例如，$m=1$ 时 $\tilde{\mathbf{L}}=[\sqrt{\hat{\lambda}_1}\,\hat{\mathbf{e}}_1]$，$m=2$ 时 $\tilde{\mathbf{L}}=[\sqrt{\hat{\lambda}_1}\,\hat{\mathbf{e}}_1 \,|\, \sqrt{\hat{\lambda}_2}\,\hat{\mathbf{e}}_2]$，其中 $(\hat{\lambda}_1,\hat{\mathbf{e}}_1)$ 和 $(\hat{\lambda}_2,\hat{\mathbf{e}}_2)$ 是 $\mathbf{S}$(或 $\mathbf{R}$)的前两个特征值-特征向量对。

由 $\tilde{\psi}_i$ 的定义，$\mathbf{S}$ 的对角元等于 $\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'+\tilde{\boldsymbol{\Psi}}$ 的对角元。然而，$\mathbf{S}$ 的非对角元却通常不是由 $\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'+\tilde{\boldsymbol{\Psi}}$ 复制得到。那么我们该怎样选择因子数 m?

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

如果公共因子的数量不由预先的某种考虑来决定，比如某理论或其他研究成果。那么 m 的选择就可基于估计的特征值，以与选择主成分大致相同的方式进行。考虑残差矩阵

$$\mathbf{S}-(\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'+\tilde{\boldsymbol{\Psi}}) \tag{9-18}$$

它是用主成分解逼近 $\mathbf{S}$ 得到的。对角元为 0，并且若其他元也小时，我们可以主观认为取 m 个因子的模型是恰当的。从分析角度看，我们有（见练习 9.5）

$$\mathbf{S}-(\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'+\tilde{\boldsymbol{\Psi}})\text{ 的元素的平方和}\leqslant\hat{\lambda}_{m+1}^2+\cdots+\hat{\lambda}_p^2 \tag{9-19}$$

因而，被略去的特征值的平方和较小时，表明近似误差的平方和的值也较小。

可以想像，前几个因子对变量的样本方差的贡献应该大。来自第一个公共因子的对样本方差 s_{ii} 的贡献是 $\tilde{l}_{i1}^2$。对样本总方差 $s_{11}+s_{22}+\cdots+s_{pp}=\mathrm{tr}(\mathbf{S})$ 的贡献则因特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_1$ 有单位长度而为

$$\tilde{l}_{11}^2+\tilde{l}_{21}^2+\cdots+\tilde{l}_{p1}^2=(\sqrt{\hat{\lambda}_1}\,\hat{\mathbf{e}}_1)'(\sqrt{\hat{\lambda}_1}\,\hat{\mathbf{e}}_1)=\hat{\lambda}_1$$

一般地

$$\begin{pmatrix}\text{样本总方差}\\ \text{归因于第 } i \text{ 个}\\ \text{因子的比例}\end{pmatrix}=\begin{cases}\dfrac{\hat{\lambda}_i}{s_{11}+s_{22}+\cdots+s_{pp}} & \text{对 } \mathbf{S} \text{ 的因子分析}\\[2ex] \dfrac{\hat{\lambda}_i}{p} & \text{对 } \mathbf{R} \text{ 的因子分析}\end{cases} \tag{9-20}$$

在决定恰当的公共因子个数时，式(9-20)中的标准经常可作一种有启发性的手段。保留在模型中的公共因子个数一直增加，直到已经被解释的样本总方差占有一个“适当的比例”为止。

在其他的计算机程序包中经常遇到的另一个公认的标准是，若对样本相关矩阵 $\mathbf{R}$ 做因子化，则令 m 等于 $\mathbf{R}$ 中大于 1 的特征值的个数，或在样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$ 做因子化时，令 m 等于 $\mathbf{S}$ 的正特征值的个数。对这些经验规则不应不加区分地运用。例如，当遵照上述对 $\mathbf{S}$ 的规则时，则由于大样本时 $\mathbf{S}$ 的所有特征值都是正的，所以取 $m=p$。最好的方法是保留少数几个而不是许多因子，只要它们能对数据给出满意的阐述并对 $\mathbf{S}$ 或 $\mathbf{R}$ 得出满意的拟合。

例 9.3 （顾客偏好数据的因子分析）

在一项顾客偏好的调查中，询问顾客对一件新产品几种品质的评分。将顾客的回答列表并构造品质相关矩阵。该相关矩阵表示如下：

品质（变量）		1	2	3	4	5
爱好	1	1.00	0.02	0.96	0.42	0.01
乐于用现金买	2	0.02	1.00	0.13	0.71	0.85
调味品	3	0.96	0.13	1.00	0.50	0.11
适应快餐	4	0.42	0.71	0.50	1.00	0.79
精力充沛采购	5	0.01	0.85	0.11	0.79	1.00

从相关矩阵中圈出的项可清楚看到，变量 1 和 3 及变量 2 和 5 都形成小组，变量 4 相对(1,3)组更为接近于(2,5)组。已知这些结果，而且变量数目较少，我们可以期望至多用两个或三个公共因子来解释变量间明显的线性关系。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

前两个特征值，$\hat{\lambda}_1=2.85$ 和 $\hat{\lambda}_2=1.81$ 是 $\mathbf{R}$ 的所有大于 1 的特征值。其次，$m=2$ 个公共因子将累积占到(标准化)样本总方差的比为

$$\frac{\hat{\lambda}_1+\hat{\lambda}_2}{p}=\frac{2.85+1.85}{5}=0.93$$

表 9.1 给出利用式(9-15)，式(9-16)及式(9-17)得到的估计的因子载荷、共性方差及特殊方差。

现在，

$$\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'+\tilde{\boldsymbol{\Psi}}=\begin{bmatrix}0.56 & 0.82\\ 0.78 & -0.53\\ 0.65 & 0.75\\ 0.94 & -0.10\\ 0.80 & -0.54\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.56 & 0.78 & 0.65 & 0.94 & 0.80\\ 0.82 & -0.53 & 0.75 & -0.10 & -0.54\end{bmatrix}$$

$$+\begin{bmatrix}0.02 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0.12 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0.02 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0.11 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.07\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.00 & 0.1 & 0.97 & 0.44 & 0.00\\ & 1.00 & 0.11 & 0.79 & 0.91\\ & & 1.00 & 0.53 & 0.11\\ & & & 1.00 & 0.81\\ & & & & 1.00\end{bmatrix}$$

接近再现相关矩阵 $\mathbf{R}$。这样在纯粹描述的基础上，我们将断定两因子模型提供对该数据的一个好的拟合，该模型具有表示在表 9.1 中的因子载荷。共性方差(0.98，0.88，0.98，0.89，0.93)表明这两个因子占各变量样本方差的一个很大比例。

表 9.1

变 量	因子载荷估计 $\tilde{l}_{ij}=\sqrt{\hat{\lambda}_i}\,\hat{e}_{ij}$		共性方差	特殊方差
	F_1	F_2	$\tilde{h}_i^2$	$\tilde{\varphi}_i=1-\tilde{h}_i^2$
1. 爱好	0.56	0.82	0.98	0.02
2. 乐于用现金购买	0.78	−0.53	0.88	0.12
3. 调味品	0.65	0.75	0.98	0.02
4. 适应快餐	0.94	−0.11	0.89	0.11
5. 精力充沛采购	0.80	−0.54	0.93	0.07
特征值	2.85	1.81		
(标准)样本总方差的累积比例	0.571	0.932		

我们将不在这一点上解释因子。像我们在 9.2 节注意过的那样，因子(以及载荷)是惟一对正交旋转不变的。因子旋转常常揭示一个简单的结构，有助于进行解释。在讨论了因子旋转之后我们将再次考虑这个例子。(见例 9.9 和显示板 9.1。)

例 9.4 (股票价格数据的因子分析)

例 8.5 介绍过 $p=5$ 只股票的 $n=100$ 周回报率组成的股票价格数据。该例中，从 $\mathbf{R}$ 得到过前两个样本主成分。取 $m=1$ 和 $m=2$，我们可以很容易地得到对正交因子模型的

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

主成分解。特别地，在以相应特征值的平方根调节之后，被估计的因子载荷是样本主成分系数（**R** 的特征向量）。表 9.2 列出估计的因子载荷、共性方差、特殊方差以及由各因子对 $m=1$ 和 $m=2$ 个因子解所解释的（标准化）样本总方差的比例。共性方差由式（9-17）给出。所以，例如在 $m=2$ 时，$\tilde{h}_1^2=\tilde{l}_{11}^2+\tilde{l}_{12}^2=0.783^2+(-0.217)^2=0.66$。

表 9.2

变量	一个因子解		两个因子解		
	因子载荷估计	特殊方差	因子载荷估计		特殊方差
	F_1	$\tilde{\psi}_i=1-\tilde{h}_i^2$	F_1	F_2	$\tilde{\psi}_i=1-\tilde{h}_i^2$
1. 阿莱德化学	0.783	0.39	0.783	−0.217	0.34
2. 杜邦	0.773	0.40	0.773	−0.458	0.19
3. 联合碳化物	0.794	0.37	0.794	−0.234	0.31
4. 埃克森	0.713	0.49	0.713	0.472	0.27
5. 德士古	0.712	0.49	0.712	0.524	0.22
所解释的（标准化）样本总方差的累积比例	0.571		0.571	0.733	

相应于 $m=2$ 的解的残差阵为

$$\mathbf{R}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'-\tilde{\Psi}=\begin{bmatrix} 0 & -0.127 & -0.164 & -0.069 & 0.017 \\ -0.127 & 0 & -0.122 & 0.055 & 0.012 \\ -0.164 & -0.122 & 0 & -0.019 & -0.017 \\ -0.069 & 0.055 & -0.019 & 0 & -0.232 \\ 0.017 & 0.012 & -0.017 & -0.232 & 0 \end{bmatrix}$$

由两因子解所解释的总方差的比例要较单因子解大很多。然而对 $m=2$，$\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'$ 得出的数一般说比样本相关要大，对 r_{45} 更是如此。

似乎很清楚了：第一个因子 F_1 代表总的经济条件，可称之为**市场因子**。所有股票都高度地依赖于它，且载荷都差不多相等。第二因子将化学类股票和石油类股票进行对比。（化学类在此因子上有比较大的负载荷而石油类有大的正载荷）。这样，F_2 将不同行业股票加以区分，可称之为**行业因子**。作为总结，回报率要由总的市场条件和各个行业的独特运作以及残差或是公司特殊因子来共同决定，这基本上是在例 8.5 中测试样本主成分所获得的结论。

一个修正方法——主因子解

有时考虑修改主成分方法。我们用 **R** 的因子分析说明修改的理由，虽然这个过程对 **S** 也是适用的。如果因子模型 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$ 被准确指明了，那这 m 个公共因子将占据 $\boldsymbol{\rho}$ 的非对角元，还有对角元

$$\rho_{ii}=1=h_i^2+\psi_i$$

的共性方差部分。如果从对角上除掉特殊因子贡献 ψ_i，或者等价地以 h_i^2 代替 1，那么所得

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

矩阵为 $\rho-\Psi=\mathbf{LL}'$。

现在设此特殊方差的初始估计 ψ_i^* 可以得到，则用 $h_i^{*2}=1-\psi_i^*$ 代替 $\mathbf{R}$ 的第 i 个对角元，我们就得到一个"缩减了的"样本相关矩阵

$$\mathbf{R}_r=\begin{bmatrix} h_1^{*2} & r_{12} & \cdots & r_{1p} \\ r_{12} & h_2^{*2} & \cdots & r_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{1p} & r_{2p} & \cdots & h_p^{*2} \end{bmatrix}$$

现在除去样本变差，此缩减样本相关矩阵 $\mathbf{R}_r$ 的所有元将由 m 个公共因子占据。特别地，$\mathbf{R}_r$ 因子化为

$$\mathbf{R}_r=\mathbf{L}_r^*\mathbf{L}_r^{*\prime} \tag{9-21}$$

其中 $\mathbf{L}_r^*=\{l_{ij}^*\}$ 是荷载的估计。

因子分析的**主成分法**采用估计

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_r^* &= \left[\sqrt{\hat{\lambda}_1^*}\,\hat{\mathbf{e}}_1^* \;\vdots\; \sqrt{\hat{\lambda}_2^*}\,\hat{\mathbf{e}}_2^* \;\vdots\; \cdots \;\vdots\; \sqrt{\hat{\lambda}_m^*}\,\hat{\mathbf{e}}_m^*\right] \\ \psi_i^* &= 1-\sum_{j=1}^{m} l_{ij}^{*2} \end{aligned} \tag{9-22}$$

其中 $(\hat{\lambda}_i^*,\hat{\mathbf{e}}_i^*)$ $i=1,\cdots,m$ 是从 $\mathbf{R}_r$ 决定的(最大)特殊值-特征向量对。反之，共性方差则会(重新)估计为

$$\tilde{h}_i^{*2}=\sum_{j=1}^{m} l_{ij}^{*2} \tag{9-23}$$

主成分因子解可从迭代得到，以共性方差估计(9-23)为下一步的初始估计。

以主成分解角度看，考虑特征值估计 $\hat{\lambda}_1^*,\hat{\lambda}_2^*,\cdots,\hat{\lambda}_p^*$，有助于确定保留公共因子的数目。由于使用初始共性方差估计，一个额外的麻烦是，现在某些特征值可能是负数。在想像中，我们应取公共因子的个数等于缩减总体矩阵的秩。不幸的是，从 $\mathbf{R}_r$ 不总是好决定秩数，这样某些判断就是必要的了。

虽然对特殊方差初始估计存在许多选择，但当与相关矩阵打交道时最受欢迎的选择是 $\psi_i^*=1/r^{ii}$，其中 r^{ii} 是 $\mathbf{R}^{-1}$ 的第 i 个对角元。初始共性方差估计则变为

$$h_i^{*2}=1-\psi_i^*=1-1/r^{ii} \tag{9-24}$$

它等于 X_i 和其他 $p-1$ 个变量间多重相关系数的平方。涉及多重相关系数，意味着甚至当 $\mathbf{R}$ 不满秩时也可计算 h_i^{*2}。为进行 $\mathbf{S}$ 因子化，初始的特殊方差估计采用 $\mathbf{S}^{-1}$ 的对角元 s^{ii}。文献[12]中有它们的进一步讨论和其他的初始估计。然而，当变量数目大而公共因子数目小时，两种方法在实际中经常得到相差不多的因子载荷。

我们不进一步探讨主因子解，因为在我们看来，最值得推荐的解法是主成分法和最大似然法，我们下面就讨论它们。

最大似然方法

如果可以假设公共因子 $\mathbf{F}$ 和特殊因子 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是正态分布的，则可以得到因子载荷和特殊

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

方差的最大似然估计。当 $\mathbf{F}_j$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 是联合正态时，观测值 $\mathbf{X}_j-\boldsymbol{\mu}=\mathbf{L}\mathbf{F}_j+\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 就是正态的，并且由式(4-16)，似然函数是

$$
\begin{aligned}
L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) &= (2\pi)^{-\frac{np}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{n}{2}}\mathrm{e}^{-\left(\frac{1}{2}\right)\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'+n(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\right)\right]} \\
&= (2\pi)^{\frac{-(n-1)p}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{(n-1)}{2}}\mathrm{e}^{-\left(\frac{1}{2}\right)\mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right)\right]} \\
&\quad\times (2\pi)^{-\frac{p}{2}}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\left(\frac{n}{2}\right)(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}-\boldsymbol{\mu})}
\end{aligned}
\tag{9-25}
$$

它通过 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{L}\mathbf{L}'+\boldsymbol{\Psi}$ 依赖于 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$。因为由正交变换而成为可能的选择 $\mathbf{L}$ 的多重性，仍然不能很好地确定这个模型。施加可方便计算的惟一性条件

$$\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}\mathbf{L}=\boldsymbol{\Delta}\text{ 为一个对角阵} \tag{9-26}$$

使 $\mathbf{L}$ 得以很好地确定，是可取的。

将式(9-25)数值最大化，会得到最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$。幸运的是，现在已有有效的计算机程序，能让人们相当容易地得到这些估计。

结论 9.1 令 $\mathbf{X}_1,\mathbf{X}_2,\cdots,\mathbf{X}_n$ 是 $N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 的随机样本，其中 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{L}\mathbf{L}'+\boldsymbol{\Psi}$ 是对 m 个公共因子模型(9-4)的协方差矩阵。最大似然估计量 $\hat{\mathbf{L}},\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{x}}$ 使式(9-25)在 $\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}}$ 是对角阵的约束下取得最大化。

共性方差的最大似然估计是

$$\hat{h}_i^2=\hat{l}_{i1}^2+\hat{l}_{i2}^2+\cdots+\hat{l}_{im}^2,\qquad i=1,2,\cdots,p \tag{9-27}$$

故

$$\begin{pmatrix}\text{归因于第 } j \text{ 个因子}\\ \text{的样本总方差}\\ \text{所占的比例}\end{pmatrix}=\frac{\hat{l}_{1j}^2+\hat{l}_{2j}^2+\cdots+\hat{l}_{pj}^2}{s_{11}+s_{22}+\cdots+s_{pp}} \tag{9-28}$$

证明 由于最大似然估计的不变性(见节 4.3)，$\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 的函数，用与 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 的相同的函数去估计。特别地，共性方差 $h_i^2=l_{i1}^2+l_{i2}^2+\cdots+l_{im}^2$ 有最大似然估计 $\hat{h}_i^2=\hat{l}_{i1}^2+\hat{l}_{i2}^2+\cdots+\hat{l}_{im}^2$。

如果像在式(8-10)中那样将变量标准化，使得 $\mathbf{Z}=\mathbf{V}^{-1/2}(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})$，那么 $\mathbf{Z}$ 的协方差矩阵可表示为

$$\boldsymbol{\rho}=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{-1/2}=(\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L})(\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L})'+\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Psi}\mathbf{V}^{-1/2} \tag{9-29}$$

这样，$\boldsymbol{\rho}$ 有与式(9-5)类似的因子化，具有载荷矩阵 $\mathbf{L}_{\mathbf{Z}}=\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L}$ 及特殊方差矩阵 $\boldsymbol{\Psi}_{\mathbf{Z}}=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Psi}\mathbf{V}^{-1/2}$。由于最大似然估计的不变性，$\boldsymbol{\rho}$ 的最大似然估计量是

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{\rho}} &= (\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}})(\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}})'+\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2} \\
&= \hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}
\end{aligned}
\tag{9-30}
$$

其中 $\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}$ 和 $\hat{\mathbf{L}}$ 分别是 $\mathbf{V}^{-1/2}$ 和 $\mathbf{L}$ 的最大似然估计量。(见补充 9A。)

作为因子化(9-30)的一个结果，一旦最大似然分析与相关矩阵有关，我们就称

$$\hat{h}_i^2=\hat{l}_{i1}^2+\hat{l}_{i2}^2+\cdots+\hat{l}_{im}^2,\qquad i=1,2,\cdots,p \tag{9-31}$$

为共性方差的最大似然估计，并且基于

$$\begin{pmatrix}\text{归因于第 } j \text{ 个因子}\\ \text{的(标准化)样本}\\ \text{总方差所占的比例}\end{pmatrix}=\frac{\hat{l}_{1j}^2+\hat{l}_{2j}^2+\cdots+\hat{l}_{pj}^2}{p} \tag{9-32}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

来评价因子的重要性。为避免更繁复的记号，就用先前使用的 $\hat{l}_{ij}$ 记 $\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}$ 的元。

评注 通常，是将观测值标准化，并且样本相关矩阵 **R** 是作分析的因子。将此样本相关矩阵 **R** 插入似然函数(9-25)中的 $[(n-1)/n]\mathbf{S}$，并利用计算机得到 $\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}$ 的最大似然估计。虽然似然函数(9-25)是对 **S** 适用不是对 **R**，出人意外的是，这一做法与令 $\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}=\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}=\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}$，基于样本协方差矩阵 **S** 得到似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 是一样的。这里 $\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}$ 是一对角阵，在主对角元上是样本标准差(以 $\sqrt{n}$ 为除数算得)的逆元。

换一个办法，已知从 **R** 得到的载荷估计 $\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}$ 和特殊方差估计 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}$，我们发现对协方差矩阵 $[(n-1)/n]\mathbf{S}$ 的一个因子分析，作最大似然估计的结果是 $\hat{\mathbf{L}}=\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}=\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{V}}^{1/2}$，或是

$$\hat{l}_{ij}=\hat{l}_{\mathbf{Z},ij}\sqrt{\hat{\sigma}_{ii}} \quad 和 \quad \hat{\psi}_i=\hat{\psi}_{\mathbf{Z},i}\hat{\sigma}_{ii}$$

其中 $\hat{\sigma}_{ii}$ 是用除数 n 算出的样本方差。两个除数间的不同对于主成分解来说可忽略不计。

因子化 **S** 和因子化 **R** 之间的等价性，显而易见在许多已出版的因子分析的讨论中已经被弄混了。(见补充 9A。)

例 9.5 (利用最大似然法对股票价格数据的因子分析)

假设 $m=2$ 的因子模型和利用最大似然法，对例 8.5 和 9.4 中的股票价格数据再做因子分析。估计的因子载荷、共性方差、特殊方差以及由各因子解释的(标准化)样本总方差所占的比例都列在表 9.3 中。由主成分法得到的 $m=2$ 因子解的相应数值(见例 9.4)，也已给出。对应于 **R** 的最大似然因子化的共性方差形式为[见式(9-31)] $\hat{h}_i^2=\hat{l}_{i1}^2+\hat{l}_{i2}^2$。

所以，例如对 $i=1$，

$$\hat{h}_1^2=0.684^2+0.189^2=0.50$$

表 9.3

变量	最大似然			主成分		
	因子载荷估计		特殊方差	因子载荷估计		特殊方差
	F_1	F_2	$\tilde{\psi}_i=1-\tilde{h}_i^2$	F_1	F_2	$\hat{\psi}_i=1-\hat{h}_i^2$
1. 阿莱德化学	0.684	0.189	0.50	0.783	−0.217	0.34
2. 杜邦	0.694	0.517	0.25	0.773	−0.458	0.19
3. 联合碳化物	0.681	0.248	0.47	0.794	−0.234	0.31
4. 埃克森	0.621	−0.073	0.61	0.713	0.412	0.27
5. 德士古	0.792	−0.442	0.18	0.712	0.524	0.22
所解释的(标准化)样本总方差的累积比例	0.485	0.598		0.571	0.733	

残差矩阵为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'-\hat{\Psi}=\begin{bmatrix} 0 & 0.005 & -0.004 & -0.024 & -0.004 \\ 0.005 & 0 & -0.003 & -0.004 & 0.000 \\ -0.004 & -0.003 & 0 & 0.031 & -0.004 \\ -0.024 & -0.004 & 0.031 & 0 & -0.000 \\ -0.004 & 0.000 & -0.004 & -0.000 & 0 \end{bmatrix}$$

$\mathbf{R}-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'-\hat{\Psi}$ 的元较对应于主成分因子化 $\mathbf{R}$ 的残差阵的元要小得多，后者列在例 9.4 中。有鉴于此，我们更欣赏最大似然法，并且在以后的例子中有代表性地描绘它的特点。

由因子解释的占样本总方差的累积比，主成分因子化要比最大似然因子化大。这个判别准则典型地倾向于主成分因子化，这一点并不奇怪。由主成分因子分析得到的载荷与主成分有关，它有目的地使方差得到优化（见式(8-19)前的讨论）。

把注意力集中到最大似然解，我们看到所有变量在 F_1 上有大的正载荷。我们称这个因子为市场因子，一如我们在主成分解中所做的那样。然而，第二因子的阐述就不像它在主成分解中的那样清楚了。因子载荷的符号与行业因子一致，但其幅值在某些情况下较小，并且人们可以把这个因子认定为杜邦公司股票和德士古公司股票之间的一个比较。最大似然解的初始因子载荷的模式受到 $\hat{\mathbf{L}}'\hat{\Psi}^{-1}\hat{\mathbf{L}}$ 为对角阵这个惟一性条件的制约。因此，常常直到完成因子旋转时，有用的因子模式才被发现（见 9.4 节）。

例 9.6 （奥林匹克十项全能运动数据的因子分析）

林登(Linden)[21]对二战以来奥林匹克十项全能运动得分作因子分析研究，全部 160 个完整的比赛数据来自 139 个运动员①。将十项全能运动的每一项得分作标准化，并用主成分法和最大似然法对其样本相关矩阵做了因子分析。他报告说，十项全能运动的每一项的标准得分的分布都是正态的或近似正态的。基于 $n=160$ 个比赛数据，样本相关矩阵是

$$\mathbf{R}=\begin{array}{c} \begin{array}{cccccccccc} \text{100 米跑} & \text{跳远} & \text{投铅球} & \text{跳高} & \text{400 米跑} & \text{110 米跨栏} & \text{铁饼} & \text{撑竿跳高} & \text{标枪} & \text{1500 米跑} \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1.0 & 0.59 & 0.35 & 0.34 & 0.63 & 0.40 & 0.28 & 0.20 & 0.11 & -0.07 \\ & 1.0 & 0.42 & 0.51 & 0.49 & 0.52 & 0.31 & 0.36 & 0.21 & 0.09 \\ & & 1.0 & 0.38 & 0.19 & 0.36 & 0.73 & 0.24 & 0.44 & -0.08 \\ & & & 1.0 & 0.29 & 0.46 & 0.27 & 0.39 & 0.17 & 0.18 \\ & & & & 1.0 & 0.34 & 0.17 & 0.23 & 0.13 & 0.39 \\ & & & & & 1.0 & 0.32 & 0.33 & 0.18 & 0.00 \\ & & & & & & 1.0 & 0.24 & 0.34 & -0.02 \\ & & & & & & & 1.0 & 0.24 & 0.17 \\ & & & & & & & & 1.0 & -0.00 \\ & & & & & & & & & 1.0 \end{bmatrix} \end{array}$$

从主成分因子分析看来，$\mathbf{R}$ 的前 4 个特征值为 3.78，1.52，1.11 和 0.91，故建议取 $m=3$ 或 $m=4$ 的因子解。随后的因子载荷解释支持 $m=4$ 的选择。

① 因为参加多次奥林匹克比赛的运动员，其相继得分可能会相关，因此只利用 139 个不同运动员的 139 个得分来做分析，对参加多次比赛的运动员，则随机选择他的一个得分。此结果实质上与基于全部 160 个得分的结果是完全相同的。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

将主成分解和最大似然解的方法用到林登的相关矩阵上去，得出表 9.4 中估计的因子载荷、共性方差以及特殊方差的贡献①。

表 9.4

变 量	主成分					最大似然				
	因子载荷估计				特殊方差	因子载荷估计				特殊方差
	F_1	F_2	F_3	F_4	$\tilde{\psi}_i=1-\tilde{h}_i^2$	F_1	F_2	F_3	F_4	$\hat{\psi}_i=1-\hat{h}_i^2$
1. 100 米	0.691	0.217	−0.520	−0.206	0.16	−0.090	0.341	0.830	−0.169	0.16
2. 跳远	0.789	0.184	−0.193	0.092	0.30	0.065	0.433	0.595	0.275	0.38
3. 投铅球	0.702	−0.535	0.047	−0.175	0.19	−0.139	0.990	0.000	0.000	0.00
4. 跳高	0.674	0.134	0.139	0.396	0.35	0.156	0.406	0.336	0.445	0.50
5. 400 米	0.620	0.551	−0.084	−0.419	0.13	0.376	0.245	0.671	−0.137	0.33
6. 100 米跨栏	0.687	0.042	−0.161	0.345	0.38	−0.021	0.361	0.425	0.388	0.54
7. 铁饼	0.621	−0.521	0.109	−0.234	0.28	−0.063	0.728	0.030	0.019	0.46
8. 撑竿跳高	0.538	0.087	0.411	0.440	0.34	0.155	0.264	0.229	0.394	0.70
9. 标枪	0.434	−0.439	0.372	−0.235	0.43	−0.026	0.441	−0.010	0.098	0.80
10. 1500 米	0.147	0.596	0.658	−0.279	0.11	0.998	0.059	0.000	0.000	0.00
所解释的总方差的累积比例	0.38	0.53	0.64	0.73		0.12	0.37	0.55	0.61	

此时，两个解法产生十分不同的结果。对主成分因子化，除 1500 米跑之外的所有项目在第一个因子上都有大的正载荷，这个第一因子可以标为运动员的总能力。余下的因子不能很容易地给出让我们满意的解释。因子 2 好像跑步能力和投掷能力或“手臂强壮”程度之间对照，因子 3 好像是跑的耐力(1500 米跑)和跑的速度(100 米跑)的对照，虽说在此因子上有相对为高的撑竿跳的载荷。因子 4 在因子阐述上则是不可思议的。

对最大似然法，1500 米跑是在第一因子上有大载荷的惟一变量。此因子可称为跑的耐力因子。第二因子好像基本上是一个强壮因子(在此因子上铁饼和投铅球有大载荷)，而第三因子由于 100 米和 400 米跑在此因子有大载荷而与跑的速度有关。第四因子仍然不易认定，虽然它可能与跳的能力或腿部强壮程度有关。在讨论因子旋转之后我们将在例 9.11 再次解释诸因子。

虽然在某些情况(例如标枪和跨栏)估计出的特殊方差较大，但这四因子主成分解占(标准化)样本总方差很大的比例。这表明：某些项目可能要求惟一的或特别的、其他项目所不要求的特征。四因子最大似然解占样本总方差比例较少，但是正如下列残差矩阵表明的那样，对再现 $\mathbf{R}$ 最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\Psi}$ 比主成分估计 $\tilde{\mathbf{L}}$ 和 $\tilde{\Psi}$ 做得更好。

主成分：

① 用 BMDP 统计软件包生成此表。从 SAS 程序得到的输出与主成分解是完全一样的，而与最大似然解则十分类似。对于此例，解似然方程产生一种海伍德(Heywood)情况，即载荷的估计使某些特殊方差为负数的情况。结果导致软件包不能运行，除非预先在程序中选定了海伍德情况选项。取此选项，程序会稍稍调整此载荷使得全部特殊方差的估计是非负的，从而得到一个可用的解。本例中海伍德情况建议对推铅球和 1500 米跑的特殊方差值采用 0.00。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'-\tilde{\boldsymbol{\Psi}}=$$

$$\begin{bmatrix}
0 & & & & & & & & & \\
-0.075 & 0 & & & & & & & & \\
-0.030 & -0.010 & 0 & & & & & & & \\
-0.001 & -0.056 & 0.042 & 0 & & & & & & \\
-0.047 & -0.077 & -0.020 & -0.024 & 0 & & & & & \\
-0.096 & -0.092 & -0.032 & -0.122 & 0.022 & 0 & & & & \\
-0.027 & -0.041 & -0.031 & -0.001 & -0.017 & 0.014 & 0 & & & \\
0.114 & -0.042 & -0.034 & -0.215 & 0.067 & -0.129 & 0.009 & 0 & & \\
0.051 & 0.042 & -0.158 & -0.022 & 0.036 & 0.041 & -0.254 & -0.005 & 0 & \\
-0.016 & 0.017 & 0.056 & 0.020 & -0.091 & 0.076 & 0.062 & -0.109 & -0.112 & 0
\end{bmatrix}$$

最大似然：

$$\mathbf{R}-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'-\hat{\boldsymbol{\Psi}}=$$

$$\begin{bmatrix}
0 & & & & & & & & & \\
0.000 & 0 & & & & & & & & \\
0.000 & 0.000 & 0 & & & & & & & \\
0.012 & 0.002 & 0.000 & 0 & & & & & & \\
0.000 & -0.002 & 0.000 & -0.033 & 0 & & & & & \\
-0.012 & 0.006 & -0.000 & 0.001 & 0.028 & 0 & & & & \\
0.004 & -0.025 & -0.000 & -0.034 & -0.002 & 0.036 & 0 & & & \\
0.000 & -0.009 & -0.000 & 0.006 & 0.008 & -0.012 & 0.043 & 0 & & \\
-0.018 & -0.000 & -0.000 & -0.045 & 0.052 & -0.013 & 0.016 & 0.091 & 0 & \\
0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0
\end{bmatrix}$$

公共因子个数的大样本检验

正态总体的假设直接引出模型充分性的检验。设 m 个公共因子的模型成立，此处 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$，并且检验 m 个公共因子模型的充分性等价于检验

$$H_0:\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}}=\underset{(p\times m)}{\mathbf{L}}\underset{(m\times p)}{\mathbf{L}'}+\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Psi}} \tag{9-33}$$

备选 H_1：$\boldsymbol{\Sigma}$ 是任意其他的正定矩阵。当 $\boldsymbol{\Sigma}$ 没有特殊形式时，似然函数的最大值[见式(4-18)和结论 4.11，取 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=((n-1)/n)\mathbf{S}=\mathbf{S}_n$]与

$$|\mathbf{S}_n|^{-n/2}\mathrm{e}^{-np/2} \tag{9-34}$$

成比例。在 H_0 之下，限定 $\boldsymbol{\Sigma}$ 形如式(9-33)。此种情况下，似然函数的最大值[见式(9-25)，取 $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{x}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}$，其中 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 分别是 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 的最大似然估计]与

$$\begin{aligned}
&|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|^{-n/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}\left(\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\right)\right]\right)\\
&\quad=|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|^{-n/2}\exp\left(-\frac{1}{2}n\mathrm{tr}[(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}})^{-1}\mathbf{S}_n]\right)
\end{aligned} \tag{9-35}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

成比例。利用结论 5.2，式(9-34)及式(9-35)，我们发现对检验 H_0 的似然比统计量是

$$-2\ln\Lambda = -2\ln\left[\frac{H_0\text{下最大似然函数}}{\text{最大似然函数}}\right]$$

$$= -2\ln\left(\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\mathbf{S}|}\right)^{-n/2} + n[\mathrm{tr}(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}\mathbf{S}_n) - p] \tag{9-36}$$

其自由度为 $\nu-\nu_0 = \frac{1}{2}p(p+1)-\left[p(m+1)-\frac{1}{2}m(m-1)\right]$

$$= \frac{1}{2}[(p-m)^2-p-m] \tag{9-37}$$

补充 9A 表明，$\mathrm{tr}(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}\mathbf{S}_n)-p=0$ 可证明 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{L}\mathbf{L}'+\boldsymbol{\Psi}$ 的最大似然估计。这样，我们有

$$-2\ln\Lambda = n\ln\left(\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\mathbf{S}_n|}\right) \tag{9-38}$$

巴特利特[4]已经证明，对 $-2\ln\Lambda$ 的抽样分布的 χ^2 近似可以用多重因子 $(n-1-(2p+4m+5)/6)$ 代替式(9-38)中的 n 来修正。

利用巴特利特修正①，只要 n 和 $n-p$ 大，若

$$(n-1-(2p+4m+5)/6)\ln\frac{|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|}{|\mathbf{S}_n|} > \chi^2_{[(p-m)^2-p-m]/2}(\alpha) \tag{9-39}$$

则在显著性水平 α 上拒绝 H_0。由于自由度 $\frac{1}{2}[(p-m)^2-p-m]$ 必为正的，为应用检验(9-39)，得出

$$m < \frac{1}{2}(2p+1-\sqrt{8p+1}) \tag{9-40}$$

评注 在实施检验(9-39)中，我们用比较广义方差 $|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|$ 和 $|\mathbf{S}_n|$ 去检验 m 个公共因子模型的充分性。如果 n 大而 m 相对于 p 较小，则假设 H_0 通常将被拒绝，这导致保留更多的因子。然而 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 可能足够靠近 $\mathbf{S}_n$，以致于增加更多的因子并不会加深认识，即使那些增加的因子是“显著的”。在选择 m 时必须加以判断。

例 9.7 （两个公共因子的检验）

例 9.5 提供过对股票数据的两因子最大似然分析。那里残差矩阵表明两因子解可能是充分的。在水平 $\alpha=0.05$ 下，检验假设 $H_0:\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{L}\mathbf{L}'+\boldsymbol{\Psi}$，取 $m=2$。

式(9-39)中的检验统计量基于广义方差比

$$\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\mathbf{S}_n|} = \frac{|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|}{|\mathbf{S}_n|}$$

令 $\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}$ 是对角阵，使 $\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\mathbf{S}_n\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}=\mathbf{R}$。由行列式性质(见结论 2A.11)，知

$$|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}||\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}||\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}| = |\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}+\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|$$

和

$$|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}||\mathbf{S}_n||\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}| = |\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\mathbf{S}_n\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|$$

因而，由式(9-30)得到

---

① 许多因子分析以无偏估计 $\mathbf{S}=[n/(n-1)]\mathbf{S}_n$ 代替 $\mathbf{S}_n$ 得到近似最大似然估计，然后将 $\ln|\boldsymbol{\Sigma}|+\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{S}]$ 最小化。把 $\mathbf{S}$ 和近似最大似然估计量两次代换到式(9-39)的检验统计量中，不影响它的大样本性质。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{aligned}
\frac{|\hat{\boldsymbol{\Sigma}}|}{|\mathbf{S}_n|} &= \frac{|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|}{|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|}\,\frac{|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}' + \hat{\boldsymbol{\Psi}}|}{|\mathbf{S}_n|}\,\frac{|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|}{|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|} \\
&= \frac{|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'\hat{\mathbf{V}}^{-1/2} + \hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|}{|\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\mathbf{S}_n\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}|} \\
&= \frac{|\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}' + \hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}|}{|\mathbf{R}|}
\end{aligned}
\tag{9-41}
$$

从例 9.5，我们确定

$$
\frac{|\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}\hat{\mathbf{L}}_{\mathbf{Z}}' + \hat{\boldsymbol{\Psi}}_{\mathbf{Z}}|}{|\mathbf{R}|} = \frac{\begin{vmatrix} 1.000 & & & & \\ 0.572 & 1.000 & & & \\ 0.513 & 0.602 & 1.000 & & \\ 0.411 & 0.393 & 0.405 & 1.000 & \\ 0.458 & 0.322 & 0.430 & 0.523 & 1.000 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1.000 & & & & \\ 0.577 & 1.000 & & & \\ 0.509 & 0.599 & 1.000 & & \\ 0.387 & 0.389 & 0.436 & 1.000 & \\ 0.462 & 0.322 & 0.426 & 0.523 & 1.000 \end{vmatrix}} = \frac{0.194414}{0.193163} = 1.0065
$$

利用巴特利特修正，我们计算式(9-39)中检验统计量的值：

$$
\begin{aligned}
&[n - 1 - (2p + 4m + 5)/6]\ln\frac{|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}' + \hat{\boldsymbol{\Psi}}|}{|\mathbf{S}_n|} \\
&= \left[100 - 1 - \frac{(10 + 8 + 5)}{6}\right]\ln(1.0065) = 0.62
\end{aligned}
$$

既然$\frac{1}{2}[(p-m)^2-p-m]=\frac{1}{2}[(5-2)^2-5-2]=1$，没超过 5%的临界值 $\chi_1^2(0.05)=3.84$，我们不能拒绝 H_0。我们的结论为：数据与两因子模型的假定不矛盾。事实上，所观测的显著性水平，或者 P 值 $P[\chi_1^2>0.62]\approx 0.43$，意味着在任何合理的水平上都不会拒绝 H_0。

当最大似然估计 $\hat{l}_{ij}$，$\hat{\psi}_i$ 已经从样本协方差矩阵 $\mathbf{S}$ 中确定下来时，对这些估计的大样本方差和协方差就已经推得了。(见[20]。)一般说表达式是相当复杂的。

9.4 因子旋转

像我们在 9.2 节中曾指出的那样，用一个正交变换从初始载荷得到的所有因子载荷，同样有能力重现协方差(或相关)矩阵。[见式(9-8)。]从矩阵代数我们知道，一个正交变换对应一个坐标轴的刚性旋转(或反射)。因为这个缘故，因子载荷的一个正交变换，与隐含的因子正交变换一样，称之为**因子旋转**。

如 $\hat{\mathbf{L}}$ 是从任何方法(主成分、最大似然等等)得到的因子载荷估计的 $p\times m$ 矩阵，则

$$
\hat{\mathbf{L}}^* = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}, \quad 其中 \quad \mathbf{T}\mathbf{T}' = \mathbf{T}'\mathbf{T} = \mathbf{I} \tag{9-42}
$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

是一个 $p\times m$"旋转过的"载荷矩阵。其次，由于

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}=\hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}\mathbf{T}'\hat{\mathbf{L}}+\hat{\boldsymbol{\Psi}}=\hat{\mathbf{L}}^{*}\hat{\mathbf{L}}^{*\prime}+\hat{\boldsymbol{\Psi}} \tag{9-43}$$

协方差(或相关)估计矩阵仍然不变。式(9-43)表明残差矩阵 $\mathbf{S}_n-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'-\hat{\boldsymbol{\Psi}}=\mathbf{S}_n-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'-\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 仍然不变。而且，特殊方差 $\hat{\psi}_i$，以及由此的共性方差 $\hat{h}_i^2$，也是不变的。这样，从数学角度看，是否得到 $\hat{\mathbf{L}}$ 或 $\hat{\mathbf{L}}^{*}$，并不重要。

既然原先的载荷不易阐述，旋转它们直到达到一个"简单结构"为止，就是常用的办法。基本原理就像是为了更清晰看见细节而使显微镜的焦点更敏锐。

可以想像，我们将乐于看到一个载荷的模式，它使各变量在某单个因子上有高额载荷，而在其余因子上只有小到中等的载荷。然而得到这一简单结构，并不总是可能的，虽说旋转了的载荷对例 9.11 中讨论的十项全能运动数据提供一个近于理想的模式。

我们将集中精力去确定正交旋转到一个简单结构的作图方法和分析方法。当 $m=2$，或者一次考虑两个公共因子，经常可用图形确定如何变换到一个简单结构。因子载荷配对 $(\hat{l}_{i1},\hat{l}_{i2})$ 的图，产生 p 个点，各点对应一个变量。可以直观地旋转坐标轴一个角度(称为 ϕ)并且从关系式

$$\underset{(p\times 2)}{\hat{\mathbf{L}}^{*}}=\underset{(p\times 2)}{\hat{\mathbf{L}}}\ \underset{(2\times 2)}{\mathbf{T}} \tag{9-44}$$

决定新的旋转了的载荷 $\hat{l}_{ij}^{*}$，

这里
$$\begin{cases}\mathbf{T}=\begin{bmatrix}\cos\phi & \sin\phi\\ -\sin\phi & \cos\phi\end{bmatrix} & \text{顺时针方向旋转}\\[2ex] \mathbf{T}=\begin{bmatrix}\cos\phi & -\sin\phi\\ \sin\phi & \cos\phi\end{bmatrix} & \text{逆时针方向旋转}\end{cases}$$

关系式(9-44)在二维图形分析中很少实行。在这样情况下，用眼睛就可以发现变量簇，并且这些簇能让人们确认公共因子而不必考查旋转后载荷的大小。另一方面，对 $m>2$，不易看到方向，而旋转后载荷的大小却必须被考查，以发现对原始数据有意义的阐述。应立即考虑选取一个正交矩阵 $\mathbf{T}$，它可对简单结构进行分析测度。

例 9.8 (因子旋转的最初一瞥)

劳雷和马克斯韦尔给出对 $n=220$ 个男学生在 $p=6$ 门学科里测验得分的样本相关矩阵。这个相关矩阵是

$$\mathbf{R}=\begin{array}{c}\begin{array}{cccccc}\text{盖尔语} & \text{英语} & \text{历史} & \text{算术} & \text{代数} & \text{几何}\end{array}\\ \begin{bmatrix}1.0 & 0.439 & 0.410 & 0.288 & 0.329 & 0.248\\ & 1.0 & 0.351 & 0.354 & 0.320 & 0.329\\ & & 1.0 & 0.164 & 0.190 & 0.181\\ & & & 1.0 & 0.595 & 0.470\\ & & & & 1.0 & 0.464\\ & & & & & 1.0\end{bmatrix}\end{array}$$

对 $m=2$ 公共因子的最大似然解得出表 9.5 中的估计值。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 9.5

变　量	估计因子载荷 F_1	F_2	共性方差 $\hat{h}_i^2$
1. 盖尔语	0.553	0.429	0.490
2. 英语	0.568	0.288	0.406
3. 历史	0.392	0.450	0.356
4. 算术	0.740	−0.273	0.623
5. 代数	0.724	−0.211	0.569
6. 几何	0.595	−0.132	0.372

所有的变量在第一因子上都有正载荷。劳雷和马克斯韦尔建议，这个因子反映学生对教学的整体响应并且可以标为一般智力因子。在第二因子上，一半载荷为正一半载荷为负。有些种载荷模式的因子叫**两极因子**。(负极与正极的分派是任意的，因为在一个因子上载荷的正负号可换为相反的符号而不影响分析。)这种因子不易确认，但在语言表达的测试中得到平均分以上的个人在这个因子上也得到平均分以上的得分。在数学测试中有平均分以上成绩的个人在此因子上得到平均分以下的得分，也许可以把这种因子分类作为一个“数学-非数学”因子。

将因子载荷配对$(\hat{l}_{i1},\hat{l}_{i2})$在图 9.1 中用点表示，在点上标出相应的变量的序号。图上还画出坐标轴顺时针方向绕过一个角度 $\phi=20°$的正交旋转。选这个角度是为了让新坐标轴之一经过$(\hat{l}_{41},\hat{l}_{42})$。做完这些，所有点都全落在第一象限中(因子载荷全为正)，并且更为清晰地揭示出有两个不同的变量簇。

数学测试变量在 F_1^* 上有高额载荷而在 F_2^* 上有负载荷。第一个因子可以称为数学能力因子。类似地，三个语言表达的测试变量在 F_2^* 上有高额而在 F_1^* 上为中到小的载荷。可以给第二因子标为语言表达能力因子。最初确认的一般智力因子被淹没在因子 F_1^* 和 F_2^* 之中。

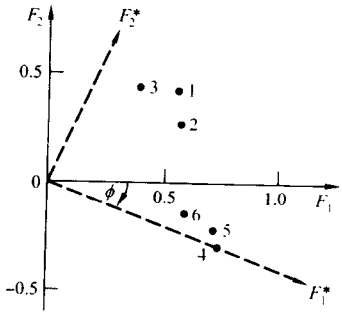


图 9.1　测试得分的因子旋转

在表 9.6 中是，从取 $\phi\doteq20°$的式(9-44)得到的旋转后因子载荷和相应的共性方差估计。旋转后因子载荷的大小支持由图 9.1 所提出的因子阐述。

表 9.6

变　量	旋转因子载荷估计 F_1^*	F_2^*	共性方差 $\hat{h}_i^{*2}=\hat{h}_i^2$
1. 盖尔语	0.369	0.594	0.490
2. 英语	0.433	0.467	0.406
3. 历史	0.211	0.558	0.356
4. 算术	0.789	0.001	0.623
5. 代数	0.752	0.054	0.568
6. 几何	0.604	0.083	0.372

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

由于 $\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'=\hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}\mathbf{T}'\hat{\mathbf{L}}'=\hat{\mathbf{L}}^*\hat{\mathbf{L}}^{*\prime}$，因此正交旋转不改变估计的共性方差，并且共性方差是这些矩阵的对角元。

我们指出，图 9.1 表明了坐标的斜交旋转。一条新轴会通过{1,2,3}组，而另一条通过{4,5,6}组。斜交旋转的得名是因为它们对应于坐标轴的非刚性旋转，会产生不相互垂直的新轴。不过，很明显，对于本例斜交因子的阐述与先前给出的对于正交旋转的阐述会是一样的。

凯泽(Kaiser)[19]曾建议过一个简单结构的分析测度，称作**最大方差准则**或正态最大方差准则。把 $\tilde{l}_{ij}^*=\hat{l}_{ij}^*/\hat{h}_i$ 定义为以共性方差平方根进行标度变换的旋转后系数。那么此(正态)方差最大过程是选正交变换 **T** 使

$$V=\frac{1}{p}\sum_{j=1}^{m}\left[\sum_{i=1}^{p}\tilde{l}_{ij}^{*4}-\left(\sum_{i=1}^{p}\tilde{l}_{ij}^{*2}\right)^2\Big/p\right] \tag{9-45}$$

尽可能大。

对旋转后系数 $\hat{l}_{ij}^*$ 进行标度变换，结果使有较小共性方差的变量在决定简单结构时有相对较大的权重。确定变换 **T** 之后，以 $\hat{h}_i$ 乘载荷 $\tilde{l}_{ij}^*$ 以保存原来的共性方差。

尽管式(9-45)看上去有点可怕，它却有一个简单的解释。换而言之，

$$V\propto\sum_{j=1}^{m}(\text{第 } j \text{ 个因子(标度变换后)载荷平方的方差}) \tag{9-46}$$

结果，最大化 V 对应于把每个因子上的载荷平方尽可能多地“扩展出去”。因此我们希望在旋转后载荷矩阵 $\hat{\mathbf{L}}^*$ 的任一列上，找到大的和可以忽略的系数组。

有最大化 V 的算法，而且最受欢迎的因子分析计算机程序(例如，统计软件包 SAS，SPSS 及 BMDP)提供最大方差旋转。正如期望的那样，用不同解法(主成分、最大似然等等)得到的因子载荷的最大方差旋转，一般说不会是一致的。如果在旋转中添加公共因子，那么旋转载荷的模型也可以有明显的改变。如果一个起控制作用的单因子存在，用任何正交旋转其含义一般都将被弄模糊。另一方面，可将其固定而旋转剩下的因子。

例 9.9 (对消费者偏好数据的旋转载荷)

表 9.7

变量	因子载荷估计 F_1	因子载荷估计 F_2	旋转因子载荷估计 F_1^*	旋转因子载荷估计 F_2^*	共性方差 $\hat{h}_i^2$
1. 爱好	0.56	0.82	0.02	$\boxed{0.99}$	0.98
2. 乐于用现金购买	0.78	−0.52	$\boxed{0.94}$	−0.01	0.88
3. 调味品	0.65	0.75	0.13	$\boxed{0.98}$	0.98
4. 适应快餐	0.94	−0.10	$\boxed{0.84}$	0.43	0.89
5. 精力充沛采购	0.80	−0.54	$\boxed{0.97}$	−0.02	0.93
所解释的(标准化)样本总方差的累积比例	0.571	0.932	0.507	0.932	

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

我们回到例 9.3 中讨论的营销数据。原始的因子载荷(由主成分法得到)、共性方差及(最大方差)旋转因子载荷,列在表 9.7 中(见显示板 9.1 中的 SAS 统计软件输出。)

很清楚,变量 2,4 和 5 定义因子 1(在因子 1 上有高载荷而在因子 2 上载荷小或可以忽略),而变量 1 和 3 定义因子 2(在因子 2 上高载荷而在因子 1 上载荷小或可以忽略)。变量 4 与因子 1 最密切,虽然它有某些特征用因子 2 表示。我们可称因子 1 为食物因子而因子 2 为爱好因子。

变量的因子载荷,以及原因子轴和(最大方差)旋转后因子轴,示于图 9.2 中。

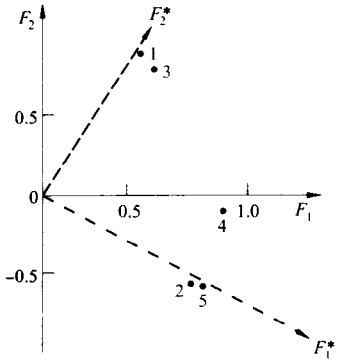


图 9.2 假设的营销数据的因子旋转

由于限定初始值需满足惟一性条件 $\hat{\mathbf{L}}'\hat{\Psi}^{-1}\hat{\mathbf{L}}$ 为对角阵,则用最大似然得到的载荷,其因子载荷旋转受到特别推荐。惟一性条件可方便计算,但不一定引出易于阐述的因子。

显示板 9.1 利用 PROC FACTOR 对例 9.9 的 SAS 分析

```
title 'Factor Analysis';
data consumer(type=corr);
_type_='CORR';
input _name_ $ taste money flavor snack energy;
cards;
taste    .   1.00  .     .     .     .
money        0.02  1.00  .     .     .
flavor       0.96  0.13  1.00  .     .
snack        0.42  0.71  0.50  1.00  .
energy       0.01  0.85  0.11  0.79  1.00
;
proc factor res data=consumer
     method=prin nfact=2rotate=varimax preplot plot;
var taste money flavor snack energy;
```

PROGRAM COMMANDS

显示板 9.1(续)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

OUTPU

Initial Factor Method: Principal Components

Prior Communality Estimates: ONE

Eigenvalues of the Correlation Matrix: Total=5 Average=1

	1	2	3	4	5
Eigenvalue	2.853090	1.806332	0.204490	0.102409	0.033677
Difference	1.046758	1.601842	0.102081	0.068732	
Proportion	0.5706	0.3613	0.0409	0.0205	0.0067
Cumulative	0.5706	0.9319	0.9728	0.9933	1.0000

2 factors will be retained by the NFACTOR criterion.

Factor Pattern

	FACTOR1	FACTOR2
TASTE	0.55986	0.81610
MONEY	0.77726	−0.52420
FLAVOR	0.64534	0.74795
SNACK	0.93911	−0.10492
ENERGY	0.79821	−0.54323

Final Communality Estimates: Total=4.659423

TASTE	MONEY	FLAVOR	SNACK	ENERGY
0.97961	0.878920	0.975883	0.892928	0.932231

Rotation Method: Varimax

Rotated Factor Pattern

	FACTOR1	FACTOR2
TASTE	0.01970	0.98948
MONEY	0.93744	−0.01123
FLAVOR	0.12856	0.97947
SNACK	0.84244	0.42805
ENERGY	0.96539	−0.01563

Variance explained by each factor

FACTOR1	FACTOR2
2.537396	2.122027

例 9.10 （股票价格数据的旋转载荷）

表 9.8 表示对例 8.5 和 9.5 的股票价格数据的因子载荷的初始值估计和最大似然估计。假定 $m=2$ 的因子模型，特殊方差估计和由各因子解释的（标准化）样本总方差的累积

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

比例，也已给出。

由未旋转载荷所提出的因子阐述，已在例 9.5 给出。我们确认过市场因子和行业因子。

旋转载荷表明化学股票（联合碳化物、杜邦及阿莱德化学）在第一因子上高载荷，而石油股票（埃克森和德士古）在第二因子上高载荷。（虽然没显示从主成分解得到的旋转载荷，对它们也能观测到相同现象。）这两个旋转因子一起将行业区分开来。想标明这些因子是困难的。因子 1 代表那些引起化学股票一起波动的独特经济力量，因子 2 代表影响石油类股票的经济条件。

如我们已经注意到的，一个一般因子（也即所有变量在其上都有高载荷的因子）倾向于在旋转后被破坏掉了。为了这个缘故，在出现一般因子时，有时在进行正交旋转时，将一般因子载荷固定住。①

表 9.8

变量	因子载荷的最大似然估计 F_1	F_2	旋转因子载荷估计 F_1^*	F_2^*	特殊方差 $\hat{\psi}_i=1-\hat{h}_i^2$
1. 阿莱德化学	0.684	0.189	0.601	0.377	0.50
2. 杜邦	0.694	0.517	0.850	0.164	0.25
3. 联合碳化物	0.681	0.248	0.643	0.335	0.47
4. 埃克森	0.621	−0.073	0.365	0.507	0.61
5. 德士古	0.792	−0.442	0.208	0.883	0.18
所解释的（标准化）样本总方差的累积比例	0.485	0.598	0.335	0.598	

例 9.11 （奥林匹克十项全能运动数据的旋转载荷）

例 9.6 中对奥林匹克十项全能运动数据给出了估计的因子载荷和特殊方差。对一个 $m=4$ 的因子模型，既用主成分法也用最大似然解法，导出了这些量。所有隐含因子的阐述并未马上就清楚明了。为弄清旋转变量载荷是否会进一步加深认识，我们做过最大方差旋转[见式(9-45)]。表 9.9 中除了特殊方差外，还有对 $m=4$ 因子解的最大方差旋转载荷。略去估计载荷，旋转只影响由各因子解释的样本总方差之比的分布。由所有因子解释的样本总方差之累积比，没有改变。

对两种解法的旋转因子载荷表明相同的潜在性质，虽然因子 1 和 2 不在同一次序上。我们看到推铅球、铁饼和标枪在一个因子上有高载荷，并且依照林登[21]的意见称此因子为暴发性臂力强度。类似地，跳高、110 米栏、撑竿跳，以及——在某种程度上——跳远，都在另一因子上有高载荷。林登把这个因子标为暴发性腿部强度。100 米、400 米，以及——还是在某种程度上——跳远在第三个因子上有高载荷，这个因子可以叫做跑的速度因子。最后，在第四个因子上，1500 米有高载荷而 400 米有中等载荷。林登称此因子为“跑的耐

① 某些一般目的因子分析程序允许人们固定与某些因子有关的载荷而旋转其余因子。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

力”因子。正如他所注意到的，“这项研究所指出的基本功能大致是和田赛运动员和径赛运动员的传统分类，保持一致。”

表 9.9

变量	主成分					最大似然				
	旋转因子载荷估计，$\hat{l}_{ij}^*$				特殊方差	旋转因子载荷估计，$\hat{l}_{ij}^*$				特殊方差
	F_1^*	F_2^*	F_3^*	F_4^*	$\hat{\psi}_i=1-\hat{h}_i^2$	F_1^*	F_2^*	F_3^*	F_4^*	$\hat{\psi}_i=1-\hat{h}_i^2$
1. 100 米	0.884	0.136	0.156	−0.113	0.16	0.167	0.857	0.246	−0.138	0.16
2. 跳远	0.631	0.194	0.515	−0.006	0.30	0.240	0.477	0.580	0.011	0.38
3. 投铅球	0.245	0.825	0.223	−0.148	0.19	0.966	0.154	0.200	−0.058	0.00
4. 跳高	0.239	0.150	0.750	0.076	0.35	0.242	0.173	0.632	0.113	0.50
5. 400 米	0.797	0.075	0.102	0.468	0.13	0.055	0.709	0.236	0.330	0.33
6. 110 米跨栏	0.404	0.153	0.635	−0.170	0.38	0.205	0.261	0.589	−0.071	0.54
7. 铁饼	0.186	0.814	0.147	−0.079	0.28	0.697	0.133	0.180	−0.009	0.46
8. 撑竿跳高	−0.036	0.176	0.762	0.217	0.34	0.137	0.078	0.513	0.116	0.70
9. 标枪	−0.048	0.735	0.110	0.141	0.43	0.416	0.019	0.175	0.002	0.80
10. 1500 米	0.045	−0.041	0.112	0.934	0.11	−0.055	0.056	0.113	0.990	0.00
所解释的样本总方差的累积比例	0.21	0.42	0.61	0.73		0.18	0.34	0.50	0.61	

图 9.3 中为对因子配对(1,2)和(1,3)旋转最大似然载荷的图。图上这些点一般沿因子轴分组。旋转主成分载荷的图也十分类似。

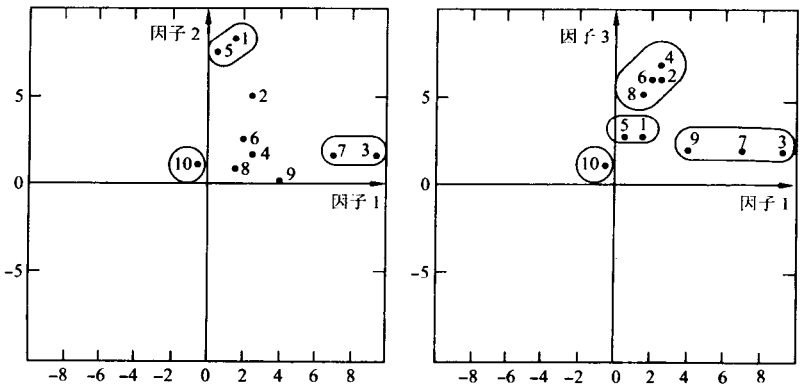


图 9.3 对十项全能运动数据因子配对(1,2)和(1,3)的旋转最大似然估计载荷

(图中数字对应于变量)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

斜交旋转

正交旋转适合于公共因子假定是相互独立的因子模型。除正交旋转外，许多研究社会科学的人也考虑斜交(非正交)旋转。后者常常是在人们仔细观察因子载荷估计之后而建议采用的，并且不遵循我们先前假定的模型。不过，在因子分析中，斜交旋转经常是有用的助手。

如果我们把 m 个公共因子看作坐标轴，有 m 个坐标$(\hat{l}_{i1},\hat{l}_{i2},\cdots,\hat{l}_{im})$的点代表在**因子空间**中第 i 个变量的位置。假定把变量分成没有重叠的簇，旋转到一个简单结构的正交旋转，就与坐标轴的刚性旋转是对应的，它使得这些坐标轴在旋转之后尽可能近地通过这些簇。而旋转到简单结构的斜交旋转，则对应于一个非刚性的旋转坐标系，使得旋转后的坐标轴不再垂直，但(近似地)通过这些簇。斜交旋转寻求用最少数量的因子——最好是单一因子——去表达各个变量。有些资料(例如见[12]或[20])讨论斜交旋转，本书将不再多述。

9.5 因子得分

因子分析中，感兴趣的通常是因子模型的参数。然而，公共因子的估计值，称为**因子得分**，也是我们需要的。这些量可作为随后分析的输入值，也常常用于寻找特征。

因子得分不是在通常意义下对未知参数的估计，相反地，它们是对不能观测的随机因子向量 $\mathbf{F}_j$ 的值的估计，$j=1,2,\cdots,n$。也即，因子得分

$$\hat{\mathbf{f}}_j = \text{由 } \mathbf{F}_j(\text{第 } j \text{ 种情况}) \text{ 达到的 } \mathbf{f}_j \text{ 的估计值}$$

由于不能观测的量 $\mathbf{f}_j$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 在数目上超过被观测的量 $\mathbf{x}_j$，因此想要作出估计是复杂的。为克服这一困难，对估计因子值问题，一些颇具启发性且又合理的方法已经取得进展。我们描述其中的两个方法。

两种因子得分方法都有两个共同的要素：

1. 它们把估计的因子载荷 $\hat{l}_{ij}$和特殊方差 $\hat{\psi}_i$ 当作真值处理。
2. 它们涉及原始数据的线性变换，可能是做中心化或标准化。

通常，不用原始的载荷估计而是用旋转后的载荷估计来计算因子得分。本节所给的计算公式，在旋转载荷代替未旋转载荷时，是不变的。所以，我们将在它们之间不作区分。

加权最小二乘法

首先假设对于因子模型

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}} - \underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\mu}} = \underset{(p\times m)}{\mathbf{L}}\underset{(m\times 1)}{\mathbf{F}} + \underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

均值向量 $\boldsymbol{\mu}$，因子载荷阵 $\mathbf{L}$ 以及特殊方差阵 $\boldsymbol{\Psi}$ 都是已知的。进而认为特殊因子 $\boldsymbol{\varepsilon}'=[\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_p]$是误差。既然 $\mathrm{Var}(\varepsilon_i)=\psi_i,(i=1,2,\cdots,p)$不必彼此相等，巴特利特[3]已建议用加权最小二乘估计公共因子的值。

用误差的方差的倒数作权系数，其误差平方的加权和是

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{\varepsilon_i^2}{\psi_i} = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{L}\mathbf{f})'\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{L}\mathbf{f}) \tag{9-47}$$

巴特利特建议，选 $\mathbf{f}$ 的估计值 $\hat{\mathbf{f}}$ 以使式(9-47)最小化。解(见练习 7.3)为

$$\hat{\mathbf{f}} = (\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})^{-1}\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \tag{9-48}$$

在式(9-48)的推动下，我们取估计值 $\hat{\mathbf{L}}$，$\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{x}}$ 作为真值，并且得到对第 j 种情形的因子得分为

$$\hat{\mathbf{f}}_j = (\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1}\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) \tag{9-49}$$

当 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 是由最大似然方法决定时，这些估计值必须满足惟一性条件：$\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}}=\hat{\boldsymbol{\Delta}}$ 是一对角阵。于是我们有：

从最大似然估计用加权最小二乘得到的因子得分

$$\left.\begin{aligned}
\hat{\mathbf{f}}_j &= (\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1}\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}(\mathbf{x}_j - \hat{\boldsymbol{\mu}}) \\
&= \hat{\boldsymbol{\Delta}}^{-1}\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}), \qquad j=1,2,\cdots,n \\
&\text{或者，若将相关矩阵因子化，} \\
\hat{\mathbf{f}}_j &= (\hat{\mathbf{L}}_z'\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z^{-1}\hat{\mathbf{L}}_z)^{-1}\hat{\mathbf{L}}_z'\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z^{-1}\mathbf{z}_j \\
&= \hat{\boldsymbol{\Delta}}_z^{-1}\hat{\mathbf{L}}_z'\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z^{-1}\mathbf{z}_j, \qquad j=1,2,\cdots,n
\end{aligned}\right\} \tag{9-50}$$

其中，同式(8-25)中一样，$\mathbf{z}_j=\mathbf{D}^{-1/2}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$，且 $\hat{\boldsymbol{\rho}}=\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_z'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z$。

由式(9-50)产生的因子得分有样本均值向量 $\mathbf{0}$ 和零样本协方差。(见练习 9.16。)

若式(9-50)中的原载荷改用旋转载荷 $\hat{\mathbf{L}}^*=\hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}$，则相应的因子得分 $\hat{\mathbf{f}}_j^*$ 与 $\hat{\mathbf{f}}_j$ 有关，关系为 $\hat{\mathbf{f}}_j^*=\mathbf{T}'\hat{\mathbf{f}}_j$，$j=1,2,\cdots,n$。

评注 若由主成分方法估计因子载荷，那么习惯上用未加权(普通的)最小二乘过程生成因子得分。毫无疑问，这相当于假定 ψ_i 相等或近似相等。于是因子得分为

$$\hat{\mathbf{f}}_j = (\hat{\mathbf{L}}'\hat{\mathbf{L}})^{-1}\hat{\mathbf{L}}'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}})$$

或者对标准化数据为

$$\hat{\mathbf{f}}_j = (\hat{\mathbf{L}}_z'\hat{\mathbf{L}}_z)^{-1}\hat{\mathbf{L}}_z'\mathbf{z}_j$$

既然 $\mathbf{L}=\left[\sqrt{\hat{\lambda}_1}\mathbf{e}_1 \vdots \sqrt{\hat{\lambda}_2}\mathbf{e}_2 \vdots \cdots \vdots \sqrt{\hat{\lambda}_m}\mathbf{e}_m\right]$[见式(9-15)]，我们有

$$\hat{\mathbf{f}}_j = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{\hat{\lambda}_1}}\hat{\mathbf{e}}_1'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) \\ \frac{1}{\sqrt{\hat{\lambda}_2}}\hat{\mathbf{e}}_2'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) \\ \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{\hat{\lambda}_m}}\hat{\mathbf{e}}_m'(\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \tag{9-51}$$

对于这些因子得分，有

$$\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\hat{\mathbf{f}}_j = \mathbf{0} \qquad \text{(样本均值)}$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}\hat{\mathbf{f}}_j\hat{\mathbf{f}}_j' = \mathbf{I} \qquad \text{（样本方差）}$$

比较式(9-51)和式(8-21)，从 $\mathbf{x}_j$ 来看，$\hat{\mathbf{f}}_j$ 一点也不比前 m 个(尺度化调整后)主成分多。

回归法

再从原因子模型 $\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}=\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon}$ 开始，我们最初把载荷矩阵 $\mathbf{L}$ 和特殊方差矩阵 $\boldsymbol{\Psi}$ 都是作为已知处理。当公共因子 $\mathbf{F}$ 和特殊因子(或误差)$\boldsymbol{\varepsilon}$ 为联合正态分布，由式(9-3)给出其均值和协方差，则线性组合 $\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}=\mathbf{LF}+\boldsymbol{\varepsilon}$ 服从 $N_p(\mathbf{0},\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})$ 分布。(见结论 4.3。)而且，$\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu}$ 和 $\mathbf{F}$ 的联合分布是 $N_{m+p}(\mathbf{0},\boldsymbol{\Sigma}^*)$，其中

$$\underset{(m+p)\times(m+p)}{\boldsymbol{\Sigma}^*} = \left[\begin{array}{c:c} \underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{LL}' + \boldsymbol{\Psi} & \underset{(p\times m)}{\mathbf{L}} \\ \hdashline \underset{(m\times p)}{\mathbf{L}'} & \underset{(m\times m)}{\mathbf{I}} \end{array}\right] \tag{9-52}$$

而 $\mathbf{0}$ 是一个 $(m+p)\times 1$ 的零向量。利用结论 4.6，我们发现 $\mathbf{F}|\mathbf{X}$ 的条件分布也是多元正态，且

$$\text{均值} = E(\mathbf{F}|\mathbf{x}) = \mathbf{L}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{L}'(\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}) \tag{9-53}$$

$$\text{协方差} = \mathrm{Cov}(\mathbf{F}|\mathbf{x}) = \mathbf{I} - \mathbf{L}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{L} = \mathbf{I} - \mathbf{L}'(\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})^{-1}\mathbf{L} \tag{9-54}$$

式(9-53)中的量 $\mathbf{L}'(\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})^{-1}$ 是变量的因子在(多元)回归里的系数。这些系数的估计值产生的因子得分与多元回归分析中条件均值的估计类似。(见第 7 章。)因而，已知任意观测值向量 $\mathbf{x}_j$，并取最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 为真值，则我们看到第 j 个因子得分向量由

$$\hat{\mathbf{f}}_j = \hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}) = \hat{\mathbf{L}}'(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}})^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}), \qquad j=1,2,\cdots,n \tag{9-55}$$

给出。利用矩阵恒等式(见练习 9.6)

$$\underset{(m\times p)}{\hat{\mathbf{L}}'}\underset{(p\times p)}{(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}})^{-1}} = \underset{(m\times m)}{(\mathbf{I}+\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1}}\underset{(m\times p)}{\hat{\mathbf{L}}'}\underset{(p\times p)}{\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}} \tag{9-56}$$

可以简化式(9-55)中 $\hat{\mathbf{f}}_j$ 的计算。这个恒等式允许我们将由回归过程生成的因子得分(9-55)与加权最小二乘过程生成的因子得分[见式(9-50)]作比较。我们临时记前者为 $\hat{\mathbf{f}}_j^R$ 而后者为 $\hat{\mathbf{f}}_j^{LS}$，则利用式(9-56)我们得到

$$\hat{\mathbf{f}}_j^{LS} = (\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1}(\mathbf{I}+\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})\mathbf{f}_j^R = (\mathbf{I}+(\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1})\mathbf{f}_j^R \tag{9-57}$$

对最大似然估计 $(\hat{\mathbf{L}}'\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}})^{-1}=\boldsymbol{\Delta}^{-1}$，并且若此对角阵的元接近于 0，则回归和广义最小二乘法将给出近于相同的因子得分。

为努力减小对因子个数的(可能的)不正确决定带来的影响，实际工作者倾向于用 $\mathbf{S}$(原样本协方差矩阵)代替 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 来计算因子得分。于是我们有：

用回归得到因子得分

$$\left.\begin{array}{ll} \hat{\mathbf{f}}_j=\hat{\mathbf{L}}'\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}), & j=1,2,\cdots,n \\ \text{或者，若将相关矩阵因子化，} & \\ \hat{\mathbf{f}}_j=\hat{\mathbf{L}}_z'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z}_j, & j=1,2,\cdots,n \end{array}\right\} \tag{9-58}$$

其中，见式(8-25)，

$$\mathbf{z}_j=\mathbf{D}^{-1/2}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}}) \quad \text{和} \quad \hat{\boldsymbol{\rho}}=\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_z'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

如用旋转载荷 $\hat{\mathbf{L}}^* = \hat{\mathbf{L}}\mathbf{T}$ 代替式(9-58)中的原载荷，则再次得到因子得分 $\hat{\mathbf{f}}_j^*$ 与 $\hat{\mathbf{f}}_j$ 有关，关系式为

$$\hat{\mathbf{f}}_j^* = \mathbf{T}'\hat{\mathbf{f}}_j, \qquad j = 1,2,\cdots,n$$

用两个不同计算方法生成在同一因子上的因子得分之间的样本相关系数，可提供一个它们因子得分间一致性的数值测度。在介绍的所有方法中，还没有一个可推荐为具有全面的优势。

例 9.12 （计算因子得分）

我们将详述用最小二乘法和回归法计算因子得分，数据采用例 9.10 中讨论的股票价格数据。**R** 的最大似然解已给出估计的旋转载荷和特殊方差

$$\hat{\mathbf{L}}_z^* = \begin{bmatrix} 0.601 & 0.377 \\ 0.850 & 0.164 \\ 0.643 & 0.335 \\ 0.365 & 0.507 \\ 0.208 & 0.883 \end{bmatrix} \quad 和 \quad \hat{\boldsymbol{\Psi}}_z = \begin{bmatrix} 0.50 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.25 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.47 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.61 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.18 \end{bmatrix}$$

标准化观测值向量

$$\mathbf{z}' = [0.50,\ -1.40,\ -2.0,\ -0.70,\ 1.40]$$

产生在因子 1 和 2 上的下列得分：

加权最小二乘(9-50)：

$$\hat{\mathbf{f}} = (\hat{\mathbf{L}}_z^{*\prime}\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z^{-1}\hat{\mathbf{L}}_z^*)^{-1}\hat{\mathbf{L}}_z^{*\prime}\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z^{-1}\mathbf{z} = \begin{bmatrix} -1.8 \\ 2.0 \end{bmatrix}$$

回归(9-58)：

$$\hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{L}}_z^{*\prime}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z} = \begin{bmatrix} 0.187 & 0.657 & 0.222 & 0.050 & -0.210 \\ 0.037 & -0.185 & 0.013 & 0.107 & 0.864 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.50 \\ -1.40 \\ -0.20 \\ -0.70 \\ 1.40 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} -1.2 \\ 1.4 \end{bmatrix}$$

此时，两种方法产生略为不同的结果。用式(9-58)得到的全部回归因子得分，示于图 9.4。

评注 可以十分简单地将有相当好直观性的因子得分作图。在一个因子上有高载荷(比如说大于 0.40)的变量分为一组 。将此组变量的(标准化)观测值求和，结合因子得分的符号，就形成因子 1 的得分，因子 2 的因子得分是在因子 2 上有高载荷的变量所对应的标准化观测值之和，如此继续下去。用这些简单的因子得分代替标准化数据，就完成了数据压缩。简单因子得分与用更复杂的最小二乘法和回归法得到的因子得分，常常是高度相关的。

例 9.13 （从因子分析分组生成简单综合得分）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

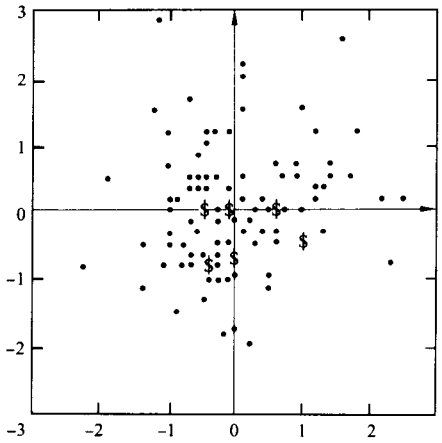


图 9.4　股票价格数据利用式(9-58)在因子 1 和 2 上的因子得分(因子载荷的最大似然估计)

例 9.4 中股票价格数据的主成分因子分析产生载荷估计

$$\tilde{\mathbf{L}} = \begin{bmatrix} 0.784 & -0.216 \\ 0.773 & -0.458 \\ 0.795 & -0.234 \\ 0.712 & 0.473 \\ 0.712 & 0.524 \end{bmatrix} \quad 和 \quad \tilde{\mathbf{L}}^* = \tilde{\mathbf{L}}\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 0.746 & 0.323 \\ 0.889 & 0.128 \\ 0.766 & 0.316 \\ 0.258 & 0.815 \\ 0.226 & 0.854 \end{bmatrix}$$

对各个因子,$\tilde{\mathbf{L}}$ 中大载荷的大小都取为 1,而略去小载荷,这样作为综合,我们生成线性组合

$$\hat{f}_1 = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5$$
$$\hat{f}_2 = x_4 + x_5 - x_2$$

实际上我们将标准化这些新变量。

如果不用 $\tilde{\mathbf{L}}$,从方差最大旋转载荷 $\tilde{\mathbf{L}}^*$ 着手,简单因子得分是

$$\hat{f}_1 = x_1 + x_2 + x_3$$
$$\hat{f}_2 = x_4 + x_5$$

高载荷和可忽略的载荷的认定实际上是相当主观的,使题材有意义的线性混合更为可取。

虽然在因子分析中常常假定变量为多元正态的,但是对大量的变量来说,证明这个假定是很困难的。像我们在第 4 章指出的那样,边际变换可以帮助我们。类似地,因子得分可以是也可以不是正态分布的。双变量因子得分散布图可以产生各种各样非椭圆形状的图形。在运用因子得分作其他分析之前,应对其图形做检查。它们可以揭示出远离中心的值和(可能的)非正态性的程度。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

9.6 因子分析展望和建议

在因子分析研究中，必须做出许多决策。大概最重要的决策是选择公共因子数 m。虽然已知 m 时对模型充分性有大样本检验，但这只是对近似正态分布的数据适用。而且，若变量数和观测数都大，检验将会很有把握地拒绝小 m 的模型，而正是此时因子分析可提供一个有用的近似。最为常见的是，m 最后的选定基于下述考虑的综合：(1) 所解释的样本方差的比例，(2) 题材知识，以及(3)结论的"合理程度"。

解法和旋转类型的选择并非决定性的决策，事实上，大多数满意的因子分析都试用了不止一种旋转并且所有结果实质上都确认同一因子结构。

在现阶段，因子分析仍然是一种艺术，并且尚没有一种单一的策略可以获得完美的成功。我们建议和详细阐述一种合情合理的选择：

1. 执行主成分因子分析。这个方法对第一次考察数据尤其合适。(不要求 **R** 或 **S** 是非奇异的)。

(a) 画因子得分图，找可疑观测值。

计算对各观测值的标准化得分和 4.6 节所述的平方距离。

(b) 试用最大方差旋转。

2. 执行包括最大方差旋转在内的最大似然因子分析。

3. 比较从两个因子分析得到的解。

(a) 载荷的分组方式是否相同？

(b) 画出从主成分得到的因子得分图，对比从最大似然分析得到的图形。

4. 对其他的公共因子数 m，重复前三个步骤。有必要将额外的因子放入来理解和阐述该数据吗？

5. 对大数据集，将它们分为两半并且对每一半都执行因子分析。比较这两个结果，并与从完整数据集所得结果做比较，以检查解的稳定性。(数据可以随机剖分或是把前一半放在一组中，把后一半放在另一组中。)

例 9.14 (鸡的骨骼数据的因子分析)

我们介绍对白来亨鸡的骨骼和颅骨测量的几个因子分析的结果，原始数据取自邓恩(Dunn)[10]。邓恩数据的因子分析，起初由赖特(Wright)[26]研究，他从跟我们不同的相关矩阵着手分析。

全数据集由对鸡骨骼大小的 $n=276$ 个测量值(数据)组成：

$$\text{头：}\begin{cases} X_1 = \text{颅骨长度} \\ X_2 = \text{颅骨幅宽} \end{cases}$$

$$\text{腿：}\begin{cases} X_3 = \text{股骨长} \\ X_4 = \text{胫骨长} \end{cases}$$

$$\text{翅：}\begin{cases} X_5 = \text{肱骨长} \\ X_6 = \text{尺骨长} \end{cases}$$

把样本相关矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}=\begin{bmatrix}1.000 & 0.505 & 0.569 & 0.602 & 0.621 & 0.603\\ 0.505 & 1.000 & 0.422 & 0.467 & 0.482 & 0.450\\ 0.569 & 0.422 & 1.000 & 0.926 & 0.877 & 0.878\\ 0.602 & 0.467 & 0.926 & 1.000 & 0.874 & 0.894\\ 0.621 & 0.482 & 0.877 & 0.874 & 1.000 & 0.937\\ 0.603 & 0.450 & 0.878 & 0.894 & 0.937 & 1.000\end{bmatrix}$$

用主成分法和最大似然法对 $m=3$ 因子模型作因子分析。结果示于表 9.10①。

表 9.10　鸡的骨骼数据的因子分析

主成分法

变　量	因子载荷估计			旋转因子载荷估计			
	F_1	F_2	F_3	F_1^*	F_2^*	F_3^*	$\hat{\psi}_i$
1. 颅骨长度	0.741	0.350	0.573	0.355	0.244	0.902	0.00
2. 颅骨幅宽	0.604	0.720	−0.340	0.235	0.949	0.211	0.00
3. 股骨长	0.929	−0.233	−0.075	0.921	0.164	0.218	0.08
4. 胫骨长	0.943	−0.175	−0.067	0.904	0.212	0.252	0.08
5. 肱骨长	0.948	−0.143	−0.045	0.888	0.228	0.283	0.08
6. 尺骨长	0.945	−0.189	−0.047	0.908	0.192	0.264	0.07
所解释的(标准化)样本总方差的累积比例	0.743	0.873	0.950	0.576	0.763	0.950	

最大似然法

变　量	因子载荷估计			旋转因子载荷估计			
	F_1	F_2	F_3	F_1^*	F_2^*	F_3^*	$\hat{\psi}_i$
1. 颅骨长度	0.602	0.214	0.286	0.467	0.506	0.128	0.51
2. 颅骨幅宽	0.467	0.177	0.652	0.211	0.792	0.050	0.33
3. 股骨长	0.926	0.145	−0.057	0.890	0.289	0.084	0.12
4. 胫骨长	1.000	0.000	−0.000	0.936	0.345	−0.073	0.00
5. 肱骨长	0.874	0.463	−0.012	0.831	0.362	0.396	0.02
6. 尺骨长	0.894	0.336	−0.039	0.857	0.325	0.272	0.09
所解释的(标准化)样本总方差的累积比例	0.667	0.738	0.823	0.559	0.779	0.823	

旋转之后，求解的两种方法出现略为不同的结果。将注意力集中于主成分法和被解释的样本总方差的累积比，我们看到三因子解是有道理的。第三个因子解释附加样本变差的一个“显著的”比例。第一个因子表现为体格大小因子，为翅和腿的大小所左右。第二和第三因子，总体上描绘颅骨大小，可以分别给予与变量相同的名子，即颅骨幅宽和颅骨长度。

① 注意在最大似然解中胫骨长的估计特殊方差为 0.00。这表明最大化似然函数可以产生海伍德情况。重做我们的结果的读者若使用 SAS 或类似软件，应该试一下 Hey (wood)选择。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

旋转最大似然因子载荷与用主成分法生成的因子载荷对第一因子是一致的，但对第二和第三因子不一致。对最大似然法，第二因子是代表头部大小。第三因子含义不清，而且可能是不需要的。

对保留三个或更少因子的进一步支持，由从最大似然估计得到的残差阵提供：

$$\mathbf{R}-\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_z'-\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z=\begin{bmatrix} 0.000 & & & & & \\ -0.000 & 0.000 & & & & \\ -0.003 & 0.001 & 0.000 & & & \\ 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & & \\ -0.001 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.000 & \\ 0.004 & -0.001 & -0.001 & 0.000 & -0.000 & 0.000 \end{bmatrix}$$

该矩阵的全部元都很小。我们将继续探索此例的 $m=3$ 因子模型。$m=2$ 因子模型在练习 9.10 中考虑。

从带有最大似然估计旋转的式(9-58)产生的对因子 1 和因子 2 的因子得分，示于图 9.5 中。该图可让我们确认那些出于某种原因与其余观测值不一致的观测值。可能的离群值在图上已圈出。

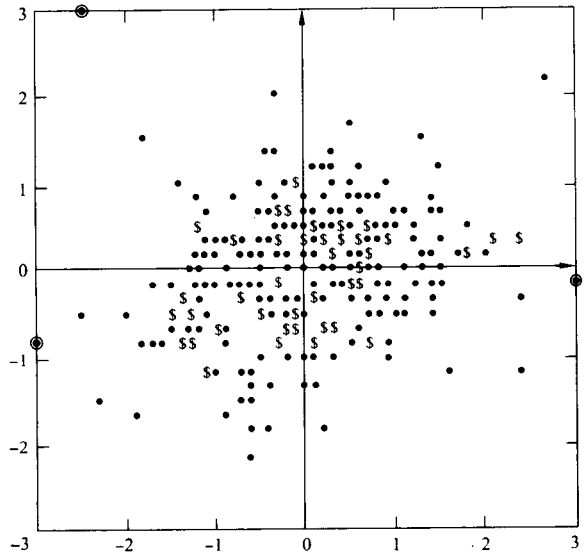


图 9.5　鸡的骨骼数据前两个因子的因子得分

画出用主成分和最大似然估计因子载荷而得到因子得分配对的图形也是有意义的。对鸡的骨骼数据，因子得分配对的图示于图 9.6。如果在某个因子上诸载荷一致，则此得分配对将紧紧聚集在通过原点的 45°直线附近。不一致的那些载荷，将产生偏离这一模式的因子得分。如果后一情况出现，它通常与最后面的因子有关，并且可能表明因子数太大了。也即最后的那些因子没有多大意义。这似乎正是鸡的骨骼数据中第三因子出现的情况，如在图 9.6 的(c)图所示。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

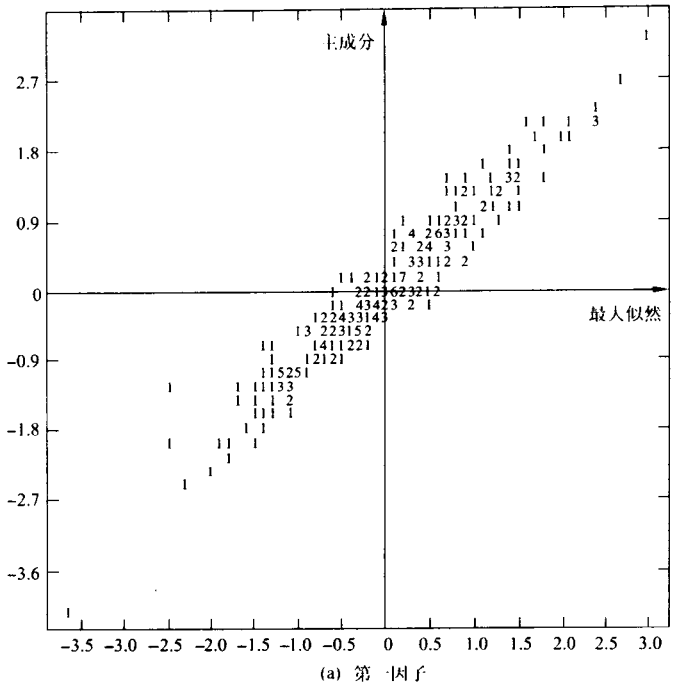


图 9.6　鸡的骨骼数据的因子得分配对

（用主成分法和最大似然法估计载荷）

利用从两种解法估计出的载荷得到的因子得分配对图，也是探测离群值的好工具。若对某因子的载荷趋向一致，离群值将在 45°直线的邻域中出现，但却远离原点和其余点聚集处。从图 9.6 的(b)图可以清楚看到，276 个观测值中只有一个点与其他点不一致。它有一个少见的大 F_2 得分。要是除去此点[39.1，39.3，75.7，115，73.4，69.1]，并重作分析，载荷不会有明显改变。

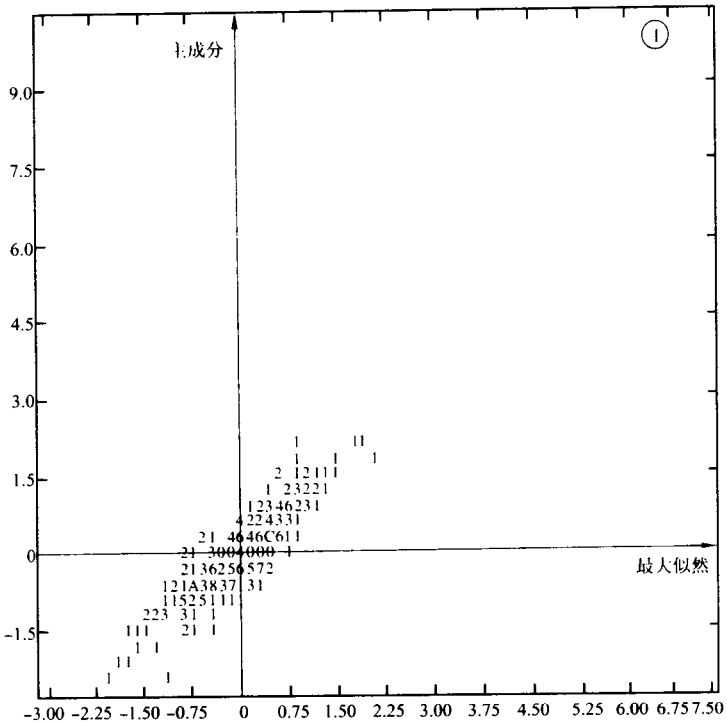
在数据集大时，应将它分为两个(大致)相等的组，并且在每个组上完成因子分析。这些分析的结果可以彼此作比较，还可以与全部数据集的分析作比较，以检查解的稳定性。如果结果相互一致，对解的信任程度就增强了。

鸡的骨骼数据曾被分为 $n_1=137$ 个和 $n_2=139$ 个观察值的两组。得到的样本相关矩阵为

$$\mathbf{R}_1=\begin{bmatrix}1.000 & & & & & \\ 0.696 & 1.000 & & & & \\ 0.588 & 0.540 & 1.000 & & & \\ 0.639 & 0.575 & 0.901 & 1.000 & & \\ 0.694 & 0.606 & 0.844 & 0.835 & 1.000 & \\ 0.660 & 0.584 & 0.866 & 0.863 & 0.931 & 1.000\end{bmatrix}$$

及

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com



(b) 第二因子

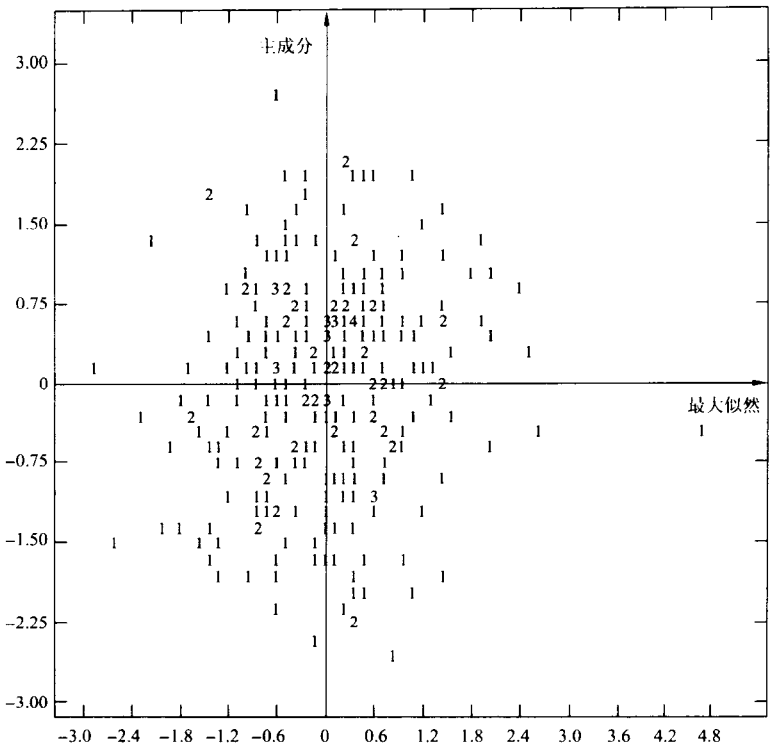
图 9.6 （续）

$$\mathbf{R}_2 = \begin{bmatrix} 1.000 & & & & & \\ 0.366 & 1.000 & & & & \\ 0.572 & 0.352 & 1.000 & & & \\ 0.587 & 0.406 & 0.950 & 1.000 & & \\ 0.587 & 0.420 & 0.909 & 0.911 & 1.000 & \\ 0.598 & 0.386 & 0.894 & 0.927 & 0.940 & 1.000 \end{bmatrix}$$

旋转后的估计载荷、特殊方差及对 $m=3$ 因子模型主成分解所解释的(标准化)样本总方差的比例，在表 9.11 中给出。

对鸡的骨骼测量值的两组的结果很类似。因子 F_2^* 和 F_3^* 的颅骨长度和颅骨幅宽的标号互换，但它们一起代表头部大小。第一因子 F_1^* 再次表现为是体格大小因子，受腿和翅膀控制。与对整个数据集的主成分分析给出的结果，有着同样的阐述。解是相当稳定的，并且我们十分相信，大载荷是“真实的”。然而像我们已经指出过的，三个因子可能是太多了。一个单因子或双因子模型对鸡的骨骼数据已是十分充分的，我们鼓励大家重作因子分析，并采用更少因子和变换解法。(见练习 9.10。)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com



(c) 第三因子

图 9.6 （续）

表 9.11

	第一组 ($n_1=137$ 个观测值) 旋转因子载荷估计				第二组 ($n_2=139$ 个观测值) 旋转因子载荷估计			
变　量	F_1^*	F_2^*	F_3^*	$\tilde{\psi}_i$	F_1^*	F_2^*	F_3^*	$\tilde{\psi}_i$
1. 颅骨长度	0.360	0.361	0.853	0.01	0.352	0.921	0.167	0.00
2. 颅骨幅宽	0.303	0.899	0.312	0.00	0.203	0.145	0.968	0.00
3. 股骨长	0.914	0.238	0.175	0.08	0.930	0.239	0.130	0.06
4. 胫骨长	0.877	0.270	0.242	0.10	0.925	0.248	0.187	0.05
5. 肱骨长	0.830	0.247	0.395	0.11	0.912	0.252	0.208	0.06
6. 尺骨长	0.871	0.231	0.332	0.08	0.914	0.272	0.168	0.06
所解释的(标准化)样本总方差的累积比例	0.546	0.743	0.940		0.593	0.780	0.962	

因子分析对行为科学和社会科学有着巨大的直观上的吸引力。在这些领域很自然会认为，对动物和人类过程的多变量观测值是潜在的、不能观测的“特性”的表现形式。因子分析提供了一条途径，用这些特性来解释行为观察变量。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在最后我们要说，因子分析仍然是十分主观的。我们的例子以及大多数出版资料中，因子分析模型都用少数可阐述因子提供合理解释。实际上，绝大多数因子分析并没产生如此明确的结果。不幸的是，评价因子分析质量的法则尚未很好量化，质量问题似乎只好依赖一个

"哇"准则

如果在仔细检查因子分析的时候，研究者能够喊出"哇，我明白了这些因子"的时候，就可看作是成功运用了因子分析。

9.7 构造方程模型

构造方程模型是用于说明特殊现象的线性方程组，这些现象用它们假定的因果变量来表达。在它们最一般的形式中，允许模型里有不能直接测量的变量。构造方程模型特别有助于研究社会科学和行为科学，并且已经用于研究社会地位和成就之间的关系、公司盈利性的决定因素、就业歧视、社会活动方案的效果，以及研究其他有趣的机制。（要增加对理论和应用的认识，见[2]，[5]，[6]，[7]，[9]，[11]，[13]，[14]，[15]，[17]及[23]）。

用于说明、拟合和评价构造方程模型的计算机软件，像 LISREL (Linear Structural Relationships)系统，已由朱瑞司柯克(Jöreskog)和索尔包莫(Sörbom)开发出来，并且现在广泛采用。（见[18]。）

LISREL 模型

采用朱瑞司柯克和索尔包莫[18]的记号，LISREL 模型由下列方程给出：

$$\underset{(m\times 1)}{\boldsymbol{\eta}} = \underset{(m\times m)(m\times 1)}{\mathbf{B}\boldsymbol{\eta}} + \underset{(m\times n)(n\times 1)}{\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\xi}} + \underset{(m\times 1)}{\boldsymbol{\zeta}} \tag{9-59}$$

$$\begin{aligned} \underset{(p\times 1)}{\mathbf{Y}} &= \underset{(p\times m)(m\times 1)}{\boldsymbol{\Lambda}_y\boldsymbol{\eta}} + \underset{(p\times 1)}{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \underset{(q\times 1)}{\mathbf{X}} &= \underset{(q\times n)(n\times 1)}{\boldsymbol{\Lambda}_x\boldsymbol{\xi}} + \underset{(q\times 1)}{\boldsymbol{\delta}} \end{aligned} \tag{9-60}$$

且

$$\begin{aligned} E(\boldsymbol{\zeta}) &= \mathbf{0}; & \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\zeta}) &= \boldsymbol{\Psi} \\ E(\boldsymbol{\varepsilon}) &= \mathbf{0}; & \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}) &= \boldsymbol{\Theta}_\varepsilon \\ E(\boldsymbol{\delta}) &= \mathbf{0}; & \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\delta}) &= \boldsymbol{\Theta}_\delta \end{aligned} \tag{9-61}$$

这里$\boldsymbol{\zeta}$，$\boldsymbol{\varepsilon}$和$\boldsymbol{\delta}$彼此不相关；$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{\Phi}$；$\boldsymbol{\zeta}$和$\boldsymbol{\xi}$不相关；$\boldsymbol{\varepsilon}$与$\boldsymbol{\eta}$不相关；$\boldsymbol{\delta}$与$\boldsymbol{\xi}$不相关；$\mathbf{B}$在对角线上为零，而$\mathbf{I}-\mathbf{B}$是非奇异的。此外对假设(9-61)，我们令$E(\boldsymbol{\xi})=\mathbf{0}$和$E(\boldsymbol{\eta})=\mathbf{0}$。

式(9-59)中量$\boldsymbol{\xi}$和$\boldsymbol{\eta}$分别为因果变量，并且通常是不直接观测的。有时称它们为**潜在变量**。式(9-60)中$\mathbf{Y}$和$\mathbf{X}$是通过系数矩阵$\boldsymbol{\Lambda}_y$和$\boldsymbol{\Lambda}_x$与$\boldsymbol{\eta}$和$\boldsymbol{\xi}$线性相关的变量，并且这些变量都是可测量的。它们的观测值构成数据。有时称式(9-60)为**测量方程**。

路径图的构造

将系统中那些不受其他变量影响的变量[外生变量]和那些受其他变量影响的变量

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

[**内生变量**]区分开来。后一类因变量的每一个都伴有一个残差。**路径图**的画法如下所示：

1. 从每个源变量向它的各个因(内生)变量画一个直箭头。

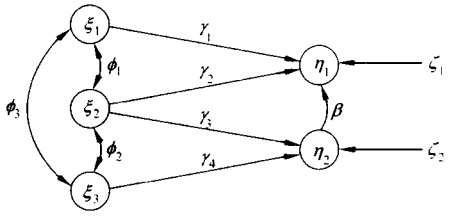
2. 从它的残差向各因变量也引出一个直箭头。

3. 在每一对认为有非零相关的自(外生)变量之间，画一个弯曲的双向箭头。

对相关画出的双向箭头表明了相关系数的对称性质。其他的连接是有向的，正如单头箭头所示。

例 9.15 （路径图和构造方程）

考虑对因果变量的下列路径图：



有 $m=2$ 和 $n=3$ 的这个路径图，对应构造方程[见式(9-59)]

$$\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & \beta\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\gamma_1 & \gamma_2 & 0\\ 0 & \gamma_3 & \gamma_4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \xi_3\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\zeta_1\\ \zeta_2\end{bmatrix}$$

且 $\mathrm{Cov}(\xi_1,\xi_2)=\phi_1$，$\mathrm{Cov}(\xi_2,\xi_3)=\phi_2$，$\mathrm{Cov}(\xi_1,\xi_3)=\phi_3$，$\mathrm{Cov}(\zeta_1,\zeta_2)=0$。我们看到，例如，$\eta_1$ 依赖于 ξ_1，ξ_2 及 η_2。

路径图对把构造模型化为公式是有用的助手。因为它们指出了因果关系的方向和性质，可以迫使研究人员加以考虑。

式(9-59)和式(9-60)中的模型有很丰富的构造，并包含几个重要的子模型作为它的特殊情况。例如，在明智选取维数和变量后，就能够定义多元线性回归模型和因子分析模型。

协方差结构

因为 $\boldsymbol{\eta}$ 和 $\boldsymbol{\xi}$ 是未观测的，LISREL 模型不能直接去验证。然而像在因子分析中那样，模型和假设推出一种协方差结构，它是可以检测的。

定义数据向量 $[\mathbf{Y}',\mathbf{X}']'$，则

$$\mathrm{Cov}\begin{bmatrix}\mathbf{Y}\\ \mathbf{X}\end{bmatrix}=\underset{(p+q)\times(p+q)}{\boldsymbol{\Sigma}}=\left[\begin{array}{c:c}\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}} & \underset{(p\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}}\\ \hdashline \underset{(q\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{21}} & \underset{(q\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c:c}\mathrm{Cov}(\mathbf{Y}) & \mathrm{Cov}(\mathbf{Y},\mathbf{X})\\ \hdashline \mathrm{Cov}(\mathbf{X},\mathbf{Y}) & \mathrm{Cov}(\mathbf{X})\end{array}\right] \tag{9-62}$$

取 $\mathbf{B}=\mathbf{0}$ 以简化讨论，则有

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(\mathbf{Y}) = E(\mathbf{YY}') &= \Lambda_y \mathrm{Cov}(\eta)\Lambda_y' + \boldsymbol{\Theta}_\varepsilon \\
&= \Lambda_y(\Gamma\boldsymbol{\Phi}\Gamma' + \Psi)\Lambda_y' + \boldsymbol{\Theta}_\varepsilon \\
\mathrm{Cov}(\mathbf{X}) = E(\mathbf{XX}') &= \Lambda_x \mathrm{Cov}(\xi)\Lambda_x' + \boldsymbol{\Theta}_\delta \\
&= \Lambda_x \boldsymbol{\Phi} \Lambda_x' + \boldsymbol{\Theta}_\delta \\
\mathrm{Cov}(\mathbf{Y},\mathbf{X}) = E(\mathbf{YX}') &= E(\Lambda_y(\Gamma\xi + \boldsymbol{\zeta}) + \varepsilon)(\Lambda_x\xi + \delta)' \\
&= \Lambda_y\Gamma\boldsymbol{\Phi}\Lambda_x' = [\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\mathbf{Y})]'
\end{aligned}
\tag{9-63}
$$

协方差是模型参数 $\Lambda_x, \Lambda_y, \Gamma, \boldsymbol{\Phi}, \Psi, \boldsymbol{\Theta}_\varepsilon$ 及 $\boldsymbol{\Theta}_\delta$ 的(非线性)函数。(记住,我们令 $\mathbf{B}=\mathbf{0}$)。

已知 n 个多元观测值 $[\mathbf{y}_j', \mathbf{x}_j']'$, $j=1,2,\cdots,n$,样本协方差矩阵[见式(3-11)]

$$
\underset{(p+q)\times(p+q)}{\mathbf{S}} = \left[\begin{array}{c:c} \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_{11}} & \underset{(p\times q)}{\mathbf{S}_{12}} \\ \hdashline \underset{(q\times p)}{\mathbf{S}_{21}} & \underset{(q\times q)}{\mathbf{S}_{22}} \end{array}\right]
$$

可以构造出来并按与 $\boldsymbol{\Sigma}$ 一致的方式分块。利用 $\mathbf{S}$ 中的信息去估计模型参数。特别地,我们令

$$
\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{S} \tag{9-64}
$$

并解出所得方程。

估计

不幸的是,方程(9-64)常常不能明确解出。必须用从初始参数估计开始的一个迭代搜索程序,来产生与 $\mathbf{S}$ 十分近似的矩阵 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$。搜索程序用一个判别函数去测度 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 和 $\mathbf{S}$ 之间的不同。现行的 LISREL 程序用"最小二乘"判别法和"最大似然"判别法来估计模型参数。(详见[18]。)

下面的例子,利用假想的数据,说明了一种能从式(9-64)得到参数估计的情况。

例 9.16 (假想数据的构造方程模型的估计)

在式(9-59)和式(9-60)中取 $m=1, n=1, p=2, q=2$ 及 $\mathbf{B}=\mathbf{0}$,则

$$
\eta = \gamma\xi + \zeta
$$

$$
\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_1 \end{bmatrix}\eta + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_2 \\ 1 \end{bmatrix}\xi + \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{bmatrix}
$$

此外令 $\mathrm{Var}(\xi)=\phi$; $\mathrm{Var}(\zeta)=\psi$,

$$
\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \begin{bmatrix} \theta_1 & 0 \\ 0 & \theta_2 \end{bmatrix}, \qquad \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\delta}) = \begin{bmatrix} \theta_3 & 0 \\ 0 & \theta_4 \end{bmatrix}
$$

利用式(9-63),得到

$$
\mathrm{Cov}(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\Sigma}_{11} = \begin{bmatrix} (\gamma^2\phi + \psi) + \theta_1 & \lambda_1(\gamma^2\phi + \psi) \\ \lambda_1(\gamma^2\phi + \psi) & \lambda_1^2(\gamma^2\phi + \psi) + \theta_2 \end{bmatrix}
$$

$$
\mathrm{Cov}(\mathbf{Y},\mathbf{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_{12} = \begin{bmatrix} \lambda_2(\gamma\phi) & (\gamma\phi) \\ \lambda_1\lambda_2(\gamma\phi) & \lambda_1(\gamma\phi) \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}_{21}'
$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\Sigma}_{22} = \begin{bmatrix} \phi\lambda_2^2 + \theta_3 & \phi\lambda_2 \\ \phi\lambda_2 & \phi + \theta_4 \end{bmatrix}$$

对 **Y** 和 **X** 收集了数据，构造样本协方差矩阵为

$$\left[\begin{array}{c:c} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \hdashline \mathbf{S}_{21} & \mathbf{s}_{22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc:cc} 14.3 & -27.6 & 6.4 & 3.2 \\ -27.6 & 55.4 & -12.8 & -6.4 \\ \hdashline 6.4 & -12.8 & 3.7 & 1.6 \\ 3.2 & -6.4 & 1.6 & 1.1 \end{array}\right]$$

令 $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{S}$，我们得到方程：

$$\begin{aligned}
&\text{(i)} && (\hat{\gamma}^2\hat{\phi} + \hat{\psi}) + \hat{\theta}_1 &&= 14.3 \\
&\text{(ii)} && \hat{\lambda}_1(\hat{\gamma}^2\hat{\phi} + \hat{\psi}) &&= -27.6 \\
&\text{(iii)} && \hat{\lambda}_1^2(\hat{\gamma}^2\hat{\phi} + \hat{\psi}) + \hat{\theta}_2 &&= 55.4 \\
&\text{(iv)} && \hat{\lambda}_2\hat{\gamma}\hat{\phi} &&= 6.4 \\
&\text{(v)} && \hat{\gamma}\hat{\phi} &&= 3.2 \\
&\text{(vi)} && \hat{\lambda}_1\hat{\lambda}_2(\hat{\gamma}\hat{\phi}) &&= -12.8 \\
&\text{(vii)} && \hat{\lambda}_1(\hat{\gamma}\hat{\phi}) &&= -6.4 \\
&\text{(viii)} && \hat{\phi}\hat{\lambda}_2^2 + \hat{\theta}_3 &&= 3.7 \\
&\text{(ix)} && \hat{\phi}\hat{\lambda}_2 &&= 1.6 \\
&\text{(x)} && \hat{\phi} + \hat{\theta}_4 &&= 1.1
\end{aligned}$$

从(iv)和(v)，$\hat{\lambda}_2 = 2.0$。接着从(ix)，$\hat{\phi} = 8$，依此类推。读者可以验算

$$\hat{\gamma} = 4 \quad \boldsymbol{\Lambda}_y = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\Lambda}_x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\phi} = 0.8 \quad \hat{\psi} = 1 \quad \hat{\boldsymbol{\Theta}}_\epsilon = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.2 \end{bmatrix} \quad \text{和} \quad \hat{\boldsymbol{\Theta}}_\delta = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.3 \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{\Lambda}_y$ 和 $\boldsymbol{\Lambda}_x$ 矩阵的列含有 1，用以固定未观测的 η 和 ξ 的尺度。此例中，选 η 的单位与 Y_1 的相同，ξ 的单位取成 X_2 的单位。(可用任何常数去消除与变量 η 和 ξ 相联系的尺度的二义性。数 1 只是一个方便的选取)。

本例中，结构变量 η 和 ξ 可能分别是公司绩效和经营才能。前者不能直接测量，但公司绩效指标，例如，Y_1＝利润和 Y_2＝普通股票价格，却可以测量。类似地，经营才能指标，比如说，X_1＝总经理从业年数和 X_2＝董事会成员，也可以测量。假定经营才能在很大程度上影响着公司绩效，我们就倾向于考虑上述模型。

一般地，我们为了估计模型参数，需要比未知参数个数更多的方程数。因此，若 t 是未知参数的总个数，则 p 和 q 必须使

$$t \leqslant (p+q)(p+q+1)/2 \tag{9-65}$$

然而条件(9-65)并不保证所有参数都一定能惟一地估计出来。

必须仔细地评价模型最后的拟合程度。应该检查单个参数估计，以及残差矩阵 $\mathbf{S} - \hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 的元。参数估计应有适当的符号和大小。又如，迭代参数估计程序在整个的参数空间上运

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

行，可能不产生正的方差估计。残差中的元应统一地小。

模型拟合策略

在线性构造方程模型中，兴趣常常集中在参数的值和相联系的“效果”。对变量的预测值不易得到，除非模型压缩到多元线性回归模型的一种变形形式。

一个有用的模型拟合策略包含以下几点：

1. 如果可能，就利用几种判别法（例如最小二乘、最大似然）生成参数估计，并且比较这些估计。

(a) 符号和大小是一致的吗？

(b) 所有的方差估计都是正的？

(c) 残差矩阵 $\mathbf{S}-\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 相似吗？

2. 利用 $\mathbf{S}$ 和样本相关矩阵 $\mathbf{R}$ 作分析。将可测变量标准化对结果有什么影响？

3. 将大数据集分成两半，对每一半执行步骤 1 和 2。比较这两个结果，并与由完整数据集所得的结果作比较，以检查解的稳定性。

对步骤 1～3 给出一致结果的模型，可能就是合理的模型。不一致的结果表明模型不被数据完全支持，因此需要加以修改或者放弃。

补充 9A　最大似然估计的某些计算细节

虽然不能得到最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 的简单解析表达式，但可以证明它们满足某些方程。以一个不知结构的协方差矩阵的最大似然估计量 $\mathbf{S}_n=(1/n)\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})'$ 来表示这些条件方程，是毫不奇怪的。一些因子分析者采用通常的样本协方差 $\mathbf{S}$，却仍用最大似然的名称来称呼得到的估计。此项修改等同于采用从威沙特分布 $\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})\cdot(\mathbf{X}_j-\bar{\mathbf{X}})'$ 得到的似然估计，而忽略由 $\bar{\mathbf{X}}$ 的正态密度做出的微小贡献。既然 $\mathbf{S}_n$ 和 $\mathbf{S}$ 都产生同样的相关矩阵，$\mathbf{R}$ 的因子分析当然不受选用 $\mathbf{S}_n$ 还是选用 $\mathbf{S}$ 的影响。

结论 9A.1　令 $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n$ 是来自正态总体的随机样本。将式(9-25)在惟一性条件(9-26)约束下取最大化，得到最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$。它们满足

$$(\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\mathbf{S}_n\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2})(\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}})=(\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}})(\mathbf{I}+\hat{\boldsymbol{\Delta}}) \tag{9A-1}$$

故 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}$ 的第 j 列是 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\mathbf{S}_n\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}$ 的（非规范化）特征向量，对应于特征值 $1+\hat{\Delta}_j$。这里

$$\mathbf{S}_n=n^{-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'=n^{-1}(n-1)\mathbf{S}\quad 且\ \hat{\Delta}_1\geqslant\hat{\Delta}_2\geqslant\cdots\geqslant\hat{\Delta}_m$$

还有，在收敛处，

$$\hat{\psi}_i=\mathbf{S}_n-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'\ 的第\ i\ 个对角元 \tag{9A-2}$$

和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathrm{tr}(\hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}\mathbf{S}_n) = p$$

我们不去考虑证明的细节，但很明显，$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\bar{\mathbf{x}}$，考虑到对数似然函数，会引向在 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 上求 $-(n/2)[\ln|\boldsymbol{\Sigma}|+\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{S}_n)]$ 的最大化。等价地，由于 $\mathbf{S}_n$ 和 p 在最大化中是常数，我们把

$$h(\hat{\boldsymbol{\mu}},\boldsymbol{\Psi},\mathbf{L}) = \ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \ln|\mathbf{S}_n| + \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{S}_n) - p \tag{9A-3}$$

在 $\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L}=\boldsymbol{\Delta}$ 为对角阵的约束下，最小化。

评注 劳雷和马克斯韦尔[20]，以及许多做因子分析的工作者，用协方差的无偏估计 $\mathbf{S}$ 代替最大似然估计 $\mathbf{S}_n$。现在，对正态数据，$(n-1)\mathbf{S}$ 服从威沙特分布。[见式(4-21)和式(4-23)。]如果我们略去包含 $(\boldsymbol{\mu}-\bar{\mathbf{x}})$ 的第二项对似然函数(9-25)的贡献，则在 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 上将缩减了的似然函数做最大化，等价于在 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 上将威沙特似然函数

$$\text{似然函数} \propto |\boldsymbol{\Sigma}|^{-(n-1)/2}\mathbf{e}^{-[(n-1)/2]\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{S}]}$$

最大化。等价地，我们可以把

$$\ln|\boldsymbol{\Sigma}| + \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{S}_n)$$

最小化，或者像式(9A-3)那样把

$$\ln|\boldsymbol{\Sigma}| + \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{S}) - \ln|\mathbf{S}| - p$$

最小化。在这些条件下，以 $\mathbf{S}$ 代替 $\mathbf{S}_n$，结论 9A.1 成立。还有，对大 n，$\mathbf{S}$ 和 $\mathbf{S}_n$ 几乎是相等的，并且相应的最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 会类似。为检验因子模型[见式(9-39)]，若采用实际的似然函数(9-25)，应该把 $|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|$ 与 $|\mathbf{S}_n|$ 作比较，如用前述的威沙特似然函数去导出 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$，就应该把 $|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|$ 与 $|\mathbf{S}|$ 作比较。

推荐的计算方案

对 $m>1$，条件 $\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L}=\boldsymbol{\Delta}$ 有效地给 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 的元素施加了 $m(m-1)/2$ 个限制，并且在这些限制的约束下以一种迭代方式解出似然方程。方法可如下：

1. 计算特殊方差 $\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_p$ 的初始估计。朱瑞司柯克[16]建议设

$$\hat{\psi}_i = \left(1-\frac{1}{2}\cdot\frac{m}{p}\right)\left(\frac{1}{s^{ii}}\right) \tag{9A-4}$$

其中 s^{ii} 是 $\mathbf{S}^{-1}$ 的第 i 个对角元。

2. 已知 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$，计算“再调节了惟一性的”协方差矩阵

$$\mathbf{S}^* = \hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\mathbf{S}_n\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2} \tag{9A-5}$$

的前 m 个不同特征值 $\hat{\lambda}_1>\hat{\lambda}_2>\cdots>\hat{\lambda}_m>1$，以及对应的特征向量，$\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_m$。令 $\tilde{\mathbf{E}}=[\hat{\mathbf{e}}_1 \vdots \hat{\mathbf{e}}_2 \vdots \cdots \vdots \hat{\mathbf{e}}_m]$ 是规范化特征向量的 $p\times m$ 矩阵，$\hat{\boldsymbol{\Lambda}}=$ 对角阵 $[\hat{\lambda}_1,\hat{\lambda}_2,\cdots,\hat{\lambda}_m]$ 是特征值的 $m\times m$ 对角阵。从式(9A-1)，$\hat{\boldsymbol{\Lambda}}=\mathbf{I}+\hat{\boldsymbol{\Delta}}$，$\tilde{\mathbf{E}}=\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}\hat{\boldsymbol{\Delta}}^{-1/2}$。这样，我们得到估计

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\boldsymbol{\Psi}}^{1/2}\hat{\mathbf{E}}\hat{\boldsymbol{\Delta}}^{1/2} = \hat{\boldsymbol{\Psi}}^{1/2}\hat{\mathbf{E}}(\hat{\boldsymbol{\Lambda}}-\mathbf{I})^{1/2} \tag{9A-6}$$

3. 将式(9A-6)得到的 $\hat{\mathbf{L}}$ 代进似然函数(9A-3)，并就 $\hat{\psi}_1,\hat{\psi}_2,\cdots,\hat{\psi}_p$ 将结果最小化。必须用到一个数值搜索程序。在步骤 2 用从最小化得到的值 $\hat{\psi}_1,\hat{\psi}_2,\cdots,\hat{\psi}_p$ 去生成一个新的 $\hat{\mathbf{L}}$。重复步骤 2 和 3 直到收敛为止——也即直到 $\hat{l}_{ij}$ 和 $\hat{\psi}_i$ 的相继值之差可以忽略为止。

评注 常常会发生这种情况：式(9A-3)中的目标函数对应于某个 $\hat{\psi}_i$ 的负值有相对的最小值。这个解很清楚是不能接受的，并说它是不真实的或是一个海伍德情况。对大部分计算机程序包，如在某个迭代中出现这种情况，在下一步处理之前，把负的 $\hat{\psi}_i$ 将改为小

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

正数。

$\boldsymbol{\rho}=\mathbf{L}_z\mathbf{L}_z'+\boldsymbol{\Psi}_z$ 的最大似然估计

当 $\boldsymbol{\Sigma}$ 有因子分析结构 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{L}\mathbf{L}'+\boldsymbol{\Psi}$，则 $\boldsymbol{\rho}$ 可因子化，为 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{-1/2}=(\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L})\cdot(\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L})'+\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Psi}\mathbf{V}^{-1/2}=\mathbf{L}_z\mathbf{L}_z'+\boldsymbol{\Psi}_z$。对标准化变量的载荷矩阵是 $\mathbf{L}_z=\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L}$，而相应的特殊方差矩阵是 $\boldsymbol{\Psi}_z=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Psi}\mathbf{V}^{-1/2}$，其中 $\mathbf{V}^{-1/2}$ 是对角阵，其第 i 个对角元为 $\sigma_{ii}^{-1/2}$。如用 $\mathbf{R}$ 替代目标函数(9A-3)中的 $\mathbf{S}_n$，研究者将

$$\ln\left(\frac{|\mathbf{L}_z\mathbf{L}_z'+\boldsymbol{\Psi}_z|}{|\mathbf{R}|}\right)+\operatorname{tr}[(\mathbf{L}_z\mathbf{L}_z'+\boldsymbol{\Psi}_z)^{-1}\mathbf{R}]-p \tag{9A-7}$$

最小化。

引进对角阵 $\hat{\mathbf{V}}^{1/2}$，它的第 i 个对角元是 $\mathbf{S}_n$ 第 i 个对角元的平方根，我们可将目标函数(9A-7)写为

$$\begin{aligned}
&\ln\left(\frac{|\hat{\mathbf{V}}^{1/2}|\,|\mathbf{L}_z\mathbf{L}_z'+\boldsymbol{\Psi}_z|\,|\hat{\mathbf{V}}^{1/2}|}{|\hat{\mathbf{V}}^{1/2}|\,|\mathbf{R}|\,|\hat{\mathbf{V}}^{1/2}|}\right)\\
&\qquad+\operatorname{tr}[(\mathbf{L}_z\mathbf{L}_z'+\boldsymbol{\Psi}_z)^{-1}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\mathbf{R}\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}]-p\\
&=\ln\left(\frac{|(\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\mathbf{L}_z)(\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\mathbf{L}_z)'+\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\boldsymbol{\Psi}_z\hat{\mathbf{V}}^{1/2}|}{|\mathbf{S}_n|}\right)\\
&\qquad+\operatorname{tr}[((\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\mathbf{L}_z)(\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\mathbf{L}_z)'+\hat{\mathbf{V}}^{1/2}\boldsymbol{\Psi}_z\hat{\mathbf{V}}^{1/2})^{-1}\mathbf{S}_n]-p\\
&\geqslant\ln\left(\frac{|\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}|}{|\mathbf{S}_n|}\right)+\operatorname{tr}[(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}})^{-1}\mathbf{S}_n]-p
\end{aligned} \tag{9A-8}$$

最后一个不等号是因为最大似然估计 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 使目标函数(9A-3)最小化。[对 $\hat{\mathbf{L}}_z=\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z=\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}$，(9A-8)中等号成立。]因此，在 $\mathbf{L}_z$ 和 $\boldsymbol{\Psi}_z$ 上将式(9A-7)最小化等价于从 $\mathbf{S}_n$ 得到 $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 并且用 $\hat{\mathbf{L}}_z=\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\mathbf{L}}$ 估计 $\mathbf{L}_z=\mathbf{V}^{-1/2}\mathbf{L}$ 和用 $\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z=\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}\hat{\boldsymbol{\Psi}}\hat{\mathbf{V}}^{-1/2}$ 估计 $\boldsymbol{\Psi}_z=\mathbf{V}^{-1/2}\boldsymbol{\Psi}\mathbf{V}^{-1/2}$。后一估计过程的根据是最大似然估计的不变性。[见式(4-20)。]

练　　习

9.1　证明对 $p=3$ 个标准化随机变量 Z_1,Z_2 和 Z_3 的协方差矩阵

$$\boldsymbol{\rho}=\begin{bmatrix}1.0 & 0.63 & 0.45\\ 0.63 & 1.0 & 0.35\\ 0.45 & 0.35 & 1.0\end{bmatrix}$$

可以由 $m=1$ 的因子模型

$$\begin{cases}Z_1=0.9F_1+\varepsilon_1\\ Z_2=0.7F_1+\varepsilon_2\\ Z_3=0.5F_1+\varepsilon_3\end{cases}$$

来生成，其中 $\operatorname{Var}(F_1)=1$，$\operatorname{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon},F_1)=\mathbf{0}$，且

$$\boldsymbol{\Psi}=\operatorname{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon})=\begin{bmatrix}0.19 & 0 & 0\\ 0 & 0.51 & 0\\ 0 & 0 & 0.75\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

也即，将 $\boldsymbol{\rho}$ 写成形式 $\boldsymbol{\rho}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$

9.2　利用练习 9.1 中的信息

(a) 计算共性方差 $h_i^2, i=1,2,3$，并解释这些量。

(b) 计算 $\mathrm{Corr}(Z_i, F_1), i=1,2,3$。哪个变量会在公共因子的"命名"上有最大的权重？为什么？

9.3　练习 9.1 中的相关系数矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 的特征值和特征向量为

$$\lambda_1 = 1.96, \qquad \mathbf{e}_1' = [0.625,\ 0.593,\ 0.507]$$
$$\lambda_2 = 0.68, \qquad \mathbf{e}_2' = [-0.219,\ -0.491,\ 0.843]$$
$$\lambda_3 = 0.36, \qquad \mathbf{e}_3' = [0.749,\ -0.638,\ -0.177]$$

(a) 假设 $m=1$ 的因子模型，利用主成分解法计算载荷矩阵 $\mathbf{L}$ 及特别方差矩阵 $\boldsymbol{\Psi}$。同练习 9.1 的结果作比较。

(b) 用第一公共因子解释的总体总方差的比例是多少？

9.4　已知练习 9.1 中的 $\boldsymbol{\rho}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 及 $m=1$ 的因子模型，计算缩减相关系数矩阵 $\tilde{\boldsymbol{\rho}}=\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Psi}$ 及载荷矩阵 $\mathbf{L}$ 的主因子解。这些结果是否与练习 9.1 相一致？应该一致吗？

9.5　证明不等式(9-19)

提示：因为 $\mathbf{S}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'-\tilde{\boldsymbol{\Psi}}$ 在对角线上为 0，

$(\mathbf{S}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'-\tilde{\boldsymbol{\Psi}}$ 元素的平方和$)\leqslant(\mathbf{S}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'$ 元素的平方和$)$

现在，$\mathbf{S}-\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}'=\hat{\lambda}_{m+1}\hat{\mathbf{e}}_{m+1}\hat{\mathbf{e}}_{m+1}'+\cdots+\hat{\lambda}_p\hat{\mathbf{e}}_p\hat{\mathbf{e}}_p'=\hat{\mathbf{P}}_{(2)}\hat{\boldsymbol{\Lambda}}_{(2)}\hat{\mathbf{P}}_{(2)}'$，其中 $\hat{\mathbf{P}}_{(2)}=[\hat{\mathbf{e}}_{m+1} \vdots \cdots \vdots \hat{\mathbf{e}}_p]$ 且 $\hat{\boldsymbol{\Lambda}}_{(2)}$ 是对角元为 $\hat{\lambda}_{m+1},\cdots,\hat{\lambda}_p$ 的对角阵。

利用$(\mathbf{A}$ 元素的平方和$)=\mathrm{tr}\mathbf{AA}'$ 及 $\mathrm{tr}[\hat{\mathbf{P}}_{(2)}\hat{\boldsymbol{\Lambda}}_{(2)}\hat{\boldsymbol{\Lambda}}_{(2)}\hat{\mathbf{P}}_{(2)}']=\mathrm{tr}[\hat{\boldsymbol{\Lambda}}_{(2)}\hat{\boldsymbol{\Lambda}}_{(2)}]$。

9.6　验证下列矩阵性质

(a) $(\mathbf{I}+\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})^{-1}\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L}=\mathbf{I}-(\mathbf{I}+\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})^{-1}$

提示：两边左乘$(\mathbf{I}+\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})$。

(b) $(\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})^{-1}=\boldsymbol{\Psi}^{-1}-\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L}(\mathbf{I}+\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})^{-1}\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}$

提示：两边右乘 $\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$ 并利用(a)。

(c) $\mathbf{L}'(\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})^{-1}=(\mathbf{I}+\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})^{-1}\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}$

提示：将(b)两边右乘 $\mathbf{L}$，利用(a)，并将两边取转置，注意$(\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi})^{-1}$，$\boldsymbol{\Psi}^{-1}$ 及 $(\mathbf{I}+\mathbf{L}'\boldsymbol{\Psi}^{-1}\mathbf{L})^{-1}$ 为对称矩阵。

9.7　(因子模型参数化不必是惟一的。)令因子模型 $p=2$ 和 $m=1$ 成立。证明

$$\sigma_{11} = \hat{l}_{11}^2 + \psi_1, \qquad \sigma_{12} = \sigma_{21} = l_{11}l_{21}$$
$$\sigma_{22} = \hat{l}_{21}^2 + \psi_2$$

以及对给定 σ_{11}，σ_{22} 和 σ_{12}，对 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 存在无限多的选择。

9.8　(惟一但不真实的解：海伍德情形。)

对协方差矩阵为

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0.4 & 0.9 \\ 0.4 & 1 & 0.7 \\ 0.9 & 0.7 & 1 \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的总体，考虑 $m=1$ 的因子模型，证明对满足 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$ 的 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 有惟一的选择，但 $\psi_3<0$，因此这种选择是不可接受的。

9.9　在法国的一项酒类调查中，斯托塞尔(Stoetzel)[25]收集了 $n=1442$ 个人对 $p=9$种酒的偏好，并进行排名。对排名顺序的 9×9 样本相关系数矩阵作的因子分析给出如下的估计载荷：

因子载荷估计			
变量(X_1)	F_1	F_2	F_3
(蒸馏)酒	0.64	0.02	0.16
Kirsch 酒	0.50	−0.06	−0.10
Mirabelle 酒	0.46	−0.24	−0.19
朗姆酒	0.17	0.74	0.97*
白兰地	−0.29	0.66	−0.39
威士忌	−0.29	−0.08	0.09
Calvados 酒	−0.49	0.20	−0.04
科涅克白兰地	−0.52	−0.03	0.42
Armagnac 酒	−0.60	−0.17	0.14

* 这个数据太大。斯托塞尔采用了估计因子载荷的近似法，结果，它超过了最大值 0.64。

已知这些结果，斯托塞尔结论如下：在法国关于酒的偏好最主要的原则是甜酒和烈酒之间的区别。第二个激励因素是价格，记住酒既昂贵又是种摆阔性的消费品，就可理解这一点。除了两种最大众化和最便宜的酒(朗姆酒和白兰地)，在产生对酒的喜好的判断上，这第二个因子起的作用小得多，第三个因子涉及社会性和地区性的判断差异。(见[25]。)

(a) 就你对所涉及的各种酒的知识来判断，斯托塞尔的解释合理吗？

(b) 作图表示前两个因子的载荷对。用图解法表示因子轴的正交旋转。产生近似旋转载荷。解释前两个因子的旋转载荷。你的解释与斯托塞尔从未旋转载荷得到的因子解释一致吗？请说明。

9.10　对鸡的骨骼测量值(见例 9.14)的相关系数矩阵为

$$\begin{bmatrix} 1.000 & & & & & \\ 0.505 & 1.000 & & & & \\ 0.569 & 0.422 & 1.000 & & & \\ 0.602 & 0.467 & 0.926 & 1.000 & & \\ 0.621 & 0.482 & 0.877 & 0.874 & 1.000 & \\ 0.603 & 0.450 & 0.878 & 0.894 & 0.937 & 1.000 \end{bmatrix}$$

以下因子载荷估计是由最大似然法求出的：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

变　量	因子载荷估计 F_1	F_2	因子载荷的最大方差旋转估计 F_1^*	F_2^*
1. 颅骨长度	0.602	0.200	0.484	0.411
2. 颅骨幅宽	0.467	0.154	0.375	0.319
3. 股骨长	0.926	0.143	0.603	0.717
4. 胫骨长	1.000	0.000	0.519	0.855
5. 肱骨长	0.874	0.476	0.861	0.499
6. 尺骨长	0.894	0.327	0.744	0.594

用未旋转的因子载荷估计，得出下列各项的最大似然估计。

(a) 特殊方差。

(b) 共性方差。

(c) 用各个因子解释的方差的比例。

(d) 残差矩阵 $\mathbf{R}-\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_z'-\hat{\boldsymbol{\Psi}}_z$。

9.11　参见练习 9.10 用未旋转和旋转的因子载荷估计，计算最大方差准则的值。对结果进行评论。

9.12　海龟测量值(见例 8.4)的对数的协方差矩阵为

$$\mathbf{S}=10^{-3}\begin{bmatrix}11.072 & & \\ 8.019 & 6.417 & \\ 8.160 & 6.005 & 6.773\end{bmatrix}$$

对一个 $m=1$ 的模型所做的最大似然因子载荷估计如下：

变　量	因子载荷估计 F_1
1. ln(长度)	0.1022
2. ln(宽度)	0.0752
3. ln(高度)	0.0765

利用因子载荷估计，得出以下各项的最大似然估计。

(a) 特殊方差。

(b) 共性方差。

(c) 可用因子解释的方差的比例。

(d) 残差矩阵 $\mathbf{S}_n-\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'-\hat{\boldsymbol{\Psi}}$。

提示：用 $\mathbf{S}_n$ 换 $\mathbf{S}$。

9.13　参见练习 9.12。计算式(9-39)中的检验统计量。有 $H_0:\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$(取$m=1$)，$H_1:\boldsymbol{\Sigma}$ 无约束。指出对此假设的检验，在此例中为什么不能实现。[见式(9-40)]

9.14　最大似然因子载荷估计在式(9A-6)中由

$$\hat{\mathbf{L}}=\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{1/2}\hat{\mathbf{E}}\hat{\boldsymbol{\Delta}}^{1/2}$$

给出。对此选择验证

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{\boldsymbol{\Psi}}^{-1}\hat{\mathbf{L}}=\hat{\boldsymbol{\Delta}}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

其中 $\hat{\Delta}=\hat{\Lambda}-\mathbf{I}$ 是对角阵。

9.15　赫希切(Hirschey)和威克恩(Wichern)[15]调查对利润的会计测量和市场价值测量间的一致性、决定因素和用途。他们研究的一部分是进行利润会计测量和经济利润市场估计的因子分析。帐目历史，帐目置换和1977年商行运作的样本的市场-价值测量的相关系数矩阵如下：

变　量	HRA	HRE	HRS	RRA	RRE	RRS	Q	REV
资产历史收益率，HRA	1.000							
股本历史收益率，HRE	0.738	1.000						
销售历史收益率，HRS	0.731	0.520	1.000					
资产重置收益率，RRA	0.828	0.688	0.652	1.000				
股本重置收益率，RRE	0.681	0.831	0.513	0.887	1.000			
销售重置收益率，RRS	0.712	0.543	0.826	0.867	0.692	1.000		
市场Q比率，Q	0.625	0.322	0.579	0.639	0.419	0.608	1.000	
市场相对溢价，REV	0.604	0.303	0.617	0.563	0.352	0.610	0.937	1.000

得到对 $m=3$ 因子模型因子载荷的旋转主成分估计如下：

变　量	因子载荷估计		
	F_1	F_2	F_3
HRA	0.433	0.612	0.499
HRE	0.125	0.892	0.234
HRS	0.296	0.238	0.887
RRA	0.406	0.708	0.483
RRE	0.198	0.895	0.283
RRS	0.331	0.414	0.789
Q	0.928	0.160	0.294
REV	0.910	0.079	0.355
解释全部方差的累积比例	0.287	0.628	0.908

(a) 利用因子载荷估计，确定特殊方差和共性方差。

(b) 确定残差矩阵 $\mathbf{R}-\hat{\mathbf{L}}_z\hat{\mathbf{L}}_z'-\hat{\Psi}_z$。已知此信息和上面表格中的解释总方差的累积比例，$m=3$ 的因子模型对这些数据是否恰当？

(c) 假设小于0.4的载荷估计是小的，解释这三个因子。例如，会出现这样情况吗：市场价值测量值表明的利润与会计测量值表明的利润不同？你能将会计历史利润的测量值从会计重置测量中分出来吗？

9.16　证明由式(9-50)构造的因子得分有样本均值向量 $\mathbf{0}$ 和零样本协方差。

9.17　考虑例9.16的LISREL模型，把参数向量 Λ_y 中的1和 λ_1 交换，参数向量 Λ_x 中的 λ_2 和1交换。用该例中提供的S矩阵，求解模型参数。解释为什么必须固定构造变量 η 和 ξ 的尺度。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

以下练习需使用计算机

9.18　参见练习 5.16 的捕鱼数据

(a) 仅用测量值 x_1-x_4，求出 $m=1$ 和 $m=2$ 的因子模型的主成分解。

(b) 仅用测量值 x_1-x_4，求出 $m=1$ 和 $m=2$ 的因子模型的最大似然解。

(c) 旋转(a)和(b)的解。比较这些解，并加以评论。解释每一个因子。

(d) 用测量值 x_1-x_6 执行因子分析，求因子的合理个数 m，并比较旋转之后的主成分和最大似然解。解释这些因子。

9.19　一家公司正试图对其销售员工的质量做评估，并且正寻找一种考察或一系列测试，以期可以揭示是否有创造良好销售额的潜能。该公司已挑选了 50 个销售人员的随机样本，还已对每一个人就 3 项表现作了评估：销售增长，销售利润和新客户销售额。这些测度量已被变为同一尺度，其中 100 表示“平均”业绩。50 个人中的每一个接受 4 项测试，分别测量创造力、机械推理、抽象推理和数学能力。表 9.12 中列出在 $p=7$ 个变量上的 $n=50$次观察值。

(a) 假设对标准化变量 $Z_i=(X_i-\mu_i)/\sqrt{\sigma_{ii}}\,(i=1,2,\cdots,7)$有正交因子模型。求 $m=2$ 和 $m=3$ 个公共因子的主成分解或最大似然解。

(b) 由(a)的解，求 $m=2$ 和 $m=3$ 的旋转载荷。比较这两组旋转载荷。解释 $m=2$ 和 $m=3$ 的因子解。

(c) 列出 $m=2$ 和 $m=3$ 的共性方差、特殊方差和 $\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}'+\hat{\boldsymbol{\Psi}}$ 的估计值。比较这些结果。此时，你更愿意选择 m 等于什么值？为什么？

(d) 对 $m=2$ 和 $m=3$ 分别在 $\alpha=0.01$ 的水平下做检验 $H_0:\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$ 对 $H_1:\boldsymbol{\Sigma}\neq\mathbf{LL}'+\boldsymbol{\Psi}$。

由这些结果及(b)和(c)中结果，选择 m 为多少最好？

(e) 设随机选取一个新的销售人员，得到测验分数 $\mathbf{x}'=[x_1,x_2,\cdots,x_7]=[110,98,105,15,18,20,35]$。用加权最小二乘法和回归方法，计算这个销售人员的因子得分，

注意：$\mathbf{x}$ 的成分必须用由原始数据计算的样本均值和方差来标准化。

9.20　用表 1.3 给出的空气污染变量 X_1,X_2,X_5 和 X_6，生成样本协方差矩阵。

(a) 求 $m=1$ 和 $m=2$ 的因子模型的主成分解。

(b) 求 $m=1$ 和 $m=2$ 时 $\mathbf{L}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 的最大似然估计。

(c) 比较由主成分和最大似然方法解得到的因子分解。

9.21　对练习 9.20 中 $m=2$ 的两个解都做最大方差旋转。解释你得到的结果。主成分解和最大似然解相互一致吗？

9.22　参看练习 9.20

(a) 用(i)式(9-50)中的加权最小二乘和(ii)式(9-58)的回归方法，计算 $m=2$ 的最大似然估计的因子得分。

(b) 用式(9-51)求主成分解的因子得分。

(c) 比较此三组因子得分。

9.23　从样本相关系数矩阵着手，重复练习 9.20。解释 $m=1$ 和 $m=2$ 解的因子。若

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

R 而非 **S** 因子化，结果会有不同吗？解释一下。

9.24　对表 8.2 中人口普查数据做因子分析。从 **R** 着手，求最大似然和主成分解。评论一下你选择的 m 值。你的分析需包含因子旋转和因子得分的计算。

9.25　做表 4.3 给出的及例 4.14 讨论过的"硬度"测量值的因子分析，计算因子得分并查找数据的离群值。利用样本协方差矩阵 **S**。

9.26　见例 8.6 的老鼠重量数据，由样本协方差矩阵着手（见练习 8.15 的 $\sqrt{s_{ii}}$）

(a) 求 $m=1$ 和 $m=2$ 的因子模型的主成分解。

(b) 求 $m=1$ 和 $m=2$ 时载荷和特殊方差的最大似然估计。

(c) 把(a)和(b)的解做最大方差旋转。

表 9.12　销售人员数据

销售人员	指标			得分			
	销售增长 (x_1)	销售利润 (x_2)	新客户销售额 (x_3)	创造力 (x_4)	机械推理 (x_5)	抽象推理 (x_6)	数学能力 (x_7)
1	93.0	96.0	97.8	09	12	09	20
2	88.8	91.8	96.8	07	10	10	15
3	95.0	100.3	99.0	08	12	09	26
4	101.3	103.8	106.8	13	14	12	29
5	102.0	107.8	103.0	10	15	12	32
6	95.8	97.5	99.3	10	14	11	21
7	95.5	99.5	99.0	09	12	09	25
8	110.8	122.0	115.3	18	20	15	51
9	102.8	108.3	103.8	10	17	13	31
10	106.8	120.5	102.0	14	18	11	39
11	103.3	109.8	104.0	12	17	12	32
12	99.5	111.8	100.3	10	18	08	31
13	103.5	112.5	107.0	16	17	11	34
14	99.5	105.5	102.3	08	10	11	34
15	100.0	107.0	102.8	13	10	08	34
16	81.5	93.5	95.0	07	09	05	16
17	101.3	105.3	102.8	11	12	11	32
18	103.3	110.8	103.5	11	14	11	35
19	95.3	104.3	103.0	05	14	13	30
20	99.5	105.3	106.3	17	17	11	27
21	88.5	95.3	95.8	10	12	07	15
22	99.3	115.0	104.3	05	11	11	42
23	87.5	92.5	95.8	09	09	07	16
24	105.3	114.0	105.3	12	15	12	37
25	107.0	121.0	109.0	16	19	12	39

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

销售人员	指标			得分			
	销售增长 (x_1)	销售利润 (x_2)	新客户销售额 (x_3)	创造力 (x_4)	机械推理 (x_5)	抽象推理 (x_6)	数学能力 (x_7)
26	93.3	102.0	97.8	10	15	07	23
27	106.8	118.0	107.3	14	16	12	39
28	106.8	120.0	104.8	10	16	11	49
29	92.3	90.8	99.8	08	10	13	17
30	106.3	121.0	104.5	09	17	11	44
31	106.0	119.5	110.5	18	15	10	43
32	88.3	92.8	96.8	13	11	08	10
33	96.0	103.3	100.5	07	15	11	27
34	94.3	94.5	99.0	10	12	11	19
35	106.5	121.5	110.5	18	17	10	42
36	106.5	115.5	107.0	08	13	14	47
37	92.0	99.5	103.5	18	16	08	18
38	102.0	99.8	103.3	13	12	14	28
39	108.3	122.3	108.5	15	19	12	41
40	106.8	119.0	106.8	14	20	12	37
41	102.5	109.3	103.8	09	17	13	32
42	92.5	102.5	99.3	13	15	06	23
43	102.8	113.8	106.8	17	20	10	32
44	83.3	87.3	96.3	01	05	09	15
45	94.8	101.8	99.8	07	16	11	24
46	103.5	112.0	110.8	18	13	12	37
47	89.5	96.0	97.3	07	15	11	14
48	84.3	89.8	94.3	08	08	08	09
49	104.3	109.5	106.5	14	12	12	36
50	106.0	118.5	105.0	12	16	11	39

9.27　把 **R** 因子化以代替样本协方差矩阵，重复练习 9.26。并且，对有标准化体重[0.8，−0.2，−0.6，1.5]的老鼠，用载荷的最大似然估计和式(9-58)计算因子得分。

9.28　对表 1.7 的国家和地区女子田径纪录做因子分析。用样本协方差矩阵 **S** 并解释这些因子。计算因子得分，并查找这些数据的离群值。用样本相关系数矩阵 **R** 再做一次因子分析。若把 **R** 而非 **S** 因子化，有什么区别吗？为什么？

9.29　参看练习 9.28，将国家和地区女子田径纪录换为以米每秒为单位的速度测量值。(见练习 8.19。)对速度数据作因子分析。用样本协方差矩阵 **S** 并解释这些因子。计算因子得分，并查找数据的离群值。用样本相关系数矩阵 **R** 再做一次因子分析。当 **R** 而非 **S** 因子化时，结果有不同吗？请解释。和练习 9.28 的结果比较一下，你认为哪一个分析更好？为什么？

9.30　对表 8.6 中的国家和地区男子田径纪录做因子分析，重复练习 9.28 的步骤。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

男子数据的恰当因子模型同女子的有区别吗？若没有区别，因子解释是否大致相同？若认为这两个模型确有区别，试说明它们的不同之处。

9.31　参见练习 9.30。将国家和地区男子田径纪录换为以米每秒为单位的速度测量值。(见练习 8.21。)对速度数据作因子分析。用样本协方差矩阵 **S** 并解释这些因子。计算因子得分，并查找数据的离群值。用样本相关系数矩阵 **R** 再作因子分析。当 **R** 而非 **S** 因子化，结果有不同吗？请说明。与练习 9.30 的结果比较一下，你认为哪一个分析更好？为什么？

9.32　对表 1.8 的公牛的数据做因子分析，用这七个变量 YrHgt，FtFrBody，PrctFFB，Frame，BkFat，SaleHt 和 SaleNt。因子化样本协方差矩阵 **S** 并解释这些因子。计算因子得分，并查找离群值。用样本相关系数矩阵 **R** 再作因子分析。比较分别由 **S** 和 **R** 得到的结果。若 **R** 而非 **S** 因子化，结果有不同吗？请说明。

参 考 文 献

1. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Methods* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.
2. Bartholomew, D. J. *Latent Variable Models and Factor Analysis*. London: Griffin, 1987.
3. Bartlett, M. S. "The Statistical Conception of Mental Factors." *British Journal of Psychology*, 28 (1937), 97～104.
4. Bartlett, M. S. "A Note on Multiplying Factors for Various Chi-Squared Approximations." *Journal of the Royal Statistical Society* (*B*), 16 (1954), 296～298.
5. Bentler, P. M. "Multivariate Analysis with Latent Variables: Causal Models." *Annual Review of Psychology*. 31 (1980), 419～456.
6. Bielby, W. T., and R. M Hauser "Structural Equation Models." *Annual Review of Sociology*, 3 (1977), 137～161.
7. Bollen, K. A. *Structural Equations with Latent Variables*. New York: John Wiley, 1989.
8. Dixon, W. J., ed. *BMDP Biomedical Computer Programs*. Berkeley, CA.: University of California Press, 1979.
9. Duncan, O. D. *Introduction to Structural Equation Models*. New York: Academic Press, 1975.
10. Dunn, L. C. "The Effect of Inbreeding on the Bones of the Fowl." *Storrs Agricultural Experimental Station Bulletin*, 52 (1928), 1～112.
11. Goldberger, A. S. "Structural Equation Methods in the Social Sciences." *Econometrica*, 40 (1972), 979～1001.
12. Harmon, H. H. *Modern Factor Analysis*. Chicago: The University of Chicago Press, 1967.
13. Hayduk, L. A. *Structural Equation Modeling with LISREL*. Baltimore: The Johns Hopkins University Press, 1987.
14. Heise, D. R. *Causal Analysis*. New York: John Wiley, 1975.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第10章 典型相关

10.1 引言

典型相关分析的目的是识别并量化两组变量之间的联系。霍特林[(5),(6)]最早开发了这项技术，他提供了关于等差速度、等差动能与阅读速度、阅读能力之间关系的例子。(见练习10.9)其他一些例子中包括政府政策变量和经济目标变量的关系，以及大学“表现”和入学前“成绩”的关系。

典型相关分析的研究焦点是，一组变量的线性组合和另一组变量的线性组合之间的相关关系。想法是这样的：首先求一对线性组合，它有最大相关系数。下一步则从和最初挑选的这对线性组合不相关的线性组合配对中，选出有最大相关系数的一对，如此继续下去。这些选出的线性组合配对，称为**典型变量**，它们的相关系数，称为**典型相关系数**。

典型相关系数度量了这两组变量之间联系的强度。此项最大化技术是努力将两组变量间一个高维关系浓缩到少数几对典型变量来体现。

10.2 典型变量和典型相关系数

我们关心的是两组变量之间联系的度量。用$(p\times 1)$随机向量$\mathbf{X}^{(1)}$来代表第一组的p个变量，$(q\times 1)$随机向量$\mathbf{X}^{(2)}$代表第二组的q个变量。在理论研究中，我们假设$\mathbf{X}^{(1)}$是较小的组，即$p\leqslant q$。

对于随机向量$\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)}$，令

$$\begin{aligned} &E(\mathbf{X}^{(1)})=\boldsymbol{\mu}^{(1)}; \qquad \mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})=\boldsymbol{\Sigma}_{11} \\ &E(\mathbf{X}^{(2)})=\boldsymbol{\mu}^{(2)}; \qquad \mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})=\boldsymbol{\Sigma}_{22} \\ &\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)})=\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\boldsymbol{\Sigma}_{21}' \end{aligned} \tag{10-1}$$

把$\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)}$联合起来考虑将是方便的，因此利用结论(2-38)至(2-40)以及(10-1)，我们发现随机向量

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\underset{((p+q)\times 1)}{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{(1)} \\ \cdots\cdots \\ \mathbf{X}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1^{(1)} \\ X_2^{(1)} \\ \vdots \\ X_p^{(1)} \\ \cdots\cdots \\ X_1^{(2)} \\ X_2^{(2)} \\ \vdots \\ X_q^{(2)} \end{bmatrix} \tag{10-2}$$

有均值向量

$$\underset{((p+q)\times 1)}{\boldsymbol{\mu}} = E(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \mathbf{E}(\mathbf{X}^{(1)}) \\ \cdots\cdots \\ E(\mathbf{X}^{(2)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} \\ \cdots \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{bmatrix} \tag{10-3}$$

和协方差矩阵

$$\begin{aligned} \underset{(p+q)\times(p+q)}{\boldsymbol{\Sigma}} &= E(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})' \\ &= \left[\begin{array}{c:c} E(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})' & E(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})' \\ \hdashline E(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})' & E(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})' \end{array}\right] \\ &= \left[\begin{array}{c:c} \underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}} & \underset{(p\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}} \\ \hdashline \underset{(q\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{21}} & \underset{(q\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}} \end{array}\right] \end{aligned} \tag{10-4}$$

来自不同组——一个从 $\mathbf{X}^{(1)}$，一个从 $\mathbf{X}^{(2)}$——的变量配对之间的协方差包含于 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}$ 中，或等价地包含于 $\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ 中。也就是说，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}$ 中的 pq 个元素量度这两组之间的联系。当 p 和 q 较大时，整体地解释 Σ_{12} 中的元素基本上是没有希望的。而且，为达到预测和比较的目的，变量的线性组合常常是我们感兴趣的和有用的。典型相关分析的主要任务是，用 Σ_{12} 中几个经过仔细挑选的协方差（或相关系数）而不是它的全部 pq 个协方差来综合 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 间的联系。

线性组合提供了对一组变量简单扼要的度量。对系数向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ 的某些配对，设

$$\begin{aligned} U &= \mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)} \\ V &= \mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)} \end{aligned} \tag{10-5}$$

则利用式(10-5)和式(2-45)，得到

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(U) &= \mathbf{a}'\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})\mathbf{a} = \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{a} \\ \mathrm{Var}(V) &= \mathbf{b}'\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})\mathbf{b} = \mathbf{b}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\mathbf{b} \\ \mathrm{Cov}(U,V) &= \mathbf{a}'\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)})\mathbf{b} = \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b} \end{aligned} \tag{10-6}$$

我们将找系数向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$，使

$$\mathrm{Corr}(U,V) = \frac{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b}}{\sqrt{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{a}}\sqrt{\mathbf{b}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\mathbf{b}}} \tag{10-7}$$

尽可能的大。

我们做如下定义：

第一对典型变量，或第一典型变量配对是具有单位方差的线性组合 U_1 和 V_1 的配对，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

它使对应的相关系数(10-7)最大化。

第二对典型变量,或**第二典型变量配对**是具有单位方差的线性组合 U_2 和 V_2 的配对,且在与第一对典型变量不相关的所有配对中,其对应的相关系数(10-7)为最大。

在第 k 步中:

第 k 对典型变量,或**第 k 典型变量配对**是具有单位方差的线性组合 U_k 和 V_k 的配对,且在与 $k-1$ 个典型变量配对都不相关的所有配对中,其相关系数(10-7)为最大。

第 k 对典型变量之间的相关系数称为**第 k 典型相关系数**。

以下结论为得到典型变量及它们的相关系数提供了必要的细节。

结论 10.1 假设 $p\leqslant q$,随机向量 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}^{(1)}}$ 和 $\underset{(q\times 1)}{\mathbf{X}^{(2)}}$ 有

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)})=\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}},\quad \mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(2)})=\underset{(q\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}}\quad 及\quad \mathrm{Cov}(\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)})=\underset{(p\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}}$$

其中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是满秩的。对系数向量 $\underset{(p\times 1)}{\mathbf{a}}$ 和 $\underset{(q\times 1)}{\mathbf{b}}$,构成线性组合 $U=\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $V=\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}$。则由线性组合(第一典型变量配对)

$$U_1=\underbrace{\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)}}_{a_1'}\quad 和\quad V_1=\underbrace{\mathbf{f}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{X}^{(2)}}_{b_1'}$$

达到

$$\max_{\mathbf{a},\mathbf{b}}\mathrm{Corr}(U,V)=\rho_1^*$$

第 k 对典型变量,$k=2,3,\cdots,p$,

$$U_k=\mathbf{e}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)},\qquad V_k=\mathbf{f}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{X}^{(2)}$$

使

$$\mathrm{Corr}(U_k,V_k)=\rho_k^*$$

在那些与前面 $1,2,\cdots,k-1$ 个典型变量无关的线性组合中最大化。

这里 $\rho_1^{*2}\geqslant\rho_2^{*2}\geqslant\cdots\geqslant\rho_p^{*2}$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$ 的特征值,而 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p$ 是相应的 $(p\times 1)$ 特征向量。($\rho_1^{*2},\rho_2^{*2},\cdots,\rho_p^{*2}$ 亦是矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}$ 的 p 个最大的特征值,这个矩阵有对应的 $(q\times 1)$ 特征向量 $\mathbf{f}_1,\mathbf{f}_2,\cdots,\mathbf{f}_p$。每一个 $\mathbf{f}_i$ 都是和 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_i$ 成比例的。)

典型变量具有性质

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(U_k)&=\mathrm{Var}(V_k)=1\\ \mathrm{Cov}(U_k,U_l)&=\mathrm{Corr}(U_k,U_l)=0\quad k\neq l\\ \mathrm{Cov}(V_k,V_l)&=\mathrm{Corr}(V_k,V_l)=0\quad k\neq l\\ \mathrm{Cov}(U_k,V_l)&=\mathrm{Corr}(U_k,V_l)=0\quad k\neq l\end{aligned}$$

其中,$k,l=1,2,\cdots,p$。

证明 假设 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ 都是非奇异的①。引进对称的平方根矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{1/2}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{1/2}$ 具有 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{1/2}$ 及 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$。[见式(2-22)。]令 $\mathbf{c}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{1/2}\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{d}=\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{1/2}\mathbf{b}$,故 $\mathbf{a}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{c}$ 和 $\mathbf{b}=\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{d}$。那么

---

① 若 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ 或 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ 是奇异的,可从适当的组中删去一个或多个变量,并且线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}$ 可用压缩过的组来表示。若 $p>$ 秩$(\boldsymbol{\Sigma}_{12})=p_1$,则非零的典型相关系数为 $\rho_1^*,\rho_2^*,\cdots,\rho_{p_1}^*$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathrm{Corr}(\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}) = \frac{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b}}{\sqrt{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{a}}\ \sqrt{\mathbf{b}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\mathbf{b}}} = \frac{\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{d}}{\sqrt{\mathbf{c}'\mathbf{c}}\ \sqrt{\mathbf{d}'\mathbf{d}}} \tag{10-8}$$

由柯西-施瓦茨不等式(2-48),有

$$\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{d} \leqslant (\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{c})^{1/2}(\mathbf{d}'\mathbf{d})^{1/2} \tag{10-9}$$

因为 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$是一个 $p\times p$ 的对称矩阵,由最大化结论(2-51)得到

$$\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{c} \leqslant \lambda_1\mathbf{c}'\mathbf{c} \tag{10-10}$$

其中 λ_1 为 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$的最大的特征值。当 $\mathbf{c}=\mathbf{e}_1$ 时式(10-10)中等号成立,$\mathbf{e}_1$ 为与 λ_1 相联系的规范化的特征值。若 $\mathbf{d}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1$ 成比例,则式(10-9)中的等号亦成立。因此,

$$\max_{\mathbf{a},\mathbf{b}}\mathrm{Corr}(\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}) = \sqrt{\lambda_1} \tag{10-11}$$

当 $\mathbf{a}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{c}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1$ 且 $\mathbf{b}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1$ 成比例时,上式左边取到最大值,其中符号的选取使得成正相关。我们取 $\mathbf{b}=\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{f}_1$。推出最后的对应关系是在下述等式

$$(\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2})\mathbf{e}_1 = \lambda_1\mathbf{e}_1$$

两边同乘以 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$,得到

$$\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}(\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1) = \lambda_1(\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1) \tag{10-12}$$

这样,如果$(\lambda_1,\mathbf{e}_1)$是 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$的一个特征值-特征向量对,则$(\lambda_1,\mathbf{f}_1)$是 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\cdot\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}$的一个特征值-特征向量对,其中 $\mathbf{f}_1$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1$ 的规范化形式,且选其符号使得有正相关。前面已经证过 $U_1=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)}$和 $V_1=\mathbf{f}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{X}^{(2)}$是第一对典型变量,它们的相关系数 $\rho_1^*=\sqrt{\lambda_1}$。还有 $\mathrm{Var}(U_1)=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{e}_1=1$,及类似的 $\mathrm{Var}(V_1)=1$。

又,注意到,如果

$$0 = \mathrm{Cov}(U_1,\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)}) = \mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{c} = \mathbf{e}_1'\mathbf{c} \quad \text{或 } \mathbf{c}\perp\mathbf{e}_1$$

则 U_1 和任一个线性组合 $\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)}=\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)}$是不相关的。

在第 k 步,我们要求 $\mathbf{c}\perp\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{k-1}$。则最大化结论(2-52)得出

对 $\mathbf{c}\perp\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_{k-1}$,$\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{c}\leqslant\lambda_k\mathbf{c}'\mathbf{c}$

而由式(10-8)得到

$$\mathrm{Corr}(\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}) = \frac{\mathbf{c}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{d}}{\sqrt{\mathbf{c}'\mathbf{c}}\ \sqrt{\mathbf{d}'\mathbf{d}}} \leqslant \sqrt{\lambda_k}$$

如前所说,对 $\mathbf{c}=\mathbf{e}_k$ 或 $\mathbf{a}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_k$ 和 $\mathbf{b}=\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{f}_k$ 有等号成立。这样,$U_k=\mathbf{e}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)}$和 $V_k=\mathbf{f}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{X}^{(2)}$为第 k 个典型配对,且其相关系数$\sqrt{\lambda_k}=\rho_k^*$。

尽管我们没有明确要求 V_k 是不相关的,但

$$\mathrm{Cov}(V_k,V_l) = \mathbf{f}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{f}_l = \mathbf{f}_k'\mathbf{f}_l = 0, \quad \text{若 } k\neq l\leqslant p$$

既然由于式(10-12),$\mathbf{f}_k'$为 $\mathbf{e}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}$的倍数,我们同样有

$$\mathrm{Cov}(U_k,V_l) = \mathbf{e}_k'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{f}_l = 0, \quad \text{若 } k\neq l\leqslant p$$

如果把原来的变量用 $\mathbf{Z}^{(1)}=[Z_1^{(1)},Z_2^{(1)},\cdots,Z_p^{(1)}]'$和 $\mathbf{Z}^{(2)}=[Z_1^{(2)},Z_2^{(2)},\cdots,Z_q^{(2)}]'$来标准

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

化，从第一准则，典型变量具有如下的形式

$$U_k = \mathbf{a}_k'\mathbf{Z}^{(1)} = \mathbf{e}_k'\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\mathbf{Z}^{(1)}$$
$$V_k = \mathbf{b}_k'\mathbf{Z}^{(2)} = \mathbf{f}_k'\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}\mathbf{Z}^{(2)} \tag{10-13}$$

这里，$\mathrm{Cov}(\mathbf{Z}^{(1)})=\boldsymbol{\rho}_{11}$，$\mathrm{Cov}(\mathbf{Z}^{(2)})=\boldsymbol{\rho}_{22}$，$\mathrm{Cov}(\mathbf{Z}^{(1)},\mathbf{Z}^{(2)})=\boldsymbol{\rho}_{12}=\boldsymbol{\rho}_{12}'$，$\mathbf{e}_k$ 及 $\mathbf{f}_k$ 分别为 $\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}\cdot\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}$ 及 $\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}$ 的特征向量。而典型相关系数 ρ_k^* 满足

$$\mathrm{Corr}(U_k,V_k) = \rho_k^*, \qquad k = 1,2,\cdots,p \tag{10-14}$$

其中 $\rho_1^{*2}\geqslant\rho_2^{*2}\geqslant\cdots\geqslant\rho_p^{*2}$ 是矩阵 $\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}$（或等价地，矩阵 $\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}$）的非零特征值。

评注 注意

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_k'(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)}) &= a_{k1}(X_1^{(1)}-\mu_1^{(1)}) + a_{k2}(X_2^{(1)}-\mu_2^{(1)}) \\ &\quad + \cdots + a_{kp}(X_p^{(1)}-\mu_p^{(1)}) \\ &= a_{k1}\sqrt{\sigma_{11}}\,\frac{(X_1^{(1)}-\mu_1^{(1)})}{\sqrt{\sigma_{11}}} + a_{k2}\sqrt{\sigma_{22}}\,\frac{(X_2^{(1)}-\mu_2^{(1)})}{\sqrt{\sigma_{22}}} \\ &\quad + \cdots + a_{kp}\sqrt{\sigma_{pp}}\,\frac{(X_p^{(1)}-\mu_p^{(1)})}{\sqrt{\sigma_{pp}}}\end{aligned}$$

其中 $\mathrm{Var}(X_i^{(1)})=\sigma_{ii}$，$i=1,2,\cdots,p$。因而，标准化变量 $Z_i^{(1)}=(X_i^{(1)}-\mu_i^{(1)})/\sqrt{\sigma_{ii}}$ 的典型系数只与原变量 $X_i^{(1)}$ 的典型系数有关。特别地，若 $\mathbf{a}_k'$ 为第 k 个典型变量 U_k 的系数向量，则 $\mathbf{a}_k'\mathbf{V}_{11}^{1/2}$ 是从标准化变量 $\mathbf{Z}^{(1)}$ 构造的第 k 个典型变量的系数向量。这里 $\mathbf{V}_{11}^{1/2}$ 是对角阵，其第 i 个对角元素为 $\sqrt{\sigma_{ii}}$。同理，$\mathbf{b}_k'\mathbf{V}_{22}^{1/2}$ 是由标准化变量组 $\mathbf{Z}^{(2)}$ 构造的典型变量的系数向量。在这种情况下，$\mathbf{V}_{22}^{1/2}$ 是第 i 个对角元素为 $\sqrt{\sigma_{ii}}=\sqrt{\mathrm{Var}(X_i^{(2)})}$ 的对角阵。标准化不改变典型相关系数。但是，如果 $\rho_k^{*2}=\rho_{k+1}^{*2}$，系数向量 $\mathbf{a}_k$，$\mathbf{b}_k$ 的选择将是不惟一的。

标准化变量的典型系数和原始变量的典型系数之间的关系从矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\ (\text{或 } \boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2})$$

的特殊结构得出（也见于式(10-16)），并且在本书中，对典型相关分析该关系是惟一的。例如，主成分分析中，若 $\mathbf{a}_k'$ 是从 $\boldsymbol{\Sigma}$ 得到的第 k 个主成分的系数向量，则 $\mathbf{a}_k'(\mathbf{X}-\boldsymbol{\mu})=\mathbf{a}_k'\mathbf{V}^{1/2}\mathbf{Z}$，但我们不能由此就推断说 $\mathbf{a}_k'\mathbf{V}^{1/2}$ 是从 $\boldsymbol{\rho}$ 导出的第 k 个主成分的系数向量。

例 10.1 （计算标准化变量的典型变量和典型相关系数）

假设 $\mathbf{Z}^{(1)}=[\mathbf{Z}_1^{(1)},\mathbf{Z}_2^{(1)}]'$ 是标准化变量且 $\mathbf{Z}^{(2)}=[Z_1^{(2)},Z_2^{(2)}]'$ 也是标准化变量。令 $\mathbf{Z}=[\mathbf{Z}^{(1)},\mathbf{Z}^{(1)}]'$ 和

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{Z}) = \left[\begin{array}{c:c}\boldsymbol{\rho}_{11} & \boldsymbol{\rho}_{12}\\ \hdashline \boldsymbol{\rho}_{21} & \boldsymbol{\rho}_{22}\end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc:cc}1.0 & 0.4 & 0.5 & 0.6\\ 0.4 & 1.0 & 0.3 & 0.4\\ \hdashline 0.5 & 0.3 & 1.0 & 0.2\\ 0.6 & 0.4 & 0.2 & 1.0\end{array}\right]$$

则

$$\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2} = \begin{bmatrix}1.0681 & -0.2229\\ -0.2229 & 1.0681\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}=\begin{bmatrix}1.0417 & -0.2083\\ -0.2083 & 1.0417\end{bmatrix}$$

和

$$\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}=\begin{bmatrix}0.4371 & 0.2178\\ 0.2178 & 0.1096\end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{12}\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}$的特征值 ρ_1^{*2} 和 ρ_2^{*2} 可由下式

$$0=\begin{vmatrix}0.4371-\lambda & 0.2178\\ 0.2178 & 0.1096-\lambda\end{vmatrix}=(0.4371-\lambda)(0.1096-\lambda)-2.178^2$$
$$=\lambda^2-0.5467\lambda+0.0005$$

解得 $\rho_1^{*2}=0.5458$ 和 $\rho_2^{*2}=0.0009$。特征向量 $\mathbf{e}_1$ 从向量方程

$$\begin{bmatrix}0.4371 & 0.2178\\ 0.2178 & 0.1096\end{bmatrix}\mathbf{e}_1=0.5458\mathbf{e}_1$$

得到。因此，$\mathbf{e}_1'=[0.8947,0.4466]$及

$$\mathbf{a}_1=\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1=\begin{bmatrix}0.8561\\ 0.2776\end{bmatrix}$$

由结论 10.1，$\mathbf{f}_1\propto\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_{21}\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_1$，$\mathbf{b}_1=\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1/2}\mathbf{f}_1$。因此，

$$\mathbf{b}_1\propto\boldsymbol{\rho}_{22}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{21}\mathbf{a}_1=\begin{bmatrix}0.3959 & 0.2292\\ 0.5209 & 0.3542\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.8561\\ 0.2776\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.4026\\ 0.5443\end{bmatrix}$$

我们必须调整 $\mathbf{b}_1$，使得

$$\mathrm{Var}(V_1)=\mathrm{Var}(\mathbf{b}_1'\mathbf{Z}^{(2)})=\mathbf{b}_1'\boldsymbol{\rho}_{22}\mathbf{b}_1=1$$

向量$[0.4026,0.5443]'$给出

$$[0.4026,\ 0.5443]\begin{bmatrix}1.0 & 0.2\\ 0.2 & 1.0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.4026\\ 0.5443\end{bmatrix}=0.5460$$

利用 $\sqrt{0.5460}=0.7389$，我们取

$$\mathbf{b}_1=\frac{1}{0.7389}\begin{bmatrix}0.4026\\ 0.5443\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.5448\\ 0.7366\end{bmatrix}$$

第一对典型变量是

$$U_1=\mathbf{a}_1'\mathbf{Z}^{(1)}=0.86Z_1^{(1)}+0.28Z_2^{(1)}$$
$$V_1=\mathbf{b}_1'\mathbf{Z}^{(2)}=0.54Z_1^{(2)}+0.74Z_2^{(2)}$$

它们的典型相关系数为

$$\rho_1^*=\sqrt{\rho_1^{*2}}=\sqrt{0.5458}=0.74$$

这是分别来自 $\mathbf{Z}^{(1)}$组和 $\mathbf{Z}^{(2)}$组的变量的线性组合之间可能的最大相关系数。

第二典型相关系数 $\rho_2^*=\sqrt{0.0009}=0.03$ 很小，因而第二对典型变量没有为两组变量的联系传达什么信息，尽管它们和第一对的成员是不相关的。（第二对典型变量的计算见练习 10.5。）

我们指出 U_1，V_1 除尺度改变，与下一配对

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\tilde{U}_1 = \mathbf{a}'\mathbf{Z}^{(1)} = [3,1]\begin{bmatrix} Z_1^{(1)} \\ Z_2^{(1)} \end{bmatrix} = 3Z_1^{(1)} + Z_2^{(1)},$$

$$\tilde{V}_1 = \mathbf{b}'\mathbf{Z}^{(2)} = [1,1]\begin{bmatrix} Z_1^{(2)} \\ Z_2^{(2)} \end{bmatrix} = Z_1^{(2)} + Z_2^{(2)}$$

没有大的不同。对这些变量，有

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(\tilde{U}_1) &= \mathbf{a}'\boldsymbol{\rho}_{11}\mathbf{a} = 12.4 \\ \mathrm{Var}(\tilde{V}_1) &= \mathbf{b}'\boldsymbol{\rho}_{22}\mathbf{b} = 2.4 \\ \mathrm{Cov}(\tilde{U}_1,\tilde{V}_1) &= \mathbf{a}'\boldsymbol{\rho}_{12}\mathbf{b} = 4.0 \end{aligned}$$

和

$$\mathrm{Corr}(\tilde{U}_1,\tilde{V}_1) = \frac{4.0}{\sqrt{12.4} \times \sqrt{2.4}} = 0.73$$

在相当简单并易于解释的线性组合 $\tilde{U}_1,\tilde{V}_1$ 之间的相关系数，几乎是最大的值 $\rho_1^* = 0.74$。

在结论 10.1 中求解典型变量的过程有某些优点。其特征向量决定典型系数的对称矩阵，容易用计算机处理。此外，将系数向量写为 $\mathbf{a}_k = \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_k$ 和 $\mathbf{b}_k = \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{f}_k$ 便于解析描述和几何解释。为了减轻计算负担，很多人喜欢从特征值方程

$$|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} - \rho^{*2}\mathbf{I}| = 0 \tag{10-15}$$

求典型相关系数。系数向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ 可直接从特征向量方程

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\mathbf{a} &= \rho^{*2}\mathbf{a} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b} &= \rho^{*2}\mathbf{b} \end{aligned} \tag{10-16}$$

求得。通常，矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}$ 是不对称的。（详见练习 10.4）

10.3 总体典型变量的解释

一般来说，典型变量是人为定义的。就是说，它们没有实质意义。如果使用原始变量 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$，那么典型系数 $\mathbf{a},\mathbf{b}$ 的单位与 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 两组的单位成比例。如果原始变量被标准化，有零均值和单位方差，典型系数就没有测量值单位，而且它们必须要用标准化变量来阐述。

结论 10.1 给出了典型变量和典型相关系数的技术性定义。在这一节里，我们集中于解释这些量。

确认典型变量

尽管典型变量是人为定义的，它们却可常常利用题材变量来“确认”。很多时候，计算典型变量和原始变量的相关系数帮助了这种确认。但是，这些相关系数的解释是必须加以小心的。它们没有指出原始变量是如何共同为典型分析做出贡献，在这个意义上，典型变量仅仅提供单一变量的信息。（可参见[11]。）正因如此，许多研究人员宁愿直接从标准化

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的系数(10-13)来评价原始变量的贡献。

令 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{A}}=[\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots,\mathbf{a}_p]$和 $\underset{(q\times q)}{\mathbf{B}}=[\mathbf{b}_1,\mathbf{b}_2,\cdots,\mathbf{b}_q]$,则典型变量的向量为

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{U}}=\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)};\qquad \underset{(q\times 1)}{\mathbf{V}}=\mathbf{B}\mathbf{X}^{(2)} \tag{10-17}$$

这里我们的主要兴趣在 $\mathbf{V}$ 中的前 p 个典型变量。接着,有

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)})=\mathrm{Cov}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(1)})=\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{11} \tag{10-18}$$

因为 $\mathrm{Var}(U_i)=1$,所以 $\mathrm{Corr}(U_i,X_k^{(1)})$是由 $\mathrm{Cov}(U_i,X_k^{(1)})$除以$\sqrt{\mathrm{Var}(X_k^{(1)})}=\sigma_{kk}^{1/2}$得到的。等价地,$\mathrm{Corr}(U_i,X_k^{(1)})=\mathrm{Cov}(U_i,\sigma_{kk}^{-1/2}X_k^{(1)})$。引入记号 $\mathbf{V}_{11}^{-1/2}$,它是对角元素为 $\sigma_{kk}^{-1/2}$的$(p\times p)$对角阵。用矩阵表示,我们有

$$\begin{aligned}\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\rho}}_{\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)}}=\mathrm{Corr}(\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)})&=\mathrm{Cov}(\mathbf{U},\mathbf{V}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)})=\mathrm{Cov}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{V}_{11}^{-1/2}\mathbf{X}^{(1)})\\&=\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{V}_{11}^{-1/2}\end{aligned}$$

对$(\mathbf{U},\mathbf{X}^{(2)})$,$(\mathbf{V},\mathbf{X}^{(2)})$和$(\mathbf{V},\mathbf{X}^{(1)})$,类似的计算得到

$$\begin{aligned}&\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\rho}}_{\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)}}=\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{V}_{11}^{-1/2};\qquad \underset{(q\times q)}{\boldsymbol{\rho}}_{\mathbf{V},\mathbf{X}^{(2)}}=\mathbf{B}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\mathbf{V}_{22}^{-1/2}\\&\underset{(p\times q)}{\boldsymbol{\rho}}_{\mathbf{U},\mathbf{X}^{(2)}}=\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1/2};\qquad \underset{(q\times p)}{\boldsymbol{\rho}}_{\mathbf{V},\mathbf{X}^{(1)}}=\mathbf{B}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\mathbf{V}_{11}^{-1/2}\end{aligned} \tag{10-19}$$

其中 $\mathbf{V}_{22}^{-1/2}$是第 i 个对角元为$\sqrt{\mathrm{Var}(X_i^{(2)})}$的$(q\times q)$对角阵。

有时,从标准化变量得到的典型变量可以通过计算其相关系数来说明。于是,

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{Z}^{(1)}}=\mathbf{A}_{\mathbf{z}}\boldsymbol{\rho}_{11};\qquad \boldsymbol{\rho}_{\mathbf{V},\mathbf{Z}^{(2)}}=\mathbf{B}_{\mathbf{z}}\boldsymbol{\rho}_{22}\\&\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{Z}^{(2)}}=\mathbf{A}_{\mathbf{z}}\boldsymbol{\rho}_{12};\qquad \boldsymbol{\rho}_{\mathbf{V},\mathbf{Z}^{(1)}}=\mathbf{B}_{\mathbf{z}}\boldsymbol{\rho}_{21}\end{aligned} \tag{10-20}$$

其中 $\underset{(p\times p)}{\mathbf{A}_{\mathbf{z}}}$ 和 $\underset{(q\times q)}{\mathbf{B}_{\mathbf{z}}}$ 是矩阵,它们的行分别包含 $\mathbf{Z}^{(1)}$和 $\mathbf{Z}^{(2)}$组的典型系数。式(10-20)列出矩阵的相关系数与出现在式(10-19)中的相关系数有相同的数值,即 $\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)}}=\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{Z}^{(1)}}$,等等。这是因为,例如,$\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)}}=\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{V}_{11}^{-1/2}=\mathbf{A}\mathbf{V}_{11}^{1/2}\mathbf{V}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{V}_{11}^{-1/2}=\mathbf{A}_{\mathbf{z}}\boldsymbol{\rho}_{11}=\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{Z}^{(1)}}$。相关系数不受标准化的影响。

例 10.2 (计算典型变量和其成分变量间的相关系数)

假设情况同例 10.1,计算第一对典型变量和它们的成分变量之间的相关系数。

例 10.1 中的变量已是标准的,故式(10-20)适用。对标准化变量,有

$$\boldsymbol{\rho}_{11}=\begin{bmatrix}1.0 & 0.4\\0.4 & 1.0\end{bmatrix};\qquad \boldsymbol{\rho}_{22}=\begin{bmatrix}1.0 & 0.2\\0.2 & 1.0\end{bmatrix}$$

和

$$\boldsymbol{\rho}_{12}=\begin{bmatrix}0.5 & 0.6\\0.3 & 0.4\end{bmatrix}$$

当 $p=1$,

$$\mathbf{A}_{\mathbf{z}}=[0.86,\ 0.28],\qquad \mathbf{B}_{\mathbf{z}}=[0.54,\ 0.74]$$

故

$$\boldsymbol{\rho}_{U_1,\mathbf{Z}^{(1)}}=\mathbf{A}_{\mathbf{z}}\boldsymbol{\rho}_{11}=[0.86,\ 0.28]\begin{bmatrix}1.0 & 0.4\\0.4 & 1.0\end{bmatrix}=[0.97,\ 0.62]$$

且

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\boldsymbol{\rho}_{V_1,\mathbf{Z}^{(2)}} = \mathbf{B}_z\boldsymbol{\rho}_{22} = [0.54,\ 0.74]\begin{bmatrix}1.0 & 0.2\\ 0.2 & 1.0\end{bmatrix} = [0.69,\ 0.85]$$

我们得出结论，组 $\mathbf{Z}^{(1)}$ 中两个变量里的第一个与典型变量 U_1 联系更紧密。组 $\mathbf{Z}^{(2)}$ 中两个变量的第二个与 V_1 联系更紧密。此时，相关系数加强了标准化系数 $\mathbf{A}_z$ 和 $\mathbf{B}_z$ 所提供的信息。不过，因为这些相关系数忽略了每组中余下变量的贡献，所以，该相关系数提高了 $Z_2^{(1)}$ 在第一组和 $Z_1^{(2)}$ 在第二组中的相对重要性。

由式(10-20)，我们还可得到相关系数

$$\boldsymbol{\rho}_{U_1,\mathbf{Z}^{(2)}} = \mathbf{A}_z\boldsymbol{\rho}_{12} = [0.86,\ 0.28]\begin{bmatrix}0.5 & 0.6\\ 0.3 & 0.4\end{bmatrix} = [0.51,\ 0.63]$$

和

$$\boldsymbol{\rho}_{V_1,\mathbf{Z}^{(1)}} = \mathbf{B}_z\boldsymbol{\rho}_{21} = \mathbf{B}_z\boldsymbol{\rho}_{12}' = [0.54,\ 0.74]\begin{bmatrix}0.5 & 0.3\\ 0.6 & 0.4\end{bmatrix} = [0.71,\ 0.46]$$

在以后我们对样本典型变量的讨论中，我们会对最后几种相关系数的解释进行评价。

相关系数 $\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{U},\mathbf{X}^{(1)}}$ 和 $\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{V},\mathbf{X}^{(2)}}$ 可以帮助提供典型变量的含义。这精神同作主成分分析时是一样的，在那里主成分及其联系变量之间的相关系数可提供对成分的实际题材的解释。

典型相关系数作为其他相关系数的推广

首先，典型相关系数概括了两个变量间的相关系数。当 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 都各只含一个变量时，则 $p=q=1$，

$$|\mathrm{Corr}(X_1^{(1)},X_1^{(2)}| = |\mathrm{Corr}(aX_1^{(1)},bX_1^{(2)}|,\text{对一切 } a,b$$

因此，"典型变量"$U_1=X_1^{(1)}$ 和 $V_1=X_1^{(2)}$ 有相关系数 $\rho_1^* = |\mathrm{Corr}(X_1^{(1)},X_1^{(2)})|$。当 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 有更多分量时，令 $\mathbf{a}'=[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]$，其中第 i 个元为 1，令 $\mathbf{b}'=[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]$，其第 k 个元为 1，则得到

$$\begin{aligned}|\mathrm{Corr}(X_i^{(1)},X_k^{(2)}| &= |\mathrm{Corr}(\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)})|\\ &\leqslant \max_{\mathbf{a},\mathbf{b}} \mathrm{Corr}(\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}) = \rho_1^*\end{aligned} \tag{10-21}$$

也就是，第一典型相关系数比 $\boldsymbol{\rho}_{12}=\mathbf{V}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1/2}$ 中任一项的绝对值都大。

其次，多重相关系数 $\rho_{1(\mathbf{X}^{(2)})}$[见式(7-54)]是当 $\mathbf{X}^{(1)}$ 只有一个元素 $X_1^{(1)}(p=1)$ 时的一个特殊典型相关系数。回忆

$$\rho_{1(\mathbf{X}^{(2)})} = \max_{\mathbf{b}}\mathrm{Corr}(X_1^{(1)},\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}) = \rho_1^*,\quad p=1 \tag{10-22}$$

当 $p>1$ 时，ρ_1^* 比 $X_i^{(1)}$ 与 $\mathbf{X}^{(2)}$ 的多重相关系数之中的每一个都大，或比 $X_i^{(2)}$ 与 $\mathbf{X}^{(1)}$ 的多重相关系数中的每一个都大。

最后，我们指出，从结论 10.1 的证明知

$$\rho_{U_k(\mathbf{X}^{(2)})} = \max_{\mathbf{b}}\mathrm{Corr}(U_k,\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}) = \mathrm{Corr}(U_k,V_k) = \rho_k^* \tag{10-23}$$

$$k=1,2,\cdots,p$$

类似地

$$\rho_{V_k(\mathbf{X}^{(1)})} = \max_{\mathbf{a}}\mathrm{Corr}(\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)},V_k) = \mathrm{Corr}(U_k,V_k) = \rho_k^*, \tag{10-24}$$

$$k=1,2,\cdots,p$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

上式说明，典型相关系数亦是 $\mathbf{U}_k$ 与 $\mathbf{X}^{(2)}$ 多重相关系数或是 V_k 与 $\mathbf{X}^{(1)}$ 的多重相关系数。

由于多重相关系数的解释，第 k 个典型相关系数的平方 ρ_k^{*2} 是典型变量 U_k 的方差被组 $\mathbf{X}^{(2)}$"解释"的比例，亦是典型变量 V_k 的方差被组 $\mathbf{X}^{(1)}$"解释"的比例。因此，ρ_k^{*2} 常被称为两组 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 之间的**平分方差**。最大值 ρ_1^{*2} 有时看作组重叠的测度。

前 r 个典型变量作为可变性的综合

将坐标轴从 $\mathbf{X}^{(1)}$ 变换到 $\mathbf{U}=\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)}$，从 $\mathbf{X}^{(2)}$ 变换到 $\mathbf{V}=\mathbf{B}\mathbf{X}^{(2)}$，这种变换使得 $\mathrm{Corr}(U_1, V_1)$ 最大化，并且相继地，使 $\mathrm{Corr}(U_i, V_i)$ 最大化，其中 (U_i, V_i) 与前面的配对 (U_1, V_1)，(U_2, V_2)，…，(U_{i-1}, V_{i-1}) 有零相关系数。$\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 两组间的相关在这些典型变量配对中分割开了。

特意挑选系数向量 $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i$ 使相关系数最大，且不必提供(近似地)说明子集协方差 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ 的变量。当前几对典型变量对 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ 中的变异性提供不了好的综合时，我们不清楚要有多高的典型相关系数该被解释。

例 10.3 (典型相关系数作为可变性的糟糕综合)

考虑协方差矩阵

$$\mathrm{Cov}\left(\begin{bmatrix} X_1^{(1)} \\ X_2^{(1)} \\ \hdashline X_1^{(2)} \\ X_2^{(2)} \end{bmatrix}\right) = \left[\begin{array}{c:c} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \hdashline \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc:cc} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.95 & 0 \\ \hdashline 0 & 0.95 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 100 \end{array}\right]$$

读者可以证明(见练习 10.1)第一对典型变量 $U_1=X_2^{(1)}$ 与 $V_1=X_1^{(2)}$ 有相关系数

$$\rho_1^* = \mathrm{Corr}(U_1, V_1) = 0.95$$

然而 $U_1=X_2^{(1)}$ 提供了第一组变异性的十分糟糕的综合。这组里大部分的变异性在 $X_1^{(1)}$ 中，与 U_1 不相关。同样的情况在第二组对 $V_1=X_1^{(2)}$ 亦为真。

总体典型相关分析的几何解释

对挑选典型变量过程的几何解释，提供了对典型相关分析本质的一些有价值的认识。

变换

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)}$$

从 $\mathbf{X}^{(1)}$ 到 $\mathbf{U}$ 给出

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{A}' = \mathbf{I}$$

由结论 10.1 及式(2-22)，$\mathbf{A}=\mathbf{E}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}=\mathbf{E}'\mathbf{P}_1\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\mathbf{P}_1'$，其中 $\mathbf{E}'$ 是行向量为 $\mathbf{e}_i'$ 的正交矩阵，并且有 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}=\mathbf{P}_1\boldsymbol{\Lambda}_1\mathbf{P}_1'$。现在 $\mathbf{P}'_1\mathbf{X}^{(1)}$ 是仅从 $\mathbf{X}^{(1)}$ 得到的主成分组。矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\mathbf{P}_1'\mathbf{X}^{(1)}$ 的第 i 行 $(1/\sqrt{\lambda_i})\mathbf{P}_i'\mathbf{X}^{(1)}$ 是变换至单位方差的第 i 个主成分。也就是，

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}(\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\mathbf{P}_1'\mathbf{X}^{(1)}) &= \boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\mathbf{P}_1'\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{P}_1\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2} = \boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\mathbf{P}_1'\mathbf{P}_1\boldsymbol{\Lambda}_1\mathbf{P}_1'\mathbf{P}_1\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2} \\ &= \boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\boldsymbol{\Lambda}_1\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2} = \mathbf{I}\end{aligned}$$

因此，$\mathbf{U}=\mathbf{A}\mathbf{X}^{(1)}=\mathbf{E}'\mathbf{P}_1\boldsymbol{\Lambda}_1^{-1/2}\mathbf{P}_1'\mathbf{X}^{(1)}$ 可被解释为(1)与标准化主成分不相关的 $\mathbf{X}^{(1)}$ 的变换，接着(2)由 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ 决定的严格(正交)转动 $\mathbf{P}_1$，再(3)由整体协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 决定另一个旋转

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\mathbf{E}'$。对 $\mathbf{V}=\mathbf{B}\mathbf{X}^{(2)}$ 有类似的解释。

10.4 样本典型变量和样本典型相关系数

对 $\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)}$ 中 $p+q$ 个变量中每个变量的 n 个观察值的随机样本，可构成 $n\times(p+q)$ 的数据矩阵

$$\mathbf{X}=[\mathbf{X}^{(1)}\ \vdots\ \mathbf{X}^{(2)}]$$

$$=\begin{bmatrix} x_{11}^{(1)} & x_{11}^{(1)} & \cdots & x_{1p}^{(1)} & \vdots & x_{11}^{(2)} & x_{12}^{(2)} & \cdots & x_{1q}^{(2)} \\ x_{21}^{(1)} & x_{2p}^{(1)} & \cdots & x_{2p}^{(1)} & \vdots & x_{21}^{(2)} & x_{22}^{(2)} & \cdots & x_{2q}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1}^{(1)} & x_{n1}^{(1)} & \cdots & x_{np}^{(1)} & \vdots & x_{n2}^{(2)} & x_{n2}^{(2)} & \cdots & x_{nq}^{(2)} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^{(1)\prime} & \vdots & \mathbf{x}_1^{(2)\prime} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{x}_n^{(1)\prime} & \vdots & \mathbf{x}_n^{(2)\prime} \end{bmatrix} \tag{10-25}$$

样本均值向量可组成

$$\underset{(p+q)\times 1}{\bar{\mathbf{x}}}=\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{x}}^{(1)} \\ \cdots\cdots \\ \bar{\mathbf{x}}^{(2)} \end{bmatrix} \quad 其中 \quad \bar{\mathbf{x}}^{(1)}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j^{(1)}$$

$$\bar{\mathbf{x}}^{(2)}=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j^{(2)} \tag{10-26}$$

同样地，样本协方差矩阵可以写成类似式(10-4)的形式。这样，

$$\underset{(p+q)\times(p+q)}{\mathbf{S}}=\begin{bmatrix} \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_{11}} & \vdots & \underset{(p\times q)}{\mathbf{S}_{12}} \\ \cdots\cdots & & \cdots\cdots \\ \underset{(q\times p)}{\mathbf{S}_{21}} & \vdots & \underset{(q\times q)}{\mathbf{S}_{22}} \end{bmatrix}$$

其中

$$\mathbf{S}_{kl}=\frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j^{(k)}-\bar{\mathbf{x}}^{(k)})(\mathbf{x}_j^{(l)}-\bar{\mathbf{x}}^{(l)})',\qquad k,l=1,2 \tag{10-27}$$

线性组合

$$\hat{U}=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}^{(1)};\qquad \hat{V}=\hat{\mathbf{b}}'\mathbf{x}^{(2)} \tag{10-28}$$

有样本相关系数[见式(3-36)]

$$r_{\hat{U},\hat{V}}=\frac{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{S}_{12}\hat{\mathbf{b}}}{\sqrt{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{S}_{11}\hat{\mathbf{a}}}\sqrt{\hat{\mathbf{b}}'\mathbf{S}_{22}\hat{\mathbf{b}}}} \tag{10-29}$$

第一对样本典型变量是具有使比率(10-29)最大的单位样本方差的线性组合 $\hat{U}_1,\hat{V}_1$ 配对。

一般来说，**第 k 对样本典型变量**是在与前面 $k-1$ 个样本典型变量不相关且有单位样本方差的变量的所有的线性组合中，使比率(10-29)最大的 $\hat{U}_k,\hat{V}_k$ 配对。

$\hat{U}_k$ 和 $\hat{V}_k$ 的样本相关系数称为**第 k 个样本典型相关系数**。

样本典型变量和样本典型相关系数可从样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_{11},\mathbf{S}_{12}=\mathbf{S}_{21}'$ 和 $\mathbf{S}_{22}$ 得到，方法与结论 10.1 中描述的总体情况是一致的。

结论 10.2 令 $\mathbf{S}_{11}^{-1/2}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1/2}$ 的 p 个顺序特征值为 $\hat{\rho}_1^{*2}\geqslant\hat{\rho}_2^{*2}\geqslant\cdots\geqslant\hat{\rho}_p^{*2}$ 对应的特

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

征向量为 $\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_p$，其中 $\mathbf{S}_{kl}$ 由式(10-27)定义且 $p\leqslant q$。令 $\hat{\mathbf{f}}_1,\hat{\mathbf{f}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{f}}_p$ 为 $S_{22}^{-1/2}S_{21}S_{11}^{-1}S_{12}\cdot S_{22}^{-1/2}$ 的特征向量，其中前 p 个 $\hat{\mathbf{f}}$ 可以从 $\hat{\mathbf{f}}_k=(1/\hat{\rho}_k^*)\mathbf{S}_{22}^{-1/2}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1/2}\hat{\mathbf{e}}_k(k=1,2,\cdots,p)$ 得到。于是，第 k 个样本典型变量配对① 为

$$\hat{U}_k=\underbrace{\hat{\mathbf{e}}_k'\mathbf{S}_{11}^{-1/2}}_{\hat{\mathbf{a}}_k'}\mathbf{x}^{(1)};\qquad \hat{V}_k=\underbrace{\hat{\mathbf{f}}_k'\mathbf{S}_{22}^{-1/2}}_{\hat{\mathbf{b}}_k'}\mathbf{x}^{(2)}$$

其中 $\mathbf{x}^{(1)}$ 和 $\mathbf{x}^{(2)}$ 为变量 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 对特定实验单元的值。并且，第一样本典型变量配对有最大的样本相关系数

$$r_{\hat{U}_1,\hat{V}_1}=\hat{\rho}_1^*$$

且对第 k 对，

$$r_{\hat{U}_k,\hat{V}_k}=\hat{\rho}_k^*$$

是同前 $k-1$ 个样本典型变量不相关的线性组合中可能的最大相关系数。

量 $\hat{\rho}_1^*,\hat{\rho}_2^*,\cdots,\hat{\rho}_p^*$ 是样本典型相关系数②。

证明 用 $\mathbf{S}_{kl}$ 代替 $\mathbf{\Sigma}_{kl}(k,l=1,2)$ 从结论 10.1 证明得到此结论的证明。

样本典型变量有单位样本方差

$$s_{\hat{U}_k,\hat{U}_k}=s_{\hat{V}_k,\hat{V}_k}=1 \tag{10-30}$$

且它们的样本相关系数为

$$r_{\hat{U}_k,\hat{U}_l}=r_{\hat{V}_k,\hat{V}_l}=0,\qquad k\neq l$$
$$r_{\hat{U}_k,\hat{V}_l}=0,\qquad k\neq l \tag{10-31}$$

计算在组 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 中变量和典型变量之间的样本相关系数，常常有助于阐述 $\hat{U}_k$ 和 $\hat{V}_k$。我们定义矩阵

$$\underset{(p\times p)}{\hat{\mathbf{A}}}=[\hat{\mathbf{a}}_1,\hat{\mathbf{a}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{a}}_p]';\qquad \underset{(q\times q)}{\hat{\mathbf{B}}}=[\hat{\mathbf{b}}_1,\hat{\mathbf{b}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{b}}_q]' \tag{10-32}$$

它们的行是样本典型变量的系数向量③。模仿式(10-17)，我们有

$$\underset{(p\times 1)}{\hat{\mathbf{U}}}=\hat{\mathbf{A}}\mathbf{x}^{(1)};\qquad \underset{(q\times 1)}{\hat{\mathbf{V}}}=\hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}^{(2)} \tag{10-33}$$

并且我们可以定义

$$\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{U}},\mathbf{x}^{(1)}}=\hat{\mathbf{U}}\text{ 和 }\mathbf{x}^{(1)}\text{ 的样本相关矩阵}$$
$$\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{V}},\mathbf{x}^{(2)}}=\hat{\mathbf{V}}\text{ 和 }\mathbf{x}^{(2)}\text{ 的样本相关矩阵}$$
$$\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{U}},\mathbf{x}^{(2)}}=\hat{\mathbf{U}}\text{ 和 }\mathbf{x}^{(2)}\text{ 的样本相关矩阵}$$
$$\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{V}},\mathbf{x}^{(1)}}=\hat{\mathbf{V}}\text{ 和 }\mathbf{x}^{(1)}\text{ 的样本相关矩阵}$$

与式(10-19)相对应，我们有

---

① 当分布是正态的，最大似然方法可通过用 $\hat{\mathbf{\Sigma}}=\mathbf{S}_n$ 代替 $\mathbf{S}$ 来实现。因此，样本典型相关系数 $\hat{\rho}_k^*$ 为 ρ_k^* 的最大似然估计，并且 $\sqrt{n/(n-1)}\hat{\mathbf{a}}_k$，$\sqrt{n/(n-1)}\hat{\mathbf{b}}_k$ 分别为 $\mathbf{a}_k$ 和 $\mathbf{b}_k$ 的最大似然估计。

② 若 $p>$ 秩$(\mathbf{S}_{12})=p_1$，非零样本典型相关系数为 $\hat{\rho}_1^*,\hat{\rho}_2^*,\cdots,\hat{\rho}_{p_1}^*$。

③ 向量 $\hat{\mathbf{b}}_{p_1+1}=\mathbf{S}_{22}^{-1/2}\hat{\mathbf{f}}_{p_1+1},\hat{\mathbf{b}}_{p_1+2}=\mathbf{S}_{22}^{-1/2}\hat{\mathbf{f}}_{p_1+2},\cdots,\hat{\mathbf{b}}_q=\mathbf{S}_{22}^{-1/2}\hat{\mathbf{f}}_q$ 由后 $q-p_1$ 个相互正交的特征向量 $\hat{\mathbf{f}}$ 决定，而 $\hat{\mathbf{f}}$ 为 $\mathbf{S}_{22}^{-1/2}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1/2}$ 的零特征值相联系的特征向量。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{aligned}
\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{U}},\mathbf{x}^{(1)}} &= \hat{\mathbf{A}}\mathbf{S}_{11}\mathbf{D}_{11}^{-1/2} \\
\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{V}},\mathbf{x}^{(2)}} &= \hat{\mathbf{B}}\mathbf{S}_{22}\mathbf{D}_{22}^{-1/2} \\
\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{U}},\mathbf{x}^{(2)}} &= \hat{\mathbf{A}}\mathbf{S}_{12}\mathbf{D}_{22}^{-1/2} \\
\mathbf{R}_{\hat{\mathbf{V}},\mathbf{x}^{(1)}} &= \hat{\mathbf{B}}\mathbf{S}_{21}\mathbf{D}_{11}^{-1/2}
\end{aligned}
\tag{10-34}
$$

其中 $\mathbf{D}_{11}^{-1/2}$是第 i 个对角元素为(样本 $\mathrm{Var}(x_i^{(1)}))^{-1/2}$的$(p\times p)$对角阵，而 $\mathbf{D}_{22}^{-1/2}$是第 i 个对角元素为(样本 $\mathrm{Var}(x_i^{(2)}))^{-1/2}$的$(q\times q)$对角阵。

评注 若观察值是已标准化的[见式(8-25)]，则数据矩阵变为

$$
\mathbf{Z} = [\mathbf{Z}^{(1)} \vdots \mathbf{Z}^{(2)}] = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1^{(1)\prime} & \mathbf{z}_1^{(2)\prime} \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{z}_n^{(1)\prime} & \mathbf{z}_n^{(2)\prime} \end{bmatrix}
$$

并且样本典型变量变为

$$
\underset{(p\times 1)}{\hat{\mathbf{U}}} = \hat{\mathbf{A}}_z\mathbf{z}^{(1)}; \qquad \underset{(q\times 1)}{\hat{\mathbf{V}}} = \hat{\mathbf{B}}_z\mathbf{z}^{(2)} \tag{10-35}
$$

其中 $\hat{\mathbf{A}}_z=\hat{\mathbf{A}}\mathbf{D}_{11}^{-1/2}$和 $\hat{\mathbf{B}}_z=\hat{\mathbf{B}}\mathbf{D}_{22}^{-1/2}$。样本典型相关系数不受标准化的影响。式(10-34)中列出的相关系数对标准观察值保持不变，并且这些相关系数可通过 $\hat{\mathbf{A}}_z$ 代替 $\hat{\mathbf{A}}$，$\hat{\mathbf{B}}_z$ 代替 $\hat{\mathbf{B}}$ 及 $\mathbf{R}$ 代替 $\mathbf{S}$ 来计算。注意对标准观察值有 $\mathbf{D}_{11}^{-1/2}=\underset{(p\times p)}{\mathbf{I}}$ 和 $\mathbf{D}_{22}^{-1/2}=\underset{(q\times q)}{\mathbf{I}}$。

例 10.4 (鸡的骨骼数据的典型相关分析)

在例 9.14 中，描述了白来亨鸡的骨骼和颅骨测量值组成的数据。在该例中，鸡骨测量值

$$
\text{头}(\mathbf{X}^{(1)}):\begin{cases} X_1^{(1)} = \text{颅骨幅宽} \\ X_2^{(1)} = \text{颅骨长度} \end{cases}
$$

$$
\text{腿}(\mathbf{X}^{(2)}):\begin{cases} X_1^{(2)} = \text{股骨长度} \\ X_2^{(2)} = \text{胫骨长度} \end{cases}
$$

有样本相关矩阵

$$
\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{cc:cc} 1.0 & 0.505 & 0.569 & 0.602 \\ 0.505 & 1.0 & 0.422 & 0.467 \\ \hdashline 0.569 & 0.422 & 1.0 & 0.926 \\ 0.602 & 0.467 & 0.926 & 1.0 \end{array}\right]
$$

头和腿的变量组的典型相关分析利用 $\mathbf{R}$ 产生两个典型相关系数和对应的变量对

$$
\hat{\rho}_1^* = 0.631 \quad \begin{aligned} \hat{U}_1 &= 0.781z_1^{(1)} + 0.345z_2^{(1)} \\ \hat{V}_1 &= 0.060z_1^{(2)} + 0.944z_2^{(2)} \end{aligned}
$$

和

$$
\hat{\rho}_2^* = 0.057 \quad \begin{aligned} \hat{U}_2 &= -0.856z_1^{(1)} + 1.106z_2^{(1)} \\ \hat{V}_2 &= -2.648z_1^{(2)} + 2.475z_2^{(2)} \end{aligned}
$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

这里 $z_i^{(1)}(i=1,2)$ 和 $z_i^{(2)}(i=1,2)$ 分别是组 1 和组 2 的标准化数据值。处理的结果取自统计软件 SAS 的输出，示于显示板 10.1 中。此外，原始变量和典型变量的相关系数在显示板中以阴影表示。

显示板 10.1 利用 PROC CANCORR 对例 10.4 作 SAS 分析

```
title 'Canonical Correlation Analysis';
data skull (type=corr);
_type_='CORR';
input_name_ $ x1 x2 x3 x4;
cards;
x1    1.0     .       .       .
x2    0.505   1.0     0.      .
x3    0.569   0.422   1.0     .
x4    0.602   0.467   0.926   1.0
;
proc cancorr data=skull vprefix=head wprefix=leg;
    var x1 x2; with x3 x4;
```

PROGRAM COMMANDS

例 10.5 （职业满意度的典型相关分析）

在研究组织结构对“职业满意度”的影响时，作为其中一部分，邓讷姆(Dunham)[4]调查了职业满意度与职业特性相关的程度。利用一调查方法，对从一大型零售公司各分公司挑出的 $n=784$ 个行政人员，测量了 $p=5$ 个职业特性和 $q=7$ 个职业满意变量。职业满意度的测量与职业特性是否相联系？这个答案可能对职业设计有启示。

原始职业特性变量 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和职业满意度变量 $\mathbf{X}^{(2)}$ 分别定义为

$$\mathbf{X}^{(1)}=\begin{bmatrix}X_1^{(1)}\\X_2^{(1)}\\X_3^{(1)}\\X_4^{(1)}\\X_5^{(1)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\text{用户反馈}\\\text{任务重要性}\\\text{任务多样性}\\\text{任务特性}\\\text{自主权}\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}^{(2)}=\begin{bmatrix}X_1^{(2)}\\X_2^{(2)}\\X_3^{(2)}\\X_4^{(2)}\\X_5^{(2)}\\X_6^{(2)}\\X_7^{(2)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\text{主管满意度}\\\text{事业前景满意度}\\\text{财政满意度}\\\text{工作强度满意度}\\\text{公司地位满意度}\\\text{工种满意度}\\\text{总体满意度}\end{bmatrix}$$

变量 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 应答值在一个尺度下记录且被标准化了。对 784 个被测者的样本相关系数矩阵为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

显示板 10.1(续)

Canonical Correlation Analysis

	Canonical Correlation	Adjusted Canonical Correlation	Approx Standard Error	Squared Canonical Correlation
1	0.631085	0.628291	0.036286	0.398268
2	0.056794		0.060108	0.003226

Raw Canonical Coefficient for the 'VAR' Variables

	HEAD1	HEAD2
X1	0.7807924389	−0.855973184
X2	0.3445068301	1.1061835145

OUTPUT

Raw Canonical Coefficients for the 'WITH' Variables

	LEG1	LEG2
X3	0.0602508775	−2.648156338
X4	0.943948961	2.4749388913

Canonical Structure

Correlations Between the 'VAR' Variables and Their Canonical Variables

	HEAD1	HEAD2	
X1	0.9548	−0.2974	(see (10-34))
X2	0.7388	0.6739	

Correlations Between the 'WITH' Variables and Their Canonical Variables

	LEG1	LEG2	
X3	0.9343	−0.3564	(see (10-34))
X4	0.9997	0.0227	

Correlations Between the 'VAR' Variables and the Canonical Variables of the 'WITH' Variables

	LEG1	LEG2	
X1	0.6025	−0.0169	(see (10-34))
X2	0.4663	0.0383	

Correlations Between the 'WITH' Variables and the Canonical Variables of the 'VAR' Variables

	HEAD1	HEAD2	
X3	0.5897	−0.0202	(see (10-34))
X4	0.6309	0.0013	

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\mathbf{R}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ \hdashline \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{array}\right]
$$

$$
=\left[\begin{array}{ccccc:ccccccc}
1.0 & & & & & 0.33 & 0.32 & 0.20 & 0.19 & 0.30 & 0.37 & 0.21 \\
0.49 & 1.0 & & & & 0.30 & 0.21 & 0.16 & 0.08 & 0.27 & 0.35 & 0.20 \\
0.53 & 0.57 & 1.0 & & & 0.31 & 0.23 & 0.14 & 0.07 & 0.24 & 0.37 & 0.18 \\
0.49 & 0.46 & 0.48 & 1.0 & & 0.24 & 0.22 & 0.12 & 0.19 & 0.21 & 0.29 & 0.16 \\
0.51 & 0.53 & 0.57 & 0.57 & 1.0 & 0.38 & 0.32 & 0.17 & 0.23 & 0.32 & 0.36 & 0.27 \\
\hdashline
0.33 & 0.30 & 0.31 & 0.24 & 0.38 & 1.0 & & & & & & \\
0.32 & 0.21 & 0.23 & 0.22 & 0.32 & 0.43 & 1.0 & & & & & \\
0.20 & 0.16 & 0.14 & 0.12 & 0.17 & 0.27 & 0.33 & 1.0 & & & & \\
0.19 & 0.08 & 0.07 & 0.19 & 0.23 & 0.24 & 0.26 & 0.25 & 1.0 & & & \\
0.30 & 0.27 & 0.24 & 0.21 & 0.32 & 0.34 & 0.54 & 0.46 & 0.28 & 1.0 & & \\
0.37 & 0.35 & 0.37 & 0.29 & 0.36 & 0.37 & 0.32 & 0.29 & 0.30 & 0.35 & 1.0 & \\
0.21 & 0.20 & 0.18 & 0.16 & 0.27 & 0.40 & 0.58 & 0.45 & 0.27 & 0.59 & 0.31 & 1.0
\end{array}\right]
$$

$\min(p,q)=\min(5,7)=5$ 个样本典型相关系数和样本典型变量系数向量(取自邓纳姆[4]),在下表中列出

典型变量系数和典型相关系数

	标准化变量							标准化变量						
	$z_1^{(1)}$	$z_2^{(1)}$	$z_3^{(1)}$	$z_4^{(1)}$	$z_5^{(1)}$	$\hat{\rho}_1^*$		$z_1^{(2)}$	$z_2^{(2)}$	$z_3^{(2)}$	$z_4^{(2)}$	$z_5^{(2)}$	$z_6^{(2)}$	$z_7^{(2)}$
$\hat{\mathbf{a}}_1'$:	0.42	0.21	0.17	−0.02	0.44	0.55	$\hat{\mathbf{b}}_1'$:	0.42	0.22	−0.03	0.01	0.29	0.52	−0.12
$\hat{\mathbf{a}}_2'$:	−0.30	0.65	0.85	−0.29	−0.81	0.23	$\hat{\mathbf{b}}_2'$:	0.03	−0.42	0.08	−0.91	0.14	0.59	−0.02
$\hat{\mathbf{a}}_3'$:	−0.86	0.47	−0.19	−0.49	0.95	0.12	$\hat{\mathbf{b}}_3'$:	0.58	−0.76	−0.41	−0.07	0.19	−0.43	0.92
$\hat{\mathbf{a}}_4'$:	0.76	−0.06	−0.12	−1.14	−0.25	0.08	$\hat{\mathbf{b}}_4'$:	0.23	0.49	0.52	−0.47	0.34	−0.69	−0.37
$\hat{\mathbf{a}}_5'$:	0.27	1.01	−1.04	0.16	0.32	0.05	$\hat{\mathbf{b}}_5'$:	−0.52	−0.63	0.41	0.21	0.76	0.02	0.10

例如,第一样本典型变量配对为

$$
\hat{U}_1=0.42z_1^{(1)}+0.21z_2^{(1)}+0.17z_3^{(1)}-0.02z_4^{(1)}+0.44z_5^{(1)}
$$

$$
\hat{V}_1=0.42z_1^{(2)}+0.22z_2^{(2)}-0.03z_3^{(2)}+0.01z_4^{(2)}+0.29z_5^{(2)}+0.52z_6^{(2)}-0.12z_7^{(2)}
$$

且样本典型相关系数为 $\hat{\rho}_1^*=0.55$。

根据系数,$\hat{U}_1$ 首先是一个用户反馈和自主权变量,而 $\hat{V}_1$ 则表示对主管、事业前景和工种的满意度,以及在公司的地位。

为提供对 $\hat{U}_1$ 和 $\hat{V}_1$ 的解释,计算 $\hat{U}_1$ 与其成分变量之间的样本相关系数和 $\hat{V}_1$ 与其成分变量之间的样本相关系数。下表列出了一个组中变量与另一个组的第一样本典型变量的样本相关系数。这些相关系数可由式(10-34)计算得到。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

原始变量与典型变量的样本相关系数

$\mathbf{X}^{(1)}$变量	样本典型变量 $\hat{U}_1$	样本典型变量 $\hat{V}_1$	$\mathbf{X}^{(2)}$变量	样本典型变量 $\hat{U}_1$	样本典型变量 $\hat{V}_1$
1. 用户反馈	0.83	0.46	1. 主管满意度	0.42	0.75
2. 任务重要性	0.74	0.41	2. 事业前景满意度	0.35	0.65
3. 任务多样性	0.75	0.42	3. 财政满意度	0.21	0.39
4. 任务特性	0.62	0.34	4. 工作强度满意度	0.21	0.37
5. 自主权	0.85	0.48	5. 公司地位度	0.36	0.65
			6. 工种满意度	0.44	0.80
			7. 总体满意度	0.28	0.50

所有五个表示职业特性的变量具有与第一典型变量 $\hat{U}_1$ 大致相同的相关系数。从此点看，$\hat{U}_1$ 可以形容为职业特性“指标”。它与我们喜欢的基于系数的解释不同，这里任务变量并不重要。

第一典型变量对中的另一个成员 $\hat{V}_1$，看起来主要地代表了主管满意度、事业前景满意度、公司地位和工种满意度。正像变量所表达的，$\hat{V}_1$ 可以视为职业满意度-公司地位指标。这些与前述的基于诸 $z_i^{(2)}$ 典型系数的解释相一致。两个指标 $\hat{U}_1$ 和 $\hat{V}_1$ 间的样本相关系数为 $\hat{\rho}_1^* = 0.55$。看来，职业特性和职业满意度之间有部分重叠，我们将在例 10.7 中进一步考察这个问题。

第一对$(\hat{U}_1, \hat{V}_1)$的散布图可以揭示非典型的、需要进一步研究的观察值 $\mathbf{x}_j$。若典型相关系数 $\hat{\rho}_2^*, \hat{\rho}_3^*, \cdots$亦较大，$(\hat{U}_2, \hat{V}_2), (\hat{U}_3, \hat{V}_3), \cdots$的散布图在这方面亦是有用的。作为阐述实际题材的一个辅助，很多分析者建议标绘“重要的”典型变量而除去它们的成分变量。这些图加强了式(10-34)中的相关系数。

若样本较大，我们常常希望将其分为两半，前一半可用来构造并评价该样本的典型变量和典型相关系数，其结果用剩下的观察值来“验证”。典型分析中的实质性改变(如果有的话)会为取样的不定性和结论的稳定性提供一个提示。

10.5 其他样本描述性度量

如果典型变量分别是其各变量组的“良好”综合，则变量间的联系可用典型变量和它们的相关系数来描述。有一些可使典型变量分别说明它们各组的变化的综合测度，将是很有用的。计算由其他组的典型变量来解释的一组变量方差所占的比例，有时也是有用的。

近似值误差矩阵

在式(10-32)中定义的矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$ 和 $\hat{\mathbf{B}}$，令 $\hat{\mathbf{a}}^{(i)}$和 $\hat{\mathbf{b}}^{(i)}$分别表示 $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$和 $\hat{\mathbf{B}}^{-1}$的第 i 列。由于 $\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{A}}\mathbf{x}^{(1)}$和 $\hat{\mathbf{V}} = \hat{\mathbf{B}}\mathbf{x}^{(2)}$我们可以写出

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{x}^{(1)}} = \underset{(p\times p)}{\hat{\mathbf{A}}^{-1}} \underset{(p\times 1)}{\hat{\mathbf{U}}}; \qquad \underset{(q\times 1)}{\mathbf{x}^{(2)}} = \underset{(q\times q)}{\hat{\mathbf{B}}^{-1}} \underset{(q\times 1)}{\hat{\mathbf{V}}} \tag{10-36}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

因为样本 $\mathrm{Cov}(\hat{\mathbf{U}},\hat{\mathbf{V}})=\hat{\mathbf{A}}\mathbf{S}_{12}\hat{\mathbf{B}}'$，样本 $\mathrm{Cov}(\hat{\mathbf{U}})=\hat{\mathbf{A}}\mathbf{S}_{11}\hat{\mathbf{A}}'=\underset{(p\times p)}{\mathbf{I}}$，且样本 $\mathrm{Cov}(\hat{\mathbf{V}})=\hat{\mathbf{B}}\mathbf{S}_{22}\hat{\mathbf{B}}'=\underset{(q\times q)}{\mathbf{I}}$，故

$$\mathbf{S}_{12}=\hat{\mathbf{A}}^{-1}\left[\begin{array}{cccc:c}\rho_1^* & 0 & \cdots & 0 & \\ 0 & \rho_2^* & \cdots & 0 & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & \cdots & \rho_p^* & \end{array}\right](\hat{\mathbf{B}}^{-1})'=\rho_1^*\hat{\mathbf{a}}^{(1)}\hat{\mathbf{b}}^{(1)\prime}+\rho_2^*\hat{\mathbf{a}}^{(2)}\hat{\mathbf{b}}^{(2)\prime}+\cdots+\rho_p^*\hat{\mathbf{a}}^{(p)}\hat{\mathbf{b}}^{(p)\prime} \tag{10-37}$$

$$\mathbf{S}_{11}=(\hat{\mathbf{A}}^{-1})(\hat{\mathbf{A}}^{-1})'=\hat{\mathbf{a}}^{(1)}\hat{\mathbf{a}}^{(1)\prime}+\hat{\mathbf{a}}^{(2)}\hat{\mathbf{a}}^{(2)\prime}+\cdots+\hat{\mathbf{a}}^{(p)}\hat{\mathbf{a}}^{(p)\prime}$$

$$\mathbf{S}_{22}=(\hat{\mathbf{B}}^{-1})(\hat{\mathbf{B}}^{-1})'=\hat{\mathbf{b}}^{(1)}\hat{\mathbf{b}}^{(1)\prime}+\hat{\mathbf{b}}^{(2)}\hat{\mathbf{b}}^{(2)\prime}+\cdots+\hat{\mathbf{b}}^{(q)}\hat{\mathbf{b}}^{(q)\prime}$$

由于 $\mathbf{x}^{(1)}=\hat{\mathbf{A}}^{-1}\hat{\mathbf{U}}$，且 $\hat{\mathbf{U}}$ 有样本协方差 $\mathbf{I}$，$\hat{\mathbf{A}}^{-1}$ 的前 r 列包含了前 r 个典型变量 $\hat{U}_1,\hat{U}_2,\cdots,\hat{U}_r$ 与其成分变量 $X_1^{(1)},X_2^{(1)},\cdots,X_p^{(1)}$ 的样本协方差。同样地，$\hat{\mathbf{B}}^{-1}$ 的前 r 列包含 $\hat{V}_1,\hat{V}_2,\cdots,\hat{V}_r$ 与其成分变量的样本协方差。

如果仅用前 r 个典型配对，举例来说，

$$\tilde{\mathbf{x}}^{(1)}=[\hat{\mathbf{a}}^{(1)}\vdots\hat{\mathbf{a}}^{(2)}\vdots\cdots\vdots\hat{\mathbf{a}}^{(r)}]\begin{bmatrix}\hat{U}_1\\ \hat{U}_2\\ \vdots\\ \hat{U}_r\end{bmatrix}$$

和 (10-38)

$$\tilde{\mathbf{x}}^{(2)}=[\hat{\mathbf{b}}^{(1)}\vdots\hat{\mathbf{b}}^{(2)}\vdots\cdots\vdots\hat{\mathbf{b}}^{(r)}]\begin{bmatrix}\hat{V}_1\\ \hat{V}_2\\ \vdots\\ \hat{V}_r\end{bmatrix}$$

则 $\mathbf{S}_{12}$ 可用样本 $\mathrm{Cov}(\tilde{\mathbf{x}}^{(1)},\tilde{\mathbf{x}}^{(2)})$ 近似。

下面，我们看到近似值误差矩阵为

$$\mathbf{S}_{11}-(\hat{\mathbf{a}}^{(1)}\hat{\mathbf{a}}^{(1)\prime}+\hat{\mathbf{a}}^{(2)}\hat{\mathbf{a}}^{(2)\prime}+\cdots+\hat{\mathbf{a}}^{(r)}\hat{\mathbf{a}}^{(r)\prime})=\hat{\mathbf{a}}^{(r+1)}\hat{\mathbf{a}}^{(r+1)\prime}+\cdots+\hat{\mathbf{a}}^{(p)}\hat{\mathbf{a}}^{(p)\prime}$$

$$\mathbf{S}_{22}-(\hat{\mathbf{b}}^{(1)}\hat{\mathbf{b}}^{(1)\prime}+\hat{\mathbf{b}}^{(2)}\hat{\mathbf{b}}^{(2)\prime}+\cdots+\hat{\mathbf{b}}^{(r)}\hat{\mathbf{b}}^{(r)\prime})=\hat{\mathbf{b}}^{(r+1)}\hat{\mathbf{b}}^{(r+1)\prime}+\cdots+\hat{\mathbf{b}}^{(q)}\hat{\mathbf{b}}^{(q)\prime}$$

$$\mathbf{S}_{12}-(\hat{\rho}_1^*\hat{\mathbf{a}}^{(1)}\hat{\mathbf{b}}^{(1)\prime}+\hat{\rho}_2^*\hat{\mathbf{a}}^{(2)}\hat{\mathbf{b}}^{(2)\prime}+\cdots+\hat{\rho}_r^*\hat{\mathbf{a}}^{(r)}\hat{\mathbf{b}}^{(r)\prime})=\hat{\rho}_{r+1}^*\hat{\mathbf{a}}^{(r+1)}\hat{\mathbf{b}}^{(r+1)\prime}+\cdots+\hat{\rho}_p^*\hat{\mathbf{a}}^{(p)}\hat{\mathbf{b}}^{(p)\prime} \tag{10-39}$$

这个近似值误差矩阵(10-39)可被阐述为前 r 个样本典型变量重现样本协方差矩阵的完好程度的描述性综合测度。近似值误差矩阵行和(或)列的值较大时，暗示着对相应变量的“拟合”很糟糕。

通常地，前 r 个变量在重现 $\mathbf{S}_{12}=\mathbf{S}_{21}'$ 的元素时比在重现 $\mathbf{S}_{11}$ 或 $\mathbf{S}_{22}$ 的元素时做得更好。数学上看，这是因为前者的残差矩阵与最小的 $p-1$ 个样本典型相关系数有直接的关系造成的。这些相关系数常常都接近于零。另一方面，该残差矩阵与矩阵 $\mathbf{S}_{11}$ 和 $\mathbf{S}_{22}$ 的近似值相联系，仅依赖于后面的 $p-r$ 和 $q-r$ 个系数向量，这些系数向量中的元素可能相对较大，因此，残差矩阵有“大”的值。

对标准化观察值，在式(10-39)中，以 $\mathbf{R}_{kl}$ 代替 $\mathbf{S}_{kl}$，以 $\hat{\mathbf{a}}_z^{(k)},\hat{\mathbf{b}}_z^{(l)}$ 代替 $\hat{\mathbf{a}}^{(k)},\hat{\mathbf{b}}^{(l)}$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

例 10.6 （计算近似值误差矩阵）

在例 10.4 中，我们得到白来亨鸡的两个头变量和两个腿变量间的典型相关系数，从样本相关系数矩阵

$$\mathbf{R}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12}\\ \hdashline \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc:cc}1.0 & 0.505 & 0.569 & 0.602\\ 0.505 & 1.0 & 0.422 & 0.467\\ \hdashline 0.569 & 0.422 & 1.0 & 0.926\\ 0.602 & 0.467 & 0.926 & 1.0\end{array}\right]$$

出发，我们得到两个组的典型相关系数和变量

$$\hat{\rho}_1^* = 0.631 \qquad \begin{aligned}\hat{U}_1 &= 0.781z_1^{(1)} + 0.345z_2^{(1)}\\ \hat{V}_1 &= 0.060z_1^{(2)} + 0.944z_2^{(2)}\end{aligned}$$

和

$$\hat{\rho}_2^* = 0.057 \qquad \begin{aligned}\hat{U}_2 &= -0.856z_1^{(1)} + 1.106z_2^{(1)}\\ \hat{V}_2 &= -2.648z_1^{(2)} + 2.475z_2^{(2)}\end{aligned}$$

其中 $z_i^{(1)}(i=1,2)$ 和 $z_i^{(2)}(i=1,2)$ 分别为组 1 和组 2 的标准化数据值。

我们首先计算出（见显示板 10.1）

$$\hat{\mathbf{A}}_z^{-1}=\begin{bmatrix}0.781 & 0.345\\ -0.856 & 1.106\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}0.9548 & -0.2974\\ 0.7388 & 0.6739\end{bmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{B}}_z^{-1}=\begin{bmatrix}0.9343 & -0.3564\\ 0.9997 & 0.0227\end{bmatrix}$$

所以，近似值误差矩阵可仅利用第一典型变量配对得到，为

$$\begin{aligned}\mathbf{R}_{12}-\text{样本 Cov}(\tilde{\mathbf{z}}^{(1)},\tilde{\mathbf{z}}^{(2)}) &= (0.057)\begin{bmatrix}-0.2974\\ 0.6739\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-0.3564 & 0.0227\end{bmatrix}\\ &= \begin{bmatrix}0.006 & -0.000\\ -0.014 & 0.001\end{bmatrix}\\ \mathbf{R}_{11}-\text{样本 Cov}(\tilde{\mathbf{z}}^{(1)}) &= \begin{bmatrix}-0.2974\\ 0.6739\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-0.2974 & 0.6739\end{bmatrix}\\ &= \begin{bmatrix}0.088 & -0.200\\ -0.200 & 0.454\end{bmatrix}\\ \mathbf{R}_{22}-\text{样本 Cov}(\tilde{\mathbf{z}}^{(2)}) &= \begin{bmatrix}-0.3564\\ 0.0227\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-0.3564 & 0.0227\end{bmatrix}\\ &= \begin{bmatrix}0.127 & -0.008\\ -0.008 & 0.001\end{bmatrix}\end{aligned}$$

其中 $\tilde{\mathbf{z}}^{(1)},\tilde{\mathbf{z}}^{(2)}$ 由式(10-38)给出，需取 $r=1$ 且用 $\hat{\mathbf{a}}_z^{(k)},\hat{\mathbf{b}}_z^{(l)}$ 分别代替 $\hat{\mathbf{a}}^{(k)},\hat{\mathbf{b}}^{(l)}$。

我们看到第一对典型变量有效地综合（重现）$\mathbf{R}_{12}$ 的组内相关系数。但是，单个方差都不是原始组 $\mathbf{z}^{(1)}$ 和 $\mathbf{z}^{(2)}$ 的抽样可变性的特别有效的综合。这点对 $\hat{U}_1$ 尤其正确。

被解释的样本方差的比例

当观察值是标准化的，样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_{kl}$ 就是相关系数矩阵 $\mathbf{R}_{kl}$，典型系数向量是矩

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

阵 $\hat{\mathbf{A}}_z$ 和 $\hat{\mathbf{B}}_z$ 的行向量，并且 $\hat{\mathbf{A}}_z^{-1}$ 和 $\hat{\mathbf{B}}_z^{-1}$ 的列向量为典型变量与其成分变量的样本相关系数。

特别地，

$$\text{样本 Cov}(\mathbf{z}^{(1)},\hat{\mathbf{U}}) = \text{样本 Cov}(\hat{\mathbf{A}}_z^{-1}\hat{\mathbf{U}},\hat{\mathbf{U}}) = \hat{\mathbf{A}}_z^{-1}$$

和

$$\text{样本 Cov}(\mathbf{z}^{(2)},\hat{\mathbf{V}}) = \text{样本 Cov}(\hat{\mathbf{B}}_z^{-1}\hat{\mathbf{V}},\hat{\mathbf{V}}) = \hat{\mathbf{B}}_z^{-1}$$

故

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{A}}_z^{-1} &= [\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)},\hat{\mathbf{a}}_z^{(2)},\cdots,\hat{\mathbf{a}}_z^{(p)}] = \begin{bmatrix} r_{\hat{U}_1,z_1^{(1)}} & r_{\hat{U}_2,z_1^{(1)}} & \cdots & r_{\hat{U}_p,z_1^{(1)}} \\ r_{\hat{U}_1,z_2^{(1)}} & r_{\hat{U}_2,z_2^{(1)}} & \cdots & r_{\hat{U}_p,z_2^{(1)}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{\hat{U}_1,z_p^{(1)}} & r_{\hat{U}_2,z_p^{(1)}} & \cdots & r_{\hat{U}_p,z_p^{(1)}} \end{bmatrix} \\
\hat{\mathbf{B}}_z^{-1} &= [\hat{\mathbf{b}}_z^{(1)},\hat{\mathbf{b}}_z^{(2)},\cdots,\hat{\mathbf{b}}_z^{(q)}] = \begin{bmatrix} r_{\hat{V}_1,z_1^{(2)}} & r_{\hat{V}_2,z_1^{(2)}} & \cdots & r_{\hat{V}_p,z_1^{(2)}} \\ r_{\hat{V}_1,z_2^{(2)}} & r_{\hat{V}_2,z_2^{(2)}} & \cdots & r_{\hat{V}_p,z_2^{(2)}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{\hat{V}_1,z_p^{(2)}} & r_{\hat{V}_2,z_p^{(2)}} & \cdots & r_{\hat{V}_p,z_p^{(2)}} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{10-40}$$

其中 $r_{\hat{U},z_k^{(1)}}$ 和 $r_{\hat{V},z_k^{(2)}}$ 为其下标量之间的样本相关系数。

利用式(10-37)，选取标准化观察值，我们得到

第一组(标准化)样本总方差

$$= \text{tr}(\mathbf{R}_{11}) = \text{tr}(\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)\prime} + \hat{\mathbf{a}}_z^{(2)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(2)\prime} + \cdots + \hat{\mathbf{a}}_z^{(p)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(p)\prime}) = p \tag{10-41a}$$

第二组(标准化)样本总方差

$$= \text{tr}(\mathbf{R}_{22}) = \text{tr}(\hat{\mathbf{b}}_z^{(1)}\hat{\mathbf{b}}_z^{(1)\prime} + \hat{\mathbf{b}}_z^{(2)}\hat{\mathbf{b}}_z^{(2)\prime} + \cdots + \hat{\mathbf{b}}_z^{(q)}\hat{\mathbf{b}}_z^{(q)\prime}) = q \tag{10-41b}$$

因为在 $\hat{\mathbf{A}}_z^{-1}$ 和 $\hat{\mathbf{B}}_z^{-1}$ 的前 $r<p$ 个列向量中的相关系数，仅分别包含样本典型变量 $\hat{U}_1$，$\hat{U}_2,\cdots,\hat{U}_r$ 和 $\hat{V}_1,\hat{V}_2,\cdots,\hat{V}_r$，我们定义前 r 个典型变量对(标准化)样本总方差的贡献为

$$\text{tr}(\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)\prime} + \hat{\mathbf{a}}_z^{(2)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(2)\prime} + \cdots + \hat{\mathbf{a}}_z^{(r)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(r)\prime}) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{p} r^2_{\hat{U}_i,z_k^{(1)}}$$

和

$$\text{tr}(\hat{\mathbf{b}}_z^{(1)}\hat{\mathbf{b}}_z^{(1)\prime} + \hat{\mathbf{b}}_z^{(2)}\hat{\mathbf{b}}_z^{(2)\prime} + \cdots + \hat{\mathbf{b}}_z^{(r)}\hat{\mathbf{b}}_z^{(r)\prime}) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{p} r^2_{\hat{V}_i,z_k^{(2)}}$$

(标准化)样本总方差由前 r 个典型变量“解释”的比例则变为

$$\begin{aligned}
R^2_{z^{(1)}|\hat{U}_1,\hat{U}_2,\cdots\hat{U}_r} &= \left(\begin{array}{c}\text{在第一组标准化样本总方差中} \\ \text{由 } \hat{U}_1,\hat{U}_2,\cdots,\hat{U}_r \\ \text{解释的比例}\end{array}\right) \\
&= \frac{\text{tr}(\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(1)\prime} + \cdots + \hat{\mathbf{a}}_z^{(r)}\hat{\mathbf{a}}_z^{(r)\prime})}{\text{tr}(\mathbf{R}_{11})} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{p} r^2_{\hat{U}_i,z_k^{(1)}}}{p}
\end{aligned} \tag{10-42}$$

并且

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$R^{2(2)}_{\mathbf{z}|\hat{V}_1,\hat{V}_2,\cdots,\hat{V}_r} = \begin{pmatrix} \text{在第二组标准化样本总方差中} \\ \text{由 } \hat{V}_1,\hat{V}_2,\cdots,\hat{V}_r \\ \text{解释的比例} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\operatorname{tr}(\hat{\mathbf{b}}^{(1)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{b}}^{(1)\prime}_{\mathbf{z}} + \cdots + \hat{\mathbf{b}}^{(r)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{b}}^{(r)\prime}_{\mathbf{z}})}{\operatorname{tr}(\mathbf{R}_{22})}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{r}\sum_{k=1}^{q} r^2_{\hat{V}_i,z_k^{(2)}}}{q}$$

描述性测度(10-42)可表明典型变量对其所对应组的代表性程度。它们对误差矩阵提供单一数字的描述。尤其是，根据式(10-41)和式(10-42)，有

$$\frac{1}{p}\operatorname{tr}[\mathbf{R}_{11} - \hat{\mathbf{a}}^{(1)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{a}}^{(1)\prime}_{\mathbf{z}} - \hat{\mathbf{a}}^{(2)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{a}}^{(2)\prime}_{\mathbf{z}} - \cdots - \hat{\mathbf{a}}^{(r)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{a}}^{(r)\prime}_{\mathbf{z}}] = 1 - R^{2(1)}_{\mathbf{z}|\hat{U}_1,\hat{U}_2,\cdots,\hat{U}_r}$$

$$\frac{1}{q}\operatorname{tr}[\mathbf{R}_{22} - \hat{\mathbf{b}}^{(1)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{b}}^{(1)\prime}_{\mathbf{z}} - \hat{\mathbf{b}}^{(2)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{b}}^{(2)\prime}_{\mathbf{z}} - \cdots - \hat{\mathbf{b}}^{(r)}_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{b}}^{(r)\prime}_{\mathbf{z}}] = 1 - R^{2(2)}_{\mathbf{z}|\hat{V}_1,\hat{V}_2,\cdots,\hat{V}_r}$$

例 10.7 （计算样本方差由典型变量解释的比例）

考虑例 10.5 中讨论过的职业特性-职业满意度数据，利用原例题中列出的样本相关系数表格，我们发现

$$R^{2(1)}_{\mathbf{z}|\hat{U}_1} = \frac{1}{5}\sum_{k=1}^{5} r^2_{\hat{U}_1,z_k^{(1)}} = \frac{1}{5}[0.83^2 + 0.74^2 + \cdots + 0.85^2] = 0.58$$

$$R^{2(2)}_{\mathbf{z}|\hat{V}_1} = \frac{1}{7}\sum_{k=1}^{7} r^2_{\hat{V}_1,z_k^{(2)}} = \frac{1}{7}[0.75^2 + 0.65^2 + \cdots + 0.50^2] = 0.37$$

职业特性组的第一样本典型变量 $\hat{U}_1$ 解释该组的样本总方差的 58%。职业满意度组的第一样本典型变量 $\hat{V}_1$ 则解释该组样本总方差的 37%。我们因此可以指出 $\hat{U}_1$ 比 $\hat{V}_1$ 是其自身所属组的“更好”的代表。对此有兴趣的读者可能希望看到 $\hat{U}_1$ 和 $\hat{V}_1$ 是如何恰当地分别再现相关系数矩阵 $\mathbf{R}_{11}$ 和 $\mathbf{R}_{22}$。[见式(10-39)。]

10.6 大样本推断

当 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$，$\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}$ 对所有向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ 有协方差 $\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b}=\mathbf{0}$。所以，所有的典型相关系数必为零，并且作典型相关分析没有什么意义。下述结论对大样本提供了一个检验 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$ 的途径。

结论 10.3 令

$$\mathbf{X}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_j^{(1)} \\ \cdots\cdots \\ \mathbf{X}_j^{(2)} \end{bmatrix}, \qquad j = 1,2,\cdots,n$$

为从 $N_{p+q}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$ 总体取得的随机样本，且

$$\boldsymbol{\Sigma} = \left[\begin{array}{c:c} \underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{11}} & \underset{(p\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{12}} \\ \hdashline \underset{(q\times p)}{\boldsymbol{\Sigma}_{21}} & \underset{(q\times q)}{\boldsymbol{\Sigma}_{22}} \end{array}\right]$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

则似然比检验 $H_0:\mathbf{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$ 和 $H_1:\mathbf{\Sigma}_{12}\neq\mathbf{0}$，对

$$-2\ln\Lambda = n\ln\left(\frac{|\mathbf{S}_{11}||\mathbf{S}_{22}|}{|\mathbf{S}|}\right) = -n\ln\prod_{i=1}^{p}(1-\hat{\rho}_i^{*2}) \tag{10-43}$$

的大值，拒绝 H_0，这里

$$\mathbf{S}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12}\\ \hdashline \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22}\end{array}\right]$$

是 $\mathbf{\Sigma}$ 的无偏估计量。n 取值较大时，检验统计量(10-43)是近似服从 χ^2 分布的随机变量，自由度为 pq。

证明 见克什萨戈(Kshirsagar)[8]。

似然比统计量(10-43)在 H_0 下将样本广义方差

$$\begin{vmatrix}\mathbf{S}_{11} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0}' & \mathbf{S}_{22}\end{vmatrix} = |\mathbf{S}_{11}||\mathbf{S}_{22}|$$

和无约束的广义方差 $|\mathbf{S}|$ 作比较。

巴特利特[3]建议把似然比统计量中的乘数因子 n 以因子 $n-1-(p+q+1)/2$ 代替，使 χ^2 分布近似 $-2\ln\Lambda$ 的抽样分布。这样，当 n 和 $n-(p+q)$ 较大时，若

$$-\left(n-1-\frac{1}{2}(p+q+1)\right)\ln\prod_{i=1}^{p}(1-\hat{\rho}_i^{*2}) > \chi^2_{pq}(\alpha) \tag{10-44}$$

我们就在显著性水平 α 上拒绝 $H_0:\mathbf{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}(\rho_1^*=\rho_2^*=\cdots=\rho_p^*=0)$，其中 $\chi^2_{pq}(\alpha)$ 是自由度为 pq 的 χ^2 分布的第 (100α) 个上百分位数。

若零假设 $H_0:\mathbf{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}(\rho_1^*=\rho_2^*=\cdots=\rho_p^*=0)$ 被拒绝了，则自然地会去检验单个典型相关系数的“显著性”。由于典型相关系数是按从大到小顺序排列的，我们开始可以假定第一典型相关系数非零，而剩下的 $p-1$ 个典型相关系数为零。如果此假设被拒绝，我们可假定头两个典型相关系数非零，但剩下的 $p-2$ 个为零，以此类推。

令推出的序列假设为

$$\begin{aligned} &H_0^k:\rho_1^*\neq 0,\rho_2^*\neq 0,\cdots,\rho_k^*\neq 0,\rho_{k+1}^*=\cdots=\rho_p^*=0\\ &H_1^k:\rho_i^*\neq 0 \qquad 对某个\ i\geqslant k+1 \end{aligned} \tag{10-45}$$

巴特利特[2]已论证，式(10-45)中的第 k 个假设可以利用似然比准则加以检验。特别地，在显著性水平 α 上拒绝 $H_0^{(k)}$，若

$$-\left(n-1-\frac{1}{2}(p+q+1)\right)\ln\prod_{i=k+1}^{p}(1-\hat{\rho}_i^{*2}) > \chi^2_{(p-k)(q-k)}(\alpha) \tag{10-46}$$

其中 $\chi^2_{(p-k)(q-k)}(\alpha)$ 是自由度为 $(p-k)(q-k)$ 的 χ^2 分布的第 (100α) 个上百分位数。我们指出，式(10-46)中的检验统计量，在前 k 个样本典型相关系数已从总判别

$\Lambda^{2/n}=\prod_{i=1}^{p}(1-\hat{\rho}_i^{*2})$ 中剔除之后，包含“残差” $\prod_{i=k+1}^{p}(1-\hat{\rho}_i^{*2})$。

如果序列 $H_0,H_0^{(1)},H_0^{(2)}$，等等中的成员，一次检验一个直到对某个 k 值 $H_0^{(k)}$ 未被拒绝，则总的显著性水平就不是 α 了。事实上，显著性水平已难于确定。这种方法的另一个缺点，就是它会得出一个零假设为真的结论，仅仅因为零假设未被拒绝。

总而言之，结论 10.3 中总的显著性的检验对多元正态数据是有用的。式(10-46)中的

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

序贯检验应该谨慎地加以解释，并且也许最好将此序贯检验视为对选取重要典型变量个数的一个粗略的指导方法。

例 10.8 （对职业满意度数据检验其典型相关系数的显著性）

检验在例 10.5 中由职业特性-职业满意度数据展示的典型相关系数的显著性。

所有感兴趣的统计学检验都总结在下表中。由例 10.5，$n=784$，$p=5$，$q=7$，$\hat{\rho}_1^*=0.55$，$\hat{\rho}_2^*=0.23$，$\hat{\rho}_3^*=0.12$，$\hat{\rho}_4^*=0.08$ 及 $\hat{\rho}_5^*=0.05$。

假设为多元正态数据，我们发现前两个典型相关系数 $\hat{\rho}_1^*$ 和 $\hat{\rho}_2^*$ 是非零的，尽管在这个很大的样本中，与零的微小偏差仍然在统计上是显著的。从实际角度看，第二（以及子序列）样本典型相关系数可被忽略，因为(1)它们的重要性不大并且(2)对应的典型变量只代表了变量组 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 中很少部分的样本变差。

与样本典型相关系数和样本典型变量系数相联系的分布理论，是极度复杂的（除 $p=1$ 且 $q=1$ 的情况外），甚至在 $\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$ 的情况下也如此。对分布理论感兴趣的读者可参阅克什萨戈[8]。

练　　习

10.1　考虑例 10.3 给出的协方差矩阵

$$\mathrm{Cov}\left(\begin{bmatrix} X_1^{(1)} \\ X_2^{(1)} \\ \hline X_1^{(2)} \\ X_2^{(2)} \end{bmatrix}\right) = \left[\begin{array}{c:c} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \hdashline \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc:cc} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.95 & 0 \\ \hdashline 0 & 0.95 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 100 \end{array}\right]$$

验证第一对典型变量为 $U_1=X_2^{(1)}$，$V_1=X_1^{(2)}$，且它们的典型相关系数 $\rho_1^*=0.95$。

10.2　(2×1)随机向量 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 的联合均值向量和联合协方差矩阵为

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} \\ \hline \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \\ \hline 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \left[\begin{array}{c:c} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \hdashline \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc:cc} 8 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 5 & -1 & 3 \\ \hdashline 3 & -1 & 6 & -2 \\ 1 & 3 & -2 & 7 \end{array}\right]$$

(a) 计算典型相关系数 ρ_1^*，ρ_2^*。

(b) 确定典型变量配对(U_1,V_1)和(U_2,V_2)。

(c) 令 $\mathbf{U}=[U_1,U_2]'$ 及 $\mathbf{V}=[V_1,V_2]'$。由第一准则，求

$$E\left(\begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \hline \mathbf{V} \end{bmatrix}\right) \text{和} \ \mathrm{Cov}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \hline \mathbf{V} \end{bmatrix}\right) = \left[\begin{array}{c:c} \boldsymbol{\Sigma}_{UU} & \boldsymbol{\Sigma}_{UV} \\ \hdashline \boldsymbol{\Sigma}_{VU} & \boldsymbol{\Sigma}_{VV} \end{array}\right]$$

将你得到的结果和结论 10.1 的性质作比较。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

检验结果

零假设	观测检验统计量（巴特利特修正）	自由度	χ^2 分布的上 1% 点	结论
1. $H_0: \boldsymbol{\Sigma}_{12} = \mathbf{0}$（所有 $\rho_i^* = 0$）	$-\left(n-1-\frac{1}{2}(p+q+1)\right)\ln\prod_{i=1}^{5}(1-\hat{\rho}_i^{*2})$ $=-\left(784-1-\frac{1}{2}(5+7+1)\right)\ln(0.6453)$ $=340.1$	$pq=5\times 7=35$	$\chi^2_{35}(0.01)=57$	拒绝 H
2. $H_0^{(1)}: \rho_1^* \neq 0$, $\rho_2^* = \cdots = \rho_5^* = 0$	$-\left(n-1-\frac{1}{2}(p+q+1)\right)\ln\prod_{i=2}^{5}(1-\hat{\rho}_i^{*2})$ $=60.4$	$(p-1)(q-1)=24$	$\chi^2_{24}(0.01)=42.98$	拒绝 H_0
3. $H_0^{(2)}: \rho_1^* \neq 0, \rho_2^* \neq 0$, $\rho_3^* = \cdots = \rho_5^* = 0$	$-\left(n-1-\frac{1}{2}(p+q+1)\right)\ln\prod_{i=3}^{5}(1-\hat{\rho}_i^{*2})$ $=18.2$	$(p-2)(q-2)=15$	$\chi^2_{15}(0.01)=30.58$	不拒绝 H_0

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

10.3　令 $\mathbf{Z}^{(1)}\mathbf{V}_{11}^{-1/2}(\mathbf{X}^{(1)}-\boldsymbol{\mu}^{(1)})$ 和 $\mathbf{Z}^{(2)}\mathbf{V}_{22}^{-1/2}(\mathbf{X}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)})$ 为两个标准化变量组，如果 $\rho_1^*,\rho_2^*,\cdots,\rho_p^*$ 是 $\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)}$ 组的典型相关系数并且 $(U_i,V_i)=(\mathbf{a}_i'\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{b}_i'\mathbf{X}^{(2)}),i=1,2,\cdots,p$，为相联系的典型变量，确定 $\mathbf{Z}^{(1)},\mathbf{Z}^{(2)}$ 组的典型相关系数和典型变量，即用 $\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)}$ 组的典型相关系数和典型变量来表达 $\mathbf{Z}^{(1)},\mathbf{Z}^{(2)}$ 组相应的量。

10.4　（典型相关系数和变量的交替计算。）试证明，如果 λ_i 为与特征向量 $\mathbf{e}_i$ 联系的 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$ 的一个特征值，则 λ_i 还是特征向量为 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{e}_i$ 的 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ 的一个特征值。

提示：$|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}-\lambda_i\mathbf{I}|=0$　意味着

$$\begin{aligned}0&=|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}|\,|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}-\lambda_i\mathbf{I}|\,|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{1/2}|\\&=|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}-\lambda_i\mathbf{I}|\end{aligned}$$

10.5　利用例 10.1 所提供的信息

(a) 求 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ 的特征值并证明这些特征值同 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}$ 的特征值一样。

(b) 求第二对典型变量 (U_2,V_2)，并由第一准则证明它们的相关系数就是第二典型相关系数 $\rho_2^*=0.03$。

10.6　证明将 $\mathbf{X}^{(1)},\mathbf{X}^{(2)}$ 的变量以形式 $\underset{(p\times q)}{\mathbf{C}}\underset{(p\times 1)}{\mathbf{X}^{(1)}}$ 及 $\underset{(q\times q)}{\mathbf{D}}\underset{(q\times 1)}{\mathbf{X}^{(2)}}$ 做非奇异线性变换后，典型相关系数是不变的。

提示：考虑 $\mathrm{Cov}\left(\begin{bmatrix}\mathbf{C}\mathbf{X}^{(1)}\\ \hdashline \mathbf{D}\mathbf{X}^{(2)}\end{bmatrix}\right)=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\mathbf{C}' & \mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{D}'\\ \hdashline \mathbf{D}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\mathbf{C}' & \mathbf{D}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\mathbf{D}'\end{array}\right]$ 及任意线性组合 $\mathbf{a}_1'(\mathbf{C}\mathbf{X}^{(1)})=\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)}$，且 $\mathbf{a}'=\mathbf{a}_1'\mathbf{C}$。类似考虑，$\mathbf{b}_1'(\mathbf{D}\mathbf{X}^{(2)})=\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}$，且 $\mathbf{b}'=\mathbf{b}_1'\mathbf{D}$。选取 $\mathbf{a}_1'=\mathbf{e}'\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\mathbf{C}^{-1}$ 和 $\mathbf{b}_1'=\mathbf{f}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\mathbf{D}^{-1}$，使相关系数最大。

10.7　令 $\boldsymbol{\rho}_{12}=\begin{bmatrix}\rho & \rho\\ \rho & \rho\end{bmatrix}$ 且 $\boldsymbol{\rho}_{11}=\boldsymbol{\rho}_{22}=\begin{bmatrix}1 & \rho\\ \rho & 1\end{bmatrix}$，对应于等相关结构，其中 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 每一个都有两个成份。

(a) 求对应于非零典型相关系数的典型变量。

(b) 将(a)中结果推广到 $\mathbf{X}^{(1)}$ 有 p 个成分以及 $\mathbf{X}^{(2)}$ 有 $q\geqslant p$ 个成份的情况。

提示：$\boldsymbol{\rho}_{12}=\rho\,\mathbf{1}\mathbf{1}'$，$\mathbf{1}$ 是每个元素都为 1 的 $(p\times 1)$ 列向量并且 $\mathbf{1}'$ 是每个元素都为 1 的 $(q\times 1)$ 行向量。注意，$\boldsymbol{\rho}_{11}\mathbf{1}=[1+(p-1)\rho]$，故 $\boldsymbol{\rho}_{11}^{-1/2}\mathbf{1}=[1+(p-1)\rho]^{-1/2}\mathbf{1}$。

10.8　（角测量值的相关系数。）有些观测值，比如风向是由角度表达的。角 θ_2 可用一对值 $\mathbf{X}^{(2)}=[\cos(\theta_2),\sin(\theta_2)]'$ 来表示。

(a) 证明 $\mathbf{b}'\mathbf{X}^{(2)}=\sqrt{b_1^2+b_2^2}\cos(\theta_2-\beta)$，其中 $b_1/\sqrt{b_1^2+b_2^2}=\cos(\beta)$ 且 $b_2/\sqrt{b_1^2+b_2^2}=\sin(\beta)$。

提示：$\cos(\theta_2-\beta)=\cos(\theta_2)\cos(\beta)+\sin(\theta_2)\sin(\beta)$。

(b) 令 $\mathbf{X}^{(1)}$ 只有单一成分 $X_1^{(1)}$。证明单一的典型相关系数为 $\rho_1^*=\max\limits_{\beta}\mathrm{Corr}(X_1^{(1)},\cos(\theta_2-\beta))$。挑选典型变量 V_1 相当于为角度 θ_2 挑选一个新原点 β。（见约翰逊(Johnoson)和韦尔利(Wehrly)[7]。）

(c) 令 $X_1^{(1)}$ 为臭氧(以百万分之一计)且 θ_2=风向与北方的夹角。在威斯康星州密尔沃基城取得的 19 个观测值，给出该样本相关系数矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}=\begin{bmatrix}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12}\\ \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{bmatrix}=\begin{array}{c}\begin{array}{ccc}\text{臭氧} & \cos(\theta_2) & \sin(\theta_2)\end{array}\\ \begin{bmatrix}1.0 & 0.166 & 0.694\\ 0.166 & 1.0 & -0.051\\ 0.694 & -0.051 & 1.0\end{bmatrix}\end{array}$$

求样本典型相关系数 $\hat{\rho}_1^*$ 和表示新原点 $\hat{\beta}$ 的典型变量 $\hat{V}_1$。

(d) 假设 $\mathbf{X}^{(1)}$ 也是角度测量值，形如 $\mathbf{X}^{(1)}=[\cos(\theta_1),\sin(\theta_1)]'$。又有 $\mathbf{a}'\mathbf{X}^{(1)}=\sqrt{a_1^2+a_2^2}\cdot\cos(\theta_1-\alpha)$。证明

$$\rho_1^*=\max_{\alpha,\beta}\mathrm{Corr}(\cos(\theta_1-\alpha),\cos(\theta_2-\beta))$$

(e) 在早 6：00 和中午 12：00 测出的风向的 21 个观测值给出相关系数矩阵

$$\mathbf{R}=\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}\cos(\theta_1) & \sin(\theta_1) & \cos(\theta_2) & \sin(\theta_2)\end{array}\\ \begin{bmatrix}1.0 & -0.291 & 0.440 & 0.372\\ -0.291 & 1.0 & -0.205 & 0.243\\ 0.440 & -0.205 & 1.0 & 0.181\\ 0.372 & 0.243 & 0.181 & 1.0\end{bmatrix}\end{array}$$

求样本典型相关系数 $\hat{\rho}_1^*$ 和 $\hat{U}_1,\hat{V}_1$。

以下练习可能用到计算机

10.9　霍特林[5]报告称 $n=140$ 个七年级孩子接受四项测试：$X_1^{(1)}$＝阅读速度，$X_2^{(1)}$＝阅读才能，$X_1^{(2)}$＝数学运算速度以及 $X_2^{(2)}$＝数学运算才能。孩子们的表现的相关系数为

$$\mathbf{R}=\begin{bmatrix}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12}\\ \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.0 & 0.6328 & 0.2412 & 0.0586\\ 0.6328 & 1.0 & -0.0553 & 0.0655\\ 0.2412 & -0.0553 & 1.0 & 0.4248\\ 0.0586 & 0.0655 & 0.4248 & 1.0\end{bmatrix}$$

(a) 求所有的样本典型相关系数和样本典型变量。

(b) 陈述你所做的每一个假定，在显著性水平 $\alpha=0.05$ 时检验以下假设

$$H_0:\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\boldsymbol{\rho}_{12}=\mathbf{0}\quad(\rho_1^*=\rho_2^*=0)$$

$$H_1:\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\boldsymbol{\rho}_{12}\neq\mathbf{0}$$

若拒绝 H_0，取显著性水平 $\alpha=0.05$，检验

$$H_0^{(1)}:\rho_1^*\neq 0,\quad \rho_2^*=0$$

$$H_1^{(1)}:\rho_2^*\neq 0$$

阅读能力(由两项测试度量的)与数学运算能力(由两项测试度量的)是否相关？讨论之。

(c) 求出 $\mathbf{R}_{11}$，$\mathbf{R}_{22}$ 和 $\mathbf{R}_{12}$ 的近似值误差矩阵，前者是由第一样本典型变量配对 $\hat{U}_1,\hat{V}_1$ 导出的。

10.10　在一项有关贫穷、犯罪和威吓的研究中，帕克(Parker)和史密斯(Smith)[10]报告了在 1970 年和 1973 年不同州的犯罪统计数据。部分样本相关系数矩阵为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12}\\ \hdashline \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc:cc}1.0 & 0.615 & -0.111 & -0.266\\ 0.615 & 1.0 & -0.195 & -0.085\\ \hdashline -0.111 & -0.195 & 1.0 & -0.269\\ -0.266 & -0.085 & -0.269 & 1.0\end{array}\right]$$

变量为

$X_1^{(1)}$=1973 年非一级杀人犯

$X_2^{(1)}$=1973 年一级杀人犯(杀人者为家庭成员和熟人)

$X_1^{(2)}$=1970 年处罚的严厉性(服刑月份的中值)

$X_2^{(2)}$=1970 年处罚的确定性(监狱接纳人数除以杀人犯总数)

(a) 求样本典型相关系数。

(b) 确定第一典型对 $\hat{U}_1,\hat{V}_1$ 并解释这些量。

10.11　例 8.5 中列出了从五只股票的 $n=100$ 个连续的周回报率得到的相关系数矩阵。试作出化学公司回报率 $\mathbf{X}^{(1)}=[X_1^{(1)},X_2^{(1)},X_3^{(1)}]'$ 和石油公司回报率 $\mathbf{X}^{(2)}=[X_1^{(2)},X_2^{(2)}]'$ 的典型相关分析。

10.12　对 $n=70$ 个家庭的随机样本进行调查,用以确定某"人口统计"变量和某"消费"变量的联系。

令:

判别组 $\begin{cases}X_1^{(1)}=\text{每年去餐馆就餐的频率}\\ X_2^{(1)}=\text{每年出外看电影的频率}\end{cases}$

预报组 $\begin{cases}X_1^{(2)}=\text{户主的年龄}\\ X_2^{(2)}=\text{家庭年收入}\\ X_3^{(2)}=\text{户主受教育程度}\end{cases}$

假设对以上变量的 70 个观测值给出样本相关系数矩阵

$$\mathbf{R}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12}\\ \hdashline \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc:ccc}1.0 & & & & \\ 0.80 & 1.0 & & & \\ \hdashline 0.26 & 0.33 & 1.0 & & \\ 0.67 & 0.59 & 0.37 & 1.0 & \\ 0.34 & 0.34 & 0.21 & 0.35 & 1.0\end{array}\right]$$

(a) 确定样本典型相关系数,并且在显著性水平 $\alpha=0.05$ 下,检验假设 $H_0:\boldsymbol{\Sigma}_{12}=\mathbf{0}$(或,等价地,$\boldsymbol{\rho}_{12}=\mathbf{0}$)。若拒绝 H_0,检验第一典型相关系数的显著性($\alpha=0.05$);

(b) 用标准化变量,构造与"显著的"典型相关系数相对应的典型变量。

(c) 利用(a)及(b)的结果,将典型变量系数(对"显著的"典型相关系数)和典型变量与其成分变量的样本相关系数列表。

(d) 就(c)给出的信息,阐述这些典型变量。

(e) 人口统计变量对消费变量是否有影响?消费变量比人口统计变量提供的信息要多吗?

10.13　沃(Waugh)[12]提供了容量为 $n=138$ 的加拿大硬红春麦样本的信息,以及用该样本磨成的面粉的信息。$P=5$ 个小麦测度量(标准化形式)为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$z_1^{(1)}$ = 谷粒构造

$z_2^{(1)}$ = 试验重量

$z_3^{(1)}$ = 破损的谷粒

$z_4^{(1)}$ = 异地原料

$z_5^{(1)}$ = 小麦中的天然蛋白质

$q=4$ 个(标准化)面粉测度量为

$z_1^{(2)}$ = 磨成每桶面粉需要小麦量

$z_2^{(2)}$ = 面粉中的灰

$z_3^{(2)}$ = 面粉中的天然蛋白质

$z_4^{(2)}$ = 麦麸的品质指标

样本相关系数矩阵为

$$\mathbf{R}=\left[\begin{array}{c:c}\mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12}\\ \hdashline \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22}\end{array}\right]$$

$$=\left[\begin{array}{ccccc:cccc}
1.0 & & & & & & & & \\
0.754 & 1.0 & & & & & & & \\
-0.690 & -0.712 & 1.0 & & & & & & \\
-0.446 & -0.515 & 0.323 & 1.0 & & & & & \\
0.692 & 0.412 & -0.444 & -0.334 & 1.0 & & & & \\
\hdashline
-0.605 & -0.722 & 0.737 & 0.527 & -0.383 & 1.0 & & & \\
-0.479 & -0.419 & 0.361 & 0.461 & -0.505 & 0.251 & 1.0 & & \\
0.780 & 0.542 & -0.546 & -0.393 & 0.737 & -0.490 & -0.434 & 1.0 & \\
-0.152 & -0.102 & 0.172 & -0.019 & -0.148 & 0.250 & -0.079 & -0.163 & 1.0
\end{array}\right]$$

(a) 求与显著的(在 $\alpha=0.01$ 水平)典型相关系数相对应的样本典型变量。

(b) 解释第一样本典型变量 $\hat{U}_1,\hat{V}_1$。从某种意义上说,它们能否分别代表整体的小麦和面粉质量?

(c) 第一组 $\mathbf{Z}^{(1)}$ 的样本总方差被典型变量 $\hat{U}_1$ 解释的比例为多少?第二组 $\mathbf{Z}^{(2)}$ 的样本总方差被典型变量 $\hat{V}_1$ 解释的比例为多少?讨论一下你的答案。

10.14　考虑练习 9.15 给出的盈利测度的相关系数矩阵。令 $\mathbf{X}^{(1)}=[X_1^{(1)},X_2^{(1)},\cdots,X_p^{(1)}]'$ 代表盈利的会计测度向量,而令 $\mathbf{X}^{(2)}=[X_1^{(2)},X_2^{(2)}]'$ 为盈利的两个市场测度向量。

将样本相关系数矩阵分块并做典型相关分析,特别地:

(a) 确定第一样本典型变量 $\hat{U}_1,\hat{V}_1$ 及它们的相关系数。解释这些典型变量。

(b) 令 $\mathbf{Z}^{(1)}$ 和 $\mathbf{Z}^{(2)}$ 分别为对应于 $\mathbf{X}^{(1)}$ 和 $\mathbf{X}^{(2)}$ 的标准化变量组。$\mathbf{Z}^{(1)}$ 的样本总方差用典型变量 $\hat{U}_1$ 解释的比例为多少?$\mathbf{Z}^{(2)}$ 的样本总方差用典型变量 $\hat{V}_1$ 解释的比例又是多大?请讨论。

10.15　四项关于刚性的测度值,在表 4.3 中给出并在例 4.14 中讨论过,用表中数据构造样本协方差矩阵 $\boldsymbol{S}$。令向量 $\boldsymbol{X}^{(1)}=[X_1^{(1)},X_2^{(1)}]'$ 的变量代表刚性动态测度(冲击波、波动),并且令向量 $\mathbf{X}^{(2)}=[X_1^{(2)},X_2^{(2)}]'$ 的变量代表刚性的静止测度,对这些数据做典型相关

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

分析。

10.16　安德鲁斯(Andrews)和赫茨伯格(Herzberg)[1]给出由比较无糖尿病和有糖尿病的病人得到的数据。三个主要变量，

$$X_1^{(1)} = \text{葡萄糖允许量}$$
$$X_2^{(1)} = \text{胰岛素对口部葡萄糖的反应}$$
$$X_3^{(1)} = \text{胰岛素抵抗力}$$

和两个次要变量，

$$X_1^{(2)} = \text{相对重量}$$
$$X_2^{(2)} = \text{禁食的血浆葡萄糖}$$

都被测量了。从 $n=46$ 个无糖尿病病人的数据得到协方差矩阵

$$\mathbf{S} = \left[\begin{array}{c:c} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \hdashline \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc:cc} 1106.000 & 396.700 & 108.400 & 0.787 & 26.230 \\ 396.700 & 2382.000 & 1143.000 & -0.214 & -23.960 \\ 108.400 & 1143.000 & 2136.000 & 2.189 & -20.840 \\ \hdashline 0.787 & -0.214 & 2.189 & 0.016 & 0.216 \\ 26.230 & -23.960 & -20.840 & 0.216 & 70.560 \end{array}\right]$$

求样本典型变量及其相关系数，解释这些量。第一典型变量分别恰当地综合了它们各自变量组吗？试说明之。检验典型相关系数在 $\alpha=0.05$ 时的显著性。

10.17　关于人对吸烟的渴望以及心理状态和身体状态的数据，从 $n=110$ 个试验对象收集而来。数据是对 12 个问题(变量)的回答，编码为 1 到 5。与对吸烟的渴望有关的四个标准化测度量定义如下

$$z_1^{(1)} = \text{吸烟 1(第一措词)}$$
$$z_2^{(1)} = \text{吸烟 2(第二措词)}$$
$$z_3^{(1)} = \text{吸烟 3(第三措词)}$$
$$z_4^{(1)} = \text{吸烟 4(第四措词)}$$

与心理和身体状态有关的八个标准测量值定义如下

$$z_1^{(2)} = \text{集中力}$$
$$z_2^{(2)} = \text{烦恼}$$
$$z_3^{(2)} = \text{睡眠}$$
$$z_4^{(2)} = \text{紧张}$$
$$z_5^{(2)} = \text{警惕}$$
$$z_6^{(2)} = \text{急躁}$$
$$z_7^{(2)} = \text{疲劳}$$
$$z_8^{(2)} = \text{满意}$$

由这些数据构造的相关系数矩阵为

$$\mathbf{R} = \left[\begin{array}{c:c} \mathbf{R}_{11} & \mathbf{R}_{12} \\ \hdashline \mathbf{R}_{21} & \mathbf{R}_{22} \end{array}\right]$$

其中

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{R}_{11}=\begin{bmatrix}1.000 & 0.785 & 0.810 & 0.775\\ 0.785 & 1.000 & 0.816 & 0.813\\ 0.810 & 0.816 & 1.000 & 0.845\\ 0.775 & 0.813 & 0.845 & 1.000\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R}_{12}=\mathbf{R}_{21}'=\begin{bmatrix}0.086 & 0.144 & 0.140 & 0.222 & 0.101 & 0.189 & 0.199 & 0.239\\ 0.200 & 0.119 & 0.211 & 0.301 & 0.223 & 0.221 & 0.274 & 0.235\\ 0.041 & 0.060 & 0.126 & 0.120 & 0.039 & 0.108 & 0.139 & 0.100\\ 0.228 & 0.122 & 0.277 & 0.214 & 0.201 & 0.156 & 0.271 & 0.171\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R}_{22}=\begin{bmatrix}1.000 & 0.562 & 0.457 & 0.579 & 0.802 & 0.595 & 0.512 & 0.492\\ 0.562 & 1.000 & 0.360 & 0.705 & 0.578 & 0.796 & 0.413 & 0.739\\ 0.457 & 0.360 & 1.000 & 0.273 & 0.606 & 0.337 & 0.798 & 0.240\\ 0.579 & 0.705 & 0.273 & 1.000 & 0.594 & 0.725 & 0.364 & 0.711\\ 0.802 & 0.578 & 0.606 & 0.594 & 1.000 & 0.605 & 0.698 & 0.605\\ 0.595 & 0.796 & 0.337 & 0.725 & 0.605 & 1.000 & 0.428 & 0.697\\ 0.512 & 0.413 & 0.798 & 0.364 & 0.698 & 0.428 & 1.000 & 0.394\\ 0.492 & 0.739 & 0.240 & 0.711 & 0.605 & 0.697 & 0.394 & 1.000\end{bmatrix}$$

求样本典型变量及它们的相关系数。解释这些量。第一典型变量分别很好地综合了其各自变量组吗？解释之。

参 考 文 献

1. Andrews, D. F., and A. M. Herzberg. *Data*. New York: Springer-Verlag, 1985.
2. Bartlett, M. S. "Further Aspects of the Theory of Multiple Regression." *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 34 (1938), 33～40.
3. Bartlett, M. S. "A Note on Tests of Significance in Multivariate Analysis." *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 35(1939), 180～185.
4. Dunham, R. B. "Reaction to Job Characteristics: Moderating Effects of the Organization." *Academy of Management Journal*, 20, no. 1(1977),42～65.
5. Hotelling, H. "The Most Predictable Criterion." *Journal of Educational Psychology*, 26 (1935), 139～142.
6. Hotelling, H. "Relations between Two Sets of Variables." *Biometrika*, 28 (1936), 321～377.
7. Johnson, R. A., and T. Wehrly. "Measures and Models for Angular Correlation and Angular-Linear Correlation." *Journal of the Royal Statistical Society* (*B*), 39(1977), 222～229.
8. Kshirsagar, A. M. *Multivariate Analysis*. New York: Marcel Dekker, Inc., 1972.
9. Lawley, D. N. "Tests of Significance in Canonical Analysis." *Biometrika*, 46 (1959), 59～66.
10. Parker, R. N., and M. D. Smith. "Deterrence, Poverty, and Type of Homicide.." *American Journal of Sociology*, 85 (1979), 614～624.
11. Rencher, A. C. "Interpretation of Canonical Discriminant Functions. Canonical Variates and Principal Components." *The American Statistician*, 46 (1992),217～225.
12. Waugh, F. W. "Regression between Sets of Variates." *Econometrica*, 10 (1942), 290～310.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

第四部分

分类和分组方法

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

11.1 引言

判别与分类是两类多元分析方法，用于将对象（或观测值）分成不同的集合或者将新的对象（或观测值）分配到事先分好的各组之中。判别分析本质上具有探索性。作为一种分割方法，它通常在因果关系不甚明了的情况下被一次性地用来对所观察到的差别进行调查。分类方法从下述意义上说较少具有探索性：它们导出一些明确定义的法则，可用于分配新的对象。通常分类比判别要求更多的问题结构。

这样，判别与分类的直接目标可分别叙述如下：

目标 1：用图形（三维或更低维的）方法或代数方法描述来自若干个已知集合（总体）的对象（或观测值）的差异性。我们试图找到这样一些“判别量”，根据这些判别量的数值能尽可能地将这个集合分离。

目标 2：将对象（观测值）分为两个或更多个类。重点在于导出一种能最优地将新的对象指派给所分各类的法则。

我们约定用“判别”一词来指目标 1。这个术语是费希尔（R. A. Fisher）[9]在分离问题的首次现代处理中引进的。然而对这个目的来说更具描述性的词是“**分离**”。我们用“**分类**”或“**分配**”来指目标 2。

一个能将对象分离的函数有时可发挥分配量的作用；反之，一个分配对象的法则可以暗示某种判别方法。在实践中，目标 1 和目标 2 往往是重叠的，这时分离与分配之间的区别就变得很模糊。

11.2 两个总体的分离与分类

为说明问题，让我们列出一些情形。在这些情形下，人们感兴趣的是：(1)将两类对象分离，以及(2)将一个新对象指派给两个类别之一（或两个类别）。为方便计，将这两个类别分别记为 π_1 和 π_2。通常根据比如说 p 个相联系的随机变量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,\cdots,X_p]$ 的测量值来对这些对象进行分离或分类。$\mathbf{X}$ 的观测值从一个类别到另一个类别会有一定程度的差别①。我们可以将第一类中的全部数值设想为对于 π_1 的 $\mathbf{x}$ 值总体；而将第二类中的全部

① 若 $\mathbf{X}$ 值对于 π_1 和 π_2 中的对象来说没有很大差别，则两个类将不可区分，因而可将一个新对象不加区分地指派给任一类别。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

数值设想为对于 π_2 的 $\mathbf{x}$ 值总体。于是这两个总体可以用概率密度函数 $f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$ 来描述。因此我们可以交叉使用两种说法：将观测值指派给各总体，或者：将对象指派给各类别。

下面回顾一下第 1 章中所介绍的一些分类问题的例子。

总体 π_1 和 π_2	所测量的变量 $\mathbf{X}$
1. 有偿付力与无偿付力的财产责任保险公司。	总资产，股票与债券价值，股票与债券的市值，损失支出，盈余，签定的保费金额。
2. 非溃疡胃病组（胃功能紊乱者）与控制组（“正常”者）。	焦虑、依赖性、罪恶感、完美主义的量度。
3. 由麦迪逊和汉密尔顿所撰写的联邦文献。	不同单词的出现频数，句子的长度。
4. 两种鳶蕗（译者注：野草）。	萼片与花瓣的长度，花瓣裂缝的深度，苞的长度，花粉直径。
5. 新产品的速购者与迟购者。	教育，收入，家庭大小，过去更换品牌的次数。
6. 成功与不成功（肄业）的大学生。	入学考试成绩，高中毕业平均成绩，高中活动的数目。
7. 男性与女性。	人类学指标测量值，相似环境及古颅骨体积。
8. 良好信用与不良信用风险。	收入，年龄，信用卡数目，家庭规模。
9. 嗜酒者与非嗜酒者。	单胺氧化酶的活性，环脘酶的活性。

例如，我们从第 5 项中看到，对象（消费者）要被分成两类（“速购者”与“迟购者”），分类的依据是设想的有关变量的观测值（教育、收入等等）。用观测值和总体这样的术语，我们想识别形如 $\mathbf{x}'=[x_1(\text{教育}),x_2(\text{收入}),x_3(\text{家庭规模}),x_4(\text{更换品牌次数})]$ 的观察值是属于总体 π_1（速购者），还是属于 π_2（迟购者）。

目前，我们集中讨论两个总体的分类，到 11.5 节中再回来讨论分离。

分配或分类法则通常由“学习”样本发展而来。对已知随机选自两个总体的对象测出特征，并考察这些特征之间有无差别。从本质上说，全部可能的样本结果的集合被分成 R_1 和 R_2 两个区域。要是某个新观测值落入 R_1，就将它分配给总体 π_1；若落入 R_2，就将它分配给总体 π_2。这样，一个观测值集合倾向于 π_1，而另一个集合则倾向于 π_2。

在这一点上也许会感到奇怪：我们怎么知道某些观测值属于某个特定总体而对其余观测值却不能肯定？（当然，正是这一点才使分类成为一个需要研究的课题！）有几种情况会造成这种表现异常（见[19]）：

1. 关于未来表现的不完备的知识

例：在一个企业破产之前的两年内，曾对某些财务变量的极端值进行了观测。根据这些领先指标的观测值，另一个企业的官员便可对本企业的状态是否健康做出判断，并在必要时采取及时的纠正行动。

医学院的研究生招生办公室可以根据报名学生的考试成绩和其他记录把报名学生分成“有可能取得硕士学位”和“不大可能取得硕士学位”两类。这里，真正的结果只能在几年的研究生培训结束之后才能确定。

2. “完备的”信息需要毁坏对象

例：计算器电池的寿命只能通过使用直到将它用坏时才能确定；一块木材的强度只

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

能通过在其上加载荷，直到它断裂时才能得到；已被毁坏的产品不能出售。为避免上述情况，人们希望根据产品的某些事先测量值将它们分成“好的”或“坏的”。

3. 不可获得的或获得成本昂贵的信息

例：某些联邦文件可断定是由詹姆斯·麦迪逊或亚历山大·汉密尔顿撰写的，因为这些文件存他们的签名。但是另外一些文件没有签名。因而人们不禁想知道：这两人之中究竟是谁撰写了这些未署名文件？很清楚，我们不能去问他们。但词的使用频数和句子的长度能帮助我们对这些有争议的文件进行分类。

许多疾病只有通过非常昂贵的手术才能确诊。通常，我们希望通过某些容易观测但也可能误导的外部症候来诊断某种疾病。这种方法有助于避免不必要的(而且是昂贵的)手术。

从以上例子中应该明白：任何分类法则都不能提供准确无误的指派方法。这是因为在所测量的总体特征之间可能不存在明确的界限。也就是说，两组特征可能是重叠的。这样就可能将一个本属于 π_2 的对象误分到 π_1，或将属于 π_1 的对象误分到 π_2。

例 11.1 （判别机动割草机的拥有者和非拥有者）

考虑某城市中的两群人：拥有机动割草机的人群 π_1 和不拥有机动割草机的人群 π_2。在一次促销活动中，某机动割草机的制造商为预测最佳销售前景，想把该市家庭分为割草机的预期拥有者和非拥有者，所依据的变量是：x_1＝收入和 x_2＝草坪大小。$n_1=12$ 个现在的拥有者与 $n_2=12$ 个现在的非拥有者两个随机样本所产生的数据列于表 11.1。

表 11.1

π_1：机动割草机拥有者		π_2：非拥有者	
x_1(收入 单位：1000 美元)	x_2(草坪大小 单位：1000 平方英尺)	x_1(收入 单位：1000 美元)	x_2(草坪大小 单位：1000 平方英尺)
60.0	18.4	75.0	19.6
85.5	16.8	52.8	20.8
64.8	21.6	64.8	17.2
61.5	20.8	43.2	20.4
87.0	23.6	84.0	17.6
110.1	19.2	49.2	17.6
108.0	17.6	59.4	16.0
82.8	22.4	66.0	18.4
69.0	20.0	47.4	16.4
93.0	20.8	33.0	18.8
51.0	22.0	51.0	14.0
81.0	20.0	63.0	14.8

这些数据示于图 11.1。我们看到，割草机拥有者倾向于同时拥有较高的收入和较大的草坪，虽然“收入”看上去是一个比“草坪大小”更好的判别量。另一方面，两个人群有一定程度的重叠。例如，若将(x_1,x_2)值落入区域 R_1(由图中的实线所界定)的人分配到 π_1，而将(x_1,x_2)值落入区域 R_2 的人分配到 π_2，将有可能犯某些错误。某些拥有者将被错误地分类为非拥有者；反之，某些非拥有者也会被分类为拥有者。基本的思路是建立一个法则(区域 R_1 和 R_2)，使得犯上述错误的机会达到最小(见练习 11.2)。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

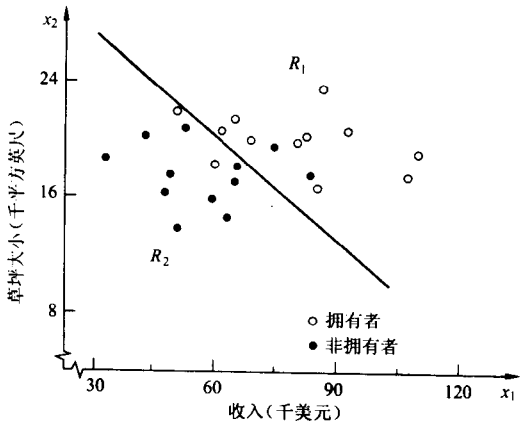


图 11.1　机动割草机的拥有者与非拥有者的收入和草坪大小

一个好的分类方法只应该产生少数错误分类。换而言之，错误分类的机会或概率应该很小。我们将会看到，一个“最优”分类法则还必须具备另外一些特性。

可能有这样的情况：某一个类别或总体比另一个类别有更大的出现概率，因为两个总体中一个比另一个大得多。例如，通常财务上健康的企业要大大多于濒临破产的企业。另一个例子是：某一类繁蕟比另一类更普遍。一个最优法则应该考虑这些“先验出现概率”。如果我们确信财务困难且最终将破产的企业的出现(先验)概率非常小，就应将一个随机选取的企业分类为非破产的，除非数据压倒性地倾向于破产。

分类的另一个问题是代价。假如将一个 π_1 对象误分为 π_2 同将一个 π_2 对象分入 π_1 相比是一个更严重的错误，那么我们就应对前者更加谨慎。作为一个例子，未能诊断出某种致命的疾病比错误地诊断有病(而实际上没有)是更严重的错误。在任何可能的情况下，最优分类方法应考虑与错误分类相联系的代价。

设 $f_1(\mathbf{x})$ 与 $f_2(\mathbf{x})$ 为 $p\times 1$ 向量随机变量 $\mathbf{X}$ 分别在总体 π_1 和 π_2 中的概率密度函数。设 Ω 为样本空间——即所有可能的观测值 $\mathbf{x}$ 的集合。一个具有观测值 $\mathbf{x}$ 的对象必须被指定属于 π_1 或 π_2。令 R_1 为 $\mathbf{x}$ 值的一个集合，当 $\mathbf{x}$ 属于 R_1 时，我们把对象分类为 π_1；$R_2=\Omega-R_1$ 为剩余的 $\mathbf{x}$ 值的集合，对这些 $\mathbf{x}$ 值，我们把对象分类为 π_2。由于任一对象必定属于且只属于 π_1 和 π_2 之一，因此 R_1 和 R_2 互斥且穷尽所有可能性。对 $p=2$，我们可能有形如图 11.2 所示的情况。

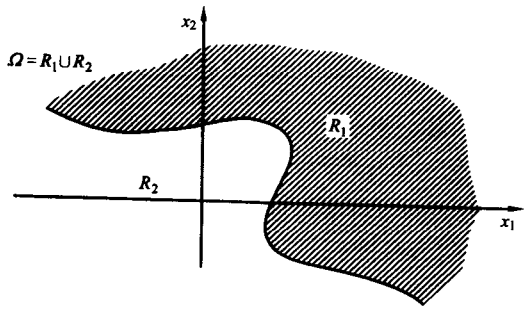


图 11.2　两个总体的分类区域

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

将 π_1 中的对象错分到 π_2 的条件概率 $P(2|1)$ 为：

$$P(2|1)=P(\mathbf{X}\in R_2|\pi_1)=\int_{R_2=\Omega-R_1}f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \tag{11-1}$$

类似地，将 π_2 中的对象错分到 π_1 的条件概率 $P(1|2)$ 为：

$$P(1|2)=P(\mathbf{X}\in R_1|\pi_2)=\int_{R_1}f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \tag{11-2}$$

在式(11-1)中，积分符号表示由密度函数 $f_1(\mathbf{x})$ 在区域 R_2 中所形成的体积。类似地，式(11-2)中的积分符号表示由 $f_2(\mathbf{x})$ 在区域 R_1 中所形成的体积。图 11.3 在单变量($p=1$)场合对此作了说明。

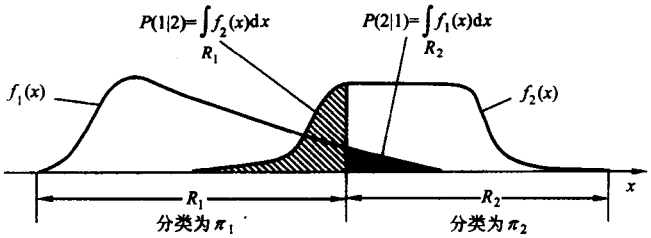


图 11.3　对假想分类区域的错分概率($p=1$)

令 p_1 为 π_1 的先验概率，p_2 为 π_2 的先验概率，$p_1+p_2=1$。此时正确或错误地将对象分类的无条件概率可表示为先验概率与条件概率之积：

$$\begin{aligned}
&P(\text{观测对象被正确地划入 }\pi_1)\\
&=P(\text{观测对象来自 }\pi_1\text{ 且被划入 }\pi_1)\\
&=P(\mathbf{X}\in R_1|\pi_1)P(\pi_1)=P(1|1)p_1,\\
&P(\text{观测对象被错误地划入 }\pi_1)\\
&=P(\text{观测对象来自 }\pi_2\text{，却被划入 }\pi_1)\\
&=P(\mathbf{X}\in R_1|\pi_2)P(\pi_2)=P(1|2)p_2\\
&P(\text{观测对象被正确地划入 }\pi_2)\\
&=P(\text{观测对象来自 }\pi_2\text{，且被划入 }\pi_2)\\
&=P(\mathbf{X}\in R_2|\pi_2)P(\pi_2)=P(2|2)p_2\\
&P(\text{观测对象被错误地划入 }\pi_2)\\
&=P(\text{观测对象来自 }\pi_1\text{，却被划入 }\pi_2)\\
&=P(\mathbf{X}\in R_2|\pi_1)P(\pi_1)=P(2|1)p_1
\end{aligned} \tag{11-3}$$

分类方案经常按错分概率来评估(见 11.4 节)，但这种做法忽视了错分的代价。例如，如果错分入 π_2 的成本极其高昂，那么即使像 $0.06=P(2|1)$ 这样的小概率也可能太大。因此忽视代价的法则有可能引起问题。

错分代价可以用代价矩阵来定义：

		分类为：	
		π_1	π_2
真实总体：	π_1	0	$c(2\|1)$
	π_2	$c(1\|2)$	0

(11-4)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(1) 正确分类的代价为 0,(2) 将属于 π_2 的对象错分为 π_1 的代价为 $c(1|2)$,(3) 将属于 π_1 的对象错分为 π_2 的代价为 $c(2|1)$。

对任一法则,平均的或**期望的错分代价**(ECM)可由式(11-4)中的非对角元与错分概率乘积之和得到。因此,

$$\mathrm{ECM} = c(2|1)P(2|1)p_1 + c(1|2)P(1|2)p_2 \tag{11-5}$$

一个合理的分类法则应该有最小或尽可能小的 ECM。

结论 11.1 使 ECM 达到最小的区域 R_1 和 R_2 由满足以下不等式的 $\mathbf{x}$ 值所定义:

$$\begin{aligned} &R_1: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} \geqslant \left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right) \\ &(\text{密度比}) \geqslant (\text{代价比})(\text{先验概率比}) \\ &R_2: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} < \left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right) \\ &(\text{密度比}) < (\text{代价比})(\text{先验概率比}) \end{aligned} \tag{11-6}$$

证明 见练习 11.3。

由式(11-6)可以清楚看出,建立最小 ECM 法则需要:(1) 在新观察值 $\mathbf{x}_0$ 处评估的密度函数比,(2) 代价比,以及(3)先验概率比。定义中出现这些比值是有意义的,因为在很多情况下,确定这些比值往往比确定它们的组成部分要容易得多。

例如,很难确定将一个事实上并非上大学材料的中学生划为是上大学材料的错划代价(取适当单位),反之亦然。例如,对于纳税人,教育一个在两年内就会退学的大学生的代价只能大致估计。若大学和社会未能使一个有能力的学生受教育,要估计这种代价更加困难。然而,对错分代价的比值却可能得出一个比较现实的数据。无论取何种度量单位,未录取一名有望读到毕业的大学生的代价可能 5 倍于录取一名最终退学的大学生的代价。在这种场合,代价比为 5。

有趣的是在某些特殊情形下考虑式(11-6)所定义的分类区域。

最小期望代价域的几个特例

(a) $p_2/p_1=1$ (相同先验概率)

$$R_1: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} \geqslant \frac{c(1|2)}{c(2|1)} \qquad R_2: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} < \frac{c(1|2)}{c(2|1)}$$

(b) $c(1|2)/c(2|1)=1$ (相同错分代价)

$$R_1: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} \geqslant \frac{p_2}{p_1} \qquad R_2: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} < \frac{p_2}{p_1} \tag{11-7}$$

(c) $p_2/p_1=c(1|2)/c(2|1)=1$ 或 $p_2/p_1=1/(c(1|2)/c(2|1))$

(相同先验概率和相同错分代价)

$$R_1: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} \geqslant 1 \qquad R_2: \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})} < 1$$

当先验概率未知时,它们通常被取成相等,此时最小 ECM 法则只涉及总体密度比与适当的错分代价比的比较。如果错分代价比不确定,通常就取成 1,结果就形成总体密度比与先验概率比的比较。最后,当先验概率比和错分代价比都是 1,或者二者为倒数关系,

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

则最优分类区域就由比较总体密度的大小来决定。在这种场合，如果 $\mathbf{x}_0$ 是一个新的观测值，且 $f_1(\mathbf{x}_0)/f_2(\mathbf{x}_0)\geqslant 1$，即 $f_1(\mathbf{x}_0)\geqslant f_2(\mathbf{x}_0)$，我们就将 $\mathbf{x}_0$ 分入 π_1。反之，若 $f_1(\mathbf{x}_0)/f_2(\mathbf{x}_0)<1$，即 $f_1(\mathbf{x}_0)<f_2(\mathbf{x}_0)$，我们就将 $\mathbf{x}_0$ 分入 π_2。实践中一种普遍的做法是在分类时随意采用式(11-7)中的情况(c)。这种做法等价于假定对最小 ECM 法则有相同的先验概率和相同的错分代价①。

例 11.2 （将一个新的观测值分到两个总体之一）

某研究人员可获得足够的数据来估计分别与总体 π_1 和 π_2 相联系的密度函数 $f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$。设 $c(2|1)=5$ 个单位，$c(1|2)=10$ 个单位。此外，已知大约 20%的对象(所有这些对象的测量值均已取得)属于 π_2，也就是说，先验概率为 $p_1=0.8$，$p_2=0.2$。

给定先验概率和错分代价。便可根据式(11-6)导出分类区域 R_1 和 R_2。我们有

$$R_1:\ \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})}\geqslant\left(\frac{10}{5}\right)\times\left(\frac{0.2}{0.8}\right)=0.5$$

$$R_2:\ \frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})}<\left(\frac{10}{5}\right)\times\left(\frac{0.2}{0.8}\right)=0.5$$

假定在一个新的观测点 $\mathbf{x}_0$ 算得 $f_1(\mathbf{x}_0)=0.3$ 和 $f_2(\mathbf{x}_0)=0.4$。试问：应将此新观测点分入 π_1 还是 π_2？为回答此问题，我们计算比值

$$\frac{f_1(\mathbf{x}_0)}{f_2(\mathbf{x}_0)}=\frac{0.3}{0.4}=0.75$$

并将此值与前面得到的结果比较。由于

$$\frac{f_1(\mathbf{x}_0)}{f_2(\mathbf{x}_0)}=0.75>\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)=0.5$$

我们发现 $\mathbf{x}_0\in R_1$，因此将其分入 π_1。

用不同于期望错分代价的准则也能导出“最优”分类方法。例如，可以不考虑错分代价，通过选择 R_1 和 R_2 使**总错分概率**(TPM)

$$\begin{aligned}\text{TPM}&=P(\text{错分 }\pi_1\text{ 的观测值或错分 }\pi_2\text{ 的观测值})\\&=P(\text{观测值来自 }\pi_1\text{，但被错分入 }\pi_2)\\&\quad+P(\text{观测值来自 }\pi_2\text{，但被错分入 }\pi_1)\\&=p_1\int_{R_2}f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}+p_2\int_{R_1}f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}\end{aligned}\tag{11-8}$$

达到极小。数学上，这个问题等价于在错分代价相同的情况下使期望错分代价最小化。因此，这种情况下的最优区域由式(11-7)中的(b)给出。

我们也可以按最大“后验”概率 $P(\pi_i|\mathbf{x}_0)$ 将新观测值 $\mathbf{x}_0$ 分配给总体。根据贝叶斯法则，后验概率为：

$$\begin{aligned}P(\pi_1|\mathbf{x}_0)&=\frac{P(\pi_1\text{ 发生和我们观察到 }\mathbf{x}_0)}{P(\text{我们观察到 }\mathbf{x}_0)}\\&=\frac{P(\text{我们观察到 }\mathbf{x}_0|\pi_1)P(\pi_1)}{P(\text{我们观察到 }\mathbf{x}_0|\pi_1)P(\pi_1)+P(\text{我们观察到 }\mathbf{x}_0|\pi_0)P(\pi_2)}\end{aligned}$$

① 这是通常所提出的理由。它也等价于假定先验概率比与错分代价比互为倒数。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$=\frac{p_1 f_1(\mathbf{x}_0)}{p_1 f_1(\mathbf{x}_0)+p_2 f_2(\mathbf{x}_0)}$$

$$P(\pi_2|\mathbf{x}_0)=1-P(\pi_1|\mathbf{x}_0)=\frac{p_2 f_2(\mathbf{x}_0)}{p_1 f_1(\mathbf{x}_0)+p_2 f_2(\mathbf{x}_0)} \tag{11-9}$$

当 $P(\pi_1|\mathbf{x}_0)>P(\pi_2|\mathbf{x}_0)$时将观测值 $\mathbf{x}_0$ 分入 π_1，这相当于采用式(11-7)中的总错分概率的法则(b)，因为式(11-9)中两式的分母相同。但是，在观测到 $\mathbf{x}_0$ 后再计算总体 π_1 和 π_2 的概率(因此名为**后验概率**)，这对识别不很明确的分配来说常常很有用。

11.3 两个多元正态总体的分类

在统计实践中，基于正态总体的分类方法居主导地位。这是因为对范围广阔的总体模型来说，这些分类方法简单而高效。现在我们假定 $f_1(\mathbf{x})$和 $f_2(\mathbf{x})$为多元正态密度，分别具有均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1$，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 和均值向量 $\boldsymbol{\mu}_2$，协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_2$。

两个协方差矩阵相等的特殊情况导致特别简单的线性分类统计量。

当 $\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2=\boldsymbol{\Sigma}$ 时正态总体的分类

假定 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,\cdots,X_p]$对总体 π_1 和 π_2 的联合密度为

$$f_i(\mathbf{x})=\frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\right] \quad 对\ i=1,2 \tag{11-10}$$

再假定总体参数 $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 皆已知。此时在消去公因子$(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}$后，式(11-6)中的最小 ECM 区域变成：

$$R_1:\ \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)\right]$$
$$\geqslant\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)$$

$$R_2:\ \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)\right]$$
$$<\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right) \tag{11-11}$$

给定这些区域 R_1 和 R_2，我们就可以构造下述结论中给出的分类法则。

结论 11.2 设总体 π_1 和 π_2 由形如式(11-10)的多元正态密度描述。此时能使 ECM 最小化的分配法则如下：

当

$$(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}_0-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\geqslant\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right] \tag{11-12}$$

时将 $\mathbf{x}_0$ 分配给 π_1，否则将 $\mathbf{x}_0$ 分配给 π_2。

证明 由于对所有 $\mathbf{x}$，式(11-11)中的量均属非负，我们可以取它们的自然对数，同时保持不等号不变。进一步有(见练习 11.5)，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)$$

$$=(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2) \tag{11-13}$$

于是

$$R_1:\ (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\geqslant\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right]$$

$$R_2:\ (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)<\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right] \tag{11-14}$$

这样就证明了结论 11.2。

在大多数实际情况下，总体参数 $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 均为未知系数，因此法则(11-12)必须修改。沃尔德(Wald)[27]和安德森(Anderson)[2]建议将总体参数用它们的样本对应量来代替。

然后，假定多元随机变量 $\mathbf{X}'=[X_1,X_2,\cdots,X_p]$ 有 n_1 个观测值来自 π_1 和 n_2 个观测值来自 π_2，$n_1+n_2\geqslant p$。这时相应的数据矩阵分别为

$$\underset{(n_1\times p)}{\mathbf{X}_1}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}_{11}'\\ \mathbf{x}_{12}'\\ \vdots\\ \mathbf{x}_{1n_1}'\end{bmatrix}$$

$$\underset{(n_2\times p)}{\mathbf{X}_2}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}_{21}'\\ \mathbf{x}_{22}'\\ \vdots\\ \mathbf{x}_{2n_2}'\end{bmatrix} \tag{11-15}$$

根据这些数据矩阵，样本均值向量和样本协方差矩阵由下列诸式确定：

$$\underset{(p\times 1)}{\bar{\mathbf{x}}_1}=\frac{1}{n_1}\sum_{j=1}^{n_1}\mathbf{x}_{1j},\qquad \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_1}=\frac{1}{n_1-1}\sum_{j=1}^{n_1}(\mathbf{x}_{1j}-\bar{\mathbf{x}}_1)(\mathbf{x}_{1j}-\bar{\mathbf{x}}_1)'$$

$$\underset{(p\times 1)}{\bar{\mathbf{x}}_2}=\frac{1}{n_2}\sum_{j=1}^{n_2}\mathbf{x}_{2j},\qquad \underset{(p\times p)}{\mathbf{S}_2}=\frac{1}{n_2-1}\sum_{j=1}^{n_2}(\mathbf{x}_{2j}-\bar{\mathbf{x}}_2)(\mathbf{x}_{2j}-\bar{\mathbf{x}}_2)' \tag{11-16}$$

由于假定总体有相同的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$ 应联合起来，以导出一个如式(6-21)那样的 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的无偏估计。特别是，如果数据矩阵 $\mathbf{X}_1$ 和 $\mathbf{X}_2$ 分别包含来自总体 π_1 和 π_2 的随机样本，则加权平均

$$\mathbf{S}_p=\left[\frac{n_1-1}{(n_1-1)+(n_2-1)}\right]\mathbf{S}_1+\left[\frac{n_2-1}{(n_1-1)+(n_2-1)}\right]\mathbf{S}_2 \tag{11-17}$$

便是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的一个无偏估计。

在式(11-12)中，用 $\bar{\mathbf{x}}_1$ 代替 $\boldsymbol{\mu}_1$，$\bar{\mathbf{x}}_2$ 代替 $\boldsymbol{\mu}_2$，$\mathbf{S}_p$ 代替 $\boldsymbol{\Sigma}$，就得到“样本”分类法则：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

两个正态总体的估计的最小 ECM 法则

若

$$(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}_0-\frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)\geqslant\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right] \tag{11-18}$$

则分配 $\mathbf{x}_0$ 到 π_1，否则分配 $\mathbf{x}_0$ 到 π_2。

若在式(11-18)中

$$\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)=1$$

则 $\ln(1)=0$，因此两个正态总体的估计的最小 ECM 法则等价于将在 $\mathbf{x}_0$ 点得出的标量

$$\hat{y}=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x} \tag{11-19}$$

与数字

$$\begin{aligned}\hat{m}&=\frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)\\&=\frac{1}{2}(\bar{y}_1+\bar{y}_2)\end{aligned} \tag{11-20}$$

做比较，其中

$$\bar{y}_1=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\bar{\mathbf{x}}_1=\hat{\mathbf{a}}'\bar{\mathbf{x}}_1$$
$$\bar{y}_2=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\bar{\mathbf{x}}_2=\hat{\mathbf{a}}'\bar{\mathbf{x}}_2$$

也就是说，两正态总体的估计的最小 ECM 法则等价于建立两个单变量总体 y，y 为来自总体 π_1 和 π_2 的观测值的适当线性组合。然后根据 $y_0=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_0$ 落在 $\bar{y}_1$ 和 $\bar{y}_2$ 的连线中点 $\hat{m}$ 的右侧还是左侧来决定将新的观测值 $\mathbf{x}_0$ 分到 π_1 还是 π_2。

一旦总体未知参数用其估计值代替，就无法保证所得出的法则在具体应用中能使 ECM 最小化。这是因为式(11-12)中的最优法则是在假定多元正态密度 $f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$ 完全已知的前提下导出的，而式(11-18)只是最优法则的一个估计。然而，如果样本容量大，就有理由期望这个估计有良好表现①。

归纳起来，如果数据表现为多元正态分布②，则对每一个新的观测值，$\mathbf{x}_0$ 可以计算式(11-18)左端的分类统计量。这些观测值可通过比较这个统计量的值与 $\ln[(c(1|2)/c(2|1))(p_2/p_1)]$ 的值来分类。

例 11.3 （两正态总体有共同 $\boldsymbol{\Sigma}$ 与相同代价情况下的分类）

本例的材料来自于一项有关查明带 A 型血友病基因者的研究[4]。（也见练习11.32。）

为构造一个查明带 A 型血友病基因者的方法，研究人员分析了两组女性的血样，并记录了以下两个变量：

$$X_1=\log_{10}(\text{AHF 活性})$$
$$X_2=\log_{10}(\text{类 AHF 抗原})$$

① 当样本容量增加时，$\bar{\mathbf{x}}_1$，$\bar{\mathbf{x}}_2$ 和 $\mathbf{S}_p$ 以接近于 1 的概率变得分别与 $\boldsymbol{\mu}_1$，$\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 无法区分。[见式(4-26)和式(4-27)。]

② 至少对每个变量来说，其观测值的边际频数分布的正态性是可以检验的。此项工作对来自两个总体的样本都要做。经常需要将某些变量做适当的变换，以使它们更“像正态变量”。（见 4.6 节和 4.8 节。）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(“AHF”代表“抗血友病因子”。)第一组妇女共 $n_1=30$ 人，来自不携带血友病基因的女性总体。这个组称为正常组。第二组有 $n_2=22$ 个妇女，来自已知的 A 型血友病患者总体(血友病患者的女儿，有多于一个血友病儿子的母亲，以及有一个血友病儿子且有其他血友病亲戚的母亲)。这一组称为必然携带者。这两组观测值对(x_1,x_2)示于图 11.4。图中还分别展示了对二元正态分布(以 $\bar{\mathbf{x}}_1$ 和 $\bar{\mathbf{x}}_2$ 为中心)含 50%和 95%概率的估计轮廓线。两个总体共同的协方差矩阵用联合样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_p$ 来估计。在本例中，二元正态分布看来同数据拟合得相当好。

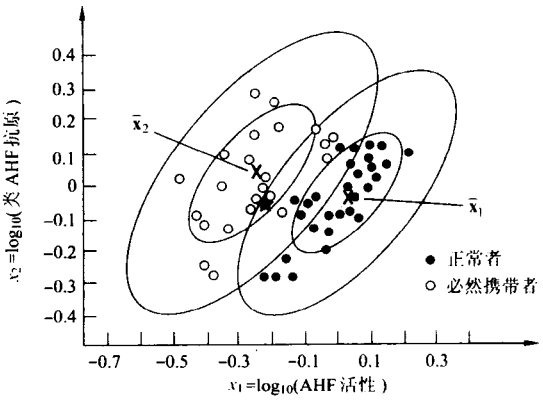


图 11.4　血友病数据的散布图

研究人员(见[4])提供了下列信息：

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}-0.0065\\-0.0390\end{bmatrix},\qquad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}-0.2483\\0.0262\end{bmatrix}$$

以及

$$\mathbf{S}_p^{-1}=\begin{bmatrix}131.158 & -90.423\\-90.423 & 108.147\end{bmatrix}$$

因此，相同代价和相同先验概率的判别函数[见式(11-19)]为

$$\begin{aligned}\hat{y}&=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}=[\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2]'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}\\&=[0.2418\quad -0.0652]\begin{bmatrix}131.158 & -90.423\\-90.423 & 108.147\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}\\&=37.61x_1-28.92x_2\end{aligned}$$

进而有

$$\bar{y}_1=\hat{\mathbf{a}}'\bar{\mathbf{x}}_1=[37.61\quad -28.92]\begin{bmatrix}-0.0065\\-0.0390\end{bmatrix}=0.88$$

$$\bar{y}_2=\hat{\mathbf{a}}'\bar{\mathbf{x}}_2=[37.61\quad -28.92]\begin{bmatrix}-0.2483\\0.0262\end{bmatrix}=-10.10$$

因此均值连线的中点[见式(11-20)]为

$$\hat{m}=\frac{1}{2}(\bar{y}_1+\bar{y}_2)=\frac{1}{2}\times(0.88-10.10)=-4.61$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

假定查得另一个妇女的两个变量值为 $x_1=-0.210$ 和 $x_2=-0.044$，这个妇女应被分入 π_1（正常组）还是 π_2（必然携带组）？

利用式(11-18)，并设有相同的代价和相同的先验概率（故 $\ln 1=0$），就有

分配 $\mathbf{x}_0$ 到 π_1，若 $\hat{y}_0=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_0\geqslant\hat{m}=-4.61$

分配 $\mathbf{x}_0$ 到 π_2，若 $\hat{y}_0=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_0<\hat{m}=-4.61$

这里 $\mathbf{x}_0'=(-0.210,-0.044)$。由于

$$\hat{y}_0=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_0=[37.61\quad -28.92]\begin{bmatrix}-0.210\\-0.044\end{bmatrix}=-6.62<-4.61$$

因此将她分入 π_2，即这位妇女是 A 型血友病基因的必然携带者。这个新的观测点在图 11.4中用一个星号表示。从图上可以看到，这个点落在 π_2 的 50%轮廓线内，而大体位于 π_1 的 95%轮廓线上。这样，分类就不是很明确。

现在假定组成员的先验概率已知。例如，假定产生上述测量值 x_1 和 x_2 的血液来自一个血友病患者的外甥，这时她（他）的基因具有 A 型血友病缺陷的机会为 0.25。因此 π_1 的先验概率为 $p_1=0.75$，而 π_2 的先验概率为 $p_2=0.25$。假定错分代价相同，即 $c(1|2)=c(2|1)$，并使用分类统计量

$$\hat{w}=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}_0-\frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)$$

或 $\hat{w}=\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_0-\hat{m}$，其中 $\mathbf{x}_0'=[-0.210,-0.044]$，$\hat{m}=-4.61$，以及 $\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_0=-6.62$，我们有

$$\hat{w}=-6.62-(-4.61)=-2.01$$

应用式(11-18)，得到

$$\hat{w}=-2.01<\ln\left[\frac{p_2}{p_1}\right]=\ln\left[\frac{0.25}{0.75}\right]=-1.10$$

因此我们将此妇女分入 π_2（必然携带者）。

按比例调节

系数向量 $\hat{\mathbf{a}}=\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)$ 只是在相差一个常数因子的意义下惟一，因此对 $c\neq 0$，任一向量 $c\hat{\mathbf{a}}$ 均可成为判别系数。

向量 $\hat{\mathbf{a}}$ 经常被“按比例调节”或“规范化”，以便于解释其元素。两种最常用的规范化方法为：

1. 令

$$\hat{\mathbf{a}}^*=\frac{\hat{\mathbf{a}}}{\sqrt{\hat{\mathbf{a}}'\hat{\mathbf{a}}}}\tag{11-21}$$

因此 $\hat{\mathbf{a}}^*$ 具有单位长度。

2. 令

$$\hat{\mathbf{a}}^*=\frac{\hat{\mathbf{a}}}{\hat{a}_1}\tag{11-22}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

因此新的系数向量 $\hat{\mathbf{a}}^*$ 的第一个元素为 1。

在以上两种场合，$\hat{\mathbf{a}}^*$ 均具有形式 $c\hat{\mathbf{a}}$。对规范化(1)有 $c=(\hat{\mathbf{a}}'\hat{\mathbf{a}})^{-1}$，而对(2)有 $c=\hat{\mathbf{a}}_1^{-1}$。

在式(11-21)中，$\hat{a}_1^*,\hat{a}_2^*,\cdots,\hat{a}_p^*$ 的值都落在区间[−1,1]之内。在式(11-22)中，$\hat{a}_1^*=1$，而 $\hat{a}_2^*,\cdots,\hat{a}_p^*$ 表为 $\hat{a}_1^*$ 的倍数。将 $\hat{a}_i^*$ 约束在区间[−1,1]内，有利于对系数进行直观比较。类似地，将 $\hat{a}_i^*$ 表为 $\hat{a}_1^*$ 的倍数有利于评估变量 $X_2,\cdots,X_p$ 作为判别量的相对重要性(相对于 X_1)。

只有当 $\mathbf{X}$ 变量经过标准化之后，我们才建议将 $\hat{\mathbf{a}}_i$ 规范化。如果不是这种情况，在解释分析结果时就必须非常小心。

当 $\Sigma_1\neq\Sigma_2$ 时正态总体的分类

如同所预料的那样，当总体协方差矩阵不同时，分类法则就更复杂。

考虑式(11-10)中的多元正态密度，并用 Σ_i，$(i=1,2)$代替其中的 Σ。这样，对两个总体来说，不仅两个均值向量，就是两个协方差矩阵也都不相同。正如我们所见到的，最小 ECM 和最小 TPM 的区域依赖于密度比 $f_1(\mathbf{x})/f_2(\mathbf{x})$，或等价地依赖于密度比的自然对数 $\ln[f_1(\mathbf{x})/f_2(\mathbf{x})]=\ln[f_1(\mathbf{x})]-\ln[f_2(\mathbf{x})]$。当多元正态密度有不同的协方差结构时，密度比中包含 $|\Sigma_i|^{1/2}$的项就不会像 $\Sigma_1=\Sigma_2$ 时那样可以消掉。此外，$f_1(\mathbf{x})$和 $f_2(\mathbf{x})$指数中的二次型也不能合并成如式(11-13)中那样相当简单的结果。

将具有不同协方差矩阵的正态密度代入式(11-6)，取自然对数再化简(见练习 11.15)，得到分类域：

$$R_1:\ -\frac{1}{2}\mathbf{x}'(\Sigma_1^{-1}-\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}+(\boldsymbol{\mu}_1'\Sigma_1^{-1}-\boldsymbol{\mu}_2'\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}-k\geqslant\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right]$$

$$R_2:\ -\frac{1}{2}\mathbf{x}'(\Sigma_1^{-1}-\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}+(\boldsymbol{\mu}_1'\Sigma_1^{-1}-\boldsymbol{\mu}_2'\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}-k<\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right] \tag{11-23}$$

其中

$$k=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{|\Sigma_1|}{|\Sigma_2|}\right)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1'\Sigma_1^{-1}\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2'\Sigma_2^{-1}\boldsymbol{\mu}_2) \tag{11-24}$$

这些分类域由 $\mathbf{x}$ 的二次函数定义。当 $\Sigma_1=\Sigma_2$ 时，二次项 $-\frac{1}{2}\mathbf{x}'(\Sigma_1^{-1}-\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}$ 消失，于是由式(11-23)所定义的区域退化为由式(11-14)所定义的区域。

结论 11.3 设总体 π_1 和 π_2 由均值向量和协方差矩阵分别为 $\boldsymbol{\mu}_1,\Sigma_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2,\Sigma_2$ 的正态密度所刻划，则能使期望错分代价(ECM)达到最小的分配法则为：

当

$$-\frac{1}{2}\mathbf{x}_0'(\Sigma_1^{-1}-\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}_0+(\boldsymbol{\mu}_1'\Sigma_1^{-1}-\boldsymbol{\mu}_2'\Sigma_2^{-1})\mathbf{x}_0-k\geqslant\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right]$$

时将 $\mathbf{x}_0$ 分配给 π_1，否则将 $\mathbf{x}_0$ 分配给 π_2。

这里 k 由式(11-24)所给出。

在实践中，结论 11.3 中的分类法则是通过用样本量 $\bar{\mathbf{x}}_1,\bar{\mathbf{x}}_2,\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$[见式(11-16)]分

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

别代替总体量 $\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_2$ 来实施的①。

二次分类法则(有不同协方差阵的正态总体)

若

$$-\frac{1}{2}\mathbf{x}_0'(\mathbf{S}_1^{-1}-\mathbf{S}_2^{-1})\mathbf{x}_0+(\bar{\mathbf{x}}_1'\mathbf{S}_1^{-1}-\bar{\mathbf{x}}_2'\mathbf{S}_2^{-1})\mathbf{x}_0-k\geqslant\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right] \tag{11-25}$$

则将 $\mathbf{x}_0$ 分配到 π_1,否则将 $\mathbf{x}_0$ 分配到 π_2。

在维数大于 2 的场合,用二次函数进行分类相当困难,而且会导致某些奇怪的结果。尤其当数据(本质上)不服从正态分布时,情况更是如此。

图 11.5(a)显示了建立在两个具有不同方差的正态分布这一理想化情况基础上的相同代价及相同先验概率法则。在这个场合,这个二次分类法则导致区域 R_1 由两个不相联结的集合组成。

在许多应用中,π_1 分布的左尾部分比正态分布所描述的左尾部分要低。于是正如同图 11.5(b)所示的那样,由二次法则产生的 R_1 的左尾部分不能清晰地区分两个总体分布,因此会导致较大的失误率。二次法则的一个严重的弱点是对偏离正态性很敏感。

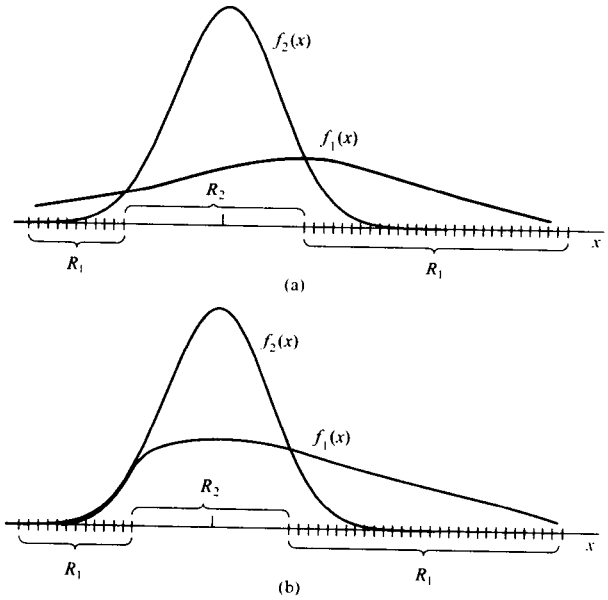


图 11.5 二次法则:(a) 两个方差不同的正态分布,(b) 两个分布,其中一个为非正态分布——法则不适当

若数据为非多元正态数据,则有两种可行的选择。首先,可将非正态性数据变换成接近正态性的数据,然后进行协方差矩阵相等性的检验,看看线性法则(11-18)和二次法则(11-25)哪个更合适。可以考虑的变换在第 4 章中已有讨论。(通常的协方差齐次性检验受

① 为保证 $\mathbf{S}_1^{-1}$ 和 $\mathbf{S}_2^{-1}$ 存在,不等式 $n_1>p$ 和 $n_2>p$ 都必须成立,因为这样才能用 $\mathbf{S}_1^{-1}$ 和 $\mathbf{S}_2^{-1}$ 分别取代 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_2$,从而得出样本分类法则(11-25)。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

到非正态性的很大影响，所以在进行这种检验之前必须将非正态性数据变换成正态性数据。）

其次，可以使用线性（或二次）法则而不考虑母总体分布的形式，期望能产生相当好的效果。但是对这个问题的研究表明，在非正态情形下，即使总体协方差矩阵相同，线性分类函数的使用效果有时也非常差。（见[20]和[21]。）由此得出结论：一定要检查任何分类方法的效果。至少必须对用于构造分类函数的数据做这种检查。在理想的情况下，会有足够的数据用作"训练"样本和"验证"样本。训练样本用于构造分类函数，而验证样本则用于评估分类的效果。

11.4 评估分类函数

判断任一分类方法效果的一个重要途径，就是计算其"失误率"或错分概率。当母总体分布形式完全已知时，如例 11.4 所显示的那样，错分概率的计算相对说比较容易。由于母总体分布很少是已知的，我们将集中考虑与样本分类函数相联系的失误率。一旦构造出一个分类函数，我们就对如何度量它在未来样本中的性能感兴趣。

由式(11-8)知，总错分概率为

$$\mathrm{TPM} = p_1\int_{R_2} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} + p_2\int_{R_1} f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}$$

通过适当选择 R_1 和 R_2 得出的该量的最小值，称为最优失误率(OER)。

最优失误率 $$(\mathrm{OER}) = p_1\int_{R_2} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} + p_2\int_{R_1} f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \tag{11-26}$$

其中 R_1 和 R_2 由式(11-7)中的(b)所确定。

这样，OER 就是最小 TPM 分类法则的失误率。

例 11.4 （计算错分概率）

让我们在 $p_1=p_2=1/2$，并且式(11-10)中的 $f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$ 为多元正态密度时导出最优失误率的表达式。

最小 ECM 分类法则和最小 TPM 分类法则在 $c(1|2)=c(2|1)$ 时彼此重合。由于先验概率也相等，所以最小 TPM 分类域对正态总体来说由式(11-12)定义，其中 $\ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right]=0$。我们发现

$$R_1:\ (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2) \geqslant 0$$

$$R_2:\ (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2) < 0$$

这些集合可用 $y=(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}=\mathbf{a}'\mathbf{x}$ 表示为

$$R_1(y):\ y \geqslant \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)$$

$$R_2(y):\ y < \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

但 Y 为正态随机变量的线性组合，因此 Y 的概率密度 $f_1(y)$ 和 $f_2(y)$ 服从一元正态分布（见结论 4.2），其均值和方差分别为

$$\mu_{1Y} = \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_1 = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1$$
$$\mu_{2Y} = \mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_2 = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2$$
$$\sigma_Y^2 = \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a} = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) = \Delta^2$$

现在，

$$\text{TPM} = \frac{1}{2}P(\text{将 } \pi_1 \text{ 观测值错分入 } \pi_2) + \frac{1}{2}P(\text{将 } \pi_2 \text{ 观测值错分入 } \pi_1)$$

但是，

$$\begin{aligned}
&P[\text{将 } \pi_1 \text{ 观测值错分入 } \pi_2] = P(2|1) \\
&= P\left[Y < \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)\right] \\
&= P\left(\frac{Y - \mu_{1Y}}{\sigma_Y} < \frac{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2) - (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1}{\Delta}\right) \\
&= P\left(Z < \frac{-\frac{1}{2}\Delta^2}{\Delta}\right) = \Phi\left(\frac{-\Delta}{2}\right)
\end{aligned}$$

其中 $\Phi(\cdot)$ 为标准正态分布的累积分布函数。类似地，

$$\begin{aligned}
&P[\text{将 } \pi_2 \text{观测值错分为 } \pi_1] \\
&= P(1|2) = P\left[Y \geqslant \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)\right] \\
&= P\left(Z \geqslant \frac{\Delta}{2}\right) = 1 - \Phi\left(\frac{\Delta}{2}\right) = \Phi\left(\frac{-\Delta}{2}\right)
\end{aligned}$$

这些错分概率示于图 11.6。最优失误率为

$$\text{OER} = \text{最小 TPM} = \frac{1}{2}\Phi\left(\frac{-\Delta}{2}\right) + \frac{1}{2}\Phi\left(\frac{-\Delta}{2}\right) = \Phi\left(\frac{-\Delta}{2}\right) \tag{11-27}$$

比如说，若 $\Delta^2 = (\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2) = 2.56$，则 $\Delta = \sqrt{2.56} = 1.6$。利用附录中的表 1，我们得到

$$\text{最小 TPM} = \Phi\left(\frac{-1.6}{2}\right) = \Phi(-0.8) = 0.2119$$

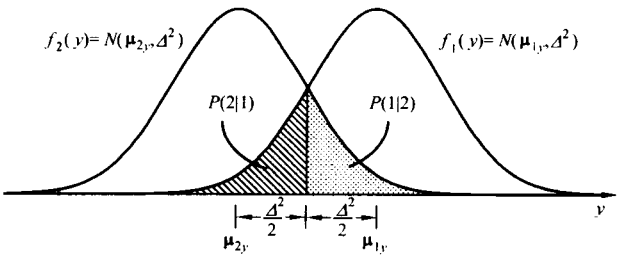


图 11.6　基于 Y 的错分概率

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

这个最优分类法则会错误地将 21%的对象从一个总体分配到另一个总体。

例 11.4 说明当总体密度函数已知时，如何计算最优失误率。如果某些总体参数需要用样本来估计(通常情况就是如此)，那么失误率的计算就不那么直截了当。

原则上，样本分类函数的效果可以用真实失误率(AER)来评估：

$$\mathrm{AER} = p_1\int_{\hat{R}_2} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} + p_2\int_{\hat{R}_1} f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \tag{11-28}$$

其中 $\hat{R}_1$ 和 $\hat{R}_2$ 表示由容量分别为 n_1 和 n_2 的样本所决定的分类域。例如，若使用式(11-18)中的分类函数，则区域 $\hat{R}_1$ 和 $\hat{R}_2$ 由满足下列不等式的 $\mathbf{x}$ 的集合来定义。

$$\hat{R}_1:\ (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 + \bar{\mathbf{x}}_2) \geqslant \ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right]$$

$$\hat{R}_2:\ (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 + \bar{\mathbf{x}}_2) < \ln\left[\left(\frac{c(1|2)}{c(2|1)}\right)\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\right]$$

AER 指出样本分类函数在未来样本中将如何表现。同最优失误率一样，一般来说 AER 不能计算，因为它依赖于未知密度函数 $f_1(\mathbf{x})$和 $f_2(\mathbf{x})$。但有一个与真实失误率有关的量的估计值却可以计算，下面简短讨论一下。

存在一个分类方法效果的度量，它不依赖于母总体分布的形式，并且对任意分类方法均可计算。这个度量称为**表观失误率**(APER)。它定义为训练样本中被错分的观测值所占的比例。

表观失误率可以很容易地从**模糊矩阵**计算出来。对来自 π_1 的 n_1 个观测值和来自 π_2 的 n_2 个观测值，模糊矩阵的形式为

		预测归属		
		π_1	π_2	
真实	π_1	n_{1c}	$n_{1M}=n_1-n_{1c}$	n_1
归属	π_2	$n_{2M}=n_2-n_{2c}$	n_{2c}	n_2

(11-29)

其中

$n_{1c}=\pi_1$ 中的对象被正确地分类为 π_1 的个数

$n_{1M}=\pi_1$ 中的对象被错误地分类为 π_2 的个数

$n_{2c}=\pi_2$ 中的对象被正确分类的个数

$n_{2M}=\pi_2$ 中的对象被错误分类的个数

于是表观失误率为

$$\mathrm{APER} = \frac{n_{1M} + n_{2M}}{n_1 + n_2} \tag{11-30}$$

正好是训练样本中被错分的观测值所占的比例。

例 11.5 (计算表观失效率)

考虑图 11.1 所示的机动割草机数据的分类域 R_1 和 R_2。这里，实线右上方的数据被分类为 π_1，即割草机拥有者；实线左下方的数据被分类为 π_2。注意，某些观测值被错分了，模糊矩阵为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

		预测归属		
		π_1:割草机拥有者	π_2:非拥有者	
实际归属	π_1:拥有者	$n_{1c}=10$	$n_{1M}=2$	$n_1=12$
	π_2:非拥有者	$n_{2M}=2$	$n_{2c}=10$	$n_2=12$

表观失误率为

$$\text{APER}=\left(\frac{2+2}{12+12}\right)\times 100\%=\left(\frac{4}{24}\right)\times 100\%=16.7\%$$

APER 具有直观上的感染力，且易于计算。不幸的是，它倾向于低估 AER，而且除非 n_1 和 n_2 非常大，这个问题不会消失。出现这种乐观估计的原因，本质上是由于被用来构造分类函数的数据又被用于对这个函数进行评估。

可以构造比表观失误率更好的失误率估计值，而且这种估计值相对说也比较容易计算，且不需要对分布做假定。一种方法是将整个样本分成两部分：训练样本和验证样本。训练样本用于构造分类函数，而验证样本则用于评估。失误率用验证样本中被错分数据的比例来确定。虽然这种方法不用同一组数据既构造又评估分类函数，从而克服了偏倚问题，但它有两个主要缺陷：

(i) 需要用大样本，

(ii) 所评估的函数并非感兴趣的函数。因为最终几乎所有数据都必须用于构造分类函数。如果不是这样，就会损失有价值的信息。

还有一种方法看起来效果较好，称为拉亨布鲁克(Lachenbruch)的“提留”方法①(见[22])：

1. 从 π_1 组观测值开始。从这组数据中取出一个，用其余 n_1-1 个观测值和 π_2 组的 n_2 个观测值构造分类函数。

2. 用第 1 步中所构造的函数对“提留”的观测值进行分类。

3. 重复步骤 1 和 2，直至 π_1 中所有 n_1 个观测值都被分类完毕为止。令 $n_{1M}^{(H)}$ 为 π_1 组中被错分的提留观测值个数。

4. 对 π_2 中的观测值重复步骤 1 至 3。令 $n_{2M}^{(H)}$ 为 π_2 组中被错分的观测提留值个数。

在式(11-1)和式(11-2)中的条件错分概率 $P(2|1)$ 和 $P(1|2)$ 的估计量为：

$$\hat{P}(2|1)=\frac{n_{1M}^{(H)}}{n_1}$$
$$\hat{P}(1|2)=\frac{n_{2M}^{(H)}}{n_2} \tag{11-31}$$

总错分比例 $(n_{1M}^{(H)}+n_{2M}^{(H)})/(n_1+n_2)$ 为期望真实失误率 $E(\text{AER})$ 的一个接近无偏的估计量，即使对中等样本这个结论也对。

$$\hat{E}(\text{AER})=\frac{n_{1M}^{(H)}+n_{2M}^{(H)}}{n_1+n_2} \tag{11-32}$$

拉亨布鲁克的提留方法在与线性分类函数共同使用时，计算上也是可行的。在某些现有的

① 此方法有时称为“刀切”，或“交叉验证”。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

判别分析的计算机程序中，这种方法是所提供的选择项目之一。

例 11.6 （用提留方法计算失误率的估计值）

我们将对式(11-18)的相同代价和相同先验概率这种情况来说明拉亨布鲁克的提留方法和失误率估计值的计算。考虑下列数据矩阵和描述性统计数字。（我们假定 $n_1=n_2=3$ 个二元观测值随机地取自两个总体 π_1 和 π_2，并假定它们有公共协方差阵。）

$$\mathbf{X}_1=\begin{bmatrix}2 & 12\\4 & 10\\3 & 8\end{bmatrix};\quad \bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}3\\10\end{bmatrix},\quad 2\mathbf{S}_1=\begin{bmatrix}2 & -2\\-2 & 8\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}_2=\begin{bmatrix}5 & 7\\3 & 9\\4 & 5\end{bmatrix};\quad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}4\\7\end{bmatrix},\quad 2\mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}2 & -2\\-2 & 8\end{bmatrix}$$

联合协方差阵为

$$\mathbf{S}_p=\frac{1}{4}(2\mathbf{S}_1+2\mathbf{S}_2)=\begin{bmatrix}1 & -1\\-1 & 4\end{bmatrix}$$

利用 $\mathbf{S}_p$，其余数据以及式(11-18)中同等代价同等先验概率的法则，我们就可以对样本观测值进行分类。然后可以验证(见练习 11.19)，模糊矩阵为

		分类为：	
		π_1	π_2
真实总体：	π_1	2	1
	π_2	1	2

因此，

$$\text{APER（表观失误率）}=2/6=0.33$$

从 $\mathbf{X}_1$ 中提留第一个观测值 $\mathbf{x}_H'=[2,12]$，计算

$$\mathbf{X}_{1H}=\begin{bmatrix}4 & 10\\3 & 8\end{bmatrix};\quad \bar{\mathbf{x}}_{1H}=\begin{bmatrix}3.5\\9\end{bmatrix};\quad 1\mathbf{S}_{1H}=\begin{bmatrix}0.5 & 1\\1 & 2\end{bmatrix}$$

新的联合协方差矩阵 $\mathbf{S}_{H,p}$ 为

$$\mathbf{S}_{H,p}=\frac{1}{3}[1\mathbf{S}_{1H}+2\mathbf{S}_2]=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}2.5 & -1\\-1 & 10\end{bmatrix}$$

其逆①为

$$\mathbf{S}_{H,p}^{-1}=\frac{1}{8}\begin{bmatrix}10 & 1\\1 & 2.5\end{bmatrix}$$

根据组均值 $\bar{\mathbf{x}}_{1H}$ 和 $\bar{\mathbf{x}}_2$ 之间的样本距离来分类提留观测值 $\bar{\mathbf{x}}_{1H}$，计算起来更快一些。这种方法等价于计算线性函数 $\hat{y}=\hat{\mathbf{a}}_H'\mathbf{x}_H=(\bar{\mathbf{x}}_{1H}-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{H,p}^{-1}\mathbf{x}_H$ 的值，然后将它与中点 $\hat{m}_H=$

① 巴特利特[3]给出一个矩阵恒等式，可用来直接从 $\mathbf{S}_p^{-1}$ 迅速算出 $\mathbf{S}_{H,p}^{-1}$。这样就不需要在取出每个观察值后重新计算逆矩阵。（见练习 11.20。）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_{1H}-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_{1H}+\bar{\mathbf{x}}_2)$做比较。[见式(11-19)和式(11-20)。]

这样，对 $\mathbf{x}_H'=[2,12]$我们有

到 $\bar{\mathbf{x}}_{1H}$的平方距离$=(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{1H})'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{1H})$

$$=[2-3.5 \quad 12-9]\frac{1}{8}\begin{bmatrix}10 & 1\\ 1 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2-3.5\\ 12-9\end{bmatrix}=4.5$$

到 $\bar{\mathbf{x}}_2$的平方距离$=(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_2)$

$$=[2-4 \quad 12-7]\frac{1}{8}\begin{bmatrix}10 & 1\\ 1 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2-4\\ 12-7\end{bmatrix}=10.3$$

由于 $\mathbf{x}_H$ 到 $\bar{\mathbf{x}}_{1H}$的距离小于到 $\bar{\mathbf{x}}_2$ 的距离。我们将 $\mathbf{x}_H$ 分类到 π_1。在这种情形下，分类是正确的。

如果提取 $\mathbf{x}_H'=[4,10]$，则 $\bar{\mathbf{x}}_{1H}$和 $\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}$变成

$$\bar{\mathbf{x}}_{1H}=\begin{bmatrix}2.5\\ 10\end{bmatrix}\text{和 }\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}=\frac{1}{8}\begin{bmatrix}16 & 4\\ 4 & 2.5\end{bmatrix}$$

我们发现

$$(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{1H})'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{1H})=[4-2.5 \quad 10-10]\frac{1}{8}\begin{bmatrix}16 & 4\\ 4 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4-2.5\\ 10-10\end{bmatrix}$$
$$=4.5$$

$$(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_2)=[4-4 \quad 10-7]\frac{1}{8}\begin{bmatrix}16 & 4\\ 4 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4-4\\ 10-7\end{bmatrix}$$
$$=2.8$$

因此我们将错误地把 $\mathbf{x}_H'=[4,10]$指派给 π_2。提取 $\mathbf{x}_H'=[3,8]$也会导致错误地将这个观测值指派给 π_2。这样，$n_{1M}^{(H)}=2$。

转向第二组。假定提取 $\mathbf{x}_H'=[5,7]$，则

$$\mathbf{X}_{2H}=\begin{bmatrix}3 & 9\\ 4 & 5\end{bmatrix};\quad \bar{\mathbf{x}}_{2H}=\begin{bmatrix}3.5\\ 7\end{bmatrix};\quad 1\mathbf{S}_{2H}=\begin{bmatrix}0.5 & -2\\ -2 & 8\end{bmatrix}$$

新的联合协方差矩阵为

$$\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}=\frac{1}{3}[2\mathbf{S}_1+1\mathbf{S}_{2H}]=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}2.5 & -4\\ -4 & 16\end{bmatrix}$$

其逆为

$$\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}=\frac{3}{24}\begin{bmatrix}16 & 4\\ 4 & 2.5\end{bmatrix}$$

我们发现

$$(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_1)'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_1)=[5-3 \quad 7-10]\frac{3}{24}\begin{bmatrix}16 & 4\\ 4 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5-3\\ 7-10\end{bmatrix}$$
$$=4.8$$

$$(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{2H})'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{2H})=[5-3.5 \quad 7-7]\frac{3}{24}\begin{bmatrix}16 & 4\\ 4 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5-3.5\\ 7-7\end{bmatrix}$$
$$=4.5$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

因而 $\mathbf{x}_H'=[5,7]$被正确地指派给 π_2。

当 $\mathbf{x}_H'=[3,9]$被取出时，

$$(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_1)'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_1)=[3-3\quad 9-10]\frac{3}{24}\begin{bmatrix}10 & 1\\ 1 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3-3\\ 9-10\end{bmatrix}$$

$$=0.3$$

$$(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{2H})'\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_{2H})=[3-4.5\quad 9-6]\frac{3}{24}\begin{bmatrix}10 & 1\\ 1 & 2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3-4.5\\ 9-6\end{bmatrix}$$

$$=4.5$$

于是 $\mathbf{x}_H'=[3,9]$被不正确地指派给 π_1。最后，提取 $\mathbf{x}_H'=[4,5]$导致将这个观测值正确地分到 π_2。这样，$n_{2M}^{(H)}=1$。

期望真实失误率的估计值为

$$\hat{E}(\mathrm{AER})=\frac{n_{1M}^{(H)}+n_{2M}^{(H)}}{n_1+n_2}=\frac{2+1}{3+3}=0.5$$

这样，我们看到表观失误率 APER$=0.33$ 是一个乐观的效果量度。当然，实践中的样本容量要比我们这里所考虑的容量大，因而 APER 与 $\hat{E}$(AER)之间的差别没有本例中那么大。

有兴趣进一步了解分类失误率的估计方法的读者，可参看文献[21]。

下一个例子将说明当两个总体的判别方差不同时可能产生的一个困难。

例 11.7 （阿拉斯加产鲑鱼和加拿大产鲑鱼的分类）

捕捞鲑鱼对美国和加拿大两国来说都是一种有价值的资源。由于这种资源有限，因此必须有效地管理。此外，由于这个问题与两个国家有关，必须公平地解决。也就是说，阿拉斯加的商业捕鱼者不能捕捞过多的加拿大产鲑鱼，反之亦然。

这种鱼有一个奇怪的生命周期，它们出生于淡水激流，经过一到两年后游入大洋。在盐水中生活两年后，它们又回游到出生地，产卵后死去。在它们即将成熟，在由大洋回游到淡水之前，人们捕捞它们。为了帮助规范捕捞，在捕鱼季节，管理人员从捕获的鱼中进行抽样检查，以识别鱼是来自阿拉斯加还是来自加拿大。鱼鳞上的年轮可揭示产地。典型的情况是：阿拉斯加产鲑鱼的淡水生长年轮比加拿大产鲑鱼的要小。表 11.2 给出了年轮的直径数据，其中

X_1＝第一年淡水生长的年轮直径(百分之一英寸)

X_2＝第一年海洋生长的年轮直径(百分之一英寸)

此外，雌鱼取代码 1，雄鱼则取代码 2。

训练样本为 $n_1=50$ 条阿拉斯加产鲑鱼和 $n_2=50$ 条加拿大产鲑鱼。由这些样本得出以下统计数字：

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}98.380\\ 429.660\end{bmatrix},\qquad \mathbf{S}_1=\begin{bmatrix}260.608 & -188.093\\ -188.093 & 1399.086\end{bmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}137.460\\ 366.620\end{bmatrix},\qquad \mathbf{S}_2=\begin{bmatrix}326.090 & 133.505\\ 133.505 & 893.261\end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

数据看上去满足二元正态分布的假定(见练习 11.31),但协方差矩阵可能不同。然而,为说明与错分概率有关的要点,我们仍采用线性判别方法。

使用同等代价和同等先验概率假定,分类方法给出的提留估计失误率为

		预测归属	
		π_1:阿拉斯加	π_2:加拿大
实际归属	π_1:阿拉斯加	44	6
	π_2:加拿大	1	49

表 11.2 鲑鱼数据(年轮直径)

阿拉斯加			加拿大		
性别	淡水	海洋	性别	淡水	海洋
2	108	368	1	129	420
1	131	355	1	148	371
1	105	469	1	179	407
2	86	506	2	152	381
1	99	402	2	166	377
2	87	423	2	124	389
1	94	440	1	156	419
2	117	489	2	131	345
2	79	432	1	140	362
1	99	403	2	144	345
1	114	428	2	149	393
2	123	372	1	108	330
1	123	372	1	135	355
2	109	420	2	170	386
2	112	394	1	152	301
1	104	407	1	153	397
2	111	422	1	152	301
2	126	423	2	136	438
2	105	434	2	122	306
1	119	474	1	148	383
1	114	396	2	90	385
2	100	470	1	145	337
2	84	399	1	123	364
2	102	429	2	145	376
2	101	469	2	115	354
2	85	444	2	134	383
1	109	397	1	117	355
2	106	442	2	126	345
1	82	431	1	118	379
2	118	381	2	120	369
1	105	388	1	153	403
1	121	403	2	150	354
1	85	451	1	154	390

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

阿拉斯加			加拿大		
性别	淡水	海洋	性别	淡水	海洋
1	83	453	1	155	349
1	53	427	2	109	325
1	95	411	2	117	344
1	76	442	1	128	400
1	95	426	1	144	403
2	87	402	2	163	370
1	70	397	2	145	355
2	84	511	1	133	375
2	91	469	1	128	383
1	74	451	2	123	349
2	101	474	1	144	373
1	80	398	2	140	388
1	95	433	2	150	339
2	92	404	2	124	341
1	99	481	1	125	346
2	94	491	1	153	352
1	87	480	1	108	339

性别代码：1＝雌性；2＝雄性。

资料来源：数据经阿拉斯加州渔业与捕猎部许可使用。

其根据的线性判别函数[见式(11-19)]为

$$\hat{y} = -5.54121 - 0.12839x_1 + 0.05194x_2$$

对两个总体，$\hat{y}$ 的样本标准差有所不同：

	n	样本均值	样本标准差
π_1：阿拉斯加	50	4.144	3.253
π_2：加拿大	50	−4.147	2.450

虽然总失误率(7%)相当低，但这里有一种不公平现象：加拿大产的鲑鱼更不容易被错判为阿拉斯加产鲑鱼，而不是相反。图 11.7 显示线性判别函数 $\hat{y}$ 的两个正态密度。

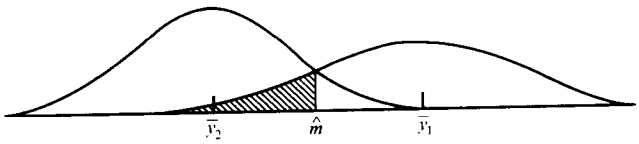


图 11.7　线性判别量的正态密度——鲑鱼数据

由此图可以看出上面所说的现象。采用两个样本均值的中点并未使两个错分概率相等。显然，具有较大方差的总体处于不利地位。这样，盲目地使用线性判别函数可能是不明智的。

直观上应该很清楚：好的分类(低失误率)将依赖于总体的分离程度。两个总体相互离得越远，就越能得出有用的分类法则。这个分离目标在 11.1 节中曾经提及，我们在 11.5 节和11.7 节中将做进一步探究。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

正如我们将看到的，在涉及相同先验概率和相同错分代价的场合，分配法则与最大限度分离的总体的函数相对应。正是在这种情形下，分类与分离之间的界限开始消失。

11.5 费希尔判别函数——分离总体

费希尔[9]实际上是根据 11.3 节中一个完全不同的论据发现式(11-19)所给的分类统计量的。他的想法是将多元观测值 $\mathbf{x}$ 变换成一元观测值 y，使得由总体 π_1 和 π_2 导出的 y 尽可能地分离开。费希尔建议用 $\mathbf{x}$ 的线性组合来建立 y，因为它们是 $\mathbf{x}$ 的非常简单的函数，易于掌握。费希尔的方法并未假定总体具有正态性，但是隐含有总体协方差矩阵相等的假定，因为使用了公共协方差矩阵的联合估计量。

假定 $\mathbf{x}$ 的一个固定线性组合对来自第一个总体的观测值来说其取值为 $y_{11}, y_{12}, \cdots, y_{1n_1}$，对来自第二个总体的观测值来说其取值为 $y_{21}, y_{22}, \cdots, y_{2n_2}$。这两组单变量数据之间的分离度用以标准差为单位的 $\bar{y}_1$ 与 $\bar{y}_2$ 之间的差别来表示，即

$$\text{分离度} = \frac{|\bar{y}_1 - \bar{y}_2|}{s_y}, \qquad \text{其中 } s_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^{n_1}(y_{1j} - \bar{y}_1)^2 + \sum_{j=1}^{n_2}(y_{2j} - \bar{y}_2)^2}{n_1 + n_2 - 2}$$

为方差的联合估计量。目标是选择适当的 $\mathbf{x}$ 的线性组合，使得样本均值 $\bar{y}_1$ 与 $\bar{y}_2$ 之间的分离度达到最大。

结论 11.4 线性组合 $\hat{y} = \hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x} = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}$ 对所有可能的线性系数向量 $\hat{\mathbf{a}}$ 使下述比值达到最大：

$$\begin{aligned}\frac{(y\text{ 的样本均值之间的距离平方})}{(y\text{ 的样本方差})} &= \frac{(\bar{y}_1 - \bar{y}_2)^2}{s_y^2} \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{a}}'\bar{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{a}}'\bar{\mathbf{x}}_2)^2}{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}} \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{d})^2}{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}} \qquad (11\text{-}33)\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{d} = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)$。比值(11-33)的最大值为 $D^2 = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)$。

证明 比值(11-33)的最大值直接由式(2-50)给出。这样，令 $\mathbf{d} = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)$，就有

$$\max_{\hat{\mathbf{a}}} \frac{(\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{d})^2}{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}} = \mathbf{d}'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{d} = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2) = D^2$$

其中 D^2 为两个均值之间的样本平方距离。

注意，式(11-33)中的 s_y^2 可按下式计算：

$$s_y^2 = \frac{\sum_{j=1}^{n_1}(y_{1j} - \bar{y}_1)^2 + \sum_{j=1}^{n_2}(y_{2j} - \bar{y}_2)^2}{n_1 + n_2 - 2} \qquad (11\text{-}34)$$

其中 $y_{1j} = \hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_{1j}$，$y_{2j} = \hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x}_{2j}$。

例 11.8 （血友病数据的费希尔线性判别）

例 11.3 中介绍了关于检查 A 型血友病基因携带者的研究。我们记得，在同等代价和

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

同等先验概率下，线性判别函数为

$$\hat{y} = \hat{\mathbf{a}}'\mathbf{x} = [\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2]'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x} = 37.61x_1 - 28.92x_2$$

该线性判别函数就是费希尔线性函数，它最大限度地分离两个总体，因而样本中的最大分离度为

$$\begin{aligned} D^2 &= (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2) \\ &= [0.2418, -0.0652]\begin{bmatrix} 131.158 & -90.423 \\ -90.423 & 108.147 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.2418 \\ -0.0652 \end{bmatrix} \\ &= 10.98 \end{aligned}$$

费希尔对分离问题的解法也可以用于对新的观测值做分类。

基于费希尔判别函数的分类法则①

若

$$\hat{y}_0 = (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}_0 \geqslant \hat{m} = \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1 + \bar{\mathbf{x}}_2) \tag{11-35}$$

或

$$\hat{y}_0 - \hat{m} \geqslant 0$$

将 $\mathbf{x}_0$ 分到 π_1。若

$$\hat{y}_0 < \hat{m}$$

或

$$\hat{y}_0 - \hat{m} < 0$$

将 $\mathbf{x}_0$ 分到 π_2。

图 11.8 是 $p=2$ 时对方法(11-33)的示意性说明。图中所有的点均投影到沿 $\hat{\mathbf{a}}$ 方向的一条直线上，而这个方向在不断变化，直到两个样本被最大限度地分开为止。

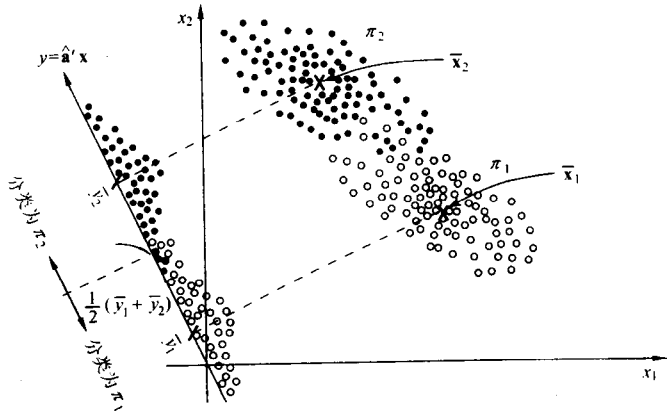


图 11.8　费希尔方法对两个总体的图形表示($p=2$)

① 我们必须有$(n_1+n_2-2)\geqslant p$，否则 $\mathbf{S}_p$ 为奇异阵，因而通常的逆矩阵 $\mathbf{S}_p^{-1}$ 不存在。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

费希尔的线性判别函数是在假定两个总体有相同协方差矩阵的条件下得到的。因此毫不奇怪，费希尔方法与最小期望错分代价法则这种特殊情况相对应。分类法则(11-18)中的第一项 $\hat{y}=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}$ 就是费希尔的线性函数，它使"组间变差"相对"组内变差"而言达到最大。[见式(11-33)。]整个表达式

$$\hat{w}=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)$$

$$=(\bar{\mathbf{x}}_1-\bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}\left[\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_1+\bar{\mathbf{x}}_2)\right] \tag{11-36}$$

常被称为**安德森**(Anderson)**分类函数**(或称**安德森统计量**)。若$[(c(1|2)/c(2|1))(p_2/p_1)]=1$，则 $\ln[(c(1|2)/c(2|1))(p_2/p_1)]=0$，法则(11-18)与基于费希尔线性判别函数的法则(11-35)相似。这样，费希尔分类法则等价于在相同先验概率和相同错分代价下的最小 ECM 法则。

简而言之，对两个总体，通过考虑多元观测值的线性组合所得到的最大相对分离度等于距离 D^2。这样就很方便，因为在某些情况下，D^2 可用于检验两个总体均值 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$ 是否有显著差异。因此，均值向量间有无差异的检验可看成是对所能达到的总体分离度的显著性检验。

假定总体 π_1 和 π_2 服从有相同协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的正态分布，则如同在 6.3 节中那样，对假设 $H_0:\boldsymbol{\mu}_1=\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $H_1:\boldsymbol{\mu}_1\neq\boldsymbol{\mu}_2$ 的检验可用统计量

$$\left(\frac{n_1+n_2-p-1}{(n_1+n_2-2)p}\right)\left(\frac{n_1n_2}{n_1+n_2}\right)D^2$$

来完成，这个统计量服从 F 分布，自由度为 $v_1=p, v_2=n_1+n_2-p-1$。如果 H_0 被拒绝，我们可以认为 π_1 与 π_2 之间的分离度是显著的。

评注 显著分离并不一定意味良好的分类。正如我们在 11.4 节中所见到的，可以对一个分类方法的有效性作出评估而不必依赖任何分离性检验。另一方面，如果分离不显著，则寻找有用的分类法则将被证明是徒劳的。

11.6 多个总体的分类

理论上，将两个总体的分类方法推广到 $g\geqslant 2$ 个总体是直截了当的。不过我们对相应样本分类函数的性质所知不多，特别是对它们的失误率尚未充分研究。

例如，对两个总体的线性分类统计量，其"稳健性"在不同协方差或非正态分布下可以用计算机生成的抽样实验来研究①。但是对多于两个总体的情况，用这种方法不能得出一般结论，因为统计量的性质依赖于总体的相互位置，这里有太多的结构使得研究产生困难。

① 这里，**稳健性**是指在使用某个分类方法时，由于数据不满足方法所要求的假定而造成的失误率的恶化。很难解析地研究分类方法的稳健性。然而，具有各式各样分布和不同协方差结构的数据很容易由计算机产生。于是，不同分类法则的效果可利用来自这些分布的由计算机生成的"样本"来评估。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

同前面一样，本节的处理方法也是先从理论上导出一些最优法则，然后指出将它们付诸实际应用时需要做哪些修正。

最小期望错分代价法

设 $f_i(\mathbf{x})$ 为与总体 π_i 相联系的密度，$i=1,2,\cdots,g$。[对本节的大部分内容，我们将取 $f_i(\mathbf{x})$ 为多元正态密度，但这在一般的理论推导中是不必要的。]

令

p_i = 总体 π_i 的先验概率，　　$i=1,2,\cdots,g$

$c(k|i)$ = 将事实上属于 π_i 的某个项目分配到 π_k 的代价，

$$k,i=1,2,\cdots,g$$

对 $k=i$，$c(i|i)=0$。最后，令 R_k 为被分类为 π_k 的 $\mathbf{x}$ 的集合，因而对 $k,i=1,2,\cdots,g$ 有

$$\begin{aligned} P(k|i) &= P(\text{将项目分类为 } \pi_k|\pi_i) \\ &= \int_{R_k} f_i(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \end{aligned}$$

且 $P(i|i) = 1 - \sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{g} P(k|i)$。

将 π_1 中的 $\mathbf{x}$ 错分到 π_2，或 π_3，…，或 π_g 的条件期望代价为

$$\begin{aligned} \mathrm{ECM}(1) &= P(2|1)c(2|1) + P(3|1)c(3|1) + \cdots + P(g|1)c(g|1) \\ &= \sum_{k=2}^{g} P(k|1)c(k|1) \end{aligned}$$

这个条件期望代价出现的先验概率为 p_1（即 π_1 的概率）。

用类似方法可得到条件期望错分代价 ECM(2)，…，ECM(g)。对每个条件 ECM 乘以相应的先验概率再求和，就得到总的 ECM：

$$\begin{aligned} \mathrm{ECM} &= p_1\mathrm{ECM}(1) + p_2\mathrm{ECM}(2) + \cdots + p_g\mathrm{ECM}(g) \\ &= p_1\Big(\sum_{k=2}^{g} P(k|1)c(k|1)\Big) + p_2\Big(\sum_{\substack{k=1\\k\neq 2}}^{g} P(k|2)c(k|2)\Big) \\ &\quad + \cdots + p_g\Big(\sum_{k=1}^{g-1} P(k|g)c(k|g)\Big) \\ &= \sum_{i=1}^{g} p_i\Big(\sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{g} P(k|i)c(k|i)\Big) \end{aligned} \tag{11-37}$$

确定一个最优分类法则相当于选择能使式(11-37)达到极小的所有互斥区域 R_1，R_2，…，R_g。

结论 11.5　能使 ECM 式(11-37)达到极小的分类域，可通过将 $\mathbf{x}$ 分配给使

$$\sum_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{g} p_i f_i(\mathbf{x})c(k|i) \tag{11-38}$$

最小的总体 $\pi_k(k=1,\cdots,g)$ 来定义。当式(11-38)最小的总体不止一个时，则将 $\mathbf{x}$ 指派给其中的任一总体即可。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

证明 见安德森[2]。

假定所有错分代价都相等(不失一般性,我们可令所有错分代价为 1),则最小 ECM 法则就是最小总错分概率法则。利用导出式(11-38)的类似论据,我们将 $\mathbf{x}$ 分配到 π_k,并使

$$\sum_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{g} p_i f_i(\mathbf{x}) \tag{11-39}$$

达到最小。现在,当被摒弃的项 $p_k f_k(\mathbf{x})$ 达到最大时,式(11-39)将达到最小。因此,当错分代价相等时,最小 ECM 法则具有下面的简单形式。

错分代价相同时的最小 ECM 分类法则

若

$$p_k f_k(\mathbf{x}) > p_i f_i(\mathbf{x}) \text{ 任意 } i \neq k \tag{11-40}$$

则将 $\mathbf{x}$ 分配到 π_k,或等价地,若

$$\ln p_k f_k(\mathbf{x}) > \ln p_i f_i(\mathbf{x}) \text{ 任意 } i \neq k \tag{11-41}$$

则将 $\mathbf{x}$ 分配到 π_k。

值得注意的是,分类法则(11-40)等价于使"后验"概率 $P(\pi_k|\mathbf{x})=P$(给定观测值 $\mathbf{x}$,$\mathbf{x}$ 来自 π_k)最大化的法则,其中

$$P(\pi_k|\mathbf{x}) = \frac{p_k f_k(\mathbf{x})}{\sum_{i=1}^{g} p_i f_i(\mathbf{x})} = \frac{(\text{先验概率}) \times (\text{密度函数})}{\sum[(\text{先验概率}) \times (\text{密度函数})]} \quad \text{对 } k = 1,2,\cdots,g \tag{11-42}$$

式(11-42)是式(11-9)在 $g\geqslant 2$ 时的推广。

请记住,一般地说,最小 ECM 法则有三个要素:先验概率、错分代价以及密度函数。这些要素在使用分类法则之前必须指定(或估计出)。

例 11.9 (将一个新观测值分到三个已知总体之一)

设虚构的先验概率、错分代价以及密度函数值给定如下表,让我们将一个观测值 $\mathbf{x}_0$ 分到 $g=3$ 个总体 π_1,π_2 和 π_3 中的一个。

		真实总体		
		π_1	π_2	π_3
将 $\mathbf{x}_0$ 分到:	π_1	$c(1\|1)=0$	$c(1\|2)=500$	$c(1\|3)=100$
	π_2	$c(2\|1)=10$	$c(2\|2)=0$	$c(2\|3)=50$
	π_3	$c(3\|1)=50$	$c(3\|2)=200$	$c(3\|3)=0$
先验概率:		$p_1=0.05$	$p_2=0.60$	$p_3=0.35$
密度值:		$f_1(\mathbf{x}_0)=0.01$	$f_2(\mathbf{x}_0)=0.85$	$f_3(\mathbf{x}_0)=2$

我们将采用最小 ECM 方法。

$\sum_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{3} p_i f_i(\mathbf{x}_0) c(k|i)$ 的值[见式(11-38)]为

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$k=1:\quad p_2f_2(\mathbf{x}_0)c(1|2)+p_3f_3(\mathbf{x}_0)c(1|3)$$
$$=0.60\times0.85\times500+0.35\times2\times100=325$$
$$k=2:\quad p_1f_1(\mathbf{x}_0)c(2|1)+p_3f_3(\mathbf{x}_0)c(2|3)$$
$$=0.05\times0.01\times10+0.35\times2\times50=35.055$$
$$k=3:\quad p_1f_1(\mathbf{x}_0)c(3|1)+p_2f_2(\mathbf{x}_0)c(3|2)$$
$$=0.05\times0.01\times50+0.60\times0.85\times200=102.025$$

由于 $k=2$ 时 $\sum_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{3}p_if_i(\mathbf{x}_0)c(k|i)$ 最小，我们将 $\mathbf{x}_0$ 分配到 π_2。

假定所有错分代价相等，我们按式(11-40)来分配 $\mathbf{x}_0$。这只需计算下列乘积：

$$p_1f_1(\mathbf{x}_0)=0.05\times0.01=0.0005$$
$$p_2f_2(\mathbf{x}_0)=0.60\times0.85=0.510$$
$$p_3f_3(\mathbf{x}_0)=0.35\times2=0.700$$

由于 $p_3f_3(\mathbf{x}_0)=0.700\geqslant p_if_i(\mathbf{x}_0)$，$i=1,2$，我们将 $\mathbf{x}_0$ 分到 π_3。等价地，计算后验概率[见式(11-42)]，得到

$$P(\pi_1|\mathbf{x}_0)=\frac{p_1f_1(\mathbf{x}_0)}{\sum_{i=1}^{3}p_if_i(\mathbf{x}_0)}$$
$$=\frac{0.05\times0.01}{0.05\times0.01+0.60\times0.85+0.35\times2}=\frac{0.0005}{1.2105}=0.0004$$
$$P(\pi_2|\mathbf{x}_0)=\frac{p_2f_2(\mathbf{x}_0)}{\sum_{i=1}^{3}p_if_i(\mathbf{x}_0)}=\frac{0.60\times0.85}{1.2105}=\frac{0.510}{1.2105}=0.421$$
$$P(\pi_3|\mathbf{x}_0)=\frac{p_3f_3(\mathbf{x}_0)}{\sum_{i=1}^{3}p_if_i(\mathbf{x}_0)}=\frac{0.35\times2}{1.2105}=\frac{0.700}{1.2105}=0.578$$

我们看到，$\mathbf{x}_0$ 应分入具有最大后验概率的总体 π_3。

正态总体情形下的分类

最重要的特例是当

$$f_i(\mathbf{x})=\frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}_i|^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\right],\quad i=1,2,\cdots,g \tag{11-43}$$

为具有均值向量 $\boldsymbol{\mu}_i$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_i$ 的正态密度函数的情形。若进一步假定 $c(i|i)=0$，$c(k|i)\doteq1$，$k\neq i$(或等价地，所有错分代价相同)，则式(11-41)变成：

若

$$\ln p_kf_k(\mathbf{x})=\ln p_k-\left(\frac{p}{2}\right)\ln(2\pi)-\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_k|-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)'\boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)$$
$$=\max_i\ln p_if_i(\mathbf{x}) \tag{11-44}$$

则将 $\mathbf{x}$ 分到 π_k。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在(11-44)中，常数$(p/2)\ln(2\pi)$可以略去，因为它对所有总体都相同。因此我们将第i个总体的**二次判别得分**定义为

$$d_i^Q(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}_i| - \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) + \ln p_i \qquad i = 1,2,\cdots,g \tag{11-45}$$

二次得分$d_i^Q(\mathbf{x})$由广义方差$|\boldsymbol{\Sigma}_i|$，先验概率p_i和$\mathbf{x}$到总体均值$\boldsymbol{\mu}_i$的距离平方所组成。不过注意，对不同的总体，必须使用不同的距离函数(等距离椭球的取向和大小均不同)。

用这些判别得分我们发现，式(11-44)中的分类法则可重新陈述如下：

正态总体和不同$\boldsymbol{\Sigma}_i$情形下的最小总错分概率法则(TPM)

若二次判别得分

$$d_k^Q(\mathbf{x}) = \max\{d_1^Q(\mathbf{x}), d_2^Q(\mathbf{x}), \cdots, d_g^Q(\mathbf{x})\} \tag{11-46}$$

则将$\mathbf{x}$分入π_k。此处$d_i^Q(\mathbf{x})$由式(11-45)给出。

实践中$\boldsymbol{\mu}_i$和$\boldsymbol{\Sigma}_i$皆属未知，但常可获得一组已经正确分类的训练样本，因此可以用样本均值$\bar{\mathbf{x}}_i$来估计总体均值$\boldsymbol{\mu}_i$，以及用样本协方差矩阵$\mathbf{S}_i$来估计总体协方差矩阵$\boldsymbol{\Sigma}_i$。此时二次判别得分$d_i^Q(\mathbf{x})$的估计量为

$$\hat{d}_i^Q(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\ln|\mathbf{S}_i| - \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_i)'\mathbf{S}_i^{-1}(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_i) + \ln p_i, \quad i = 1,2,\cdots,g \tag{11-47}$$

于是基于样本的分类法则如下：

估计的最小TPM法则(对$\boldsymbol{\Sigma}_i$不同的多个正态总体)

若二次判别得分

$$\hat{d}_k^Q(\mathbf{x}) = \max\{\hat{d}_1^Q(\mathbf{x}), \hat{d}_2^Q(\mathbf{x}), \cdots, \hat{d}_g^Q(\mathbf{x})\} \tag{11-48}$$

则将$\mathbf{x}$分入π_k，此处$\hat{d}_i^Q(\mathbf{x})$由式(11-47)给出。

如果总体协方差矩阵相同，上述判别法则有可能简化。当$\boldsymbol{\Sigma}_i=\boldsymbol{\Sigma}$，$i=1,2,\cdots,g$，式(11-45)中的判别得分变成

$$d_i^Q(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i + \ln p_i$$

此式右端的前两项对所有$d_1^Q(\mathbf{x}),\cdots,d_g^Q(\mathbf{x})$都相同，对分配目的来说可以略去。剩余诸项由常数项$c_i=\ln p_i-\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i$和$\mathbf{x}$诸分量的一个线性组合组成。

下一步，定义**线性判别得分**

$$d_i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i + \ln p_i \qquad i = 1,2,\cdots,g \tag{11-49}$$

根据$\boldsymbol{\Sigma}$的联合估计量

$$\mathbf{S}_p = \frac{1}{n_1+n_2+\cdots+n_g-g}((n_1-1)\mathbf{S}_1 + (n_2-1)\mathbf{S}_2 + \cdots + (n_g-1)\mathbf{S}_g) \tag{11-50}$$

可得到线性得分$d_i(\mathbf{x})$的估计量

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\hat{d}_i(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{x}}_i'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\bar{\mathbf{x}}_i'\mathbf{S}_p^{-1}\bar{\mathbf{x}}_i + \ln p_i \qquad (11\text{-}51)$$

$$i = 1,2,\cdots,g$$

因此我们有如下法则：

估计的最小 TPM 法则（对协方差矩阵相同的正态总体）

若线性判别得分

$$\hat{d}_k(\mathbf{x}) = \max\{\hat{d}_1(\mathbf{x}),\hat{d}_2(\mathbf{x}),\cdots,\hat{d}_g(\mathbf{x})\} \qquad (11\text{-}52)$$

则将 $\mathbf{x}$ 分入 π_k，此处 $\hat{d}_i(\mathbf{x})$ 由式(11-51)给出。

评注 式(11-49)为 $\mathbf{x}$ 的一个简单的线性函数。对协方差矩阵相同的情形，在式(11-45)中略去常数项 $-\frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}|$，便可得出一个等价的分类函数。将未知总体参数用样本的估计量代替，就可用 $\mathbf{x}$ 到样本均值向量 $\bar{\mathbf{x}}_i$ 的平方距离

$$D_i^2(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_i)'\mathbf{S}_p^{-1}(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_i) \qquad (11\text{-}53)$$

来解释上述结果。于是分配法则为：

$$\text{若} -\frac{1}{2}D_i^2(\mathbf{x}) + \ln p_i \text{ 最大，则将 } \mathbf{x} \text{ 分到总体 } \pi_i \qquad (11\text{-}54)$$

我们看到，这个法则将 $\mathbf{x}$ 分到“最近”的总体。（距离量度受到 $\ln p_i$ 的干扰。）

若先验概率未知，通常的作法是令 $p_1 = p_2 = \cdots = p_g = 1/g$。这时观测值被分入最近的总体。

例 11.10 （在假定有公共协方差阵的条件下计算样本判别得分）

让我们在 $g=3$ 个总体，有相同协方差矩阵的二元正态分布下来计算线性判别得分。来自总体 π_1,π_2 和 π_3 的随机样本、均值向量和样本协方差阵为：

$$\pi_1:\mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} -2 & 5 \\ 0 & 3 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad n_1 = 3, \quad \bar{\mathbf{x}}_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\pi_2:\mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 6 \\ 2 & 4 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad n_2 = 3, \quad \bar{\mathbf{x}}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\pi_3:\mathbf{X}_3 = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 0 \\ -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad n_3 = 3, \quad \bar{\mathbf{x}}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$$

给定 $p_1 = p_2 = 0.25$，$p_3 = 0.50$，我们来根据式(11-52)将 $\mathbf{x}_0' = [x_{01}, x_{02}] = [-2,-1]$ 进行分类。由式(11-50)，

$$\mathbf{S}_p = \frac{3-1}{9-3}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} + \frac{3-1}{9-3}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} + \frac{3-1}{9-3}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{2}{6}\begin{bmatrix} 1+1+1 & -1-1+1 \\ -1-1+1 & 4+4+4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 4 \end{bmatrix}$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

故

$$\mathbf{S}_p^{-1}=\frac{9}{35}\begin{bmatrix}4 & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{3} & 1\end{bmatrix}=\frac{1}{35}\begin{bmatrix}36 & 3\\ 3 & 9\end{bmatrix}$$

其次有

$$\bar{\mathbf{x}}_1'\mathbf{S}_p^{-1}=[-1\quad 3]\frac{1}{35}\begin{bmatrix}36 & 3\\ 3 & 9\end{bmatrix}=\frac{1}{35}[-27\quad 24]$$

因而

$$\bar{\mathbf{x}}_1'\mathbf{S}_p^{-1}\bar{\mathbf{x}}_1=\frac{1}{35}[-27\quad 24]\begin{bmatrix}-1\\ 3\end{bmatrix}=\frac{99}{35}$$

故

$$\hat{d}_1(\mathbf{x}_0)=\ln p_1+\bar{\mathbf{x}}_1'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}_0-\frac{1}{2}\bar{\mathbf{x}}_1'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x}_1$$

$$=\ln(0.25)+\left(\frac{-27}{35}\right)x_{01}+\left(\frac{24}{35}\right)x_{02}-\frac{1}{2}\times\frac{99}{35}$$

注意 $\hat{d}_1(\mathbf{x}_0)$=常数+常数·x_{01}+常数·x_{02}这一关系的线性形式。用类似方法得到

$$\bar{\mathbf{x}}_2'\mathbf{S}_p^{-1}=[1\quad 4]\frac{1}{35}\begin{bmatrix}36 & 3\\ 3 & 9\end{bmatrix}=\frac{1}{35}[48\quad 39]$$

$$\bar{\mathbf{x}}_2'\mathbf{S}_p^{-1}\bar{\mathbf{x}}_2=\frac{1}{35}[48\quad 39]\begin{bmatrix}1\\ 4\end{bmatrix}=\frac{204}{35}$$

因而

$$\hat{d}_2(\mathbf{x}_0)=\ln(0.25)+\left(\frac{48}{35}\right)x_{01}+\left(\frac{39}{35}\right)x_{02}-\frac{1}{2}\times\frac{204}{35}$$

最后，

$$\bar{\mathbf{x}}_3'\mathbf{S}_p^{-1}=[0\quad -2]\frac{1}{35}\begin{bmatrix}36 & 3\\ 3 & 9\end{bmatrix}=\frac{1}{35}[-6\quad -18]$$

$$\bar{\mathbf{x}}_3'\mathbf{S}_p^{-1}\bar{\mathbf{x}}_3=\frac{1}{35}[-6\quad -18]\begin{bmatrix}0\\ -2\end{bmatrix}=\frac{36}{35}$$

以及

$$\hat{d}_3(\mathbf{x}_0)=\ln(0.50)+\left(\frac{-6}{35}\right)x_{01}+\left(\frac{-18}{35}\right)x_{02}-\frac{1}{2}\times\frac{36}{35}$$

将数值 $x_{01}=-2$ 和 $x_{02}=-1$ 代入，得到

$$\hat{d}_1(\mathbf{x}_0)=-1.386+\left(\frac{-27}{35}\right)\times(-2)+\left(\frac{24}{35}\right)\times(-1)-\frac{99}{70}=-1.943$$

$$\hat{d}_2(\mathbf{x}_0)=-1.386+\left(\frac{48}{35}\right)\times(-2)+\left(\frac{39}{35}\right)\times(-1)-\frac{204}{70}=-8.158$$

$$\hat{d}_3(\mathbf{x}_0)=-0.693+\left(\frac{-6}{35}\right)\times(-2)+\left(\frac{-18}{35}\right)\times(-1)-\frac{36}{70}=-0.350$$

由于 $\hat{d}_3(\mathbf{x}_0)=-0.350$ 为最大判别得分，我们将 $\mathbf{x}_0$ 分入 π_3。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

例 11.11 （对一个潜在的商学院研究生分类）

一所商学院的招生人员将本科生的平均毕业成绩(GPA)和本科毕业生的管理能力测验(GMAT)成绩用作“指标”，帮助他决定应将哪些申报者接收为学院研究生。图 11.9 显示了三组近期报名者的 x_1=GPA 和 x_2=GMAT 成绩。这三个组是：π_1：接收；π_2：不接收；π_3：处于接收与不接收的边缘①。

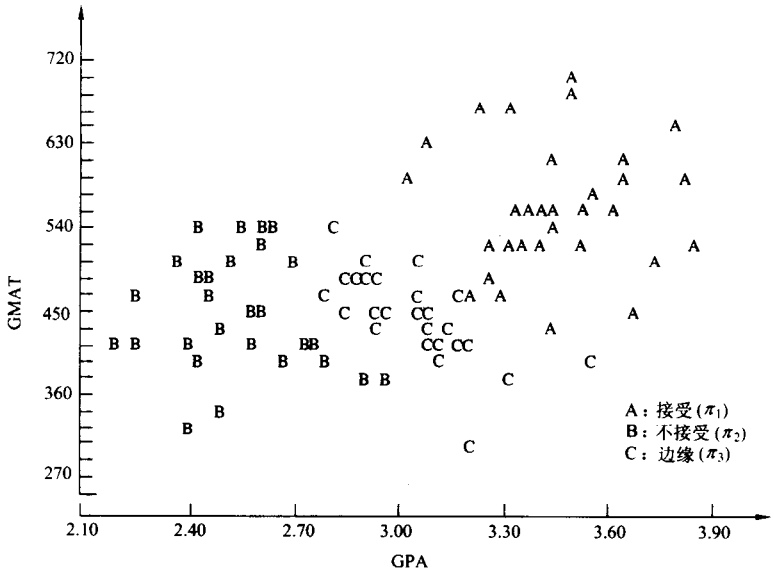


图 11.9 商学院研究生院申请者的散布图(x_1=GPA，x_2=GMAT)

图 11.9 中各点的数据列于表 11.6。(见练习 11.29。)这些数据产生下面的量(见显示板 11.1 中的 SAS 统计软件输出)：

$$n_1=31 \qquad n_2=28 \qquad n_3=26$$

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}3.40\\561.23\end{bmatrix} \qquad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}2.48\\447.07\end{bmatrix} \qquad \bar{\mathbf{x}}_3=\begin{bmatrix}2.99\\446.23\end{bmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}2.97\\488.45\end{bmatrix} \qquad \mathbf{S}_p=\begin{bmatrix}0.0361 & -2.0188\\-2.0188 & 3655.9011\end{bmatrix}$$

假定一名新申请者的 GPA 成绩 $x_1=3.21$ 和 GMAT 成绩 $x_2=497$。让我们用先验概率相等条件下的法则(11-54)对这名申请者进行分类。

因为 $\bar{\mathbf{x}}_0'=[3.21,497]$，样本距离为

$$\begin{aligned}D_1^2(\mathbf{x}_0)&=(\mathbf{x}_0-\bar{\mathbf{x}}_1)'\mathbf{S}_p^{-1}(\mathbf{x}_0-\bar{\mathbf{x}}_1)\\&=[3.21-3.40,497-561.23]\begin{bmatrix}28.6096 & 0.0158\\0.0158 & 0.0003\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3.21-3.40\\497-561.23\end{bmatrix}\\&=2.58\end{aligned}$$

① 本例中的总体都是虚构的。另一方面，经验表明，GPA 和 GMAT 得分高的学生一般能很好完成研究生学业，而那些得低分的学生则会遇到困难。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$D_2^2(\mathbf{x}_0) = (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_2)'\mathbf{S}_p^{-1}(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_2) = 17.10$$

$$D_3^2(\mathbf{x}_0) = (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_3)'\mathbf{S}_p^{-1}(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}_3) = 2.47$$

因为从 $\mathbf{x}_0' = [3.21, 497]$ 到组平均值 $\bar{\mathbf{x}}_3$ 的距离 $D_3(\mathbf{x}_0)$ 最小，我们将这名申请者分入边缘总体 π_3。

显示板 11.1 使用 SAS 的判别程序(PROC DISCRIM)对录取数据所作的分析

PROGRAM COMMANDS

```
title 'Discriminant Analysis';
data gpa;
infile 'T11-6.dat';
input admit $ gpa gmat;
proc discrim data=gpa
method=normal pool=yes manova wcov pcov listerr crosslisterr;
priors 'admit'=0.333 'notadmit'=0.3333 'border'=0.3333;
class admit; var gpa gmat;
```

OUTPUT

```
                    DISCRIMINANT ANALYSIS
   85  Observations        84  DF Total
    2  Variables           82  DF Within Classes
    3  Classes              2  DF Between Classes

                    Class Level Information

ADMIT      Frequency   Weight      Proportion   Prior Probability
admit         31       31.0000     0.364706     0.333333
border        26       26.0000     0.305882     0.333333
notadmit      28       28.0000     0.329412     0.333333

DISCRIMINANT ANALYSIS     WITHIN-CLASS COVARIANCE MATRICES
                ADMIT=admit     DF=30
          Variable      GPA        GMAT
          GPA        0.043558    0.058097
          GMAT       0.058097 4618.247312
          ----------------------------------------
                ADMIT=border    DF=25
          Variable      GPA        GMAT
          GPA        0.029692   -5.403846
          GMAT      -5.403846 2246.904615
          ----------------------------------------
                ADMIT=notadmit  DF=27
          Variable      GPA        GMAT
          GPA        0.033649   -1.192037
          GMAT      -1.192037 3891.253968
```


PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

Pooled Within-Class Covariance Matrix DF=82

Variable	GPA	GMAT
GPA	0.036068	−2.018759
GMAT	−2.018759	3655.901121

Multivariate Statistics and F Approximations

S=2 M=−0.5 N=39.5

Statistic	Value	F	Num DF	Den DF	Pr>F
Wilks' Lambda	0.12637661	73.4257	4	162	0.0001
Pillai's Trace	1.00963002	41.7973	4	164	0.0001
Hotelling-Lawley Trace	5.83665601	116.7331	4	160	0.0001
Roy's Greatest Root	5.64604452	231.4878	2	82	0.0001

NOTE: F Statistic for Roy's Greatest Root is an upper bound.

NOTE: F Statistic for Wilks' Lambda is exact.

DISCRIMINANT ANALYSIS LINEAR DISCRIMINANT FUNCTION

Constant $= -0.5\bar{X}_j' COV^{-1}\bar{X}_j + \ln PRIOR_j$ Coefficient Vector $= COV^{-1}\bar{X}_j$

	ADMIT		
	admit	border	notadmit
CONSTANT	−241.47030	−178.41437	−134.99753
GPA	106.24991	92.66953	78.08637
GMAT	0.21218	0.17323	0.16541

Classification Results for Calibration Data: WORK.GPA
Resubstitution Results using Linear Discriminant Function

Generalized Squared Distance Function:

$$D_j^2(X) = (X-\bar{X}_j)' cov^{-1}(X-\bar{X}_j)$$

Posterior Probability of Membership in each ADMIT:

$$Pr(j|X) = \exp(-0.5D_j^2(X))/\underset{k}{SUM}\exp(-0.5\,D_k^2(X))$$

Posterior Probability of Membership in ADMIT:

Obs	From ADMIT	Classified into ADMIT		admit	border	notadmit
2	admit	border	*	0.1202	0.8778	0.0020
3	admit	border	*	0.3654	0.6342	0.0004
24	admit	border	*	0.4766	0.5234	0.0000
31	admit	border	*	0.2964	0.7032	0.0004
58	notadmit	border	*	0.0001	0.7550	0.2450
59	notadmit	border	*	0.0001	0.8673	0.1326
66	border	admit	*	0.5336	0.4664	0.0000

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

* Misclassified observation

Classification Summary for Calibration Data: WORK.GPA
Cross-validation Summary using Linear Discriminant Function

Generalized Squared Distance Function:

$$D_j^2(X)=(X-\overline{X}_{(X)j})'COV_{(X)}^{-1}(X-\overline{X}_{(X)j})$$

Posterior Probability of Membership in each ADMIT:

$$Pr(j|X)=\exp(-0.5\ D_j^2(X))/\underset{k}{SUM}\exp(-0.5\ D_k^2(X))$$

Number of Observations and Percent Classified into ADMIT:

From ADMIT	admit	border	notadmit	Total
admit	26	5	0	31
	83.87	16.13	0.00	100.00
border	1	24	1	26
	3.85	92.31	3.85	100.00
notadmit	0	2	26	28
	0.00	7.14	92.86	100.00
Total	27	31	27	85
Percent	31.76	36.47	31.76	100.00
Priors	0.3333	0.3333	0.3333	

Error Count Estimates for ADMIT:

	admit	border	notadmit	Total
Rate	0.1613	0.0769	0.0714	0.1032
Priors	0.3333	0.3333	0.3333	

由式(11-49)给出的线性判别得分可以进行两两比较。使用这些量，我们可以看到：$d_k(\mathbf{x})$为$d_1(\mathbf{x}),d_2(\mathbf{x}),\cdots,d_g(\mathbf{x})$中的最大值这个条件等价于

$$\begin{aligned}0&\leqslant d_k(\mathbf{x})-d_j(\mathbf{x})\\&=(\boldsymbol{\mu}_k-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_k-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_k+\boldsymbol{\mu}_i)+\ln\left(\frac{p_k}{p_i}\right)\end{aligned}$$

对所有 $i=1,2,\cdots,g$。

将$-\ln(p_k/p_i)=\ln(p_i/p_k)$加到上述不等式的两边，就得到最小总错分概率(TPM)分类法则的另一种形式。这样我们有

若

$$(\boldsymbol{\mu}_k-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_k-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_k+\boldsymbol{\mu}_i)\geqslant\ln\left(\frac{p_i}{p_k}\right)\tag{11-55}$$

则将 $\mathbf{x}$ 分入 π_k，对所有 $i=1,2,\cdots,g$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

记式(11-55)左端为 $d_{ki}(\mathbf{x})$。于是式(11-55)中的条件定义了被(超)平面所分离的分类域 $R_1,R_2,\cdots,R_g$。这是由于 $d_{ki}(\mathbf{x})$ 为 $\mathbf{x}$ 诸分量的线性组合之故。例如，当 $g=3$ 时，分类域 R_1 由满足下面条件的 $\mathbf{x}$ 构成：

$$R_1: d_{1i}(\mathbf{x}) \geqslant \ln\left(\frac{p_i}{p_1}\right) \quad 对\ i=2,3$$

也就是说，R_1 中的 $\mathbf{x}$ 既要满足

$$d_{12}(\mathbf{x}) = (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2) \geqslant \ln\left(\frac{p_2}{p_1}\right)$$

同时又要满足

$$d_{13}(\mathbf{x}) = (\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_3)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_3)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_3) \geqslant \ln\left(\frac{p_3}{p_1}\right)$$

假定 $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\boldsymbol{\mu}_3$ 不在一条直线上，方程 $d_{12}(\mathbf{x})=\ln(p_2/p_1)$ 和 $d_{13}(\mathbf{x})=\ln(p_3/p_1)$ 就定义两个相交的超平面，它刻画 p 维变量空间中的 R_1。若 p_2 大于 p_1，则 $\ln(p_2/p_1)$ 这一项将使这个平面更靠近 $\boldsymbol{\mu}_1$(离 $\boldsymbol{\mu}_2$ 较远)。二变量情形下的区域 R_1,R_2 和 R_3 示于图 11.10。对更多变量的情况，要是我们画出含三个均值向量的平面，那么所得出的图象是一样的。

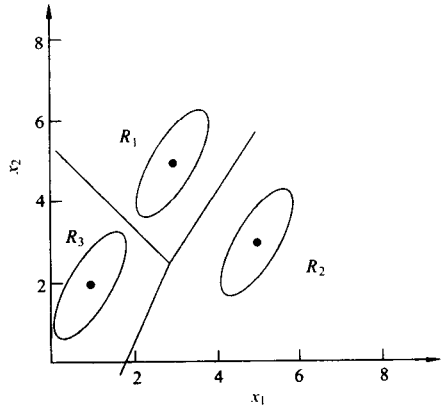


图 11.10　线性最小 TPM 法则的分类域 R_1,R_2 和 $R_3(p_1=1/4,p_2=1/2,p_3=1/4)$

通过用 $\bar{\mathbf{x}}_i$ 代替 $\boldsymbol{\mu}_i$ 和用 $\mathbf{S}_p$ 代替 $\boldsymbol{\Sigma}$，可以得到式(11-55)的样本形式。当 $\sum_{i=1}^{g}(n_i-1)\geqslant p$ 时 $\mathbf{S}_p^{-1}$ 存在，这时式(11-55)的样本形式为：

若

$$\hat{d}_{ki}(\mathbf{x}) = (\bar{\mathbf{x}}_k-\bar{\mathbf{x}}_i)'\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\bar{\mathbf{x}}_k-\bar{\mathbf{x}}_i)'\mathbf{S}_p^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_k+\bar{\mathbf{x}}_i)$$

$$\geqslant \ln\left(\frac{p_i}{p_k}\right) \qquad i\neq k \tag{11-56}$$

则将 $\mathbf{x}$ 分到 π_i。

给定 $\bar{\mathbf{x}}_i$ 和 $\mathbf{S}_p$，则 $\hat{d}_{ki}(\mathbf{x})$ 为 $\mathbf{x}$ 诸分量的线性函数。因此，由式(11-56)所定义的分类域，或等价地说由式(11-52)所定义的分类域，也是以如图 11.10 所示超平面为边界。

同式(11-52)中的样本线性判别法则一样，如果先验概率难以估计，通常就将它们取成等概率。在这种情况下，对所有 $p_i,p_k(i\neq k)$ 都有 $\ln(p_i/p_k)=0$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

由于用了总体参数的估计值，样本分类法则(11-48)和(11-52)不再是最优的。但是它们的表现可以用拉亨布鲁克的提留方法来评估。若 $n_{iM}^{(H)}$ 为第 i 组中错分提留观测的个数，$i=1,2,\cdots,g$，则期望真实失误率 $E(\mathrm{AER})$ 由下式估计：

$$\hat{E}(\mathrm{AER}) = \frac{\sum_{i=1}^{g} n_{iM}^{(H)}}{\sum_{i=1}^{g} n_i} \tag{11-57}$$

例 11.12 （用少数几个变量的有效分类）

费希尔[8]在有关判别函数的开拓性工作中，对安德森[1]收集的三种鸢尾属植物的花的数据进行了分析(见练习 11.27，表 11.5)。设三个类别的定义为：π_1,π_2,π_3 分别代表三种鸢尾属植物。对每个种的 50 株植物测量了如下四个变量：

X_1＝萼片长度，　　X_2＝萼片宽度

X_3＝花瓣长度，　　X_4＝花瓣宽度

利用表 11.5 中的全部数据，用线性判别分析得到如下模糊矩阵。

预测归属

		π_1	π_2	π_3	正确百分率
真实归属	π_1	50	0	0	100
	π_2	0	48	2	96
	π_3	0	1	49	98

矩阵中的元素用提留方法得出，故(见式(11-57))

$$\hat{E}(\mathrm{AER}) = 3/150 = 0.02$$

这个失误率很低，只有 2%。

经常可以用较少的变量得到有效的分类。在实践中可以一次用一个变量，一次用两个变量，一次用三个变量等等来进行分类，然后将这些分类结果与用全部变量分类所得结果进行比较。

如果我们用期望 AER 的提留估计值作为准则，则对鸢尾属植物的数据得出下面的结果。

单变量	错分率
X_1	0.253
X_2	0.480
X_3	0.053
X_4	0.040
双变量	**错分率**
X_1,X_2	0.207
X_1,X_3	0.040
X_1,X_4	0.040
X_2,X_3	0.047
X_2,X_4	0.040
X_3,X_4	0.040

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

我们看到，单变量 X_4＝花瓣宽度能很好地将三个种分类。而且，进一步增加变量几乎得不到任何改进。X_4 的盒形图在图 11.11 中给出。从图中看得很清楚，用花瓣宽度可以很好地将三种鸢尾属植物分开。例如，π_1 中的花瓣宽度大大小于 π_3 中的花瓣宽度。

达罗赫(Darroch)和莫西曼(Morsimann)[6]认为鸢尾属植物可以用“形状”变量来刻画，而不必借助花的大小。令 $Y_1=X_1/X_2$ 为萼片形状，$Y_2=X_3/X_4$ 为花瓣形状，将变量 Y_1 和 Y_2 用于判别将在练习 11.28 中加以探究。

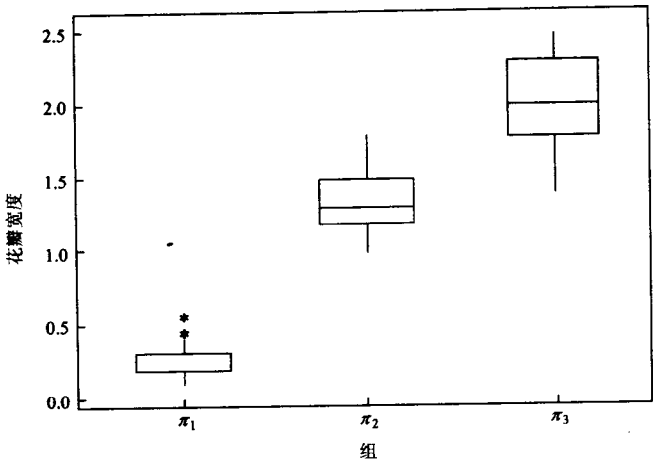


图 11.11　三种鸢尾属植物的花瓣宽度的盒形图

在判别分析中，选用适当的变量往往很困难。像本例中所给出的总结，可以帮助研究者根据评估一种方法分类效果好坏的最终准则做出合理而简单的选择。

我们着重讨论线性判别法则(11-52)或(11-56)，许多商业计算机程序也都以这一法则为基础。虽然线性判别法则有简单结构，但必须记住，它是根据多元正态性和相同协方差矩阵这两个很强的假定推出来的。在将某个线性分类法则付诸应用之前，必须对这些尝试性假定按照先是多元正态性，然后是相同协方差的顺序进行检验。如果这两个假定中有一个被破坏或两个都被破坏，那么只要事先对数据做适当变换，仍有可能得到改进的分类。

二次法则是线性判别函数分类的备选方案。这种法则适用于正态性成立而相同协方差阵的假定被严重破坏的情形。然而同线性法则相比，正态性假定对二次法则来说似乎是更重要的条件。如果对使用一次还是二次法则拿不准，可以同时采用两种法则分类，然后用拉亨布鲁克提留方法来考察它们的错误率。

11.7　对多个总体进行判别的费希尔方法

费希尔曾建议将他的判别方法(见 11.5 节)推广到多个总体的情形。隐藏在费希尔判别分析背后的动机，是需要获得某种合理的总体表示，这种表示只包含观察值的少数几个线性组合，诸如 $\mathbf{a}_1'\mathbf{x}$，$\mathbf{a}_2'\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{a}_3'\mathbf{x}$。当人们对采用(1)目视检查法或(2)图描述法分离若干个

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

总体感兴趣时，这种方法具有下列优点：

1. 将数量很大的特征变量减少到相对说较少几个线性组合，从而形成维数较小的 g 个总体的方便的表示。当然，最优分类所需的某些信息会丢失，除非这些总体的均值完全位于所选的低维空间中。

2. 对前两个或三个线性组合（判别量）的均值作图，将有助于展示总体之间的关系及可能的分组情况。

3. 作前两个判别量样本值的散布图，有助于发现离群值和数据中其他异常情况。

费希尔判别分析的最初目的是分离总体。然而它也可用于分类，因而我们将指出这种应用。不必假定 g 个总体服从多元正态分布。然而我们确实要假定 $p\times p$ 总体协方差矩阵皆相同且满秩①。也就是说，$\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2=\cdots=\boldsymbol{\Sigma}_g=\boldsymbol{\Sigma}$。

设 $\bar{\boldsymbol{\mu}}$ 为联合总体的均值向量，$\mathbf{B}_\mu$ 为组间交叉乘积和，即

$$\mathbf{B}_\mu=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})' \qquad \text{其中 } \bar{\boldsymbol{\mu}}=\frac{1}{g}\sum_{i=1}^{g}\boldsymbol{\mu}_i \tag{11-58}$$

考虑线性组合

$$\mathbf{Y}=\mathbf{a}'\mathbf{X}$$

它有期望值

$$E(Y)=\mathbf{a}'E(\mathbf{X}\mid\pi_i)=\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_i \qquad \text{对每个总体 } \pi_i$$

和方差

$$\mathrm{Var}(Y)=\mathbf{a}'\mathrm{Cov}(\mathbf{X})\mathbf{a}=\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a} \qquad \text{对所有总体}$$

因此，期望值 $\mu_{iY}=\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_i$ 随总体（从中选出 $\mathbf{X}$）的改变而改变。我们先定义总均值。

$$\bar{\mu}_Y=\frac{1}{g}\sum_{i=1}^{g}\mu_{iY}=\frac{1}{g}\sum_{i=1}^{g}\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_i=\mathbf{a}'\left(\frac{1}{g}\sum_{i=1}^{g}\boldsymbol{\mu}_i\right)$$
$$=\mathbf{a}'\bar{\boldsymbol{\mu}}$$

再构造比值

$$\frac{\begin{pmatrix}\text{从 } Y \text{ 的各总体到总均值}\\ \text{的距离平方和}\end{pmatrix}}{(Y\text{ 的方差})}=\frac{\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY}-\bar{\mu}_Y)^2}{\sigma_Y^2}=\frac{\sum_{i=1}^{g}(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_i-\mathbf{a}'\bar{\boldsymbol{\mu}})^2}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}$$
$$=\frac{\mathbf{a}'\left(\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\right)\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}$$

或

$$\frac{\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY}-\bar{\mu}_Y)^2}{\sigma_Y^2}=\frac{\mathbf{a}'\mathbf{B}_\mu\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}} \tag{11-59}$$

式(11-59)中的比值所度量的是 Y 值相对其组内变差的组间变差。于是我们可以选择 $\mathbf{a}$ 来使这个比值达到最大。

---

① 如果协方差阵不满秩，可令 $\mathbf{P}=[\mathbf{e}_1,\cdots,\mathbf{e}_q]$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的特征向量，对应非零特征值 $[\lambda_1,\cdots,\lambda_q]$。然后用 $\mathbf{P}'\mathbf{X}$ 代替 $\mathbf{X}$。$\mathbf{P}'\mathbf{X}$ 有满秩协方差矩阵 $\mathbf{P}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{P}$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

通常 $\boldsymbol{\Sigma}$ 和 $\boldsymbol{\mu}_i$ 是得不到的，但我们有一个由正确分类的观测值组成的训练集。设这个训练集由来自总体 $\pi_i(i=1,2,\cdots,g)$ 一个容量为 n_i 的随机样本组成。记 π_i 的 $n_i\times p$ 数据阵为 $\mathbf{X}_i$，其第 j 行为 $\mathbf{x}_{ij}$。先构造样本均值向量

$$\bar{\mathbf{x}}_i=\frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}\mathbf{x}_{ij}$$

及样本协方差阵 $\mathbf{S}_i$，$i=1,2,\cdots,g$，然后构造"总平均"向量

$$\bar{\mathbf{x}}=\frac{\sum_{i=1}^{g}n_i\bar{\mathbf{x}}_i}{\sum_{i=1}^{n}n_i}=\frac{\sum_{i=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_i}\mathbf{x}_{ij}}{\sum_{i=1}^{g}n_i}$$

这是对训练集中所有样本观测值取平均后得出的 $p\times 1$ 向量。

然后我们定义**组间样本**矩阵 $\mathbf{B}$：

$$\mathbf{B}=\sum_{i=1}^{g}n_i(\bar{\mathbf{x}}_i-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_i-\bar{\mathbf{x}})' \tag{11-60}$$

还有根据**组内样本**矩阵

$$\mathbf{W}=\sum_{i=1}^{g}(n_i-1)\mathbf{S}_i=\sum_{i=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_i}(\bar{\mathbf{x}}_{ij}-\bar{\mathbf{x}}_i)(\bar{\mathbf{x}}_{ij}-\bar{\mathbf{x}}_i)' \tag{11-61}$$

得出的 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的估计。因此，$\mathbf{W}/(n_1+n_2+\cdots+n_g-g)=\mathbf{S}_p$ 就是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的估计。在给出样本判别量之前我们注意，由于 $\mathbf{W}$ 是常数 $(n_1+n_2+\cdots+n_g-g)$ 乘上 $\mathbf{S}_p$，因此同一个 $\hat{\mathbf{a}}$ 既使 $\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{B}\hat{\mathbf{a}}/\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}$ 最大化，又使 $\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{B}\hat{\mathbf{a}}/\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{W}\hat{\mathbf{a}}$ 最大化。不仅如此，我们还可以将最优化的 $\hat{\mathbf{a}}$ 表示成更习惯的形式，即用 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 的特征向量 $\hat{\mathbf{e}}_i$ 来表示。这是因为若 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}\hat{\mathbf{e}}=\hat{\lambda}\hat{\mathbf{e}}$，则 $\mathbf{S}_p^{-1}\mathbf{B}\hat{\mathbf{e}}=\hat{\lambda}(n_1+n_2+\cdots+n_g-g)\hat{\mathbf{e}}$。

费希尔的样本线性判别函数

设 $\hat{\lambda}_1>\hat{\lambda}_2>\cdots>\hat{\lambda}_s>0$ 为 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 的 $s\leqslant\min(g-1,p)$ 个非零特征值，$\hat{\mathbf{e}}_1,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_s$ 为对应的特征向量（长度取为 $\hat{\mathbf{e}}'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{e}}=1$）。此时能使下面的比值最大化的系数向量 $\hat{\mathbf{a}}$ 为 $\hat{\mathbf{a}}_1=\hat{\mathbf{e}}_1$：

$$\frac{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{B}\hat{\mathbf{a}}}{\hat{\mathbf{a}}'\mathbf{W}\hat{\mathbf{a}}}=\frac{\hat{\mathbf{a}}'\left(\sum_{i=1}^{g}(\bar{\mathbf{x}}_i-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_i-\bar{\mathbf{x}})'\right)\hat{\mathbf{a}}}{\hat{\mathbf{a}}'\left[\sum_{i=1}^{g}\sum_{j=1}^{n_i}(\mathbf{x}_{ij}-\bar{\mathbf{x}}_i)(\mathbf{x}_{ij}-\bar{\mathbf{x}}_i)'\right]\hat{\mathbf{a}}} \tag{11-62}$$

线性组合 $\hat{\mathbf{a}}_1'\mathbf{x}$ 称为**样本第一判别量**。若选 $\hat{\mathbf{a}}_2=\hat{\mathbf{e}}_2$，便得到**样本第二判别量** $\hat{\mathbf{a}}_2'\mathbf{x}$，如此继续，我们可以得到**样本第 k 判别量** $\hat{\mathbf{a}}_k'\mathbf{x}=\hat{\mathbf{e}}_k'\mathbf{x}$，$k\leqslant s$。

练习 11.21 扼要地给出费希尔判别量的推导。这些判别量对每个随机样本阵 $\mathbf{X}_i$ 都没有零协方差。相反，条件

$$\hat{\mathbf{a}}_i'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}_k=\begin{cases}1 & 若\ i=k\leqslant s\\ 0 & 其余情况\end{cases} \tag{11-63}$$

得到满足。由于我们目前尝试着假定 g 个总体的协方差阵相同，所以采用 $\mathbf{S}_p$ 是适宜的。

例 11.13 （对三个总体计算费希尔样本判别量）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

考虑例 11.10 中取自 $g=3$ 个总体的 $p=2$ 个变量的观测值。假定总体有相同的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，我们来求费希尔判别量，数据为

$$\pi_1(n_1=3) \qquad \pi_2(n_2=3) \qquad \pi_3(n_3=3)$$

$$\mathbf{X}_1=\begin{bmatrix}-2 & 5\\ 0 & 3\\ -1 & 1\end{bmatrix};\quad \mathbf{X}_2=\begin{bmatrix}0 & 6\\ 2 & 4\\ 1 & 2\end{bmatrix};\quad \mathbf{X}_3=\begin{bmatrix}1 & -2\\ 0 & 0\\ -1 & -4\end{bmatrix}$$

在例 11.10 中我们曾得出

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}-1\\ 3\end{bmatrix};\quad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}1\\ 4\end{bmatrix};\quad \bar{\mathbf{x}}_3=\begin{bmatrix}0\\ -2\end{bmatrix}$$

故

$$\bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}0\\ \frac{5}{3}\end{bmatrix};\quad \mathbf{B}=\sum_{i=1}^{3}3(\bar{\mathbf{x}}_i-\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}}_i-\bar{\mathbf{x}})'=\begin{bmatrix}6 & 3\\ 3 & 62\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{W}=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{n_i}(\bar{\mathbf{x}}_{ij}-\bar{\mathbf{x}}_i)(\bar{\mathbf{x}}_{ij}-\bar{\mathbf{x}}_i)'=(n_1+n_2+n_3-3)\mathbf{S}_p$$

$$=\begin{bmatrix}6 & -2\\ -2 & 24\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{W}^{-1}=\frac{1}{140}\begin{bmatrix}24 & 2\\ 2 & 6\end{bmatrix};\quad \mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}=\begin{bmatrix}1.07143 & 1.4\\ 0.21429 & 2.7\end{bmatrix}$$

为求 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 的 $s\leqslant\min(g-1,p)=\min(2,2)=2$ 个非零特征值，必须解方程

$$|\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}-\lambda\mathbf{I}|=\left|\begin{bmatrix}1.07143-\lambda & 1.4\\ 0.21429 & 2.7-\lambda\end{bmatrix}\right|=0$$

或

$$(1.07143-\lambda)(2.7-\lambda)-1.4\times 0.21429=\lambda_2-3.77143\lambda+2.5929=0$$

用二次求根公式，得到 $\hat{\lambda}_1=2.8671$，$\hat{\lambda}_2=0.9044$。求解方程

$$(\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}-\hat{\lambda}_i\mathbf{I})\hat{\mathbf{a}}_i=\mathbf{0}\qquad i=1,2$$

并取解的长度满足 $\hat{\mathbf{a}}_i'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}_i=1$，可以得到两个标准化特征向量 $\hat{\mathbf{a}}_1$，$\hat{\mathbf{a}}_2$。例如方程

$$(\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}-\hat{\lambda}_1\mathbf{I})\hat{\mathbf{a}}_1=\begin{bmatrix}1.07143-2.8671 & 1.4\\ 0.21429 & 2.7-1.07143\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{a}_{11}\\ \hat{a}_{12}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

的解经过标准化 $\hat{\mathbf{a}}_1'\mathbf{S}_p\hat{\mathbf{a}}_1=1$ 之后为 $\hat{\mathbf{a}}_1'=[0.386,0.495]$。类似地，$\hat{\mathbf{a}}_2'=[0.938,-0.112]$。两个判别量为

$$\hat{y}_1=\hat{\mathbf{a}}_1'\mathbf{x}=[0.386\quad 0.495]\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=0.386x_1+0.495x_2$$

$$\hat{y}_2=\hat{\mathbf{a}}_2'\mathbf{x}=[0.938\quad -0.112]\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=0.938x_1-0.112x_2$$

例 11.14 （原油数据的费希尔判别量）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

格利尔德(Gerrild)和兰茨(Lantz)[12]从加利福尼亚埃尔克山的砂岩中采集了一组原油样本。这些原油可以分入以下三类之一：

π_1：威赫尔姆砂岩

π_2：下马里尼亚砂岩

π_3：高层砂岩

为说明问题，我们仅考虑五个变量：

X_1＝钒(灰分中的百分比)

$X_2=\sqrt{\text{铁(灰分中的百分比)}}$

$X_3=\sqrt{\text{铍(灰分中的百分比)}}$

X_4＝1/饱和烃(面积百分比)

X_5＝芳香烃(面积百分比)

前三个变量是痕量元素，后两个变量则根据气体色谱化学分析法所产生的一段曲线来确定。表 11.7(见练习 11.30)给出五个原始变量(钒、铁、铍、饱和烃和芳香烃)在 56 个样本中的值。这些样本的分类是已知的。

计算机计算给出下列汇总统计数字：

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}3.229\\6.587\\0.303\\0.150\\11.540\end{bmatrix},\quad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}4.445\\5.667\\0.344\\0.157\\5.484\end{bmatrix},\quad \bar{\mathbf{x}}_3=\begin{bmatrix}7.226\\4.634\\0.598\\0.223\\5.768\end{bmatrix},\quad \bar{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix}6.180\\5.081\\0.511\\0.201\\6.434\end{bmatrix}$$

以及

$$(n_1+n_2+n_3-3)\mathbf{S}_p=(38+11+7-3)\mathbf{S}_p$$

$$=\mathbf{W}=\begin{bmatrix}187.575 & & & & \\ 1.957 & 141.789 & & & \\ -4.031 & 2.128 & 3.580 & & \\ 1.092 & -0.143 & -0.284 & 0.077 & \\ 79.672 & -28.243 & 2.559 & -0.996 & 338.023\end{bmatrix}$$

$\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 最多有 $s=\min(g-1,p)=\min(2,5)=2$ 个正特征值，它们是 4.354 和 0.559。中心化的费希尔线性判别量为

$$\hat{y}_1=0.312(x_1-6.180)-0.710(x_2-5.081)+2.764(x_3-0.511)$$
$$+11.809(x_4-0.201)-0.235(x_5-6.434)$$
$$\hat{y}_2=0.169(x_1-6.180)-0.245(x_2-5.081)-2.046(x_3-0.511)$$
$$-24.453(x_4-0.201)-0.378(x_5-6.434)$$

三组样本均值的分离可以在 $\hat{y}_1$ 和 $\hat{y}_2$ 构成的二维“判别空间”中得到完全解释。组均值和单个观测值在判别坐标系中的散布图示于图 11.12。分离的效果相当好。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

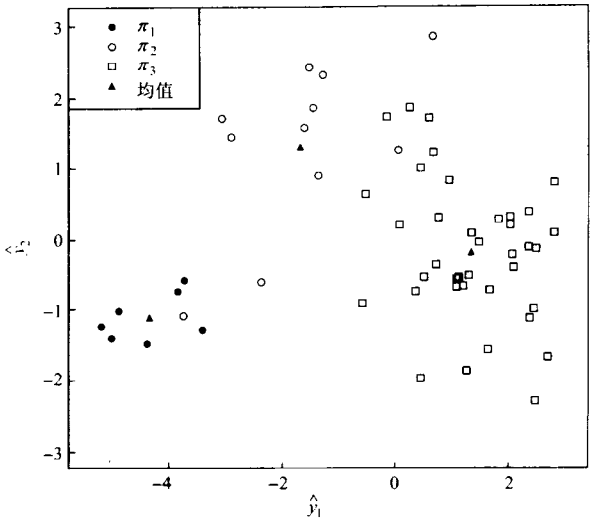


图 11.12　判别空间中的原油数据散布图

例 11.15　（将运动数据在二维判别空间作图）

一批研究人员对运动心理学感兴趣，他们利用明尼苏达多重性格记录库（MMPI）中保存的威斯康星大学 670 名获奖选手的数据进行分析。有关的运动项目及两个判别函数的系数列于表 11.3。

用前两个判别得分得出的组均值图示于图 11.13。这里，虽然对均值相等的检验在 5%的水平下显著，但基于 MMPI 得分的分离却不好。（这是由于大样本容量。）

表　11.3

运动	样本容量	MMPI 指标	第一判别量	第二判别量
		QE	0.055	−0.098
足球	158	L	−0.194	0.046
篮球	42	F	−0.047	−0.099
棒球	79	K	0.053	−0.017
赛艇	61	Hs	0.077	−0.076
击剑	50	D	0.049	0.183
高尔夫	28	Hy	−0.028	0.031
体操	26	Pd	0.001	−0.069
曲棍球	28	Mf	−0.074	−0.076
游泳	51	Pa	0.189	0.088
网球	31	Pt	0.025	−0.188
田径	52	Sc	−0.046	0.088
摔跤	64	Ma	−0.103	0.053
		Si	0.041	0.016

资料来源：W. Morgan 和 W. Johnson。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

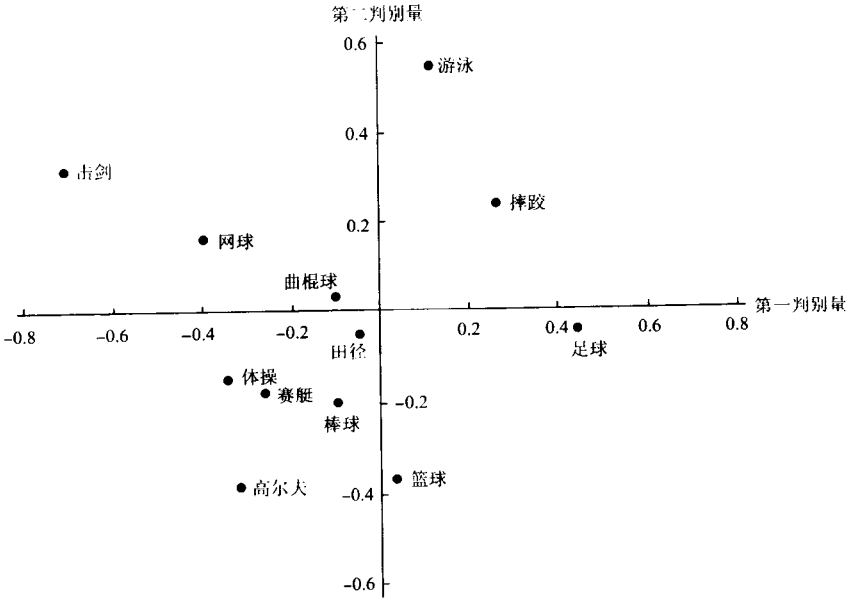


图 11.13　每项运动的判别均值 $\bar{\mathbf{y}}'=[\bar{y}_1,\bar{y}_2]$

然而判别系数却暗示：第一判别量与 L 和 Ma 两个指标关系最密切，而第二判别量则与 D 和 Pt 两个指标关系最密切。下面给出这些研究人员所提供的解释。

第一判别量占总方差的 34.4%，它与 Mf 指标高度相关($r=-0.78$)。第二判别量占总方差的 18.3%，与 Sc，F 和 D 指标高度相关($r=0.66$，0.54 和 0.50)。这些研究者认为，第一判别量最好地代表了兴趣，而第二判别量则反映了心理调整。

在理想情况下，应该对标准化的判别函数系数进行考察，以估计一个变量在存在其他变量情形下的重要性。(见[25]。)相关系数只指示每个变量如何通过自身来区分各总体，而忽略其他变量的贡献。不幸的是，在本例中是得不到标准化判别系数的。

一般来说，还应该对前几个判别量中的其他各对变量作标绘图。此外，可以对每项运动制作其判别量的判别得分散布图。在多元正态性假定下，以判别均值向量 $\bar{y}$ 为中心的单位椭圆(圆)应包含比例约为

$$P[(\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu}_Y)'(\mathbf{Y}-\boldsymbol{\mu}_Y)\leqslant 1]=P[\chi_2^2\leqslant 1]=0.39$$

的判别空间上的点。

用费希尔判别量将对象进行分类

推导费希尔判别量的目的，是得出一个能将总体最大限度地分开的低维数据表示。虽然这些判别量是出于分离的考虑而导出的，它们也为分类法则提供了依据。我们先用总体判别量 $\mathbf{a}_i'\mathbf{X}$ 来解释二者之间的联系。

令

$$Y_k=\mathbf{a}_k'\mathbf{X}=\text{第 } k \text{ 个判别量},\quad k\leqslant s \tag{11-64}$$

我们得出结论：对总体 π_i，

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}Y_1\\Y_2\\\vdots\\Y_s\end{bmatrix}\quad 有均值向量\ \boldsymbol{\mu}_{iY}=\begin{bmatrix}\mu_{iY_1}\\\vdots\\\mu_{iY_s}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1'\boldsymbol{\mu}_i\\\vdots\\\mathbf{a}_s'\boldsymbol{\mu}_i\end{bmatrix}$$

而对所有总体则有协方差矩阵 $\mathbf{I}$(见练习 11.21)。

由于 $\mathbf{Y}$ 的各分量均有单位方差和零协方差，所以 $\mathbf{Y}=\mathbf{y}$ 到 $\boldsymbol{\mu}_{iY}$ 的适当的平方距离为

$$(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}_{iY})'(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}_{iY})=\sum_{j=1}^{s}(y_j-\mu_{iY_j})^2$$

一个合理的分类法则是：若 $\mathbf{y}$ 到 $\boldsymbol{\mu}_{kY}$ 的平方距离小于 $\mathbf{y}$ 到其他 $\boldsymbol{\mu}_{iY}(i\neq k)$ 的平方距离，则将 $\mathbf{y}$ 指派给 π_k。

若只用 r 个判别量来进行分类，则相应法则为：若

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{r}(y_j-\mu_{kY_j})^2&=\sum_{j=1}^{r}[\mathbf{a}_j'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_k)]^2\\&\leqslant\sum_{j=1}^{r}[\mathbf{a}_j'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)]^2\qquad 对所有\ i\neq k\end{aligned}\tag{11-65}$$

则将 $\mathbf{x}$ 分到 π_k。

在将这种分类方法与 11.6 节中所讨论的分类方法相联系之前，我们先进一步探讨对判别量个数的限制。由练习 11.21 知

$s=$判别量个数$=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu$ 或 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$的非零特征值的个数

由于 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu$ 为 $p\times p$，故 $s\leqslant p$。进一步，g 个向量

$$\boldsymbol{\mu}_1-\bar{\boldsymbol{\mu}},\boldsymbol{\mu}_2-\bar{\boldsymbol{\mu}},\cdots,\boldsymbol{\mu}_g-\bar{\boldsymbol{\mu}}\tag{11-66}$$

满足$(\boldsymbol{\mu}_1-\bar{\boldsymbol{\mu}})+(\boldsymbol{\mu}_2-\bar{\boldsymbol{\mu}})+\cdots+(\boldsymbol{\mu}_g-\bar{\boldsymbol{\mu}})=g\bar{\boldsymbol{\mu}}-g\bar{\boldsymbol{\mu}}=0$。也就是说，第一个差值 $\boldsymbol{\mu}_1-\bar{\boldsymbol{\mu}}$ 可以表示为后 $g-1$ 个差值的线性组合。式(11-66)中的 g 个向量的线性组合决定一个超平面，其维数 $q\leqslant g-1$。取任一向量 $\mathbf{e}$ 垂直于每一个 $\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}}$，因而也垂直于这个超平面，可以得到

$$\mathbf{B}_\mu\mathbf{e}=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\mathbf{e}=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})0=\mathbf{0}$$

因此

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu\mathbf{e}=0\mathbf{e}$$

共有 $p-q$ 个正交特征向量对应于零特征值。这意味着有 q 个或更少的非零特征值。由于总有 $q\leqslant g-1$，非零特征值的个数 s 必满足 $s\leqslant\min(p,g-1)$。

于是，如果下列条件满足，则用二维图进行判别不会损失信息。

变量个数	总体个数	判别量的最大个数
任意 p	$g=2$	1
任意 p	$g=3$	2
$p=2$	任意 g	2

现在我们给出分类法则(11-65)与“正态理论”判别得分[见式(11-49)]之间的重要关系：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$d_i(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i + \ln p_i$$

或等价地$\left(\text{上式两端各加同一个常数}-\frac{1}{2}\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}\right)$，

$$d_i(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) + \ln p_i$$

结论 11.6 设 $y_j=\mathbf{a}_j'\mathbf{x}$，其中 $\mathbf{a}_j=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_j$，$\mathbf{e}_j$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$的一个特征向量。此时

$$\sum_{j=1}^{p}(y_j-\mu_{iY_j})^2 = \sum_{j=1}^{p}[\mathbf{a}_j'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)]^2 = (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$$
$$= -2d_i(\mathbf{x}) + \mathbf{x}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + 2\ln p_i$$

若 $\lambda_1\geqslant\cdots\geqslant\lambda_s>0=\lambda_{s+1}=\cdots=\lambda_p$，$\sum_{j=s+1}^{p}(y_j-\mu_{iY_j})^2$ 对所有总体 $\pi_i(i=1,2,\cdots,g)$均为常数。因此只有前 s 个判别量 y_j，或者说只有 $\sum_{j=1}^{s}(y_j-\mu_{iY_j})^2$ 对分类有贡献。

还有，若先验概率满足 $p_1=p_2=\cdots=p_g=1/g$，则取 $r=s$ 时，法则(11-65)等价于总体形式的最小 TPM 法则(11-52)。

证明 平方距离$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)=(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)=(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{E}\mathbf{E}'\cdot\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)$，其中 $\mathbf{E}=[\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_p]$为正交矩阵，其列由 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$的特征向量构成。(见练习 11.21。)

因为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_i=\mathbf{a}_i$ 或 $\mathbf{a}_i'=\mathbf{e}_i'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$，所以

$$\mathbf{E}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) = \begin{bmatrix}\mathbf{a}_1'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\\ \mathbf{a}_2'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\\ \vdots\\ \mathbf{a}_p'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)\end{bmatrix}$$

且

$$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{E}\mathbf{E}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i) = \sum_{j=1}^{p}[\mathbf{a}_j'(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_i)]^2$$

然后，每个 $\mathbf{a}_j=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_j(j>s)$为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu$ 的一个(未标准化的)特征向量，对应零特征值。正如在式(11-66)之后所讨论的，$\mathbf{a}_j$ 垂直于每个 $\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}}$，因此也垂直于$(\boldsymbol{\mu}_k-\bar{\boldsymbol{\mu}})-(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})=\boldsymbol{\mu}_k-\boldsymbol{\mu}_i$，$i,k=1,2,\cdots,g$。条件 $0=\mathbf{a}_j'(\boldsymbol{\mu}_k-\boldsymbol{\mu}_i)=\mu_{kY_j}-\mu_{iY_j}$ 意味着，$y_j-\mu_{kY_j}=y_j-\mu_{iY_j}$，故 $\sum_{j=s+1}^{p}(y_j-\mu_{iY_j})^2$ 对 $i=1,2,\cdots,g$ 为常数。因此，只有前 s 个判别量 y_j 对分类有用。

现在我们陈述基于前 $r\leqslant s$ 个样本判别量的分类法则。

基于样本判别量的费希尔分类方法

若

$$\sum_{j=1}^{r}(\hat{y}_j-\bar{y}_{kj})^2 = \sum_{j=1}^{r}[\hat{\mathbf{a}}_j'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_k)]^2 \leqslant \sum_{j=1}^{r}[\hat{\mathbf{a}}_j'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_i)]^2 \qquad \text{对所有 } i\neq k \qquad (11\text{-}67)$$

则将 $\mathbf{x}$ 分入 π_k，其中 $\hat{\mathbf{a}}_j$ 由式(11-62)中定义，$\bar{y}_{kj}=\hat{\mathbf{a}}_j'\bar{\mathbf{x}}_k$ 且 $r\leqslant s$。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

当先验概率满足 $p_1=p_2=\cdots=p_g=1/g$ 且 $r=s$ 时，法则(11-67)等价于法则(11-52)，后者根据最大线性判别得分得出。此外，若用 $r<s$ 个判别量进行分类，则对每个总体 π_i 来说，平方距离或得分都要损失 $\sum_{j=r+1}^{p}[\mathbf{a}_j'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_i)]^2$，此处 $\sum_{j=r+1}^{s}[\mathbf{a}_j'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_i)]^2$ 为对分类有用的部分。

例 11.16 （用费希尔判别量将一个新观测值分类）

我们采用例 11.13 中的费希尔判别量

$$\hat{y}_1=\hat{\mathbf{a}}_1'\mathbf{x}=0.386x_1+0.495x_2$$
$$\hat{y}_2=\hat{\mathbf{a}}_2'\mathbf{x}=0.938x_1-0.112x_2$$

根据式(11-67)来对新观测值 $\mathbf{x}_0'=[1,3]$ 进行分类。

将 $\mathbf{x}_0'=[x_{01},x_{02}]=[1,3]$ 代入上述判别量，就有

$$\hat{y}_1=0.386x_{01}+0.495x_{02}=0.386\times1+0.495\times3=1.87$$
$$\hat{y}_2=0.938x_{01}-0.112x_{02}=0.938\times1-0.112\times3=0.60$$

此外，$\bar{y}_{kj}=\hat{\mathbf{a}}_j'\bar{\mathbf{x}}_k$，故(见例 11.13)

$$\bar{y}_{11}=\hat{\mathbf{a}}_1'\bar{\mathbf{x}}_1=[0.386\quad 0.495]\begin{bmatrix}-1\\3\end{bmatrix}=1.10$$

$$\bar{y}_{12}=\hat{\mathbf{a}}_2'\bar{\mathbf{x}}_1=[0.938\quad -0.112]\begin{bmatrix}-1\\3\end{bmatrix}=-1.27$$

类似地有

$$\bar{y}_{21}=\hat{\mathbf{a}}_1'\bar{\mathbf{x}}_2=2.37$$
$$\bar{y}_{22}=\hat{\mathbf{a}}_2'\bar{\mathbf{x}}_2=0.49$$
$$\bar{y}_{31}=\hat{\mathbf{a}}_1'\bar{\mathbf{x}}_3=-0.99$$
$$\bar{y}_{32}=\hat{\mathbf{a}}_2'\bar{\mathbf{x}}_3=0.22$$

最后，必须识别

$$\sum_{j=1}^{2}(\hat{y}_j-\bar{y}_{kj})^2=\sum_{j=1}^{2}[\hat{\mathbf{a}}_j'(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}}_k)]^2$$

对 $k=1,2,3$ 的最小值。利用以上数字得到

$$\sum_{j=1}^{2}(\hat{y}_j-\bar{y}_{1j})^2=(1.87-1.10)^2+(0.60+1.27)^2=4.09$$

$$\sum_{j=1}^{2}(\hat{y}_j-\bar{y}_{2j})^2=(1.87-2.37)^2+(0.60-0.49)^2=0.26$$

$$\sum_{j=1}^{2}(\hat{y}_j-\bar{y}_{3j})^2=(1.87+0.99)^2+(0.60-0.22)^2=8.32$$

由于当 $k=2$ 时得到 $\sum_{j=1}^{2}(\hat{y}_j-\bar{y}_{kj})^2$ 的最小值，我们将 $\mathbf{x}_0$ 分配到总体 π_2。图 11.14 是用分类量 $\hat{y}_i(i=1,2,3)$ 解释这种情况的示意图。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

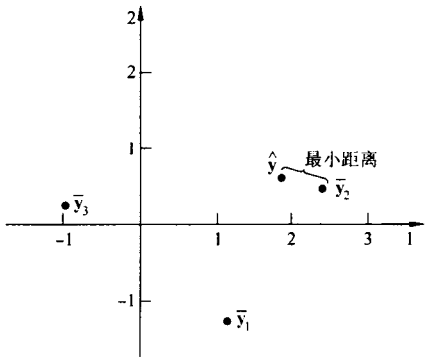


图 11.14　分类平面上的点 $\hat{\mathbf{y}}'=[\hat{y}_1,\hat{y}_2]$，$\bar{\mathbf{y}}_1'=[\bar{y}_{11},\bar{y}_{12}]$，$\bar{\mathbf{y}}_2'=[\bar{y}_{21},\bar{y}_{22}]$和 $\bar{\mathbf{y}}_3'=[\bar{y}_{31},\bar{y}_{32}]$

评注　当两个线性判别函数被用于分类时，观测值被指派给基于二维判别空间中欧氏距离的总体。

到目前为止，我们尚未说明为什么前几个判别量比后几个更重要。判别量的相对重要性由它们对分离总体的数值度量的贡献来确定。考虑分离度量

$$\Delta_S^2=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}}) \tag{11-68}$$

其中

$$\bar{\boldsymbol{\mu}}=\frac{1}{g}\sum_{i=1}^{g}\boldsymbol{\mu}_i$$

且$(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})$为第 i 个总体的均值 $\boldsymbol{\mu}_i$ 到中心 $\bar{\boldsymbol{\mu}}$ 的平方统计距离。可以证明(见练习 11.22)，$\Delta_S^2=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p$(此处 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_s$)为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}$(或 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$)的非零特征值，而 $\lambda_{s+1},\cdots,\lambda_p$ 则为零特征值。

由 Δ_S^2 给出的分离度可以用判别量均值来重新表示。第一个判别量 $Y_1=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}$ 有均值 $\boldsymbol{\mu}_{iY_1}=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\mu}_i$，且从 $\boldsymbol{\mu}_{iY_1}$ 到中心值 $\bar{\boldsymbol{\mu}}_{Y_1}=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\bar{\boldsymbol{\mu}}$ 的平方距离为 λ_1。(见练习 11.22)。由于 Δ_S^2 也可表示为

$$\begin{aligned}\Delta_S^2&=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p\\&=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)'(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)\\&=\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_1}-\bar{\mu}_{Y_1})^2+\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_2}-\bar{\mu}_{Y_2})^2+\cdots+\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_p}-\bar{\mu}_{Y_p})^2\end{aligned}$$

可以得出，第一判别量对分离度量 Δ_S^2 有最大贡献 λ_1。一般说来，第 r 个判别量 $Y_r=\mathbf{e}_r'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}$ 对 Δ_S^2 的贡献为 λ_r。若其余 $s-r$ 个非零特征值之和 $\lambda_{r+1}+\lambda_{r+2}+\cdots+\lambda_s$ 与前 r 个非零特征值之和 $\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_r$ 相比很小，则后 $s-r$ 个判别量 $Y_{r+1},Y_{r+2},\cdots,Y_s$ 可以忽略，而不会显著地影响分离总量①。

对分类法则(11-67)的有效性目前所知不多。由计算机生成的抽样实验提供了某些启

① 关于进一步的最优降维性质见[17]。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

示。拉亨布鲁克[21]总结了一些特定情况下分类法则的表现。为得出式(11-65)中的总体结论，要求有一个公共的协方差矩阵 Σ。若这一点是基本真实的，且样本足够大，则法则(11-67)应该表现相当好。在任何情况下，其性能可通过计算估计的失误率来检验。具体说，应该计算由式(11-57)给出的期望真实失误率的拉亨布鲁克估计值。

11.8 最后的评述

引入性质变量

在本章中，我们的讨论都假定判别或分类变量 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_p$ 有自然的度量单位。也就是说，每个变量原则上可以取任意实数，且这些数值可以被记录。**性质变量**或**类别变量**往往可以成为有用的判别量(分类量)。例如，有或没有某种特性(如红色)可以是一个有价值的分类变量。这种情况经常用如下方法处理：定义一个变量 $\mathbf{X}$，当对象具有该特性时 $\mathbf{X}$ 取值 1，而当对象不具有该特性时 $\mathbf{X}$ 取值 0。于是这个变量在通常的判别和分类方法中就被作为一个被测量的变量来处理。

当同时有连续变量和性质变量时，分类问题几乎没有什么理论。计算机模拟实验(见[20])表明，费希尔的线性判别函数可能表现很差，也可能表现得令人满意。这取决于性质变量与连续变量之间的相关性。正如克扎诺夫斯基(Krzanowski)[20]所指出的："在一个总体中呈弱相关而在另一个总体中呈强相关，或者两个总体之间的相关系数的符号改变，这些都可能是对费希尔线性判别函数不利的条件。"这是一个麻烦的领域，需要进一步研究。

当存在一系列 0－1 型变量时，也许最好考虑另一种分类方法，这种方法称为**逻辑斯蒂回归**(见[15])。对于双总体问题，变量 $\mathbf{x}$ 属于第一组的概率 $p_1(\mathbf{x})$ 直接用模型表示为

$$p_1(\mathbf{x}) = \frac{e^{\alpha+\beta'\mathbf{x}}}{1+e^{\alpha+\beta'\mathbf{x}}}$$

参数 α 需要进行适当调整，以容纳先验概率。但要在模型中加入代价却不太容易。若总体接近正态总体且有相同协方差矩阵，则此种线性分类方法便是最优方法。

分类树

有人提出一种与本章前几节所介绍的方法完全不同的新的分类方法(见[5])。这是一种计算机集成度高的方法，因而只是到了现在才被广泛采用。这个新方法称为**分类与回归树**(CART)，与聚类技术有密切关系(见第 12 章)。

起初，所有对象被视为一个组。根据某个变量的"高"值与"低"值，将这个组分为两个子组。然后再根据另一个变量分别将这两个子组再进行分组。分离过程不断进行，直到到达一个适当的停止点为止。分离变量的值可以是有序类别，也可以是无序类别。正是这一特点使 CART 方法具有一般性。

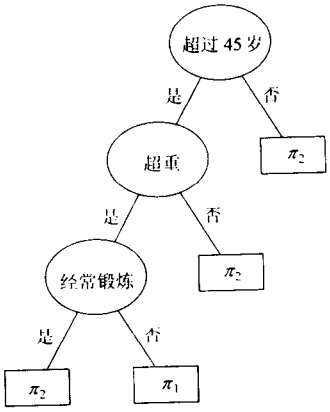
例如，假定人群被分类为

π_1：有心脏病发作倾向者

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

π_2:无心脏病发作倾向者

分类变量为年龄、体重和运动量。在这种情况下,CART 方法可用图 11.15 中的树状图来表示。树的分枝实际上对应样本空间中的分割。区域 R_1 的定义是年龄超过 45 岁,超重,且不经常锻炼的人群,可用于将一个人分类为 π_1,即有心脏病发作倾向者。CART 方法将尝试首先根据年龄,或体重,或运动量来进行分类。



π_1: 有心脏病发作倾向者
π_2: 无心脏病发作倾向者

图 11.15 分类树

CART 方法不依赖总体特征的概率分布,也不依赖特定的最优性准则。在实践中,这种方法需要数百个对象和许多变量。最后得出的树形图非常复杂,必须利用主观判断对这棵树进行"修剪",使之终止于由若干对象构成的一些组,而不是所有单个对象。然后将每个终端组指派给含多数成员的总体,而一个新对象则可根据其最后的组来分类。

为了实施 CART 分析,布雷曼(Breiman),弗里德曼(Friedman),奥尔森(Olsen)和斯通(Stone)[5]开发了一个专用软件。他们的程序中采用了若干个明智的分离法则,通常能产生一棵有很好分离效果的树。

神经网络

神经网络(NN)是一种计算机集成的算法过程,它借助于由相对说比较简单的处理单元(神经元或节)高度连接而成的网络,将输入转化为所需要的输出。神经网络以人脑的神经活动为模型。因此,神经网络的三个基本特点为:基本计算单元(神经元或节),描述各计算单元之间连接状况的网络结构以及用来寻找完成特定工作所需的网络参数(权重)值的训练算法。

神经网络中的计算单元是互相连接的,因为一个单元的输出可以是另一个单元的输入的一部分。每个计算单元利用某种预先规定的函数将输入变换为输出,这种变换在典型的情况下是单调的,但在其他情况下则是任意的。这个变换函数依赖于一些其值必须由输入和输出的训练集来确定的常数(参数)。

网络结构是计算单元的组织形式及允许的连接类型。在统计应用中,计算单元被安排

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

成若干层，而且不同层的结点之间是连接的，但在同一层中的结点不连接。接受原始输入的层称为输入层。最后一层称为输出层。位于输入层和输出层之间的层统称为隐层。图 11.16 是一个多层神经网络的简单示意图。

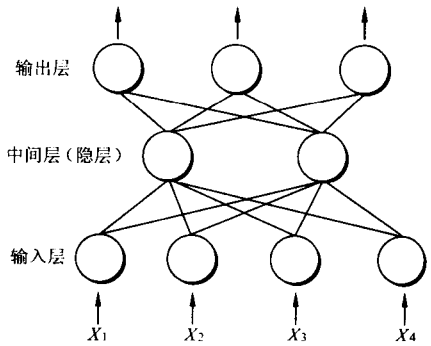


图 11.16　有一个隐层的神经网络

神经网络可用于判别和分类。在这种应用中，输入变量为所测量的总体特性量 X_1，X_2，…，X_p，而输出变量则为指示各组归属的类别变量。最新的实践经验表明，正确构造的神经网络其表现与本章中所讨论的逻辑斯蒂回归和判别函数一样好。文献[26]对神经网络在应用统计学中的运用提供了很好的讨论。

变量选择

在判别分析的某些应用中，可以获得大量变量的数据。穆西阿迪(Mucciardi)和戈斯(Gose)[23]讨论了基于 157 个变量的判别分析①。在这种情况下，显然希望选择一个包含较少变量，同时又能保留与原集合几乎一样多信息的子集，这就是**逐步判别分析法**的目标，几个流行的商用计算机程序具有这种功能。

如果使用了逐步判别分析法(或任何一种变量选择方法)，则在解释其分析结果时必须小心。(见[24]。)不管使用何种准则来选择变量，所得到的变量子集不一定是最优的。例如，根据最小化表观失误率或最大化“判别能力”所得到的子集在用于未来样本时可能效果很差。如果在各变量之间或变量的各线性组合之间存在强相关，则与变量选择方法相联系的问题会变得更严重。

对给定的一个数据集，若目标是分类，则选择一个最优变量子集的问题变得特别麻烦。至少，导出的分类函数应该用一个有效的样本来评估。正如默里(Murray)[24]所建议的那样，将样本分成若干组并对每一组确定“最优”变量子集，也许是较好的想法。对一个给定的变量，它在这些最优子集中出现的次数就是这个变量在未来分类中的价值的量度。

检验组间的差别

在两组数据的分类问题中我们已经指出，除非两个总体分离得很好，否则有效分配大

① 想像一下验证关于 157 元正态性的假定和参数的联合估计问题，或设想一下 157×157 公共协方差阵中的 12 403个参数！

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

概是不可能的，对于两组以上数据，情况也一样。除非总体的均值向量之间有显著差别，否则就不要做分类。假定数据的分布接近多元正态分布，且有共同的协方差阵，此时可用MANOVA（多元方差分析）来检验总体均值向量之间的差别。虽然表观的显著差别并不自动意味着有效的分类，但检验是必要的第一步。如果没有发现（总体均值的）显著差别，则构造分类法则可能只是浪费时间。

图

先进的计算机作图使人们现在可以用目测方法直观地考察二维或三维的多元数据。这样，对任何两个或三个变量的数据在变量空间的分组情况，都可以用肉眼来识别。用这种方法往往能识别出潜在的重要分类变量，并能揭示那些“离群的”或“非典型的”观测值。可视性显示在判别和分类中是重要的辅助工具，因而随着计算机硬件和有关计算机程序变得随手可得，它们的应用也可能不断增加。从视觉考察所获得的信息往往与通过复杂数值分析所得到的一样多。

关于多元正态性的实际考虑

尝试性假定的选择与所得到的分离函数形式之间的相互作用是重要的。考虑图11.17。此图显示两个远非正态密度的肾形轮廓线。在这种情况下，基于正态理论的线性（甚或二次）分数法则与另外一种选择相比就显得不适当了。也就是说，线性判别法在此处不适用。

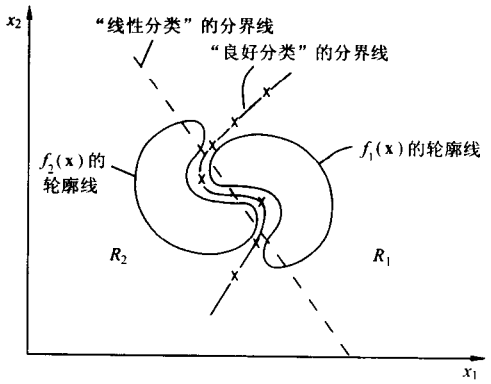


图 11.17　线性判别不适用的两个非正态总体

经常要对有很多变量的对象进行分类，其中有些是“有—无”型或0—1型变量。在这些情形或其他一些变量值域受限制的情形下，多元正态性也许不是一个明智的假定。如我们所知，基于费希尔线性判别量的分类仅当多元正态性假定成立时才是最小ECM或最小TPM意义下的最优分类。当正态性明显不成立时，我们如何解释这些量？

在没有多元正态性的场合，费希尔的线性判别量可以看成是对总样本信息提供了一种近似。前几个判别量本身的正态性可以检验，然后可以用法则(11-67)。由于判别量是大量变量的线性组合，它们往往接近正态变量。当然，必须记住：前几个判别量为原始样本信息的不完全汇总。当根据全部样本信息导出的最优法则表现很好时，基于这个受限制的

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

判别量集合的分类法则也许表现很差。

练　　习

11.1　考虑两个数据集

$$\mathbf{X}_1 = \begin{bmatrix} 3 & 7 \\ 2 & 4 \\ 4 & 7 \end{bmatrix} \text{和} \mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} 6 & 9 \\ 5 & 7 \\ 4 & 8 \end{bmatrix}$$

其中

$$\bar{\mathbf{x}}_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \end{bmatrix}, \bar{\mathbf{x}}_2 = \begin{bmatrix} 5 \\ 8 \end{bmatrix}$$

及

$$\mathbf{S}_p = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

(a) 计算式(11-19)中的线性判别函数。

(b) 用法则(11-18)，在相同先验概率和相同代价下将观测值 $\mathbf{x}_0' = [2 \quad 7]$ 分类到总体 π_1 或总体 π_2。

11.2　(a) 对例 11.1 中的数据，用式(11-19)得到一个线性判别函数。

(b) 利用(a)中得到的函数和式(11-20)，通过将给定观测值分类构造“模糊矩阵”。将你的分类结果与图 11.1 中的结果进行比较，这里的分类域用目测法确定。(见例 11.5。)

(c) 给定(b)中的结果，计算表观失误率(APER)。

(d) 陈述你在使用(a)和(b)中的方法时所根据的假定。

11.3　证明结论 11.1。

提示：将式(11-1)和式(11-2)中所给的 $P(2|1)$ 和 $P(1|2)$ 的积分表达式代入式(11-5)，得到

$$\text{ECM} = c(2|1)p_1\int_{R_2} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} + c(1|2)p_2\int_{R_1} f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}$$

注意 $\Omega = R_1 \cup R_2$，故总概率

$$1 = \int_{\Omega} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{R_1} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} + \int_{R_2} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}$$

可以将 ECM 写成

$$\text{ECM} = c(2|1)p_1\left[1 - \int_{R_1} f_1(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}\right] + c(1|2)p_2\int_{R_2} f_2(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}$$

由于积分的可加性，有

$$\text{ECM} = \int_{R_1} [c(1|2)p_2 f_2(\mathbf{x}) - c(2|1)p_1 f_1(\mathbf{x})]\mathrm{d}\mathbf{x} + c(2|1)p_1$$

现在，p_1，p_2，$c(1|2)$ 和 $c(2|1)$ 皆为非负。此外，$f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$ 对所有 $\mathbf{x}$ 均非负，且在 ECM 中只有这两个量依赖于 $\mathbf{x}$。这样，若 R_1 中只包含满足条件

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$[c(1|2)p_2f_2(\mathbf{x}) - c(2|1)p_1f_1(\mathbf{x})] \leqslant 0$$

的 $\mathbf{x}$ 而不包含使此量大于零的 $\mathbf{x}$，则 ECM 达到最小。

11.4　一名研究人员想确定一种在两个多元总体之间进行判别的方法。他能获得足够多的数据来估计分别与总体 π_1 和 π_2 相联系的密度函数 $f_1(\mathbf{x})$和 $f_2(\mathbf{x})$。设 $c(2|1)=50$（这是将 π_1 中的观测值指定到 π_2 中的代价）及 $c(1|2)=100$。

此外，已知大约有 20%的可能项目（可以记录它们的 $\mathbf{x}$ 测量值）属于 π_2。

(a) 给出将一个新的观测值分入两个总体之一的最小 ECM 法则（一般形式）。

(b) 对一个新项目记录的测量值产生密度函数值 $f_1(\mathbf{x})=0.3$ 和 $f_2(\mathbf{x})=0.5$。根据以上信息，将此新项目分到 π_1 或 π_2。

11.5　证明

$$-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)$$
$$=(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)$$

[见式(11-13)。]

11.6　考虑线性函数 $Y=\mathbf{a}'\mathbf{X}$。当 $\mathbf{X}$ 属于总体 π_1 时，记 $E(\mathbf{X})=\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\mathrm{Cov}(\mathbf{X})=\boldsymbol{\Sigma}$。当 $\mathbf{X}$ 属于总体 π_2 时，记 $E(\mathbf{X})=\boldsymbol{\mu}_2$ 和 $\mathrm{Cov}(\mathbf{X})=\boldsymbol{\Sigma}$。令 $m=\frac{1}{2}(\mu_{1Y}+\mu_{2Y})=\frac{1}{2}(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_1+\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_2)$。给定 $\mathbf{a}'=(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$，证明下列结论：

(a) $E(\mathbf{a}'\mathbf{X}|\pi_1)-m=\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_1-m>0$

(b) $E(\mathbf{a}'\mathbf{X}|\pi_2)-m=\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_2-m<0$

提示：回顾 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是满秩的，因而也是正定的，故 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$存在且正定。

11.7　设对 $|\mathbf{x}|\leqslant 1$，$f_1(\mathbf{x})=\frac{1}{2}(1-|\mathbf{x}|)$对 $-0.5\leqslant x\leqslant 1.5$，$f_2(\mathbf{x})=\frac{1}{2}(1-|\mathbf{x}-0.5|)$。

(a) 对两个密度函数作图。

(b) 当 $p_1=p_2$ 和 $c(1|2)=c(2|1)$时，确定分类域。

(c) 当 $p_1=0.2$ 和 $c(1|2)=c(2|1)$时，确定分类域。

11.8　参看练习 11.7。设 $f_1(\mathbf{x})$不变，但取 $f_2(\mathbf{x})=\frac{1}{4}(2-|\mathbf{x}-0.5|)$，$-1.5\leqslant x\leqslant 2.5$。

(a) 对两个密度函数作图。

(b) 当 $p_1=p_2$ 和 $c(1|2)=c(2|1)$时确定分类域。

11.9　对 $g=2$ 个总体，证明式(11-59)中的比值与下述比值成比例：

$$\frac{(Y\text{ 的均值间的平方距离})}{(Y\text{ 的方差})}=\frac{(\mu_{1Y}-\mu_{2Y})^2}{\sigma_Y^2}=\frac{(\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_1-\mathbf{a}'\boldsymbol{\mu}_2)^2}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}$$
$$=\frac{\mathbf{a}'(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}=\frac{(\mathbf{a}'\boldsymbol{\delta})^2}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}$$

其中 $\boldsymbol{\delta}=(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)$为均值向量之差。该比值是式(11-33)的总体对应量。试证：对任意 $c\neq 0$，该比值通过下面的线性组合达到最大：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{a} = c\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\delta} = c\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$$

提示：注意对 $i=1,2$，有

$(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'=\frac{1}{4}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'$，其中 $\bar{\boldsymbol{\mu}}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)$。

11.10　设 $n_1=11$ 个和 $n_2=12$ 个观测值分别取自两个随机变量 X_1 和 X_2。假定这两个变量服从二元正态分布，且有相同的协方差矩阵，但均值向量 $\boldsymbol{\mu}_1,\boldsymbol{\mu}_2$ 可能有差别。样本均值向量和联合协方差矩阵为

$$\bar{\mathbf{x}}_1=\begin{bmatrix}-1\\-1\end{bmatrix};\qquad \bar{\mathbf{x}}_2=\begin{bmatrix}2\\1\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{S}_p=\begin{bmatrix}7.3 & -1.1\\-1.1 & 4.8\end{bmatrix}$$

(a) 用霍特林二样本 T^2 统计量检验总体均值向量是否有显著差别。取 $\alpha=0.10$。

(b) 构造费希尔(样本)线性判别函数。[见式(11-19)和式(11-35)。]

(c) 将观测值 $\mathbf{x}_0'=[0\quad 1]$分配到总体 π_1 或 π_2。假定有等代价和等先验概率。

11.11　假定一维随机变量 X 具有方差为 4 的正态分布。若 X 来自总体 π_1，则其均值为 10；而当它来自总体 π_2 时，其均值为 14。假定事件 A_1="X 来自 π_1"与事件 A_2="X 来自 π_2"有相同的先验概率，且错分代价 $c(2|1)$与 $c(1|2)$相同(例如 10 美元)。我们决定取一个常数 c(c 值待定)，当 $X\leqslant c$ 时，将 X 分配(分类)到 π_1，而当 $X>c$ 时则将 X 分配到 π_2。记 B_1 为事件"将 X 分配到 π_1"，B_2 为事件"将 X 分配到 π_2"。试对下表所列的各种 c 值给出 $P(B_1|A_2)$，$P(B_2|A_1)$，$P(A_1$ 且 $B_2)$，$P(A_2$ 且 $B_1)$，P(错误分类)，以及期望代价之值。对哪个 c 值期望代价最小？

c	$P(B_1\|A_2)$	$P(B_2\|A_1)$	$P(A_1$ 且 $B_2)$	$P(A_2$ 且 $B_1)$	P(失误)	期望代价
10						
⋮						
14						

最小期望代价值是什么？

11.12　重复练习 11.11，但假定 A_1 和 A_2 的先验概率相等，而 $c(2|1)=5$ 美元，$c(1|2)=15$ 美元。

11.13　重复练习 11.11，但假定先验概率为 $P(A_1)=0.25$，$P(A_2)=0.75$，而错分代价与 11.12 所给的相同。

11.14　考虑例 11.13 所导出的判别函数。用式(11-21)和式(11-22)使 $\hat{\mathbf{a}}$ 正则化。计算对应于两个正则化向量 $\hat{\mathbf{a}}_1^*$ 和 $\hat{\mathbf{a}}_2^*$ 的中点 $\hat{\mathbf{m}}_1^*$ 和 $\hat{\mathbf{m}}_2^*$。对这两种情形将 $\mathbf{x}_0'=[-0.210,-0.044]$用函数 $\hat{y}_0^*=\hat{\mathbf{a}}^{*\prime}\mathbf{x}_0$ 进行分类。所得结果与例 11.3 中在等先验概率下得到的结果是否一致？它们是否应该一致？

11.15　设 $f_1(\mathbf{x})$和 $f_2(\mathbf{x})$为多元正态分布，均值向量分别为 $\boldsymbol{\mu}_1$ 和 $\boldsymbol{\mu}_2$，协方差矩阵分别为 $\boldsymbol{\Sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_2$。试由式(11-6)导出式(11-23)。

11.16　假定 $\mathbf{x}$ 来自以下两个总体之一。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

π_1：正态，均值 $\boldsymbol{\mu}_1$，协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}_1$

π_2：正态，均值 $\boldsymbol{\mu}_2$，协方差阵 $\boldsymbol{\Sigma}_2$

两个密度函数分别记为 $f_1(\mathbf{x})$ 和 $f_2(\mathbf{x})$，给出二次判别量

$$Q = \ln\left[\frac{f_1(\mathbf{x})}{f_2(\mathbf{x})}\right]$$

的表达式。如果 $\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2=\boldsymbol{\Sigma}$，验证：$Q$ 变为

$$(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\mu}_2)$$

11.17　设总体 π_1 和 π_2 如下表所示：

	总体	
	π_1	π_2
分布	正态	正态
均值 $\boldsymbol{\mu}$	$[10,15]'$	$[10,25]'$
方差-协方差 $\boldsymbol{\Sigma}$	$\begin{bmatrix} 18 & 12 \\ 12 & 32 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 20 & -7 \\ -7 & 5 \end{bmatrix}$

假定先验概率相同，错分代价 $c(2|1)=10$ 美元和 $c(1|2)=73.89$ 美元。计算总体 π_1 和 π_2 的后验概率 $P(\pi_1|\mathbf{x})$ 和 $P(\pi_2|\mathbf{x})$，练习 11.16 中的二次判别量 Q 的值，并对下表中的每个 $\mathbf{x}$ 值进行分类。

$\mathbf{x}$	$P(\pi_1\|\mathbf{x})$	$P(\pi_2\|\mathbf{x})$	Q
$[10,15]'$			
$[12,17]'$			
⋮			
$[30,35]'$			

（注意：对每个坐标均用增量 2，共 11 个点）

将下列各项内容画在 x_1,x_2 平面上：

(a) 两个总体的均值。

(b) 对每个总体包含 0.95 概率的最小椭圆域。

(c) 区域 R_1（对总体 π_1）和 $\Omega-R_1=R_2$（对总体 π_2）。

(d) 表中所分类的 11 个点。

11.18　若 $\mathbf{B}$ 定义为 $c(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)'$，$c$ 为常数。验证 $\mathbf{e}=c\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1-\boldsymbol{\mu}_2)$ 是 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}$ 的特征向量，其中 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为一个协方差矩阵。

11.19　(a) 用例 11.6 中所给的原始数据集 $\mathbf{X}_1$ 和 $\mathbf{X}_2$，计算 $\bar{\mathbf{x}}_i,\mathbf{S}_i,i=1,2$，及 $\mathbf{S}_p$，验证该例所给出的这些量的值。

(b) 用(a)中所得的结果计算费希尔线性判别函数，并用它根据法则(11-35)对样本观测值分类。验证例 11.6 中所给出的模糊矩阵是正确的。

(c) 根据观测值 $\mathbf{x}$ 到组均值 $\bar{\mathbf{x}}_1$ 和 $\bar{\mathbf{x}}_2$ 的最小平方距离 $D_i^2(\mathbf{x})$ 对样本观测值进行分类。[见式(11-54)。]

将此结果与(b)中所得结果进行比较，作出评论。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

11.20　矩阵恒等式(见巴特利特[3])

$$\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}=\frac{n-3}{n-2}\left(\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}+\frac{c_k}{1-c_k(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_k)'\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_k)}\right.$$
$$\left.\cdot\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_k)(\mathbf{x}_H-\bar{\mathbf{x}}_k)'\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}\right)$$

其中

$$c_k=\frac{n_k}{(n_k-1)(n-2)}$$

可用来由 $\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}$ 计算 $\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}$。试用例 11.6 中的数据验证这个恒等式。特别是令 $n=n_1+n_2$，$k=1$，以及 $\mathbf{x}_H'=[2,12]$。用全部数据的 $\bar{\mathbf{x}}_1$ 和 $\mathbf{S}_{\mathrm{p}}^{-1}$ 计算 $\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}$，并将所得结果与例 11.6 中的 $\mathbf{S}_{H,\mathrm{p}}^{-1}$ 比较。

11.21　设 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_s>0$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu$ 的 $s\leqslant\min(g-1,p)$ 个非零特征根，且 $\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2,\cdots,\mathbf{e}_s$ 为相应的特征向量(标准化为 $\mathbf{e}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{e}=1$)。试证：能使比值

$$\frac{\mathbf{a}'\mathbf{B}_\mu\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}=\frac{\mathbf{a}'\left[\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\right]\mathbf{a}}{\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}}$$

最大化的系数向量为 $\mathbf{a}_1=\mathbf{e}_1$。组性组合 $\mathbf{a}_1'\mathbf{X}$ 称为**第一判别量**。证明 $\mathbf{a}_2=\mathbf{e}_2$ 在约束 $\mathrm{Cov}(\mathbf{a}_1'\mathbf{X},\mathbf{a}_2'\mathbf{X})=0$ 的条件下使上述比值最大化。线性组合 $\mathbf{a}_2'\mathbf{X}$ 称为**第二判别量**。如此继续，$\mathbf{a}_k=\mathbf{e}_k$ 在约束 $0=\mathrm{Cov}(\mathbf{a}_k'\mathbf{X},\mathbf{a}_i'\mathbf{X})(i<k)$ 的条件下使上述比值最大化。$\mathbf{a}_k'\mathbf{X}$ 称为**第 k 判别量**。还有 $\mathrm{Var}(\mathbf{a}_i'\mathbf{X})=1,i=1,\cdots,s$。[见式(11-62)。]

提示：我们先把这个最大化问题转化为某个已解决的问题。由式(2-20)中的谱分解知 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathbf{P}'\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{P}$，其中 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为对角矩阵，对角元为诸正元素 λ_i。令 $\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}$ 为以 $\sqrt{\lambda_i}$ 为对角元的对角阵。由式(2-22)，对称平方根矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}=\mathbf{P}'\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\mathbf{P}$ 及其逆 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}=\mathbf{P}'\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{P}$ 满足 $\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}=\boldsymbol{\Sigma}$，$\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}=\mathbf{I}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$。然后，令

$$\mathbf{u}=\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{a}$$

故 $\mathbf{u}'\mathbf{u}=\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{a}=\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}$，且 $\mathbf{u}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{u}=\mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{a}=\mathbf{a}'\mathbf{B}_\mu\mathbf{a}$。因此，上述最大化问题简化为使

$$\frac{\mathbf{u}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{u}}{\mathbf{u}'\mathbf{u}}$$

对 $\mathbf{u}$ 最大化的问题。由式(2-51)知这个比值的最大值为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$ 的最大特征值 λ_1。当 $\mathbf{u}=\mathbf{e}_1$(对应 λ_1 的标准化特征向量)时出现此最大值。由于 $\mathbf{e}_1=\mathbf{u}=\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{a}_1$ 或 $\mathbf{a}_1=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_1$，$\mathrm{Var}(\mathbf{a}_1'\mathbf{X})=\mathbf{a}_1'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_1=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_1=\mathbf{e}_1'\mathbf{e}_1=1$。由式(2-52)知，当 $\mathbf{u}=\mathbf{e}_2$(对应于 λ_2 的标准化特征向量)时，$\mathbf{u}\perp\mathbf{e}_1$ 使上述比值最大化。对这个选择我们有 $\mathbf{a}_2=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_2$ 和 $\mathrm{Cov}(\mathbf{a}_2'\mathbf{X},\mathbf{a}_1'\mathbf{X})=\mathbf{a}_2'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_1=\mathbf{e}_2'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_1=\mathbf{e}_2'\mathbf{e}_1=0$(因 $\mathbf{e}_2\perp\mathbf{e}_1$)。类似地，$\mathrm{Var}(\mathbf{a}_2'\mathbf{X})=\mathbf{a}_2'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}_2=\mathbf{e}_2'\mathbf{e}_2=1$。对其余判别量可继续按这种方式进行处理。注意，若 λ 和 $\mathbf{e}$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$ 的特征值和相应的特征向量，则有

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}=\lambda\mathbf{e}$$

将两边同时左乘 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$，得到

$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}=\lambda\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}$ 或 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e})=\lambda(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e})$。这样 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

有相同特征值，但对应的特征向量与 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}=\mathbf{a}$ 成比例。

11.22　证明 $\Delta_s^2=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_s$，其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_s$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{B}_\mu$（或 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$）的非零特征值，$\Delta_s^2$ 由式(11-68)给出。再证明：当只用前 r 个判别量 Y_1，$Y_2,\cdots,Y_r$ 时，所得到的分离量为 $\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_r$。

提示：设 $\mathbf{P}$ 为正交矩阵，其第 i 行 $\mathbf{e}_i'$ 为 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$ 的对应于第 i 个最大特征值的特征向量，$i=1,2,\cdots,p$。考虑

$$\underset{(p\times 1)}{\mathbf{Y}}=\begin{bmatrix}Y_1\\ \vdots\\ Y_s\\ \vdots\\ Y_p\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}\\ \vdots\\ \mathbf{e}_s'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}\\ \vdots\\ \mathbf{e}_p'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}\end{bmatrix}=\mathbf{P}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}$$

现在有　$\boldsymbol{\mu}_{iY}=E(\mathbf{Y}\mid\pi_i)=\mathbf{P}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\mu}_i$ 和 $\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y=\mathbf{P}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\bar{\boldsymbol{\mu}}$，故

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)'(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)&=(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{P}'\mathbf{P}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})\\&=(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})\end{aligned}$$

因此　$\Delta_S^2=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)'(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)$。利用 Y_1 我们有

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_1}-\bar{\mu}_{Y_1})^2&=\sum_{i=1}^{g}\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})(\boldsymbol{\mu}_i-\bar{\boldsymbol{\mu}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_1\\&=\mathbf{e}_1'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_1=\lambda_1\end{aligned}$$

因为 $\mathbf{e}_1$ 有特征值 λ_1。类似地，用 Y_2 可得

$$\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_2}-\bar{\mu}_{Y_2})^2=\mathbf{e}_2'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_2=\lambda_2$$

以及用 Y_p 可得

$$\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_p}-\bar{\mu}_{Y_p})^2=\mathbf{e}_p'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{B}_\mu\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{e}_p=\lambda_p$$

这样

$$\begin{aligned}\Delta_S^2&=\sum_{i=1}^{g}(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)'(\boldsymbol{\mu}_{iY}-\bar{\boldsymbol{\mu}}_Y)\\&=\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_1}-\bar{\mu}_{Y_1})^2+\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_2}-\bar{\mu}_{Y_2})^2+\cdots+\sum_{i=1}^{g}(\mu_{iY_p}-\bar{\mu}_{Y_p})^2\\&=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_s\end{aligned}$$

因为 $\lambda_{s+1}=\cdots=\lambda_p=0$。若只用前 r 个判别量，则它们对 Δ_s^2 的贡献为 $\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_r$。

以下练习需要使用计算机。

11.23　考虑练习 1.14 中的数据。

(a) 对多发性硬化组(MS)和非多发性硬化组(NMS)检查各变量 x_i 的边际分布的正态性(用观测值的正态概率图)。如对正态性有疑问，建议进行适当的变换(使变换后的数据接近正态性)。

(b) 假定 $\boldsymbol{\Sigma}_1=\boldsymbol{\Sigma}_2=\boldsymbol{\Sigma}$。构造费希尔线性判别函数。判别函数中的变量是否都重要？讨

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

论答案。在等先验概率和等错分代价的假定下建立分类法则。

(c) 用(b)中的结果计算表观失误率。若计算手段允许，用拉亨布鲁克的提留方法计算期望真实失误率的估计值。比较两个失误率。

11.24 对破产的企业收集它们在破产前两年的年度财务数据，对财务良好的企业也收集同一时期的数据。数据涉及四个变量，X_1=CF/TD(现金流量/总债务)，X_2=NI/TA(净收入/总资产)，X_3=CA/CL(流动资产/流动债务)，以及 X_4=CA/NS(流动资产/净销售额)。数据列于表 11.4。

表 11.4 破产状况数据

行	$X_1=\frac{CF}{TD}$	$X_2=\frac{NI}{TA}$	$X_3=\frac{CA}{CL}$	$x_4=\frac{CA}{NS}$	总体 $\pi_i, i=1,2$
1	−0.45	−0.41	1.09	0.45	0
2	−0.56	−0.31	1.51	0.16	0
3	0.06	0.02	1.01	0.40	0
4	−0.07	−0.09	1.45	0.26	0
5	−0.10	−0.09	1.56	0.67	0
6	−0.14	−0.07	0.71	0.28	0
7	0.04	0.01	1.50	0.71	0
8	−0.06	−0.06	1.37	0.40	0
9	0.07	−0.01	1.37	0.34	0
10	−0.13	−0.14	1.42	0.44	0
11	−0.23	−0.30	0.33	0.18	0
12	0.07	0.02	1.31	0.25	0
13	0.01	0.00	2.15	0.70	0
14	−0.28	−0.23	1.19	0.66	0
15	0.15	0.05	1.88	0.27	0
16	0.37	0.11	1.99	0.38	0
17	−0.08	−0.08	1.51	0.42	0
18	0.05	0.03	1.68	0.95	0
19	0.01	−0.00	1.26	0.60	0
20	0.12	0.11	1.14	0.17	0
21	−0.28	−0.27	1.27	0.51	0
1	0.51	0.10	2.49	0.54	1
2	0.08	0.02	2.01	0.53	1
3	0.38	0.11	3.27	0.35	1
4	0.19	0.05	2.25	0.33	1
5	0.32	0.07	4.24	0.63	1
6	0.31	0.05	4.45	0.69	1
7	0.12	0.05	2.52	0.69	1
8	−0.02	0.02	2.05	0.35	1
9	0.22	0.08	2.35	0.40	1
10	0.17	0.07	1.80	0.52	1
11	0.15	0.05	2.17	0.55	1

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

行	$X_1=\frac{CF}{TD}$	$X_2=\frac{NI}{TA}$	$X_3=\frac{CA}{CL}$	$x_4=\frac{CA}{NS}$	总体 $\pi_i, i=1,2$
12	−0.10	−0.01	2.50	0.58	1
13	0.14	−0.03	0.46	0.26	1
14	0.14	0.07	2.61	0.52	1
15	0.15	0.06	2.23	0.56	1
16	0.16	0.05	2.31	0.20	1
17	0.29	0.06	1.84	0.38	1
18	0.54	0.11	2.33	0.48	1
19	−0.33	−0.09	3.01	0.47	1
20	0.48	0.09	1.24	0.18	1
21	0.56	0.11	4.29	0.45	1
22	0.20	0.08	1.99	0.30	1
23	0.47	0.14	2.92	0.45	1
24	0.17	0.04	2.45	0.14	1
25	0.58	0.04	5.06	0.13	1

注：$\pi_1=0$：破产企业，$\pi_2=1$：非破产企业。

资料来源：1968，1969，1970，1971，1972，穆迪行业手册(Moody's Industrial Manuals)。

(a) 对每一组数据用不同的符号，对以下各对变量的观察值作平面散布图：(x_1,x_2)，(x_1,x_3)及(x_1,x_4)。是否任何一对变量的数据散布图都显示二元正态性？

(b) 用破产企业的 $n_1=21$ 对(x_1,x_2)观测值及非破产企业的 $n_2=25$ 对(x_1,x_2)观测值分别计算样本均值向量 $\bar{\mathbf{x}}_1$ 和 $\bar{\mathbf{x}}_2$，以及样本协方差矩阵 $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{S}_2$。

(c) 利用(b)中的结果并假定两组随机样本都服从二元正态分布，构造在 $p_1=p_2$ 及 $c(1|2)=c(2|1)$时的分类法则(11-25)。

(d) 对(c)中的分类法则的表现进行评估，评估时利用两种失误率：式(11-30)中的表观失误率(APER)及式(11-32)中估计的期望真实失误率 $\hat{E}$(AER)。

(e) 假定 $p_1=0.05$，$p_2=0.95$ 及 $c(1|2)=c(2|1)$，重复(c)和(d)。这个先验概率假定是否合理？请加以解释。

(f) 用(b)中的结果构造联合协方差矩阵 $\mathbf{S}_p$，并构造式(11-19)中的费希尔线性判别函数。用这个函数对样本观测值进行分类并计算 APER。在这种情况下，费希尔的线性判别函数是否是分类量的一种明智选择？请解释。

(g) 利用观测值对(x_1,x_3)及(x_1,x_4)重复(b)到(e)。是否某些变量作为分类量看来比其他变量更好？请解释。

(h) 对所有四个变量(X_1,X_2,X_3,X_4)重复(b)到(e)。

11.25　约翰逊(Johnson)[18]曾对表 11.4 中的年度财务数据进行了分析，旨在发现在判别分析中有影响的观测值。考虑变量 $X_1=CF/TD$ 和 $X_3=CA/CL$。

(a) 利用变量 X_1 和 X_3 的数据构造费希尔的线性判别函数。用这个函数对样本观测值进行分类并计算 APER。[见式(11-35)和式(11-30)。]在(x_1,x_3)坐标系中对数据和判别线作图。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(b) 约翰逊认为，第 16 行中的破产企业数据与 13 行中的健康企业数据是有影响的多元观察值。用 X_1 和 X_3 的数据，但将第 16 个数据删除，计算费希尔线性判别函数。重复上述计算，但删除第 13 个数据。将两条判别线都画在(a)中得出的数据散布图上，并计算 APER，计算时略去被删除的点。删除这两个多元观测值中的任一个是否会造成差别？(注意，这两个有潜在影响的数据点中的任一个离各自所在的数据群中心都不特别“远”。)

11.26　用表 11.4 中的数据定义一个二值响应变量 Z：对破产企业 $Z=0$，对非破产企业 $Z=1$。令 $X=\mathrm{CA/CL}$，考虑 Z 对 X 的直线回归。虽然二值响应变量并不满足标准的回归模型假定，用一个或多个预测变量的线性函数来预测响应变量仍是合理的。

(a) 用最小二乘法来确定 Z，X_1 数据的拟合直线。将破产企业的拟合值作为[0,1]区间的点作图。对非破产企业重复同样的工作，并将两个图重叠。一个合理的判别法则是：若 Z 变量的拟合值接近 0(即拟合值小于 0.5)，则预测一个企业将破产；类似地，若 Z 变量的拟合值大于 0.5，则预测一个企业是健康的。用这个判决法则对样本企业进行分类。计算 APER。

(b) 用所有四个变量 $X_1,\cdots,X_4$(作为预测变量)对 Z 重复以上的线性回归及其他有关的计算。APER 是否有什么改变？第 16 个观测点(破产企业)与第 13 个观测点(非破产企业)是否还能看成是有影响的？

11.27　表 11.5 中的数据包含三种鸢尾的 X_2＝萼片宽度与 X_4＝花瓣宽度的观测值。对每种鸢尾有 $n_1=n_2=n_3=50$ 个观测值。

表 11.5　鸢尾数据

π_1				π_2				π_3			
萼片长度 x_1	萼片宽度 x_2	花瓣长度 x_3	花瓣宽度 x_4	萼片长度 x_1	萼片宽度 x_2	花瓣长度 x_3	花瓣宽度 x_4	萼片长度 x_1	萼片宽度 x_2	花瓣长度 x_3	花瓣宽度 x_4
5.1	3.5	1.4	0.2	7.0	3.2	4.7	1.4	6.3	3.3	6.0	2.5
4.9	3.0	1.4	0.2	6.4	3.2	4.5	1.5	5.8	2.7	5.1	1.9
4.7	3.2	1.3	0.2	6.9	3.1	4.9	1.5	7.1	3.0	5.9	2.1
4.6	3.1	1.5	0.2	5.5	2.3	4.0	1.3	6.3	2.9	5.6	1.8
5.0	3.6	1.4	0.2	6.5	2.8	4.6	1.5	6.5	3.0	5.8	2.2
5.4	3.9	1.7	0.4	5.7	2.8	4.5	1.3	7.6	3.0	6.6	2.1
4.6	3.4	1.4	0.3	6.3	3.3	4.7	1.6	4.9	2.5	4.5	1.7
5.0	3.4	1.5	0.2	4.9	2.4	3.3	1.0	7.3	2.9	6.3	1.8
4.4	2.9	1.4	0.2	6.6	2.9	4.6	1.3	6.7	2.5	5.8	1.8
4.9	3.1	1.5	0.1	5.2	2.7	3.9	1.4	7.2	3.6	6.1	2.5
5.4	3.7	1.5	0.2	5.0	2.0	3.5	1.0	6.5	3.2	5.1	2.0
4.8	3.4	1.6	0.2	5.9	3.0	4.2	1.5	6.4	2.7	5.3	1.9
4.8	3.0	1.4	0.1	6.0	2.2	4.0	1.0	6.8	3.0	5.5	2.1
4.3	3.0	1.1	0.1	6.1	2.9	4.7	1.4	5.7	2.5	5.0	2.0
5.8	4.0	1.2	0.2	5.6	2.9	3.6	1.3	5.8	2.8	5.1	2.4
5.7	4.4	1.5	0.4	6.7	3.1	4.4	1.4	6.4	3.2	5.3	2.3
5.4	3.9	1.3	0.4	5.6	3.0	4.5	1.5	6.5	3.0	5.5	1.8

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

π_1				π_2				π_3			
萼片长度 x_1	萼片宽度 x_2	花瓣长度 x_3	花瓣宽度 x_4	萼片长度 x_1	萼片宽度 x_2	花瓣长度 x_3	花瓣宽度 x_4	萼片长度 x_1	萼片宽度 x_2	花瓣长度 x_3	花瓣宽度 x_4
5.1	3.5	1.4	0.3	5.8	2.7	4.1	1.0	7.7	3.8	6.7	2.2
5.7	3.8	1.7	0.3	6.2	2.2	4.5	1.5	7.7	2.6	6.9	2.3
5.1	3.8	1.5	0.3	5.6	2.5	3.9	1.1	6.0	2.2	5.0	1.5
5.4	3.4	1.7	0.2	5.9	3.2	4.8	1.8	6.9	3.2	5.7	2.3
5.1	3.7	1.5	0.4	6.1	2.8	4.0	1.3	5.6	2.8	4.9	2.0
4.6	3.6	1.0	0.2	6.3	2.5	4.9	1.5	7.7	2.8	6.7	2.0
5.1	3.3	1.7	0.5	6.1	2.8	4.7	1.2	6.3	2.7	4.9	1.8
4.8	3.4	1.9	0.2	6.4	2.9	4.3	1.3	6.7	3.3	5.7	2.1
5.0	3.0	1.6	0.2	6.6	3.0	4.4	1.4	7.2	3.2	6.0	1.8
5.0	3.4	1.6	0.4	6.8	2.8	4.8	1.4	6.2	2.8	4.8	1.8
5.2	3.5	1.5	0.2	6.7	3.0	5.0	1.7	6.1	3.0	4.9	1.8
5.2	3.4	1.4	0.2	6.0	2.9	4.5	1.5	6.4	2.8	5.6	2.1
4.7	3.2	1.6	0.2	5.7	2.6	3.5	1.0	7.2	3.0	5.8	1.6
4.8	3.1	1.6	0.2	5.5	2.4	3.8	1.1	7.4	2.8	6.1	1.9
5.4	3.4	1.5	0.4	5.5	2.4	3.7	1.0	7.9	3.8	6.4	2.0
5.2	4.1	1.5	0.1	5.8	2.7	3.9	1.2	6.4	2.8	5.6	2.2
5.5	4.2	1.4	0.2	6.0	2.7	5.1	1.6	6.3	2.8	5.1	1.5
4.9	3.1	1.5	0.2	5.4	3.0	4.5	1.5	6.1	2.6	5.6	1.4
5.0	3.2	1.2	0.2	6.0	3.4	4.5	1.6	7.7	3.0	6.1	2.3
5.5	3.5	1.3	0.2	6.7	3.1	4.7	1.5	6.3	3.4	5.6	2.4
4.9	3.6	1.4	0.1	6.3	2.3	4.4	1.3	6.4	3.1	5.5	1.8
4.4	3.0	1.3	0.2	5.6	3.0	4.1	1.3	6.0	3.0	4.8	1.8
5.1	3.4	1.5	0.2	5.5	2.5	4.0	1.3	6.9	3.1	5.4	2.1
5.0	3.5	1.3	0.3	5.5	2.6	4.4	1.2	6.7	3.1	5.6	2.4
4.5	2.3	1.3	0.3	6.1	3.0	4.6	1.4	6.9	3.1	5.1	2.3
4.4	3.2	1.3	0.2	5.8	2.6	4.0	1.2	5.8	2.7	5.1	1.9
5.0	3.5	1.6	0.6	5.0	2.3	3.3	1.0	6.8	3.2	5.9	2.3
5.1	3.8	1.9	0.4	5.6	2.7	4.2	1.3	6.7	3.3	5.7	2.5
4.8	3.0	1.4	0.3	5.7	3.0	4.2	1.2	6.7	3.0	5.2	2.3
5.1	3.8	1.6	0.2	5.7	2.9	4.2	1.3	6.3	2.5	5.0	1.9
4.6	3.2	1.4	0.2	6.2	2.9	4.3	1.3	6.5	3.0	5.2	2.0
5.3	3.7	1.5	0.2	5.1	2.5	3.0	1.1	6.2	3.4	5.4	2.3
5.0	3.3	1.4	0.2	5.7	2.8	4.1	1.3	5.9	3.0	5.1	1.8

资料来源：Anderson[1]。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(a) 在(x_2,x_4)变量空间对数据作图。这三组观测数据是否表现为二元正态分布？

(b) 假定样本来自有相同协方差矩阵的二元正态总体。检验假设 $H_0:\mu_1=\mu_2=\mu_3$，H_1：至少有一个 μ_i 与其他均值不同，显著性水平取 $\alpha=0.05$。在这种情况下，关于公共协方差矩阵的假定是否合理？请解释。

(c) 假定总体服从二元正态分布，构造由式(11-47)给出的二次判别得分 $\hat{d}_i^Q(\mathbf{x})$，假定 $p_1=p_2=p_3=1/3$。用法则(11-48)将 $\mathbf{x}_0'=[3.5\quad 1.75]$分类到总体 π_1,π_2 或 π_3。

(d) 假定协方差矩阵 $\mathbf{\Sigma}_i$ 对三个二元正态总体均相同。构造由式(11-51)所给出的线性判别得分 $\hat{d}_i(\mathbf{x})$，并根据式(11-52)将 $\mathbf{x}_0'=[3.5,1.75]$分类到 π_1,π_2 或 π_3。取 $p_1=p_2=p_3=1/3$。将结果与(c)中结果比较。你倾向于哪种方法？请解释。

(e) 假定三个总体均为二元正态总体，有相同的协方差阵，且 $p_1=p_2=p_3=1/3$。用法则(11-56)将 $\mathbf{x}_0'=[3.5,1.75]$分配到 π_1,π_2 或 π_3。将结果与(d)的结果比较。将由法则(11-56)中的 $\hat{d}_{ki}(\mathbf{x}_0)$所决定的分类域 $\hat{R}_1,\hat{R}_2$ 和 $\hat{R}_3$ 画在(a)中所作的图上。

(f) 用(d)中得出的线性判别函数将样本观测值分类。计算 APER 及 $\hat{E}$(AER)。(为计算后者你需要用拉亨布鲁克的提留方法。[见式(11-57)。])

11.28　达罗赫和摩西曼[6]认为，表 11.5 中所列的三种鸢蕖可以只根据“形状”或与标度无关的信息来判别。令 $Y_1=X_1/X_2$ 为萼片形状，而 $Y_2=X_3/X_4$ 为花瓣形状。

(a) 将数据在$(\log Y_1,\log Y_2)$变量空间作散布图。三组观测数据是否表现为二元正态分布？

(b) 假定总体服从二元正态分布具有相同的协方差矩阵，再假定 $p_1=p_2=p_3=1/3$，构造由式(11-51)所给的线性判别得分 $\hat{d}_i(\mathbf{x})$。分三种情况：同时用 $\log Y_1$ 和 $\log Y_2$，分别用其中之一。计算 APER。

(c) 用(b)中的线性判别函数计算期望 AER 的提留估计值，将结果填入下表。

变量	错分率
$\log Y_1$	
$\log Y_2$	
$\log Y_1,\log Y_2$	

将上面的错分率与例 11.12 中得到的结果进行比较。是否关于形状的信息可以单独作为区分这三种鸢蕖的有效判别量？

(d) 比较(b)和(c)中相应的失误率。给定(a)中的散布图，你是否预期这些失误率会很不相同？请解释。

11.29　例 11.11 中所提到的 GPA 和 GMAT 数据列于表 11.6。

(a) 用这些数据计算 $\bar{\mathbf{x}}_1,\bar{\mathbf{x}}_2,\bar{\mathbf{x}}_3,\bar{\mathbf{x}}$ 及 $\mathbf{S}_p$，并根据这些量验证例 11.11 所给的结果。

(b) 计算 $\mathbf{W}^{-1}$和 $\mathbf{B}$，以及 $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ 的特征值和特征向量。使用由这些特征向量所导出的线性判别量将新的观测值 $\mathbf{x}_0'=[3.21,497]$分入下列总体之一：π_1：接收；π_2：不接收；π_3：边缘。这个分类是否与例 11.11 中的结果一致？是否应该一致？请解释。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 11.6　商学院研究生院的录取数据

π_1:接收			π_2:不接收			π_3:边缘		
报名号	GPA (x_1)	GMAT (x_2)	报名号	GPA (x_1)	GMAT (x_2)	报名号	GPA (x_1)	GMAT (x_2)
1	2.96	596	32	2.54	446	60	2.86	494
2	3.14	473	33	2.43	425	61	2.85	496
3	3.22	482	34	2.20	474	62	3.14	419
4	3.29	527	35	2.36	531	63	3.28	371
5	3.69	505	36	2.57	542	64	2.89	447
6	3.46	693	37	2.35	406	65	3.15	313
7	3.03	626	38	2.51	412	66	3.50	402
8	3.19	663	39	2.51	458	67	2.89	485
9	3.63	447	40	2.36	399	68	2.80	444
10	3.59	588	41	2.36	482	69	3.13	416
11	3.30	563	42	2.66	420	70	3.01	471
12	3.40	553	43	2.68	414	71	2.79	490
13	3.50	572	44	2.48	533	72	2.89	431
14	3.78	591	45	2.46	509	73	2.91	446
15	3.44	692	46	2.63	504	74	2.75	546
16	3.48	528	47	2.44	336	75	2.73	467
17	3.47	552	48	2.13	408	76	3.12	463
18	3.35	520	49	2.41	469	77	3.08	440
19	3.39	543	50	2.55	538	78	3.03	419
20	3.28	523	51	2.31	505	79	3.00	509
21	3.21	530	52	2.41	489	80	3.03	438
22	3.58	564	53	2.19	411	81	3.05	399
23	3.33	565	54	2.35	321	82	2.85	483
24	3.40	431	55	2.60	394	83	3.01	453
25	3.38	605	56	2.55	528	84	3.03	414
26	3.26	664	57	2.72	399	85	3.04	446
27	3.60	609	58	2.85	381			
28	3.37	559	59	2.90	384			
29	3.80	521						
30	3.76	646						
31	3.24	467						

11.30　格里尔德和兰茨[12]对三个砂岩区的原油样本作了化学分析。这三个地区分别记为 π_1,π_2 和 π_3。化学分析的结果是得到样本中的三种痕量元素及两种烃类化合物的含量：

X_1=钒(灰分中百分比)

X_2=铁(灰分中百分比)

X_3=铍(灰分中百分比)

X_4=饱和烃(面积百分比)

X_5=芳香烃(面积百分比)

得到的数据列于表 11.7。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(a) 假定有正态性，试得出估计的最小 TPM 法则，对正态性假定的适当性作评述。

(b) 用拉亨布鲁克的提留方法确定 E(AER)的估计值。同时给出模糊矩阵。

(c) 考虑能将数据转化到具有正态性的各种变换(见例 11.14)，重复(a)和(b)。

表 11.7 原油数据

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
π_1	3.9	51.0	0.20	7.06	12.19
	2.7	49.0	0.07	7.14	12.23
	2.8	36.0	0.30	7.00	11.30
	3.1	45.0	0.08	7.20	13.01
	3.5	46.0	0.10	7.81	12.63
	3.9	43.0	0.07	6.25	10.42
	2.7	35.0	0.00	5.11	9.00
π_2	5.0	47.0	0.07	7.06	6.10
	3.4	32.0	0.20	5.82	4.69
	1.2	12.0	0.00	5.54	3.15
	8.4	17.0	0.07	6.31	4.55
	4.2	36.0	0.50	9.25	4.95
	4.2	35.0	0.50	5.69	2.22
	3.9	41.0	0.10	5.63	2.94
	3.9	36.0	0.07	6.19	2.27
	7.3	32.0	0.30	8.02	12.92
	4.4	46.0	0.07	7.54	5.76
	3.0	30.0	0.00	5.12	10.77
π_3	6.3	13.0	0.50	4.24	8.27
	1.7	5.6	1.00	5.69	4.64
	7.3	24.0	0.00	4.34	2.99
	7.8	18.0	0.50	3.92	6.09
	7.8	25.0	0.70	5.39	6.20
	7.8	26.0	1.00	5.02	2.50
	9.5	17.0	0.05	3.52	5.71
	7.7	14.0	0.30	4.65	8.63
	11.0	20.0	0.50	4.27	8.40
	8.0	14.0	0.30	4.32	7.87
	8.4	18.0	0.20	4.38	7.98
	10.0	18.0	0.10	3.06	7.67
	7.3	15.0	0.05	3.76	6.84
	9.5	22.0	0.30	3.98	5.02
	8.4	15.0	0.20	5.02	10.12
	8.4	17.0	0.20	4.42	8.25
	9.5	25.0	0.50	4.44	5.95
	7.2	22.0	1.00	4.70	3.49
	4.0	12.0	0.50	5.71	6.32

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
π_3	6.7	52.0	0.50	4.80	3.20
	9.0	27.0	0.30	3.69	3.30
	7.8	29.0	1.50	6.72	5.75
	4.5	41.0	0.50	3.33	2.27
	6.2	34.0	0.70	7.56	6.93
	5.6	20.0	0.50	5.07	6.70
	9.0	17.0	0.20	4.39	8.33
	8.4	20.0	0.10	3.74	3.77
	9.5	19.0	0.50	3.72	7.37
	9.0	20.0	0.50	5.97	11.17
	6.2	16.0	0.05	4.23	4.18
	7.3	20.0	0.50	4.39	3.50
	3.6	15.0	0.70	7.00	4.82
	6.2	34.0	0.07	4.84	2.37
	7.3	22.0	0.00	4.13	2.70
	4.1	29.0	0.70	5.78	7.76
	5.4	29.0	0.20	4.64	2.65
	5.0	34.0	0.70	4.21	6.50
	6.2	27.0	0.30	3.97	2.97

11.31　参考表 11.2 中的鲑鱼数据。

(a) 对两组鲑鱼的二元数据作图。这些数据点的大小和方向是否大致相同？对阿拉斯加和加拿大鲑鱼数据，二元正态分布与等协方差矩阵是否是可以接受的总体模型？

(b) 对于等先验概率和等代价条件下的两个正态总体，用线性判别函数构造判别得分的点图。年轮直径指标是否将两个总体分离得很好？请解释。

(c) 分别对雄性和雌性鱼重复例 11.7 中的分析。判别两类雄鱼是否比判别两类雌鱼容易些？性别是否可以作为一个有用的判别量？

11.32　表 11.8 所列数据与例 11.3 中所用的 A 型血友病基因携带者数据类似。(见[14]。)利用这些数据：

(a) 对两个组检查二元正态性假定。

(b) 假定等先验概率，求样本线性判别函数，并用提留方法估计失误率。

表 11.8　血友病数据

非携带者(π_1)			必然携带者(π_2)		
组	$\log_{10}$(AHF 活性)	$\log_{10}$(AHF 抗原)	组	$\log_{10}$(AHF 活性)	$\log_{10}$(AHF 抗原)
1	−0.0056	−0.1657	2	−0.3478	0.1151
1	−0.1698	−0.1585	2	−0.3618	−0.2008
1	−0.3469	−0.1879	2	−0.4986	−0.0860
1	−0.0894	0.0064	2	−0.5015	−0.2984

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

非携带者(π_1)			必然携带者(π_2)		
组	$\log_{10}$(AHF 活性)	$\log_{10}$(AHF 抗原)	组	$\log_{10}$(AHF 活性)	$\log_{10}$(AHF 抗原)
1	−0.1679	0.0713	2	−0.1326	0.0097
1	−0.0836	0.0106	2	−0.6911	−0.3390
1	−0.1979	−0.0005	2	−0.3608	0.1237
1	−0.0762	0.0392	2	−0.4535	−0.1682
1	−0.1913	−0.2123	2	−0.3479	−0.1721
1	−0.1092	−0.1190	2	−0.3539	0.0722
1	−0.5268	−0.4773	2	−0.4719	−0.1079
1	−0.0842	0.0248	2	−0.3610	−0.0399
1	−0.0225	−0.0580	2	−0.3226	0.1670
1	0.0084	0.0782	2	−0.4319	−0.0687
1	−0.1827	−0.1138	2	−0.2734	−0.0020
1	0.1237	0.2140	2	−0.5573	0.0548
1	−0.4702	−0.3099	2	−0.3755	−0.1865
1	−0.1519	−0.0686	2	−0.4950	−0.0153
1	0.0006	−0.1153	2	−0.5107	−0.2483
1	−0.2015	−0.0498	2	−0.1652	0.2132
1	−0.1932	−0.2293	2	−0.2447	−0.0407
1	0.1507	0.0933	2	−0.4232	−0.0998
1	−0.1259	−0.0669	2	−0.2375	0.2876
1	−0.1551	−0.1232	2	−0.2205	0.0046
1	−0.1952	−0.1007	2	−0.2154	−0.0219
1	0.0291	0.0442	2	−0.3447	0.0097
1	−0.2228	−0.1710	2	−0.2540	−0.0573
1	−0.0997	−0.0733	2	−0.3778	−0.2682
1	−0.1972	−0.0607	2	−0.4046	−0.1162
1	−0.0867	−0.0560	2	−0.0639	0.1569
			2	−0.3351	−0.1368
			2	−0.0149	0.1539
			2	−0.0312	0.1400
			2	−0.1740	−0.0776
			2	−0.1416	0.1642
			2	−0.1508	0.1137
			2	−0.0964	0.0531
			2	−0.2642	0.0867
			2	−0.0234	0.0804
			2	−0.3352	0.0875
			2	−0.1878	0.2510
			2	−0.1744	0.1892
			2	−0.4055	−0.2418
			2	−0.2444	0.1614
			2	−0.4784	0.0282

资料来源:见[14]

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(c) 将下面的 10 个新事例用(b)中得到的判别函数进行分类。

事例	$\log_{10}$(AHF 活性)	$\log_{10}$(AHF 抗原)
1	−0.112	−0.279
2	−0.059	−0.068
3	0.064	0.012
4	−0.043	−0.052
5	−0.050	−0.098
6	−0.094	−0.113
7	−0.123	−0.143
8	−0.011	−0.037
9	−0.210	−0.090
10	−0.126	−0.019

(d) 假定必然携带者(组 2)的先验概率为 1/4,而非携带者(组 1)的先验概率为 3/4,重复(a)～(c)。

11.33　考虑表 1.8 中的公牛数据。

(a) 用变量 YrHgt,FtFrBody,PrctFFB,Frame,BkFat,SaleHt 和 SaleWt 计算费希尔线性判别量,并将公牛分类为 Angus,Hereford 或 Simental。用提留方法计算 E(AER)的估计值。一头新的公牛有以下变量值:YrHgt=50,FtFrBody=1000,PrcFFB=73,Frame=7,BkFat=0.17,SaleHt=54,及 SaleWt=1525。将这头牛分入三类之一。将判别得分制成二维判别空间中的点图,为便于识别,用不同的符号表示不同种群的公牛。

(b) 是否可以找到七个原始变量的一个子集,用它来作判别时效果差不多与用全部变量一样好?对各种可能的子集作判别并计算估计的 E(AER),以找到这样一个子集。

11.34　表 11.9 列出由三个美国制造商所生产的早餐方便粥的数据。这三家厂商是:通用牛奶(G),克罗格(K)和夸克(Q)。假定数据服从正态分布,有相同的协方差阵,相同先验概率及相同错分代价。将早餐方便粥的品牌按厂商分类。用提留方法计算估计的 E(AER)。解释判别函数的系数。是否有这种可能,某个厂商的产品比其他厂商的产品更"有营养"(高蛋白,低脂肪,高纤维,低糖,等等)。将方便粥产品制成二维判别空间中的点图,用不同的符号代表不同的厂商。

表 11.9　方便粥品牌数据

品　牌	厂商	卡路里	蛋白质	脂肪	钠	纤维	碳水化合物	糖	钾	组
1 Apple_Cinnamon_Cheerios	G	110	2	2	180	1.5	10.5	10	70	1
2 Cheerios	G	110	6	2	290	2.0	17.0	1	105	1
3 Cocoa_Puffs	G	110	1	1	180	0.0	12.0	13	55	1
4 Count_Chocula	G	110	1	1	180	0.0	12.0	13	65	1
5 Golden_Grahams	G	110	1	1	280	0.0	15.0	9	45	1
6 Honey_Nut_Cheerios	G	110	3	1	250	1.5	11.5	10	90	1
7 Kix	G	110	2	1	260	0.0	21.0	3	40	1
8 Lucky_Charms	G	110	2	1	180	0.0	12.0	12	55	1

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

续表

品　牌	厂商	卡路里	蛋白质	脂肪	钠	纤维	碳水化合物	糖	钾	组
9 Multi_Grain_Cheerios	G	100	2	1	220	2.0	15.0	6	90	1
10 Oatmeal_Raisin_Crisp	G	130	3	2	170	1.5	13.5	10	120	1
11 Raisin_Nut_Bran	G	100	3	2	140	2.5	10.5	8	140	1
12 Total_Corn_Flakes	G	110	2	1	200	0.0	21.0	3	35	1
13 Total_Raisin_Bran	G	140	3	1	190	4.0	15.0	14	230	1
14 Total_Whole_Grain	G	100	3	1	200	3.0	16.0	3	110	1
15 Trix	G	110	1	1	140	0.0	13.0	12	25	1
16 Wheaties	G	100	3	1	200	3.0	17.0	3	110	1
17 Wheaties_Honey_Gold	G	110	2	1	200	1.0	16.0	8	60	1
18 All_Bran	K	70	4	1	260	9.0	7.0	5	320	2
19 Apple_Jacks	K	110	2	0	125	1.0	11.0	14	30	2
20 Corn_Flakes	K	100	2	0	290	1.0	21.0	2	35	2
21 Corn_Pops	K	110	1	0	90	1.0	13.0	12	20	2
22 Cracklin'_Oat_Bran	K	110	3	3	140	4.0	10.0	7	160	2
23 Crispix	K	110	2	0	220	1.0	21.0	3	30	2
24 Froot_Loops	K	110	2	1	125	1.0	11.0	13	30	2
25 Frosted_Flakes	K	110	1	0	200	1.0	14.0	11	25	2
26 Frosted_Mini_Wheats	K	100	3	0	0	3.0	14.0	7	100	2
27 Fruitful_Bran	K	120	3	0	240	5.0	14.0	12	190	2
28 Just_Right_Crunchy_Nuggets	K	110	2	1	170	1.0	17.0	6	60	2
29 Mueslix_Crispy_Blend	K	160	3	2	150	3.0	17.0	13	160	2
30 Nut&Honey_Crunch	K	120	2	1	190	0.0	15.0	9	40	2
31 Nutri-grain_Almond-Raisin	K	140	3	2	220	3.0	21.0	7	130	2
32 Nutri-grain_Wheat	K	90	3	0	170	3.0	18.0	2	90	2
33 Product_19	K	100	3	0	320	1.0	20.0	3	45	2
34 Raisin Bran	K	120	3	1	210	5.0	14.0	12	240	2
35 Rice_Krispies	K	110	2	0	290	0.0	22.0	3	35	2
36 Smacks	K	110	2	1	70	1.0	9.0	15	40	2
37 Special_K	K	110	6	0	230	1.0	16.0	3	55	2
38 Cap'n'Crunch	Q	120	1	2	220	0.0	12.0	12	35	3
39 Honey_Graham_Ohs	Q	120	1	2	220	1.0	12.0	11	45	3
40 Life	Q	100	4	2	150	2.0	12.0	6	95	3
41 Puffed_Rice	Q	50	1	0	0	0.0	13.0	0	15	3
42 Puffed_Wheat	Q	50	2	0	0	1.0	10.0	1	50	3
43 Quaker_Oatmeal	Q	100	5	2	0	2.7	1.0	1	110	3

资料来源:数据经 Chad Dacus 许可使用。

参 考 文 献

1. Anderson, E. "The Irises of the Gaspé Peninsula." *Bulletin of the American Iris Society*, 59(1939),

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

2～5.

2. Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Methods* (2d ed.). New York: John Wiley, 1984.
3. Bartlett, M. S. "An Inverse Matrix Adjustment Arising in Discriminant Analysis." *Annals of Mathematical Statistics*, 22(1951),107～111.
4. Bouma, B. N., et al. "Evaluation of the Detection Rate of Hemophilia Carriers." *Statistical Methods for Clinical Decision Making*, 7, no. 2(1975),339～350.
5. Breiman, L., J. Friedman, R. Olshen, and C. Stone. *Classification and Regression Trees.* Belmont, CA: Wadsworth, Inc., 1984.
6. Darroch, J. N., and J. E. Mosimann. "Canonical and Principal Components of Shape." *Biometrika*, 72, no. 1(1985),241～252.
7. Eisenbeis, R. A. "Pitfalls in the Application of Discriminant Analysis in Business, Finance and Economics." Journal *of Finance*, 32, no. 3(1977),875～900.
8. Fisher, R. A. "The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems." *Annals of Eugenics*, 7 (1936),179～188.
9. Fisher, R. A. "The Statistical Utilization of Multiple Measurements." *Annals of Eugenics*, 8(1938), 376～386.
10. Ganesalingam S. "Classification and Mixture Approaches to Clustering via Maximum Likelihood." *Applied Statistics*, 38,no. 3(1989),455～466.
11. Geisser, S. "Discrimination, Allocatory and Separatory, Linear Aspects." In *Classification and Clustering*, edited by J. Van Ryzin, pp. 301～330. New York: Academic Press, 1977.
12. Gerrild, P. M., and R. J. Lantz. "Chemical Analysis of 75 Crude Oil Samples from Pliocene Sand Units, Elk Hills Oil Field, California." *U. S. Geological Survey Open-File Report*, 1969.
13. Gnanadesikan, R. *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations*, New York: John Wiley, 1977.
14. Habbema, J. D. F., J. Hermans, and K. Van Den Broek. "A Stepwise Discriminant Analysis Program Using Density Estimation." In *Compstat* 1974, *Proc. Computational Statistics*, pp. 101～110. Vienna: Physica, 1974.
15. Hand, D. J. *Discrimination and Classification*, New York: John Wiley, 1981.
16. Hills, M. "Allocation Rules and Their Error Rates." *Journal of the Royal Statistical Society* (*B*), 28(1966)1～31.
17. Hudlet, R., and R. A. Johnson. "Linear Discrimination and Some Further Results on Best Lower Dimensional Representations." In *Classification and Clustering*, edited by J. Van Ryzin, pp. 371～394. New York: Academic Press,1977.
18. Johnson, W. "The Detection of Influential Observations for Allocation, Separation, and the Determination of Probabilities in a Bayesian Framework." *Journal of Business and Economic Statistics*, 5, no. 3(1987),369～381.
19. Kendall, M. G. *Multivariate Analysis.* New York: Hafner Press,1975.
20. Krzanowski, W. J. "The Performance of Fisher's Linear Discriminant Function under Non-Optimal Conditions." *Technometrics*, 19, no. 2(1977),191～200.
21. Lachenbruch, P. A. *Discriminant Analysis.* New York: Hafner Press,1975.
22. Lachenbruch, P. A., and M. R. Mickey. "Estimation of Error Rates in Discriminant Analysis."

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

Technometrics, 10, no. 1(1968),1～11.

23. Mucciardi, A. N. , and E. E. Gose. "A Comparison of Seven Techniques for Choosing Subsets of Pattern Recognition Properties." *IEEE Trans. Computers*, C20(1971),1023～1031.
24. Murray, G. D. "A Cautionary Note on Selection of Variables in Discriminant Analysis." *Applied Statistics*, 26, no. 3(1977),246～250.
25. Rencher, A. C. "Interpretation of Canonical Discriminant Functions, Canonical Variates and Principal Components." *The American Statistician*, 46(1992),217～225.
26. Stern, H. S. "Neural Networks in Applied Statistics." *Technometrics*, 38,(1996),205～214.
27. Wald, A. "On a Statistical Problem Arising in the Classification of an Individual into One of Two Groups." *Annals of Mathematical Statistics*, 15(1944),145～162.
28. Welch, B. L. "Note on Discriminant Functions." *Biometrika*, 31(1939),218～220.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

12.1 引言

初等的、探索性的方法对理解多元关系的复杂性质往往很有用。例如，我们在本书中自始至终一直强调数据图的价值。在本章中，我们将补充一些建立在距离度量基础上的数据表示方法，这些方法有点像数据的逐步分组法则(算法)。在数据中寻找某种“自然的”分组结构是一项重要的探索性技术。分组可以提供一些非正式的方法，以帮助我们估计维数，确定离群值，以及提出涉及各种关系的假设。

分组或聚类与上一章中讨论的分类有区别。分类问题中组的数目是已知的，其操作目标是将一个新的对象分派给这些组之一。聚类分析是一种比较原始的技术，对组的数目或组的结构不用做任何假定。分类是在相似性或距离(非相似性)的基础上进行的。所需的输入是一些相似性度量，或者说是一些可从中算出相似性的数据。

为了说明在定义一种自然分组方法时所遇到的困难的实质，我们来考虑如何将一副普通纸牌中四种花色的 A，K，Q，J 共 16 张牌进行分类。我们将某些分组情况示于图 12.1。见到这些图之后立刻就会明白：有意义的分组依赖于对“**相似**”一词所下的定义。

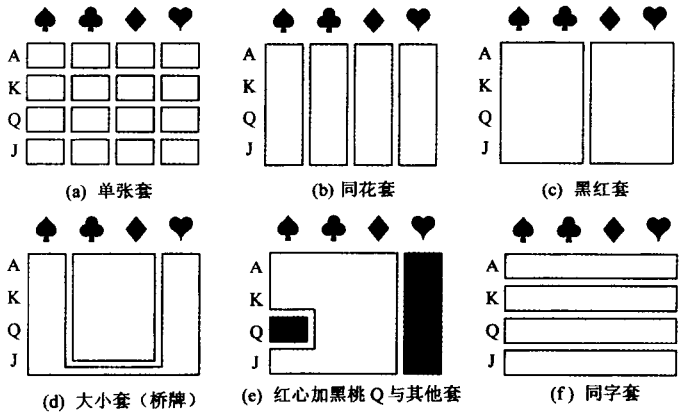


图 12.1　纸牌分组

在聚类分析的大多数实际应用中，研究者清楚了解如何区分“好”的分组与“坏”的分组。那么为什么不列出有可能的分组，然后从中选择“最优”分组，以供未来的研究？

在扑克牌的例子中，将 16 张牌分为一组有一种方法。有 32 767 种方法将 16 张牌分

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

为两组(各组牌的张数可以不同)。有 7 141 686 种方法将牌分为三组(各组牌的张数可以不同),等等[①]。显然,由于时间的限制,要从所有可能的分组中找出最优分组是不可能的。即使大型计算机也难以处理这么多的计算量。因此必须建立一些**算法**,利用它们可以找到好的,但未必是最好的分组。

总之,聚类分析的基本目标是发现项目(或变量)的自然分组方法。为此,我们必须先建立一个定量尺度,借以量度对象之间的联系(相似性)。12.2 节用来讨论各种相似性量度。在该节之后,我们介绍几种比较通用的将对象分组的算法。

即使没有关于自然分组的确切概念,我们也经常能凭眼睛将二维或三维图中的对象进行分组。1.4 节中讨论过的星图和切尔诺夫面可用于此种目的(见例 1.8 和 1.9)。还有一些方法能将高维观测值描绘为二维空间中的点,因而从某种意义上说可使相似的对象彼此更接近。这些方法将在 12.5～12.7 节中加以考虑。

12.2 相似性量度

为了从复杂的数据集产生出比较简单的组结构,多数做法都要求有一个"接近程度"或"相似性"的量度。在选择相似性量度时,通常会掺入相当大的主观性。需要考虑的重要问题包括变量的性质(离散型,连续型,二值型),测量值的尺度(名目尺度,顺序尺度,间隔尺度,比例尺度),以及关于研究课题的知识。

当一些项目(单元或事例)被聚类时,它们之间的接近程度通常用某种距离来表示。另一方面,变量通常根据相关系数或类似的联系量度来分组。

成对项目的距离与相似性系数

我们在第 1 章的 1.5 节曾讨论过距离概念。我们记得两个 p 维观测值(项目) $\mathbf{x}=[x_1,\cdots,x_p]'$ 和 $\mathbf{y}=[y_1,\cdots,y_p]'$ 之间的欧氏距离(直线距离)为

$$\begin{aligned} d(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= \sqrt{(x_1-y_1)^2+(x_2-y_2)^2+\cdots+(x_p-y_p)^2} \\ &= \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})'(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \end{aligned} \tag{12-1}$$

而同样两个观测值之间的统计距离[见式(1-23)]为

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{(\mathbf{x}-\mathbf{y})'\mathbf{A}(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \tag{12-2}$$

通常 $\mathbf{A}=\mathbf{S}^{-1}$,其中 $\mathbf{S}$ 为样本方差和协方差矩阵。但是,没有关于不同组的先验知识。这些样本量就无法计算。由于这个原因,在聚类问题中更倾向于采用欧氏距离。

另一种距离量度是闵可夫斯基(Minkowski)度量

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \left[\sum_{i=1}^{p}|x_i-y_i|^m\right]^{1/m} \tag{12-3}$$

---

① 将 n 个对象分成 k 个非空组的方法数即第二类的斯特林(Stirling)数,其值为 $(1/k!)\sum_{j=0}^{k}(-1)^{k-j}\binom{k}{j}j^n$。(见[1]。)将这些数对 $k=1,2,\cdots,n$ 求和,就得出将 n 个对象分组的所有可能的方法数。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

对 $m=1$，$d(\mathbf{x},\mathbf{y})$所量度的是 p 维空间两个点之间的“城市街区”距离。对 $m=2$，$d(\mathbf{x},\mathbf{y})$就是欧氏距离。一般说来，改变 m 就改变了赋予较大或较小差值的权值。

两个额外的关于“距离”或相异性的常用量度为坎贝拉(Canberra)度量和捷卡诺夫斯基(Czekanowski)系数。这两个量度都只对非负变量定义。我们有

$$\text{坎贝拉度量}:d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{p} \frac{|x_i - y_i|}{(x_i + y_i)} \tag{12-4}$$

$$\text{捷卡诺夫斯基度量}:d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 1 - \frac{2\sum_{i=1}^{p}\min(x_i, y_i)}{\sum_{i=1}^{p}(x_i + y_i)} \tag{12-5}$$

只要有可能，我们就建议采用“真实”距离[即满足式(1-25)中的距离性质的距离]来聚类对象。另一方面，大多数聚类算法将接受主观指定的距离数，它们可能不满足，比如说三角不等式。

下面的例子说明怎样通过将距离矩阵的元素简单地进行重新组织就能完成初步分类。

例 12.1 （通过取距离阵的阴影来聚类）

表 12.1 给出美国 22 家公用事业公司中各对公司之间的欧氏距离，这些数字是表 12.5 中的原始数据经标准化处理而成。

由于距离矩阵很大，很难凭目测来确定哪些公司彼此接近(相似)。然而用阴影作图法可以帮助我们相当容易地找到相似企业的聚类。

表 12.1　22 家公共事业公司之间的距离

公司编号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
1	0.00																					
2	3.10	0.00																				
3	3.68	4.92	0.00																			
4	2.46	2.16	4.11	0.00																		
5	4.12	3.85	4.47	4.13	0.00																	
6	3.61	4.22	2.99	3.20	4.60	0.00																
7	3.90	3.45	4.22	3.97	4.60	3.35	0.00															
8	2.74	3.89	4.99	3.69	5.16	4.91	4.36	0.00														
9	3.25	3.96	2.75	3.75	4.49	3.73	2.80	3.59	0.00													
10	3.10	2.71	3.93	1.49	4.05	3.83	4.51	3.67	3.57	0.00												
11	3.49	4.79	5.90	4.86	6.46	6.00	6.00	3.46	5.18	5.08	0.00											
12	3.22	2.43	4.03	3.50	3.60	3.74	1.66	4.06	2.74	3.94	5.21	0.00										
13	3.96	3.43	4.39	2.58	4.76	4.55	5.01	4.14	3.66	1.41	5.31	4.50	0.00									
14	2.11	4.32	2.74	3.23	4.82	3.47	4.91	4.34	3.82	3.61	4.32	4.34	4.39	0.00								
15	2.59	2.50	5.16	3.19	4.26	4.07	2.93	3.85	4.11	4.26	4.74	2.33	5.10	4.24	0.00							
16	4.03	4.84	5.26	4.97	5.82	5.84	5.04	2.20	3.63	4.53	3.43	4.62	4.41	5.17	5.18	0.00						
17	4.40	3.62	6.36	4.89	5.63	6.10	4.58	5.43	4.90	5.48	4.75	3.50	5.61	5.56	3.40	5.56	0.00					
18	1.88	2.90	2.72	2.65	4.34	2.85	2.95	3.24	2.43	3.07	3.95	2.45	3.78	2.30	3.00	3.97	4.43	0.00				
19	2.41	4.63	3.18	3.46	5.13	2.58	4.52	4.11	4.11	4.13	4.52	4.41	5.01	1.88	4.03	5.23	6.09	2.47	0.00			
20	3.17	3.00	3.73	1.82	4.39	2.91	3.54	4.09	2.95	2.05	5.35	3.43	2.23	3.74	3.78	4.82	4.87	2.92	3.90	0.00		
21	3.45	2.32	5.09	3.88	3.64	4.63	2.68	3.98	3.74	4.36	4.88	1.38	4.94	4.93	2.10	4.57	3.10	3.19	4.97	4.15	0.00	
22	2.51	2.42	4.11	2.58	3.77	4.03	4.00	3.24	3.21	2.56	3.44	3.00	2.74	3.51	3.35	3.46	3.63	2.55	3.97	2.62	3.01	0.00

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

首先，将这些距离按数值大小分成若干类（如 15 类或更少一些）。其次，在一个给定的类别中，所有距离均用一个带某种灰度的公共符号来代替。较深的符号对应较小的距离。最后，将距离阵重新组织，使具有公共符号的项目出现在主对角线上彼此邻接的位置。由相似项目组成的组所对应的各片阴影较深。

由图 12.2 我们可以看到，公司 1，18，19 和 14 构成一组，公司 22，10，13，20 和 4 构成一组，公司 9 和 3 构成一组，公司 3 和 6 构成一组，等等。组(9，3)与组(3，6)重叠，其他组也有类似的情况。公司 11，5 和 17 看来是单独的。

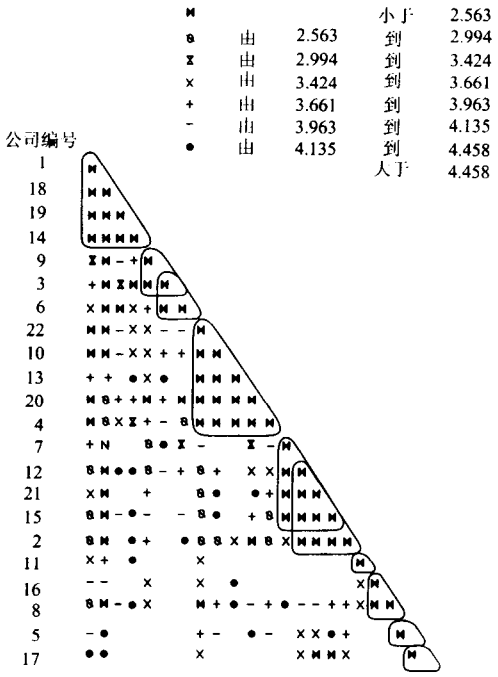


图 12.2　22 个公司的阴影化距离矩阵

当项目不能由有意义的 p 维量度来表示时，常根据某些特征的存在与否将各项目对进行比较。相似项目比不相似项目有更多的共同特征。一个特征是否存在，可以从数学上引进一个二值变量来表示，当特征存在时令这个变量取值 1，特征不存在时则令它取值 0。举例说，对于有 $p=5$ 个二值变量的情形，两个项目 i 与 k 的“得分”可能出现如下组合：

	变　量				
	1	2	3	4	5
项目 i	1	0	0	1	1
项目 k	1	1	0	1	0

在这种情况下，有两个 1—1 配对，1 个 0—0 配对，以及两个错配（0—1 和 1—0）。

设 x_{ij}为第 j 个二值变量在第 i 个项目上的得分（1 或 0），x_{kj}为第 j 个变量在第 k 个项目上的得分（同样是 1 或 0），$j=1,2,\cdots,p$。因此

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$(x_{ij}-x_{kj})^2=\begin{cases}0 & 若\ x_{ij}=x_{kj}=1\ 或\ x_{ij}=x_{kj}=0\\ 1 & 若\ x_{ij}\neq x_{kj}\end{cases} \tag{12-6}$$

故欧氏距离平方 $\sum_{j=1}^{p}(x_{ij}-x_{kj})^2$ 为错配的个数。大距离对应有许多错配的情形，也就是说与相异项目相对应。对前面所举的例子，项目 i 与 k 之间的距离平方为

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{5}(x_{ij}-x_{kj})^2&=(1-1)^2+(0-1)^2+(0-0)^2+(1-1)^2+(1-0)^2\\&=2\end{aligned}$$

虽然基于式(12-6)的距离可用来量度相似性，它却为 1—1 配对与 0—0 配对提供相同的权。然而在某些情形下，1—1 配对是比 0—0 更强的相似性指标。例如，在人的分组中，两个人都能阅读古希腊文同两人都没有这种能力相比是一种更强的相似性证据。因此，将 0—0 配对降权甚至完全不予考虑，也许是一种合理的做法。为允许对 1—1 配对和 0—0 配对有不同处理，曾提出过几种定义相似性系数的方案。

为了引进这些方案，让我们将项目 i 和 k 的配对与错配的频数以列联表的形式列出：

		项目 k		合　计
		1	0	
项目 i	1	a	b	$a+b$
	0	c	d	$c+d$
合　计		$a+c$	$b+d$	$p=a+b+c+d$

(12-7)

表中的 a 为 1—1 配对频数，b 为 1—0 配对频数，等等。对前面给出的五对二值变量来说，$a=2$，而 $b=c=d=1$。

表 12.2 列出一些用式(12-7)中的频数定义的常用相似性系数。每个定义之后附有对该定义基本依据的简短说明。

表 12.2　聚类项目的相似性系数(对 p 个二值变量)

系　数	基本依据说明
1. $\frac{a+d}{p}$	对 1—1 和 0—0 配对有相同的权。
2. $\frac{2(a+d)}{2(a+d)+b+c}$	对 1—1 和 0—0 配对有加倍的权。
3. $\frac{a+d}{a+d+2(b+c)}$	对不相配的对有加倍的权。
4. $\frac{a}{p}$	分子中无 0—0 配对。
5. $\frac{a}{a+b+c}$	分子分母中均无 0—0 配对。 (0—0 配对作为无关配对处理。)
6. $\frac{2a}{2a+b+c}$	分子分母中均无 0—0 配对。 对 1—1 配对有加倍的权。
7. $\frac{a}{a+2(b+c)}$	分子分母中均无 0—0 配对。 对不相配的对有加倍的权。
8. $\frac{a}{b+c}$	除去 0—0 配对后，1—1 配对与错配之比。

表中系数 1，2 和 3 是单调关联的。假定系数 1 是对表 Ⅰ 和表 Ⅱ 两个列联表计算的。此

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

时若$(a_{\mathrm{I}}+d_{\mathrm{I}})/p \geqslant (a_{\mathrm{II}}+d_{\mathrm{II}})/p$，我们也有$2(a_{\mathrm{I}}+d_{\mathrm{I}})/[2(a_{\mathrm{I}}+d_{\mathrm{I}})+b_{\mathrm{I}}+c_{\mathrm{I}}] \geqslant 2(a_{\mathrm{II}}+d_{\mathrm{II}})/[2(a_{\mathrm{II}}+d_{\mathrm{II}})+b_{\mathrm{II}}+c_{\mathrm{II}}]$。系数 3 对表 Ⅰ 的值也不会小于对表 Ⅱ 的值(见练习12.4.)。系数 5,6 和 7 也都保持它们的相对的顺序。

单调性是重要的，因为当相似性的定义改变而相似性的相对顺序保持不变时，某些聚类方法不受影响。在 12.3 节中讨论的单联结和完全联结分层方法也不受影响。对这些方法，选择表 12.2 中系数 1,2 或 3 中的任一个都会产生相同的分组。类似地，选择系数 5,6 或 7 中的任一个也产生相同的分组。

例 12.2 （计算相似性系数的值）

假定五个人具有以下特征：

个人	身高(英寸)	体重(磅)	眼球颜色	头发颜色	优势手	性别
1	68	140	绿	金	右	女
2	73	185	棕	黑	右	男
3	67	165	蓝	金	右	男
4	64	120	棕	黑	右	女
5	76	210	棕	黑	左	男

定义 6 个二值变量：

$$X_1=\begin{cases}1, \text{身高} \geqslant 72 \text{英寸} \\ 0, \text{身高} < 72 \text{英寸}\end{cases} \qquad X_2=\begin{cases}1, \text{体重} \geqslant 150 \text{磅} \\ 0, \text{体重} < 150 \text{磅}\end{cases}$$

$$X_3=\begin{cases}1, \text{棕色眼睛} \\ 0, \text{其他}\end{cases} \qquad X_4=\begin{cases}1, \text{金色头发} \\ 0, \text{其他}\end{cases}$$

$$X_5=\begin{cases}1, \text{右手优势} \\ 0, \text{左手优势}\end{cases} \qquad X_6=\begin{cases}1, \text{女性} \\ 0, \text{男性}\end{cases}$$

个人 1 和个人 2 在 $p=6$ 个二值变量上的得分为

个人	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
1	0	0	0	1	1	1
2	1	1	1	0	1	0

配对与错配的数目由下面双向表给出。

		个人 2		
		1	0	合计
个人 1	1	1	2	3
	0	3	0	3
	合计	4	2	6

用给出等权配对的相似系数 1，得到

$$\frac{a+d}{p}=\frac{1+0}{6}=\frac{1}{6}$$

继续用相似系数 1，便可得到其余各对个人之间的相似性数字，这些数字列于下面的 5×5 对称矩阵中。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\
\hline
1 & 1 & & & & \\
2 & \frac{1}{6} & 1 & & & \\
3 & \frac{4}{6} & \frac{3}{6} & 1 & & \\
4 & \frac{4}{6} & \frac{3}{6} & \frac{2}{6} & 1 & \\
5 & 0 & \frac{5}{6} & \frac{2}{6} & \frac{2}{6} & 1
\end{array}
$$

根据相似系数的大小，可以断言第二人与第五人最相似，而第一人与第五人最不相似。其余各对处于这两个极端之间。如果我们根据相似性数字将这五个人分成相对接近的两组，则可得出(1 3 4)和(2 5)。

注意，$X_3=0$ 意味着眼球颜色不是棕色的，故因此一个有蓝眼睛的人与一个有绿眼睛的人组成一个数 0—0 配对。因此，用相似性系数 1，2 或 3 可能不合适，因为这些系数对 1—1 配对和 0—0 配对赋予相等的权。

我们描述了距离和相似性的构造。由距离来构造相似性总是可能的。例如，我们可以令

$$\tilde{s}_{ik}=\frac{1}{1+d_{ik}} \tag{12-8}$$

其中 $0<\tilde{s}_{ik}\leqslant 1$ 为第 i 个项目与第 k 个项目之间的相似性，而 d_{ik} 则为相应的距离。

然而距离必须满足式(1-25)，所以不是总能由相似性来构造的。正如高尔(Gower)所证明的那样([5]，[6])，仅当相似性矩阵为非负定时才能做到这点。在非负定条件下 以及当最大相似性尺度已标准化(即 $\tilde{s}_{ii}=1$)时，可以定义

$$d_{ik}=\sqrt{2(1-\tilde{s}_{ik})} \tag{12-9}$$

且 d_{ik} 满足距离的性质。

变量对的相似性及关联性量度

迄今我们一直在对项目讨论相似性量度。但在某些应用中，必须进行分组的是变量而不是项目。变量之间的相似性量度常取样本相关系数的形式。不仅如此，在某些聚类应用中，负相关系数要用它们的绝对值来代替。

当变量为二值变量时，又可将数据表为列联表的形式。不过这一次描述类别的是变量，而不是项目。对每一对变量，有 n 个项目被交叉分类成一个表对于通常的 0—1 代码，此表具有如下形式：

		变量 k		合计
		1	0	
变量 i	1	a	b	$a+b$
	0	c	d	$c+d$
合　计		$a+c$	$b+d$	$n=a+b+c+d$

(12-10)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

例如，在 n 个项目中，变量 $i=1$ 和变量 $k=0$ 的项目有 b 个。

将通常的积矩相关系数公式用于列联表(12-10)中的二值变量，就得到

$$r=\frac{ad-bc}{[(a+b)(c+d)(a+c)(b+d)]^{1/2}} \tag{12-11}$$

这个数可作为两个变量之间相似性的量度。

式(12-11)中的相关系数与检验两个类别变量独立性的 χ^2 统计量有关($r=\chi^2/n$)。对给定的 n，大的相似性(或相关性)与独立性不足相一致。

给定(12-10)中的表，便可得出与表 12.2 中所列内容完全类似的关联性(或相似性)量度。惟一要做的改变是用 n(项目数)来代替 p(变量数)。

相似性问题的小结

为了对本节进行总结，我们注意到有很多种方法可用来测量各对对象之间的相似性。看来，大多数实际工作者用距离[见式(12-1)到式(12-5)]或表 12.2 中的相似性系数来对项目进行聚类，而用相关系数对变量进行聚类。然而，有时输入聚类算法程序的也许仅仅是简单的频数。

例 12.3 (测量 11 种语言的相似性)

词的含义随着历史进程而变化。然而数字 1,2,3,…的意义却代表一个显而易见的例外。这样，语言的第一次比较也许可以用数词作比较对象。表 12.3 给出英语、波兰语、匈牙利语及其他八种现代欧洲语言的前 10 个数字。(只考虑使用罗马字母的语言，而且重音符、变音符、分音符等等均予省略。)对表中数词的拼法作粗略考察后便可发现，前 5 种语言(英语、挪威语、丹麦语、荷兰语和德语)非常相似。法语、西班牙语和意大利语彼此更为接近。匈牙利语和芬兰语看来自成一家，而波兰语则具有每一个较大语言组的某些特征。

表 12.3　11 种语言中的数词

英语 (E)	挪威语 (N)	丹麦语 (Da)	荷兰语 (Du)	德语 (G)	法语 (Fr)	西班牙语 (Sp)	意大利语 (I)	波兰语 (P)	匈牙利语 (H)	芬兰语 (Fi)
one	en	en	een	eins	un	uno	uno	jeden	egy	yksi
two	to	to	twee	zwei	deux	dos	due	dwa	ketto	kaksi
three	tre	tre	drie	drei	trois	tres	tre	trzy	harom	kolme
four	fire	fire	vier	vier	quatre	cuatro	quattro	cztery	negy	neua
five	fem	fem	vijf	funf	cinq	cinco	cinque	piec	ot	viisi
six	seks	seks	zes	sechs	six	seis	sei	szesc	hat	kuusi
seven	sju	syv	zeven	sieben	sept	siete	sette	siedem	het	seitseman
eight	atte	otte	acht	acht	huit	ocho	otto	osiem	nyolc	kahdeksan
nine	ni	ni	negen	neun	neuf	nueve	nove	dziewiec	kilenc	yhdeksan
ten	ti	ti	tien	zehn	dix	diez	dieci	dziesiec	tiz	kymmenen

在法语、西班牙语和意大利语中，1 这个词全都由字母 u 开头。为达到说明的目的，我们可以用考察这些数词第一个字母的办法来比较这几种语言。我们说两种语言中表达同一个数字的词是和谐的，要是这两个词的首字母相同；否则就说它们是不和谐的。表 12.3 中数字 1～10 的和谐表(首字母配对的频数表)由表 12.4 给出。我们看到，英语和挪威语的 10 对词中有 8 对的首字母相同。其余频数可用同样的方法计算。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 12.4　11 种语言中数词的首字母配对频数

	E	N	Da	Du	G	Fr	Sp	I	P	H	Fi
E	10										
N	8	10									
Da	8	9	10								
Du	3	5	4	10							
G	4	6	5	5	10						
Fr	4	4	4	1	3	10					
Sp	4	4	5	1	3	8	10				
I	4	4	5	1	3	9	9	10			
P	3	3	4	0	2	5	7	6	10		
H	1	2	2	2	1	0	0	0	0	10	
Fi	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	10

表 12.4 中的结果进一步证实了我们从表 12.3 中得到的最初的直观印象。也就是说，英语、挪威语、丹麦语、荷兰语和德语看起来构成一组。法语、西班牙语、意大利语和波兰语也可以分在同一组，而匈牙利语和芬兰语则各自成为单独的一组。

到目前为止所举的例子中，都是根据我们对相似性或距离量度的直观印象来分组的。现在我们来讨论较少主观性的聚类方案。

12.3　分层聚类方法

即使用最大最快的计算机，我们也几乎不可能考察所有可能的分组情况。由于这个原因，人们提出各种各样的聚类算法，以期能找到“合理”的聚类而又不必考察所有可能的结构。

分层聚类方法是通过一系列或者是相继的合并，或者是相继的分割来进行的。**聚集分层法**从单个对象开始。这样在开始时有多少个对象就有多少个聚类。将那些最相似的对象首先分组，然后将组与组根据它们之间的相似性进行合并。最后随着相似性不断下降，所有的组渐渐融合为一个聚类。

分割分层法的工作方式与聚集分层法正相反。最初由所有对象组成的一个组开始，将它分割成两个子组，使一个子组的对象“远离”另一子组的对象。然后将这两个组进一步分割成不相似的组。这一过程一直进行到每个对象单独成为一组时为止。

聚集和分割这两种方法的结果可以用二维空间的图来表示，这种图称为“**树图**”。我们将看到，用树图可以说明相继完成的历次合并或分割。

在本节中，我们将集中讨论聚集分层方法，特别是**连接法**。在[2]和[4]中可找到关于分割分层法和其他聚集分层法的出色的初步介绍。

连接法既适用于对项目的聚类，也适用于对变量的聚类。不过这种情况并非对所有聚集分层法都成立。我们将依次讨论**单连接**(最小距离或最近邻近点)、完全连接(最大距离或最远邻近点)，以及**平均连接**(平均距离)。图 12.3 是在这三种连接准则下聚类合并的示意图。

从图中可以看到，当两个组根据它们最邻近成员之间的距离融合时，便产生单连接结果；当两个组根据它们最远成员之间的距离融合时，便产生完全连接；当两个组根据它们

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

相应位置上的各对成员之间的平均距离融合时，便产生平均连接。

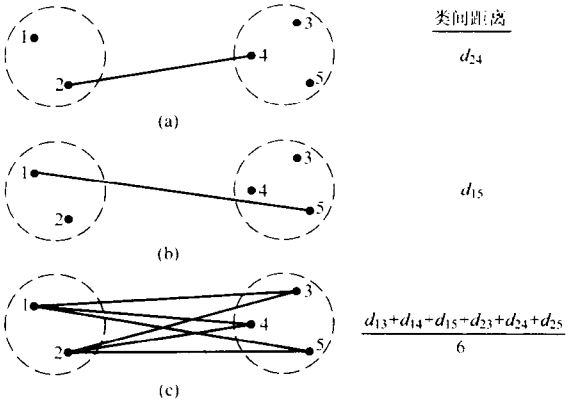


图 12.3　类间距离(相异性)：(a) 单连接，(b) 完全连接，(c) 平均连接

下面是将 N 个对象(项目或变量)分组时聚集分层聚类算法的操作步骤：

1. 从 N 个类(每类只含一个元素)和 $N\times N$ 对称距离(或相似性)距阵 $\mathbf{D}=\{d_{ik}\}$ 开始。

2. 从距离阵中搜寻最邻近(最相似)的两个类。记"最相似"的两个类为 U 和 V，它们之间的距离记为 d_{UV}。

3. 合并 U 与 V，将新的类记为 (UV)。将矩阵 $\mathbf{D}$ 中的元素更新；(a) 删除原来 U 和 V 所对应的行和列，(b) 将给出类 (UV) 与其余各类之间距离的行和列加进该矩阵。

4. 将步骤 2 和 3 重复 $N-1$ 次。(当算法结束时所有对象将在一个类中。)记录下被合并的各个类的一致性以及历次合并的水平(距离或相似性)　　(12-12)

隐藏在任何聚类方法背后的思想，都可以通过实例来表达。我们对连接方法的输入和算法组成部分作一番简要讨论之后再来介绍这些例子。

单连接法

单连接算法的输入可以是对象对之间的距离或相似性。各个组由个体通过合并最近邻近点而形成，此处的**最近邻近点**可以指最小距离或最大相似性。

一开始我们必须找到 $\mathbf{D}=(d_{ij})$ 中的最小距离，并将相应的对象比如说 U 和 V 合并，得到聚类 (UV)。对一般算法(12-12)中的步骤 3，(UV) 与任一其他聚类 W 之间的距离为

$$d_{(UV)W}=\min\{d_{UW},d_{VW}\} \tag{12-13}$$

这里 d_{UW} 和 d_{VW} 分别为聚类 U 与 W 及聚类 V 与 W 的最近邻近点之间的距离。

单连接聚类的结果可以用树图表示。树的分枝代表聚类。分枝在结点处汇合(合并)，而沿距离(或相似性)轴的各个结点位置指明合并发生时的水平(即距离或相似性的大小)。我们在下面几个例子中考虑某些特殊情形下的树图。

例 12.4　(用单连接法聚类)

为说明单连接算法，我们考虑以下的五个对象之间的假想距离如下：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\mathbf{D}=\{d_{ik}\}=\begin{array}{c} \\ 1\\2\\3\\4\\5\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{bmatrix}0&&&&\\9&0&&&\\3&7&0&&\\6&5&9&0&\\11&10&2&8&0\end{bmatrix}\end{array}$$

将每个对象看成是一个类，我们的聚类从合并两个最接近的项目开始。由于

$$\min_{i,k}(d_{ik})=d_{53}=2$$

对象 5 和 3 合并，形成聚类(35)。为确定下一个聚类水平，我们需要得到聚类(35)与其余对象 1,2,4 之间的距离。最近邻近点距离为

$$d_{(35)1}=\min\{d_{31},d_{51}\}=\min\{3,11\}=3$$
$$d_{(35)2}=\min\{d_{32},d_{52}\}=\min\{7,10\}=7$$
$$d_{(35)4}=\min\{d_{34},d_{54}\}=\min\{9,8\}=8$$

从 **D** 中将对应于对象 3 和 5 的行和列删除，并将对应于(3 5)的行和列加上，便得到新的距离阵

$$\begin{array}{c} \\ (35)\\1\\2\\4\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}(35)&1&2&4\end{array}\\ \begin{bmatrix}0&&&\\3&0&&\\7&9&0&\\8&6&5&0\end{bmatrix}\end{array}$$

在这个距离阵中，各对聚类之间的最小距离为 $d_{(35)1}=3$，于是我们将聚类(1)与聚类(35)合并，得到下一个聚类(135)。算出

$$d_{(135)2}=\min\{d_{(35)2},d_{12}\}=\min\{7,9\}=7$$
$$d_{(135)4}=\min\{d_{(35)4},d_{14}\}=\min\{8,6\}=6$$

我们得到下一个聚类水平的距离矩阵为

$$\begin{array}{c} \\ (135)\\2\\4\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{ccc}(135)&2&4\end{array}\\ \begin{bmatrix}0&&\\7&0&\\6&5&0\end{bmatrix}\end{array}$$

各对聚类之间的最小最近邻近点距离为 $d_{42}=5$，于是我们将对象 4 和 2 合并，得到聚类(24)。

现在我们有两个不同的聚类(135)和(24)。它们的最近邻近点距离(即惟一的距离)为

$$d_{(135)(24)}=\min\{d_{(135)2},d_{(135)4}\}=\min\{7,6\}=6$$

最终的距离阵变成

$$\begin{array}{c} \\ (135)\\(24)\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{cc}(135)&(24)\end{array}\\ \begin{bmatrix}0&\\6&0\end{bmatrix}\end{array}$$

于是将聚类(135)和(24)合并，形成一个包含全部五个对象的聚类(12345)，此时最近邻近

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

点距离为 6。

图解上述分层聚类过程的树图示于图 12.4。此图清楚说明了分组与分组发生时的距离水平。

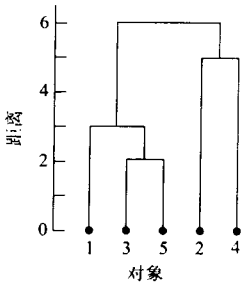


图 12.4　五个对象之间距离的单连接树图

在典型的分层聚类应用中，人们感兴趣的主要是中间结果，即将对象分为中等数目的聚类。

例 12.5　(11 种语言的单连接聚类)

考虑表 12.4 中的和谐矩阵，它代表 11 种语言中前 10 个数词之间的接近程度。为构造距离矩阵，我们将和谐性(两种语言的 10 个数字的首字母相同的频数)从完全一致的数字 10(每种语言自身的固有频数)中减去，得到的距离阵为

$$
\begin{array}{c}
 \\ E \\ N \\ Da \\ Du \\ G \\ Fr \\ Sp \\ I \\ P \\ H \\ Fi
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccccccc} E & N & Da & Du & G & Fr & Sp & I & P & H & Fi \end{array} \\
\begin{bmatrix}
0 & & & & & & & & & & \\
2 & 0 & & & & & & & & & \\
2 & 1 & 0 & & & & & & & & \\
7 & 5 & 6 & 0 & & & & & & & \\
6 & 4 & 5 & 5 & 0 & & & & & & \\
6 & 6 & 6 & 9 & 7 & 0 & & & & & \\
6 & 6 & 5 & 9 & 7 & 2 & 0 & & & & \\
6 & 6 & 5 & 9 & 7 & 1 & 1 & 0 & & & \\
7 & 7 & 6 & 10 & 8 & 5 & 3 & 4 & 0 & & \\
9 & 8 & 8 & 8 & 9 & 10 & 10 & 10 & 10 & 0 & \\
9 & 9 & 9 & 9 & 9 & 9 & 9 & 9 & 9 & 8 & 0
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

我们首先搜索各对语言(聚类)之间的最小距离。最小距离 1 出现在丹麦语与挪威语，意大利语与法语，及意大利语与西班牙语之间。将语言依出现在表中的顺序编号，我们有

$$d_{32} = 1; \qquad d_{86} = 1; \qquad d_{87} = 1$$

由于 $d_{76}=2$，只能合并 8 和 6，或者合并 8 和 7。但不能在 1 的水平上将 6，7，8 三者合并。我们选择先合并 6 和 8，然后更新距离阵，并合并 2 和 3，得到聚类(68)和(23)。随后的计算机计算产生图 12.5 中的树图。

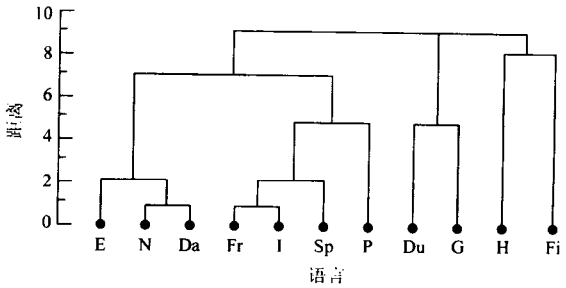


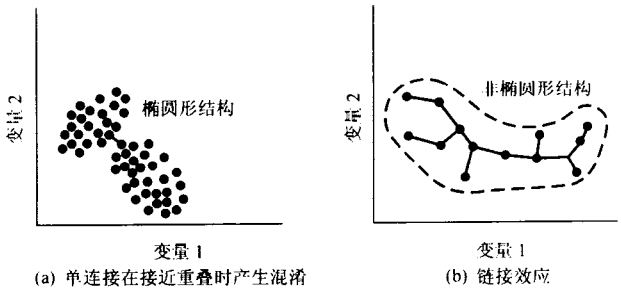
图 12.5　11 种语言中前 10 个数词之间距离的单连接树图

由这个树图我们看到，挪威语和丹麦语，以及法语和意大利语在最小距离(最大相似)水平上形成聚类，当所允许的距离增大时，英语加入挪威语-丹麦语组，而西班牙语则并入

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

法语-意大利语组。注意匈牙利语和芬兰语之间的相似性比它们与其他语言聚类之间的相似性更大。然而这两个聚类(语言)要到最近邻近点之间的距离有了很大增加之后才能合并。最后,所有的语言聚类在最近邻近点距离的最大值 9 这个水平上合并成一个聚类。

由于单连接方法用聚类之间的最短连接来合并聚类,所以这种方法不能识别分离得很差的聚类。[见图 12.6(a)。]另一方面,单连接法是能描绘非椭球形聚类的少数方法之一。单连接法有一种挑选长链状聚类的倾向,称为**链接**倾向。[见图 12.6(b)。]当项目位于链的两端因而颇不相似时,链接法有可能产生误导。



(a) 单连接在接近重叠时产生混淆　　(b) 链接效应

图 12.6　单连接聚类

通过单连接法形成的聚类,在对原始的距离(或相似性)作保序变换后保持不变。具体说,在表 12.2 中,任一组相互之间有单调关系的相似系数会产生相同的聚类。

完全连接法

完全连接聚类方式与单连接聚类方式在许多方面都相同,但有一个重要区别:在每个阶段,聚类之间的距离(相似性)由两个聚类中相距最远的两个元素之间的距离确定。这样,完全连接就能保证:对一个聚类中的所有项目,彼此间的距离均不超过某个最大距离(或最小相似性)。

一般的聚集算法从找到 $\mathbf{D}=\{d_{ik}\}$ 中的最小元素开始,并将 U 和 V 这样的相应对象合并,得到新的聚类(UV)。对式(12-12)中一般算法的步骤 3,(UV)与任一其他聚类 W 之间的距离定义为

$$d_{(UV)W} = \max\{d_{UW}, d_{VW}\} \tag{12-14}$$

这里 d_{UW}和 d_{VW}分别为 U 与 W 及 V 与 W 的相隔最远的成员之间的距离。

例 12.6　(用完全连接法聚类)

回到例 12.4 中引进的距离矩阵

$$\mathbf{D}=\{d_{ik}\}=\begin{array}{c} \\ 1\\2\\3\\4\\5\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{bmatrix}0&&&&\\9&0&&&\\3&7&0&&\\6&5&9&0&\\11&10&2&8&0\end{bmatrix}\end{array}$$

在第一阶段,将对象 3 和 5 合并,因为它们最相似。这样就得到聚类(35)。在第二阶段,我

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

们计算

$$d_{(35)1}=\max\{d_{31},d_{51}\}=\max\{3,11\}=11$$
$$d_{(35)2}=\max\{d_{32},d_{52}\}=10$$
$$d_{(35)4}=\max\{d_{34},d_{54}\}=9$$

于是距离阵修正为

$$\begin{array}{c|c} & \begin{array}{cccc}(35) & 1 & 2 & 4\end{array} \\ \begin{array}{c}(35)\\1\\2\\4\end{array} & \begin{bmatrix}0 & & & \\ 11 & 0 & & \\ 10 & 9 & 0 & \\ 9 & 6 & ⑤ & 0\end{bmatrix}\end{array}$$

下一次合并发生在两个最相似的组 2 与 4 之间，得到一个新的聚类(24)。在第三阶段我们有

$$d_{(24)(35)}=\max\{d_{2(35)},d_{4(35)}\}=\max\{10,9\}=10$$
$$d_{(24)1}=\max\{d_{21},d_{41}\}=9$$

因而距离阵为

$$\begin{array}{c|c} & \begin{array}{ccc}(35) & (24) & 1\end{array} \\ \begin{array}{c}(35)\\(24)\\1\end{array} & \begin{bmatrix}0 & & \\ 10 & 0 & \\ 11 & ⑨ & 0\end{bmatrix}\end{array}$$

下一次合并产生聚类(124)。在最后阶段，将组(35)和(124)合并成一个聚类(12345)，其距离水平为

$$d_{(124)(35)}=\max\{d_{1(35)},d_{(24)(35)}\}=\max\{11,10\}=11$$

这个聚类过程的树图由图 12.7 给出。

比较图 12.4 和图 12.7 可以看出，单连接法与完全连接法在将对象 1 分配给前面的组时分配方法是不一样的。

例 12.7 (11 种语言的完全连接聚类)

在例 12.5 中我们给出了 11 种语言的距离阵。将完全连接聚类算法应用于这个距离阵，得出的树图见图 12.8。

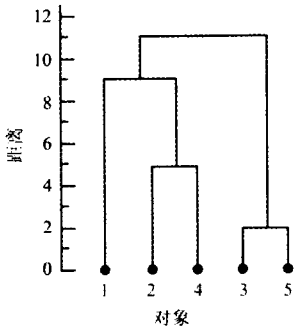


图 12.7 五个对象之间距离的完全连接树图

比较图 12.8 和 12.5，我们看到两种分层聚类法都产生出英语-挪威语-丹麦语组和法语-意大利语-西班牙语组。在中间水平上，波兰语被合并到法语-意大利语-西班牙语组。此外，两种方法都在倒数第二步才将匈牙利语和芬兰语合成一组。

然而，两种方法处理德语和荷兰语的结果不同。单连接法在中等距离上将德语与荷兰语合并，而且它们在最后的大合并之前始终是一个单独的聚类。完全连接法在中间水平上将德语并入英语-挪威语-丹麦语组。荷兰语保持为单独一组，直到在较高的距离水平上才与英语-挪威语-丹麦

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

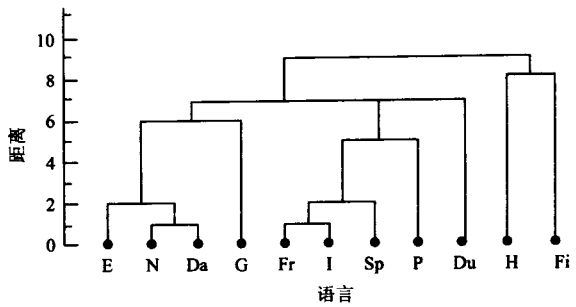


图 12.8　11 种语言中前 10 个数词之间距离的完全连接树图

语-德语组及法语-意大利语-西班牙语-波兰语组合并成一组。完全连接的最终合并涉及两个聚类，而单连接的最终合并涉及三个聚类。

例 12.8　（用完全连接法对变量进行聚类）

从 22 家美国公用事业公司搜集到的 1975 年的数据列于表 12.5。虽然将公司进行聚类更令人感兴趣，不过在这里我们要看看完全连接法是如何用于对变量进行聚类的。

表 12.5　公用事业公司数据（1975 年）

公　司	变　量							
	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8
1. 亚利桑那公共服务公司	1.06	9.2	151.	54.4	1.6	9077.	0.	0.628
2. 波士顿爱迪生公司	0.89	10.3	202.	57.9	2.2	5088.	25.3	1.555
3. 中央路易斯安那电气公司	1.43	15.4	113.	53.0	3.4	9212.	0.	1.058
4. 联邦爱迪生公司	1.02	11.2	168.	56.0	0.3	6423.	34.3	0.700
5. 联合爱迪生公司（纽约）	1.49	8.8	192.	51.2	1.0	3300.	15.6	2.044
6. 佛罗里达电力与电灯公司	1.32	13.5	111.	60.0	−2.2	11127.	22.5	1.241
7. 夏威夷电气公司	1.22	12.2	175.	67.6	2.2	7642.	0.	1.652
8. 爱达荷电力公司	1.10	9.2	245.	57.0	3.3	13082.	0.	0.309
9. 肯塔基公用事业公司	1.34	13.0	168.	60.4	7.2	8406.	0.	0.862
10. 麦迪逊天然气与电力公司	1.12	12.4	197.	53.0	2.7	6455.	39.2	0.623
11. 内华达电力公司	0.75	7.5	173.	51.5	6.5	17441.	0.	0.768
12. 新英格兰电气公司	1.13	10.9	178.	62.0	3.7	6154.	0.	1.897
13. 北方电力公司	1.15	12.7	199.	53.7	6.4	7179.	50.2	0.527
14. 俄克拉何马天然气与电力公司	1.09	12.0	96.	49.8	1.4	9673.	0.	0.588
15. 太平洋天然气与电力公司	0.96	7.6	164.	62.2	−0.1	6468.	0.9	1.400
16. 普盖桑德电力与电灯公司	1.16	9.9	252.	56.0	9.2	15991.	0.	0.620
17. 圣地亚哥天然气与电力公司	0.76	6.4	136.	61.9	9.0	5714.	8.3	1.920
18. 南方公司	1.05	12.6	150.	56.7	2.7	10140.	0.	1.108
19. 得克萨斯公用事业公司	1.16	11.7	104.	54.0	−2.1	13507.	0.	0.636
20. 威斯康星电力公司	1.20	11.8	148.	59.9	3.5	7287.	41.1	0.702
21. 联合照明公司	1.04	8.6	204.	61.0	3.5	6650.	0.	2.116
22. 弗吉尼亚电气与电力公司	1.07	9.3	174.	54.3	5.9	10093.	26.6	1.306

变量定义：X_1：固定费用周转比（收入/债务）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

X_2：资本回报率

X_3：每千瓦容量成本

X_4：年载荷因子

X_5：自 1974 至 1975 年高峰期千瓦时需求增长

X_6：销售量（年千瓦时用量）

X_7：核能所占百分比

X_8：总燃料成本（美分/千瓦时）

资料来源：数据经 H. E. Thomson 许可使用。

我们用积矩相关系数来量度各对变量之间的相似性。相关矩阵在表 12.6 中给出。

表 12.6　各对变量之间的相关系数（公用事业公司数据）

$$
\begin{array}{cccccccc}
X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8
\end{array}
$$

$$
\begin{bmatrix}
1.000 & & & & & & & \\
0.643 & 1.000 & & & & & & \\
-0.103 & -0.348 & 1.000 & & & & & \\
-0.082 & -0.086 & 0.100 & 1.000 & & & & \\
-0.259 & -0.260 & 0.435 & 0.034 & 1.000 & & & \\
-0.152 & -0.010 & 0.028 & -0.288 & 0.176 & 1.000 & & \\
0.045 & 0.211 & 0.115 & -0.164 & -0.019 & -0.374 & 1.000 & \\
-0.013 & -0.328 & 0.005 & 0.486 & -0.007 & -0.561 & -0.185 & 1.000
\end{bmatrix}
$$

当样本相关系数被用作相似性量度时，具有很大负相关系数的变量对被认为极不相似。具有很大正相关系数的变量对则被认为非常相似。在这种情形下，两个聚类之间的“距离”用这两个聚类的对象之间的最小相似性来量度。将完全连接算法用于上述相似性矩阵，便产生图 12.9 中的树图。

我们看到变量 1 和 2（固定费用周转比和资本回报率），变量 4 和 8（年载荷因子和总燃料成本），以及变量 3 和 5（每千瓦容量成本和高峰期千瓦时需求增长）在中等的相似性水平上形成聚类。变量 7（核能所占百分比）及 6（销售量）在最后一步之前始终自成一聚类。最后的合并将聚类（12478）和聚类（356）带到一起。

同单连接法的情形一样，对于完全连接聚类，距离（相似性）的保序变换不影响聚类的结果。

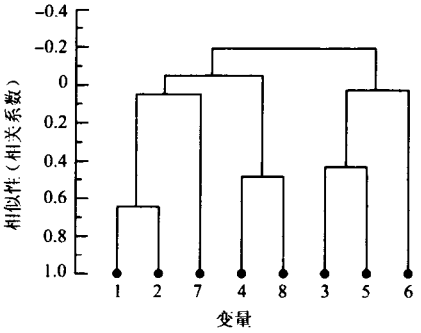


图 12.9　八个公用事业公司变量之间相似性的完全连接树图

平均连接

平均连接法将两个聚类之间的距离作为两个聚类间所有各对项目之间的平均距离来处理。（此处每一对项目中的两个成员分别属于上述两个聚类。）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

同样，平均连接算法的输入可以是距离或相似性，而且这种方法也可以用于对象聚类或变量分类。平均连接算法按式(12-12)中的一般算法进行。我们仍从距离阵 $\mathbf{D}=\{d_{ik}\}$ 中搜寻最接近(最相似)的对象开始，假定找到的是 U 和 V。这两个对象合并，组成聚类 (UV)。对一般的聚集算法的步骤 3，聚类 (UV) 与另一聚类 W 之间的距离由下式确定：

$$d_{(UV)W}=\frac{\sum_i\sum_k d_{ik}}{N_{(UV)}N_W} \tag{12-15}$$

其中 d_{ik} 为聚类 (UV) 中的第 i 个对象与聚类 W 中的第 k 个对象之间的距离，$N_{(UV)}$ 和 N_W 分别为 (UV) 和 W 中成员的个数。

例 12.9 (11 种语言的平均连接聚类)

将平均连接法用于例 12.5 中 11 种语言之间的距离，所得出的树图。示于图 12.10。

将图 12.10 中的树图与单连接树图(图 12.5)，以及完全连接树图(图 12.8)相比较，就会发现平均连接产生的结构与完全连接的结构非常一致。然而由于每一种情况下距离的定义不同，合并在不同的水平产生是不奇怪的。

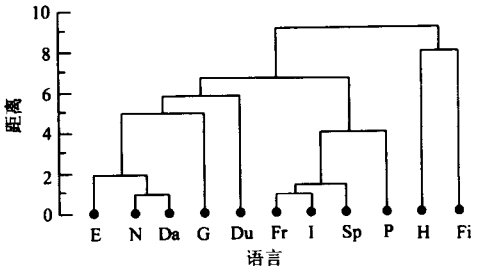


图 12.10 11 种语言中前 10 个数词之间距离的平均连接树图

例 12.10 (公用事业公司的平均连接聚类)

将平均连接算法应用于 22 个公用事业公司的欧氏距离(见表 12.1)，便产生图 12.11 中的树图。

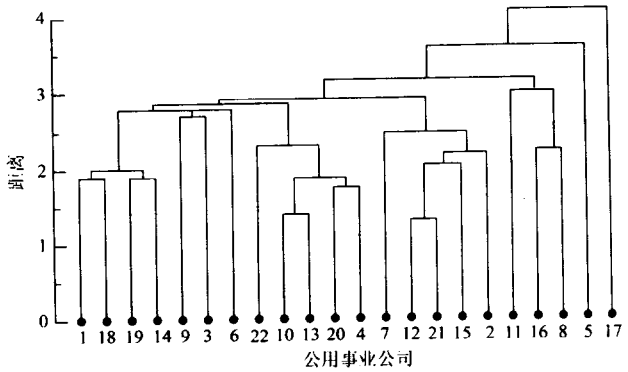


图 12.11 22 个公用事业公司间距离的平均连接树图

集中考察中间层的聚类，我们发现公用事业公司倾向于按地理位置分组。例如，一个中间聚类包含企业 1(亚利桑那公共服务公司)，18(南方公司——业务范围在佐治亚和阿拉巴马)，19(得克萨斯公用事业公司)及 14(俄克拉何马天然气与电力公司)。也有某些例外。聚类(7，12，21，15，2)包含沿东海岸和远西的企业。另一方面，所有这些企业都位于沿海地区。请注意：纽约的联合麦迪逊公司和圣地亚哥天然气与电力公司直到最后的大汇合之前均自成一个聚类。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

也许，位置相似（或位置的类型相似）的公用事业公司构成一个聚类是不值得惊奇的。可以预料：处在同一地区的公司其发电厂基本上使用同一类型的燃料，而且面对同一个市场。因此，发电的类型、成本、增长等等在这些企业之间是相对一致的。这些内容都被表观地反映在分层聚类方法之中。

对平均连接聚类，距离（相似性）的改变会影响最终聚类结构，即使这种改变是保序的。

沃德（Word）的分层聚类法

沃德[22]考虑了建立在联合两个聚类时使"信息损失"最小这一想法基础上的分层聚类方法。这种方法通常在实施过程中会有信息损失，用某种误差平方和（ESS）准则来衡量时表现为 ESS 有所增大。首先，对给定的聚类 k，令 ESS_k 为此聚类中每一个项目与类均值（中心点）的偏差平方和。若当前有 K 个聚类，则定义 $ESS=ESS_1+ESS_2+\cdots+ESS_K$。在分析过程的每一步，考虑可能有的各对聚类的合并。若某对聚类的合并使得 ESS 增加最少（信息损失最小），则将这两个聚类合并。最初，每个聚类仅由一个项目组成，因而如果有 N 个项目，则有 $ESS_k=0, k=1,2,\cdots,N$，故 $ESS=0$。在另一极端，当所有聚类合并成一个由 N 个项目组成的组，则 ESS 的值为

$$ESS=\sum_{j=1}^{N}(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})$$

其中 $\mathbf{x}_j$ 为与第 j 个项目相联系的多元测量值，而 $\bar{\mathbf{x}}$ 则为总均值。

沃德方法的结果可以用树图表示，树图的纵坐标代表发生合并时的 ESS 值。

沃德方法其于这样一个概念，即预期多元观测值的聚类大体呈椭球形分布。它是非分层聚类方法的先驱。非分层聚类法通过优化某种准则，实现将数据分割为给定数目的椭圆状聚类的目的。我们将在下一节中讨论非分层聚类法。关于聚类分析中优化方法的进一步讨论可以在[4]中找到。

例 12.11 （纯麦芽苏格兰威士忌的聚类）

世界上所有的纯麦芽苏格兰威士忌事实上均产于苏格兰。在一项研究（见[4]）中，曾用 68 个二值变量来测量苏格兰威士忌的各种特性。这些变量大致可分为颜色、气味、酒质、口感以及最后加工几类。例如，有 14 种颜色特性（描述），其中包括白葡萄酒色、黄色、极浅色、浅色、红铜色、全琥珀色、红色等等。拉普安特（LaPointe）和勒让德（Legendre）将来自不同酿酒厂的 109 种纯麦芽威士忌（均来自不同酒厂）进行了聚类。研究者的兴趣在于确定单麦芽威士忌的主要类型，它们的主要特性，以及最佳代表。此外，他们想知道由分层聚类法所得到的聚类是否与不同的地理区域相对应，因为已经知道威士忌受土壤、温度和水质这些条件的影响。

利用标准化二值变量和沃德方法对 109 种纯（单）麦芽苏格兰威士忌进行分组。得到的树图示于图 12.12。（将平均连接法用于相似性矩阵，几乎得出完全相同的分类。）

树图中标有字母 A 至 L 的 12 个组是经研究者识别后认为是相似的。随后的分析表明，这 12 个组受到某个很大的地理成分的支配。也就是说，位置互相靠近的那些酒厂倾向于生产具有类似特性的威士忌。于是这些研究人员得出结论："与地理特征的关系已被证

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

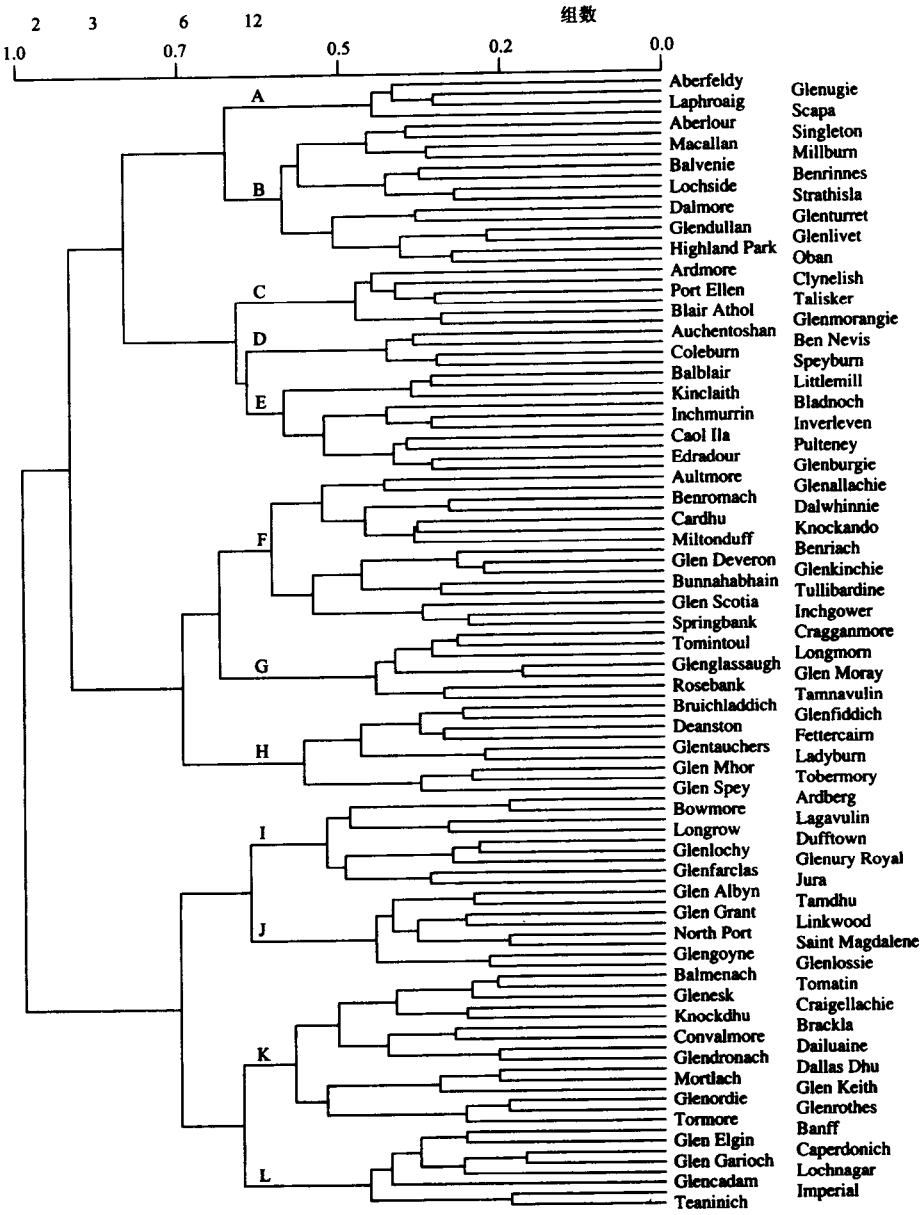


图 12.12　109 种纯麦芽苏格兰威士忌之间相似性的树图

实。分析结果支持如下假设：威士忌不仅受到厂家生产秘方和传统的影响，而且还受到与地区有关的诸如水、土壤、小气候、温度甚至空气质量等因素的影响。”

对分层方法的最后评注

除了单连接、完全连接和平均连接之外，还有许多聚集型分层聚类方法。然而，所有聚集型方法都遵循式(12-12)中的基本算法。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

同大多数聚类方法一样，在分层方法中，误差和变差来源并未得到正式考虑。这就意味着聚类方法对离群值或“噪音点”很敏感。

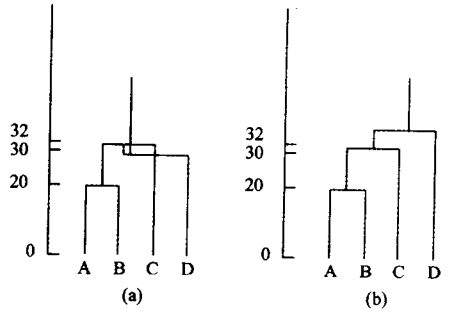
在分层聚类中，对于那些在早期阶段被“错误”分组的对象不提供重新分组的机会。因此，始终应对最终的聚类结构进行仔细检查，看看结果是否合情合理。

对某个特定的问题，较好的做法是试用几种聚类方法，而对一种给定的方法，可以试用几种不同的距离（相似性）。如果用几种不同方法得到的结果（大体上）彼此一致，那么就有可能找到一个“自然”分组。

某个分层解的**稳定性**有时可用这样的方法来检查：对数据单元加进一些小误差（干扰），然后运用聚类算法，并将新的结果与未加误差时的结果进行比较。如果各组数据能很好区分，则两种结果应大体吻合。

距离矩阵或相似性矩阵中的相同值（结）有可能使分层聚类问题产生多重解。也就是说，用不同方法处理打结的相似性（距离）会得出不同的树图，特别是在较低的水平上。并非任何方法都会出现这种问题，只有特定类型的数据才会发生多重解。出现多重解未必是坏事。不过聚类方法的应用者应该知道这种现象的存在，以便对分组（树图）给出恰当的解释，并比较不同的分组（树图），以评估它们的重合程度。对这个问题的进一步讨论可在[18]中找到。

某些数据集和分层聚类方法会产生“逆序”。（见[18]。）当某个对象在并入一个已有的聚类时其距离小于上一次合并的距离，就会发生逆序。在下图中，用两种不同方法代表一个逆序。



在此例中，A 和 B 在距离 20 处合并。下一步，C 在距离 32 处被加进（AB）组。由于聚类算法的性质，D 在距离 30 处被加进（ABC）组。这个距离小于 C 被加进（AB）组时的距离。在图（a）中，逆序由一个带交叉的树图表示。在图（b）中，逆序由一个具有非单调尺度的树图表示。

在没有清晰的聚类结构的情况下，就会出现逆序，因此逆序一般与两种分层聚类算法（即中心方法和中位数法）相联系。本书中所讨论的分层方法不易产生逆序。

12.4 非分层聚类方法

设计非分层聚类技术的目的，是为了将项目（不是变量）分成由 K 个聚类组成的集合。聚类的个数 K 可以事先指定，也可以在聚类过程中确定。由于在计算机运行过程中不

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

必确定距离(相似性)矩阵,也不必存储基本数据,所以同分层方法相比,非分层方法可用于大得多的数据集。

非分层方法的起点或者是(1)一个初始的分割,或者是(2)构成未来聚类核心的一组初始种子点。好的初始结构应该没有明显的偏倚。一种起动方式是从项目中随机选出种子点,或者将项目随机地分割成初始组的集合。

在这一节中,我们将讨论一种比较流行的非分层方法——K 均值法。

K 均值法

麦奎因(MacQueen)[16]将他所提出的一种算法命名为 K 均值法。这种算法的基本思想是将每一个项目分给具有最近中心(均值)的聚类。最简单形式中的算法包括以下三个步骤:

1. 将所有项目分成 K 个初始聚类。

2. 将项目表中的某个项目划入中心(均值)离它最近的聚类。(这里的距离通常是用标准化或非标准化数据算出的欧氏距离。)对得到项目和失去项目的两个聚类重新计算它们的中心坐标。

3. 重复步骤 2,直至所有的点都不能再分配时为止。 (12-16)

在上述过程中,步骤 1 也可以不从分割出 K 个初始聚类开始,而从规定 K 个初始中心(种子点)开始,然后进入步骤 2。

最终的分类结果在某种程度上依赖于初始分组或初始种子点的选择。经验显示,聚类过程中的绝大多数重要变化均发生在第一次再分配中。

例 12.12 (用 K 均值法聚类)

假定我们对 A,B,C,D 四个项目分别测量两个变量 x_1 和 x_2,得到如下数据:

项　目	变　量	
	x_1	x_2
A	5	3
B	-1	1
C	1	-2
D	-3	-2

我们的目标是将这些项目分成 $K=2$ 个聚类,使每个聚类内部的项目之间的距离比与分别属于不同聚类的项目之间的距离小。为了实施 $K=2$ 均值法,我们将这些项目先随意分成两个聚类,比如说(AB)和(CD),然后计算这两个聚类的中心(均值)的坐标($\bar{x}_1,\bar{x}_2$)。这样,在步骤 1 中我们有:

聚　类	中心的坐标	
	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$
(AB)	$\frac{5+(-1)}{2}=2$	$\frac{3+1}{2}=2$
(CD)	$\frac{1+(-3)}{2}=-1$	$\frac{-2+(-2)}{2}=-2$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

在步骤 2 中，计算每个项目到组中心的欧氏距离，然后将每个项目重新分配给最近的一组。若组中的项目发生了变动，则该组的中心（均值）在进行下一步操作之前要重新计算。先计算 A 到两个聚类的平方距离

$$d^2(A,(AB)) = (5-2)^2 + (3-2)^2 = 10$$

$$d^2(A,(CD)) = (5+1)^2 + (3+2)^2 = 61$$

由于 A 到 (AB) 的距离小于到 (CD) 的距离，因此 A 不用重新分配。计算 B 到两个聚类的平方距离，我们得到

$$d^2(B,(AB)) = (-1-2)^2 + (1-2)^2 = 10$$

$$d^2(B,(CD)) = (-1+1)^2 + (1+2)^2 = 9$$

结果 B 应重新分配到聚类 (CD)，得到聚类 (BCD)。接下来就应更新中心的坐标：

聚　类	中心的坐标	
	$\bar{x}_1$	$\bar{x}_2$
(A)	5	3
(BCD)	-1	-1

然后再次检查每个项目，以决定是否需要重新分类。计算各种平方距离，得出结果如下：

聚　类	项目到聚类中心的平方距离			
	项　目			
	A	B	C	D
(A)	0	40	41	89
(BCD)	52	4	5	5

我们看到，现在的每个项目都已被分给具有最近中心（均值）的聚类，因此分类过程到此结束。最终得到的 $K=2$ 个聚类为 (A) 和 (BCD)。

为检查聚类结果的稳定性，应该以新的初始分割重新启动算法。一旦聚类被确定，就可通过对项目表中诸项目的重新排列来对聚类作直观解释：使处于第一个聚类中的项目排在最前面，处于第二个聚类中的项目排在下一个位置，等等。一份列有各聚类中心坐标和每个聚类内部方差的表同样有助于刻画组与组之间的差别。

例 12.13　（对公用事业公司进行聚类的 K 均值法）

我们回到对公用事业公司进行聚类的问题，其由数据由表 12.5 中给出。这次采用 K 均值法，并对 K 取若干不同的值。我们把 $K=4$ 和 $K=5$ 时分类结果汇总如下表。一般来说，特定 K 值的选择并不是明确无误的，这依赖于对分类对象的背景知识和基于数据的评估。（基于数据的评估也许包括选择 K 值，以使组间变差相对组内变差达到极大。有关的量度可以是 $|\mathbf{W}|/|\mathbf{B}+\mathbf{W}|$［见式(6-38)］和 $\mathrm{tr}(\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B})$。）

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$K=4$

聚类	聚类中的公司数	公　　司
1	5	爱达荷电力公司(8),内华达电力公司(11),普盖特桑德电力与电灯公司(16),弗吉尼亚电气与电力公司(22),肯塔基公用事业公司(9)
2	6	中央路易斯安那电气公司(3),俄克拉何马天然气与电力公司(14),南方公司(18),得克萨斯公用事业公司(19),亚利桑那公共服务公司(1),佛罗里达电力与电灯公司(6)
3	5	新英格兰电气公司(12),太平洋天然气与电力公司(15),圣地亚哥天然气与电力公司(17),联合照明公司(21),夏威夷电气公司(7)
4	6	联合爱迪生公司(纽约)(5),波士顿爱迪生公司(2),爱迪生天然气与电力公司(10),北方电力公司(13),威斯康星电力公司(20),联邦爱迪生公司(4)

聚类中心之间的距离

$$\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 3.08 & 0 & & \\ 3.29 & 3.56 & 0 & \\ 3.05 & 2.84 & 3.18 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

$K=5$

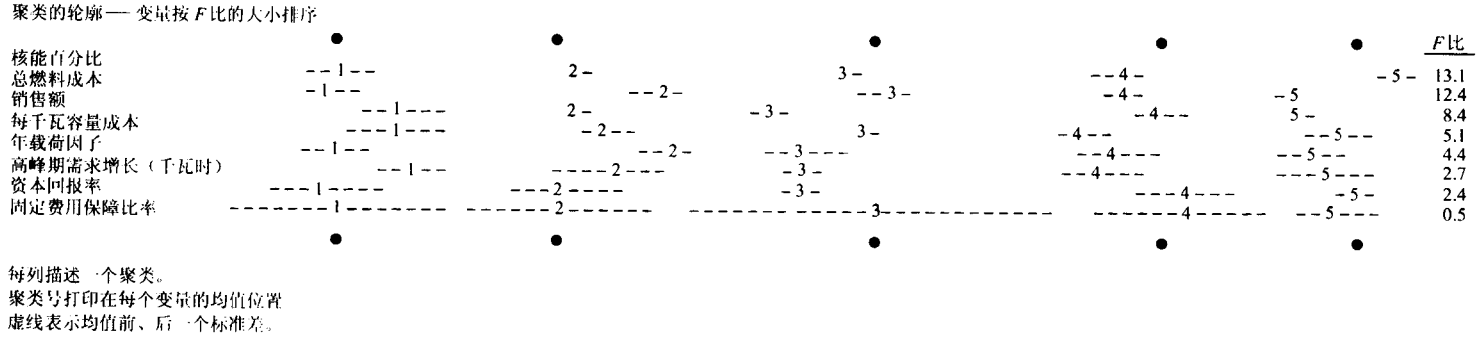
聚类	聚类中的公司数目	公　　司
1	5	内华达电力公司(11),普盖特桑德电力与电灯公司(16),爱达荷电力公司(8),弗吉尼亚电气与电力公司(22),肯塔基公用事业公司(9)
2	6	中央路易斯安那电气公司(3),得克萨斯公用事业公司(19),俄克拉何马天然气与电力公司(14),南方公司(18),亚利桑那公共服务公司(1),佛罗里达电力与电灯公司(6)
3	5	新英格兰电气公司(12),太平洋天然气与电力公司(15),圣地亚哥天然气与电力公司(17),联合照明公司(21),夏威夷电气公司(7)
4	2	联合爱迪生公司(纽约)(5),波士顿爱迪生公司(2)
5	4	联邦爱迪生公司(4),爱迪生天然气与电力公司(10),北方电力公司(13),威斯康星电力公司(20)

聚类中心之间的距离

$$\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ 3.08 & 0 & & & \\ 3.29 & 3.56 & 0 & & \\ 3.63 & 3.46 & 2.63 & 0 & \\ 3.18 & 2.99 & 3.81 & 2.89 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

$K=5$ 时的各种聚类轮廓图示于图 12.13。图中八个变量按组间变差与组内变差之比从大到小的顺序排列。[对单变量的 F 比,见 6.4 节。]我们有

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com



每列描述一个聚类。
聚类号打印在每个变量的均值位置
虚线表示均值前、后一个标准差。

图 12.13 公用事业公司数据在 K=5 时的聚类轮廓图

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$F_{nuc} = \frac{\text{聚类间核能百分比的均方}}{\text{聚类内核能百分比的均方}} = \frac{3.335}{0.255} = 13.1$$

可见不同聚类的公司之间的核能百分比弥散度很大，而同一聚类内部的公司其核能百分比的变差很小。燃料成本和年销售额在区分聚类方面看来也有某种重要性。

回顾五个聚类中的公司可以看到，K 均值法给出的结果一般与平均连接分层法的结果一致。(见例 12.10。)具有相同或相容地理位置的公司聚集在一起。还有，处于同一聚类中的公司其核能百分比大致相同。

正如我们在全书一直强调的那样，在聚类过程中评价单个变量的重要性时一定要小心，这种评价必须从一个多元的角度判断。所有变量(多元观测值)决定各个聚类均值和各个项目的归属。此外，量度个别变量重要性的描述性统计量的值是聚类个数及最终聚类结构的函数。另一方面，在得出结果之后，有些描述性量度可能有助于评估聚类方法是否“成功”。

对非分层方法的最后评注

对非分层方法在事先不固定聚类数目 K 的问题上有很多争议，争议包括以下几点：

1. 若两个或更多个种子点碰巧处于同一聚类之中，所得到的最终聚类会难以区分。
2. 当存在某个离群值时，至少会产生一个所含项目非常分散(不集中)的聚类。
3. 即使知道总体由 K 个组组成，抽样过程也有可能产生这样的结果：来自最稀疏的那一组的数据未出现在样本之中。这种情况下，强行将数据分成 K 组会造成某些毫无意义的聚类。

当某一次算法运行中需要用户指定 K 值时，使这种算法对若干个不同的初值重复运行多次，始终是一个不错的想法。

其他关于非分层聚类方法的讨论可从[2]，[4]和[10]中找到。

12.5 多维标度变换

本节讨论在低维空间展示(经过变换的)多元数据的方法。我们在前面曾讨论过类似的问题，例如对前两个主成分得分作图，或者对前两个线性判别量的得分作图。本节中要讨论的方法与上述方法不同。这里的基本目标是将原始数据“拟合”到一个低维坐标系中，使得由降维所引起的任何变形达到最小。变形通常是指原始数据点之间的相似性或相异性(距离)。虽然可以用欧氏距离来量度最终低维结构中点与点的接近程度，相似性或相异性概念却依赖于它们的定义方法。我们所提到的那类低维图称为数据的**“定位”**。

多维标度变换法涉及这样的问题：当 N 个项目中各对项目之间的相似性(或距离)给定时，求这些项目在低维空间中的表示，并使项目间的接近度与原先的相似性(或距离)“大体匹配”。

标度变换也许不可能同原始相似性(距离)的排序严格匹配。因此，标度方法试图找到 $q \leqslant N-1$ 维空间中的某些结构，使上述匹配尽可能良好。匹配优度的数值量度称为**应力**。

有可能将 N 个项目在一个低维坐标系中作出分类，且只用 $N(N-1)/2$ 个原始相似

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

性(距离)的**等级顺序**而不用其数值。当只用这种顺序信息来获得几何表示时,这个过程称为**非度量性多维标度变换**。如果利用原始相似性(距离)的实际数值来获得一个 q 维的几何表示,则此种过程称为**度量性多维标度变换**。度量性多维标度变换亦称**主坐标分析**。

标度变换方法为谢泼德(Shepard)(见[19]中对早期工作的评论)和克鲁斯卡尔(Kruskal)[11,12,13]等人所提出。关于多维标度变换的历史、理论和应用,文献[23]提供了一个很好的总结。多维标度变换法需要使用计算机。目前有几个好的机算机程序可用于这一目的。

基本算法

对 N 个项目,各对不同项目之间共有 $M=N(N-1)/2$ 个相似性(距离)。这些相似性构成基本数据。(如果相似性不易量化,例如两种颜色间的相似性,则相似性的等级顺序便是基本数据。)

假定没有结(相等),则相似性数据可依严格上升的顺序排成一列:

$$s_{i_1k_1} < s_{i_2k_2} < \cdots < s_{i_Mk_M} \tag{12-17}$$

这里 $s_{i_1k_1}$ 为 M 个相似性中最小者。下标 i_1k_1 指示最不相似的那一对项目(即在相似性排序中等级为 1 的项目)。其他下标可按类似方式解释。我们要找到这 N 个项目的一个 q 维点结构,使得各对项目之间的距离 $d_{ik}^{(q)}$ 与式(12-17)中的排序相匹配。当距离 $d_{ik}^{(q)}$ 的排序与式(12-17)中的排序相对应时,或者说当

$$d_{i_1k_1}^{(q)} > d_{i_2k_2}^{(q)} > \cdots > d_{i_Mk_M}^{(q)} \tag{12-18}$$

时,便得到一个完美的匹配。就是说,q 维空间中距离的递降顺序与原始相似性的递增顺序完全类似。这里重要的只是式(12-18)中的排序,距离的大小是无关紧要的。

对给定的 q 值,可能找不到这样一种 q 维空间的点结构,其点间距离与原始相似性之间有单调关系。克鲁斯卡尔[11]曾提出一个用以衡量某个几何表示偏离完善匹配的程度的量度,这个量度称为应力。其定义为

$$\text{应力}(q) = \left\{ \frac{\sum\sum_{i<k} (d_{ik}^{(q)} - \hat{d}_{ik}^{(q)})^2}{\sum\sum_{i<k} [d_{ik}^{(q)}]^2} \right\}^{1/2} \tag{12-19}$$

其中 $\hat{d}_{ik}^{(q)}$ 满足式(12-18),即它们与相似性之间有单调关系。这些 $\hat{d}_{ik}^{(q)}$ 并不是真正的距离,因为它们不满足式(1-25)中距离的常见性质。它们仅仅是用来评价真实距离 $d_{ik}^{(q)}$ 的非单调性的一些参考数值。

基本的想法是找到 q 维空间中 N 个项目的点表示,使应力(q)尽可能地小。克鲁斯卡尔[11]建议根据以下准则对应力作非正式解释:

应力	拟合优度
20%	差
10%	一般
5%	好
2.5%	非常好
0%	完美

(12-20)

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

这里的**拟合优度**是指相似性与最终距离之间的单调关系。

第二种偏离度的量度是由塔卡杨(Takane)等人[21]所引进的，已成为一个更受欢迎的准则。对给定维数 q，将这个量度记为 S 应力，其定义为：

$$\text{S 应力} = \left[\frac{\sum\sum_{i<k}(d_{ik}^2 - \hat{d}_{ik}^2)^2}{\sum\sum_{i<k} d_{ik}^4}\right]^{1/2} \tag{12-21}$$

也就是说，S 应力是将式(12-19)中的 d_{ik} 和 $\hat{d}_{ik}$ 用它们的平方代表编后所得到的量度。S 应力的值介于 0 和 1 之间。典型的情况是：此值小于 0.1 意味着给定的点结构对被考察的对象来说是一个好的几何表示。

一旦项目处于 q 维空间，它们的 q 维坐标向量就被作为多元观测值来对待。为了便于直观展示，可以将 q 维散点用它们的主成分坐标来表示。(见第 8 章。)

我们已将应力写为几何表示的维数 q 的函数。对每一个 q，可以找到使应力达到最小的点结构。随着 q 的增加，最小应力将在运算误差的范围内逐渐下降，且当 $q=N-1$ 时达到零。从 $q=1$ 开始，可将应力(q)对 q 作图。这些点随 q 的增加而呈下降排列。若找到一个 q，上述下降趋势到这一点开始接近水平状态，即形成一个“肘”形曲线，这个 q 便是“最佳”维数。

整个多维标度变换算法可归纳成以下几个步骤：

1. 对 N 个项目，得出各对不同项目之间的 $M=N(N-1)/2$ 个相似性(距离)。将这些相似性按式(12-17)那样排序。(距离则按从大到小的方式排序。)如果相似性(距离)无法算出，则必须指出它们的等级顺序。

2. 用一个尝试性 q 维点结构计算点间距离 $d_{ik}^{(q)}$ 和数 $\hat{d}_{ik}^{(q)}$，使后者满足式(12-18)，从而使式(12-19)中的应力或式(12-21)中的 S 应力最小化。(在计算机多维标度变换程序中，常用一些能产生单调“拟合”距离的回归方法来确定 $\hat{d}_{ik}^{(q)}$ 值。)

3. 对给定的 $\hat{d}_{ik}^{(q)}$，移动前一组点，以便得到一个新的改进的点结构。(对固定的 q，改进的点结构可通过将一般的函数最小化程序用于应力来确定。这里应力被视作 N 个项目的 $N\times q$ 个坐标的函数。)对新的点结构可以计算新的点间距离 $d_{ik}^{(q)}$ 并进而得到新的 $\hat{d}_{ik}^{(q)}$，因而有更小的应力。以上过程不断重复，直至得出最优表示(最小应力)。

4. 将最小应力对 q 作图，从对图形的考察中选择最优维数 q^*。 (12-22)

我们已假定最初的相似性数据是对称的($s_{ik}=s_{ki}$)，即没有结(两个或多个相似性相等)，也没有缺失数据。克鲁斯卡尔[11,12]提出了一些在出现有非对称性、有结和(或)有缺失数据的情况时处理问题的方法。此外，现在有一些多维标度变换的计算机程序不仅可以处理欧氏距离，而且可以处理一般的闵可夫斯基距离。[见式(12-3)。]

以下三个例子用来说明以距离作为初始相似(异)性量度的多维标度变换。

例 12.14 (美国各城市的多维标度变换)

表 12.7 给出选定的各对美国城市之间的航线距离。因为城市自然位于一个二维空间之中(地球曲面一个接近平面的部分)，所以毫不奇怪，$q=2$ 的多维标度变换将这些城市表示为平面上的点，因为这些点的相对位置大体与它们在地图上的相对位置一致。注意，如果表中的距离依从大到小的顺序排列，即按从最不相似到最相似的顺序排列，则第一个

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

位置是 $d_{波士顿,洛杉矶}=3052$。

表 12.7　航线距离数据

	亚特兰大(1)	波士顿(2)	辛辛那提(3)	哥伦布(4)	达拉斯(5)	印第安那波利斯(6)	小石城(7)	洛杉矶(8)	孟菲斯(9)	圣路易斯(10)	斯波坎(11)	坦帕(12)
(1)	0											
(2)	1068	0										
(3)	461	867	0									
(4)	549	769	107	0								
(5)	805	1819	943	1050	0							
(6)	508	941	108	172	882	0						
(7)	505	1494	618	725	325	562	0					
(8)	2197	3052	2186	2245	1403	2080	1701	0				
(9)	366	1355	502	586	464	436	137	1831	0			
(10)	558	1178	338	409	645	234	353	1848	294	0		
(11)	2467	2747	2067	2131	1891	1959	1988	1227	2042	1820	0	
(12)	467	1379	928	985	1077	975	912	2480	779	1016	2821	0

对 $q=2$ 维的多维标度变换图示于图 12.14 中。坐标轴是沿散布图的主成分方向。

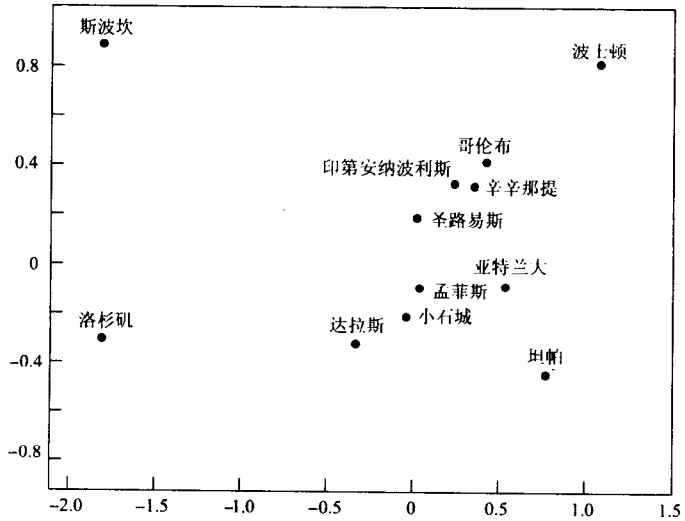


图 12.14　多维标度变换所产生的一些城市的几何表示

应力(q)对 q 的点图示于图 12.15。由于应力(q)×100%=12%，将这些城市表为一维(沿一个轴)的点也不能说不合理。应力函数的"肘"出现在 $q=2$ 处。这里应力(2)×100%=0.8%，因此"拟合"几乎是完美的。

注意在图 12.15 中，应力在 $q=3$ 时实际上是增加了。这种不正常在应力值非常小时有可能发生，这是由用于确定最小应力位置的数值搜索法本身的困难所引起的。

例 12.15　(公用事业公司的多维标度变换)

我们来将例 12.8 中 22 个公用事业公司的数据表示为低维空间的点。各对公司之间

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

的相似(异)性量度就是表 12.1 中所列的欧氏距离。$q=1,2,\cdots,6$ 六种维数的多维标度变换所产生的应力函数示于图 12.16。

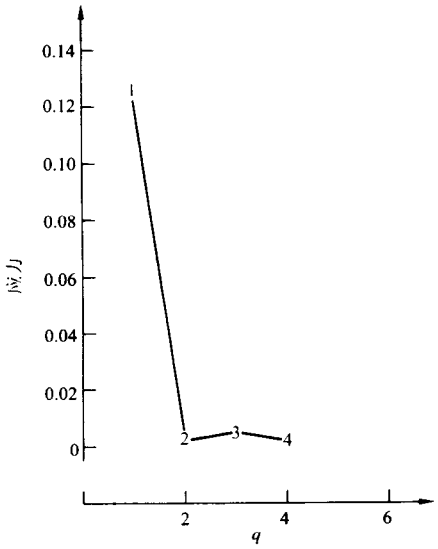


图 12.15　城市间航线距离的应力函数

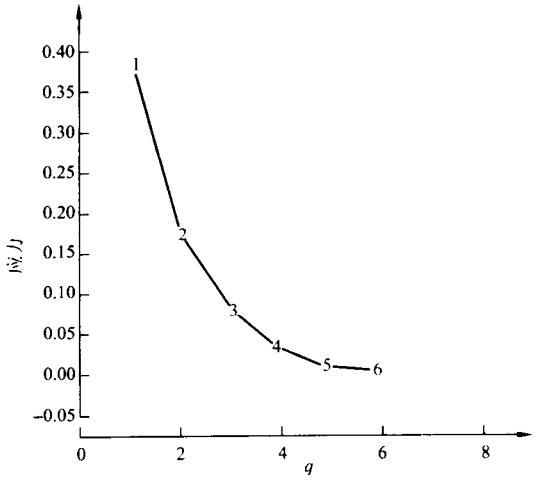


图 12.16　公用事业公司间距离的应力函数

图 12.16 中的应力函数没有明显的肘形。此图显示“好”应力值(小于或等于 5%)的点大致在 $q=4$ 附近。对公用事业公司可以得出一个好的 4 维表示，但很难作图。我们在图 12.17 中展示 $q=2$ 维的公用事业公司结构图。坐标轴沿最终散点的样本主成分方向。

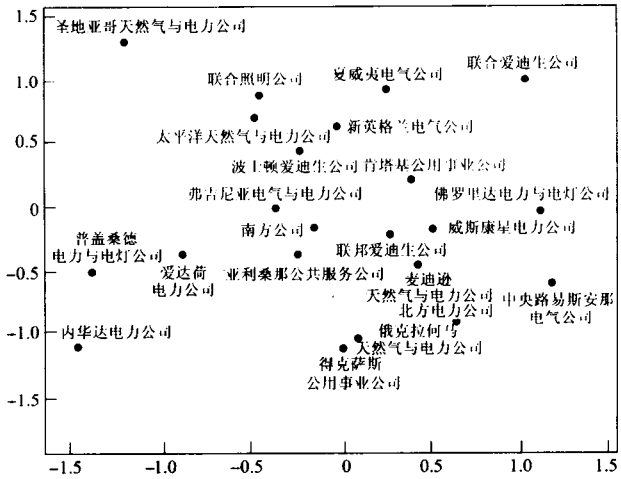


图 12.17　由多维标度变换产生的公用事业公司的几何表示

虽然二维情形下的应力值相当高(应力(2)×100%=19%)，图 12.17 中诸公司间的距离与本章早些时候所提供的聚类分析结果差别不是特别大。例如，中西部的公司——联邦爱迪生，威斯康星电力(WEPCO)，麦迪逊天然气与电力(MG&E)，和北方电力

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(NSP)——彼此很接近(相似)。得克萨斯公用事业及俄克拉何马天然气与电力(Ok. G&E)也非常接近(相似)。其他公用事业公司倾向于按地理位置或相似的环境分组。

这些公司在二维空间中布点后其点间距离 $d_{ik}^{(2)}$ 不可能与表 12.1 中的原始(6 维)距离完全一致。为了布点需要更大的灵活性,而这种灵活性只有引进更多的维数才能得到。

例 12.16 (大学的多维标度变换)

表 12.9 给出与 25 所美国大学有关的数据。(见例 12.18。)这些数据中有:新生入学的平均 SAT 得分,新生在高中时排名前 10%的人数百分比,报考者的入学百分比,学生教师比,估计的年费用以及毕业率(%)。将度量多维标度变换算法用于经过标准化的大学数据,便得到这些大学的二维表示,结果示于图 12.18。注意私立大学在图的右边聚集,而大型公立大学一般位于左侧。

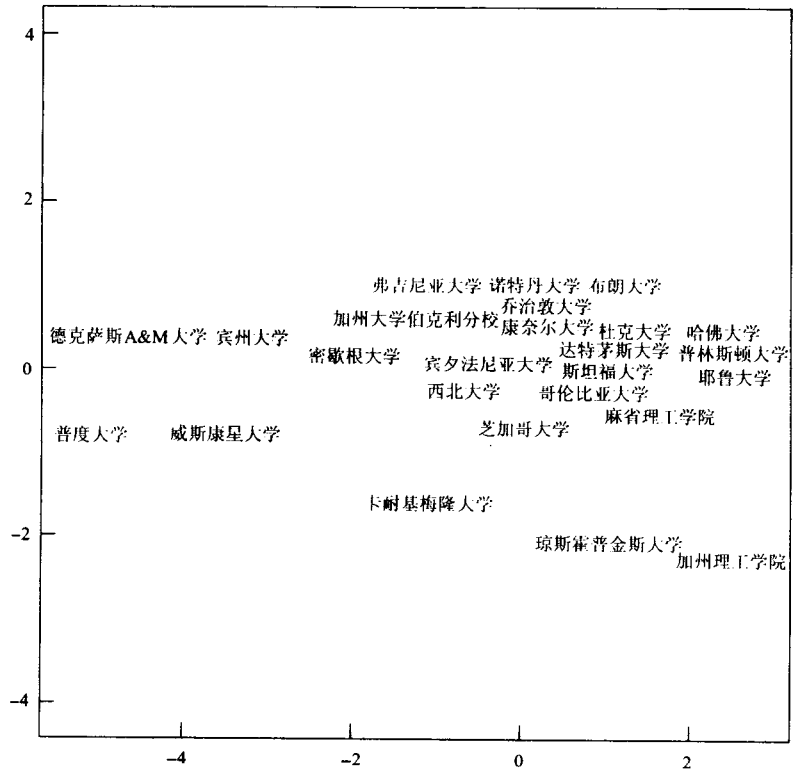


图 12.18 由度量多维标度变换得出的大学的二维表示

对同一组数据用非度量多维标度变换得到的几何表示见图 12.19。对本例来说,度量和非度量多维标度变换所给出的几何表示非常相似。两种方法所给出的二维应力值都在 10%左右。

经典的度量标度变换或主坐标分析,等价于对主成分作图。不同的软件程序选择特征向量的符号也不同,因此初看起来两个解似乎是不同的。然而,如果对一个或两个坐标作镜面反射,这两个解就完全一致。(见[17]。)

归纳起来,多维标度变换法的关键目标是低维空间的图像。无论何时,只要多元数据

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

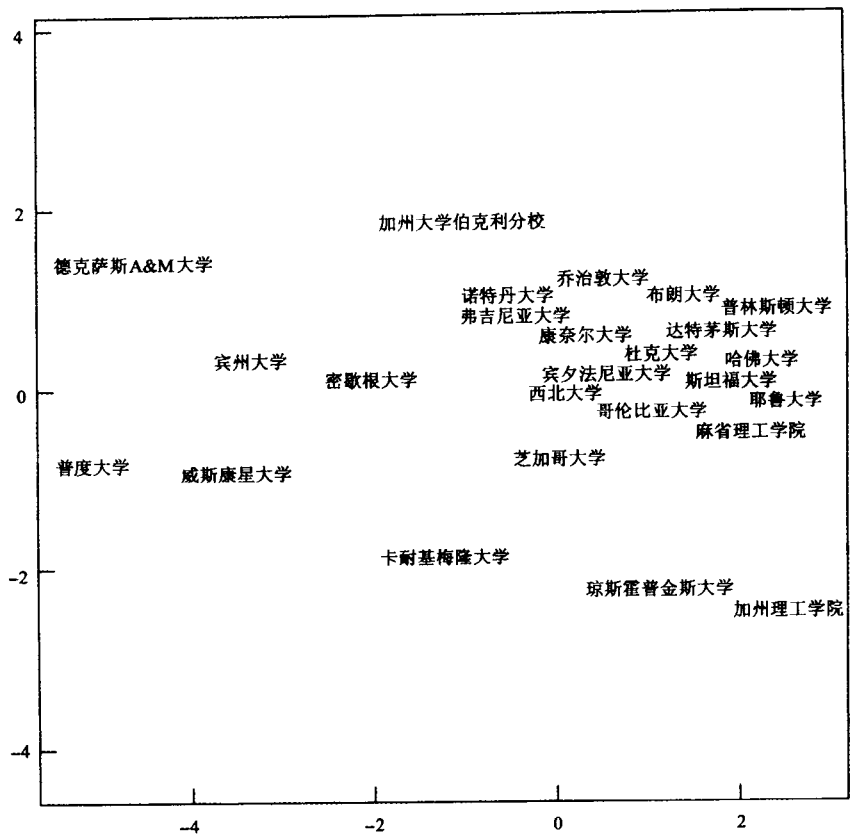


图 12.19　由非度量多维标度变换得出的大学的二维表示

可以表示为二维或三维空间中的图，目测法就能对数据解释提供很大帮助。

当多元观测值有自然的数值，且 p 维空间中的欧氏距离 $d_{ik}^{(p)}$ 可以计算，我们就可以通过使

$$E=\left[\sum_{i<k}\sum(d_{ik}^{(p)}-d_{ik}^{(q)})^2/d_{ik}^{(p)}\right]\left[\sum_{i<k}\sum d_{ik}^{(p)}\right]^{-1} \tag{12-23}$$

达到最小来找到 $q<p$ 维表示。在这种替代方法中，将 p 维和 q 维欧氏距离进行直接比较。通过使 E 最小化来得到低维表示的方法称为**非线性映射**。

任一个低维表示的最后拟合优度均可用**最小张树**来图示。(关于这个问题的进一步讨论见[10]。)

12.6　对应分析

对应分析是一种将频数或计数表中的各种联系用图来表示的方法，由弗伦奇(French)所提出。我们将集中讨论二维的频数表，常称为**列联表**。若列联表有 I 行和 J 列，则由对应分析得出的图包含两组点，一组有 I 个点，对应 I 行；另一组有 J 个点，对应 J

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

列。各点的位置反映各种联系。

相互接近的行点表明相应的行有相似的轮廓(条件分布)。相互接近的列点表明相应的列有相似的轮廓(条件分布)。最后,行点和列点相互接近表明相应的组合发生的频数会高于独立模型(行类别与列类别之间没有关系的模型)下的期望值。

对应分析的输出包含数据的"最佳"二维表示、被标绘各点的坐标值以及每个维中所保留的信息量的一个量度(称为**惯性**)。

在扼要讨论对应分析的代数推导之前,最好通过下面的一个例子来解释一下这种方法的基本思想。

例 12.17 (考古数据的对应分析)

表 12.8 包含在美国西南部 $I=7$ 个考古场所挖掘出来的 $J=4$ 种不同类型陶器的频数。表中行表示考古场所,列表示陶器类型。如果我们将每一行中的频数除以行的合计数,就得到了在该场所的陶器类型的"轮廓"(条件分布)。对不同的场所(行),陶器类型的轮廓用一个条形图示于图 12.20(a)。条的宽度与行频数成比例。一般说,对不同的行,轮廓是不同的;然而场所 P1 和场所 P2 的轮廓却相似。同样,场所 P4 和 P5 的轮廓也相似。

表 12.8 陶器类型的频数

考古场所	陶器类型				合计
	A	B	C	D	
P0	30	10	10	39	89
P1	53	4	16	2	75
P2	73	1	41	1	116
P3	20	6	1	4	31
P4	46	36	37	13	132
P5	45	6	59	10	120
P6	16	28	169	5	218
合计	283	91	333	74	781

资料来源:数据经 M. J. TreHer 许可使用。

对不同类型的陶器(列),考古场所的轮廓用条形图示于图 12.20(b)。场所的轮廓用列合计数来构造。图中各列的条形图看上去彼此不同。这意味着各种类型的陶器在不同考古地点的分布是不同的。

对陶器类型-场所数据做对应分析[①] 得到的二维图示于图 12.21。

例如,图 12.21 中的点指示场所 P1 和 P2 具有类似的陶器类型轮廓(两个点彼此靠近),而场所 P0 和 P6 的轮廓则很不相同(两个点远离)。对应陶器类型的点散得很开,表示不同类型的考古地点的轮廓非常不同。这些发现与图 12.20 所画的轮廓是一致的。

注意点 P0 和 D 彼此很接近,且与其他的点分开。这说明 D 型陶器几乎是排它地与考古场所 P0 相联系。类似地,陶器类型 A 倾向于与场所 P1 相联系,且在较小程度上与 P2 和 P3 相联系。陶器 B 与场所 P4 和 P5 相联系,而类型 C 差不多只和场所 P6 相联系。由

① 对表 12.8 中的数据做对应分析时用了 JMP 软件。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

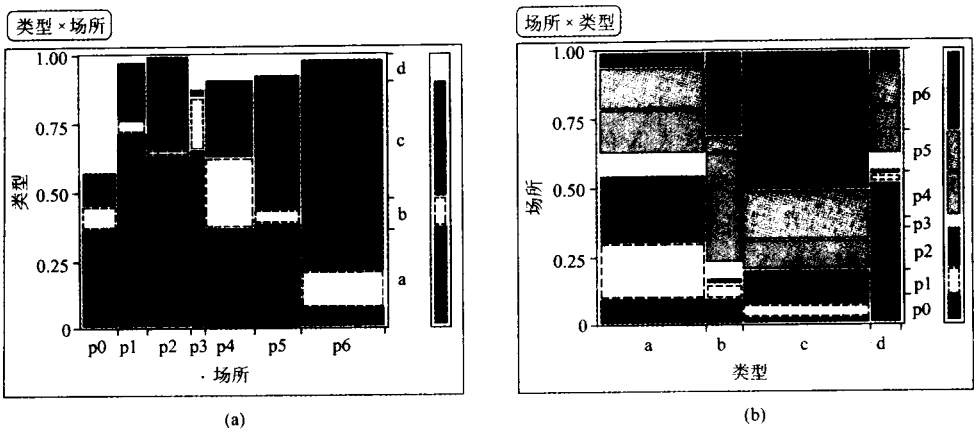


图 12.20　表 12.8 中数据的场所和陶器类型的轮廓

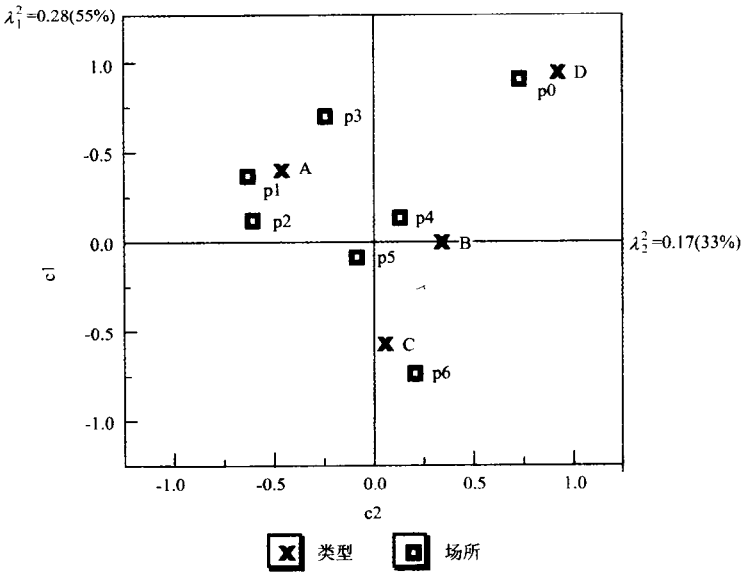


图 12.21　陶器类型-场所数据的对应分析图

于考古场所代表不同的年代，这些联系对考古学家是有特别意义的。

位于二维图纵坐标轴末端的 $\lambda_1^2=0.28$ 是与第一维相联系的惯性，这个惯性占总惯性的 55%。与第二维相联系的惯性为 $\lambda_2^2=0.17$，占总惯性的 33%。两个维的惯性之和占总惯性的 55%＋33%＝88%。由于这个问题中的数据恰好可以用三维空间中的点来表示，图 12.21 中的二维表示损失的信息(变差)很少。等价地说，我们可以认为这些点是多维行点集的“最佳”二维表示，同时也是多维列点集的“最佳”二维表示。总共 88%的惯性说明这个表示对数据的“拟合”是好的。

在本例中，对应分析的图像输出相当清晰地显示了列联表中各种联系的性质。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

对应分析的代数推导

首先，以 $\mathbf{X}$ 代表 $I\times J$ 二维列联表，其元素记为 x_{ij}。在以下的讨论中，我们取 $I>J$，并假定 $\mathbf{X}$ 为列满秩矩阵。列联表 $\mathbf{X}$ 的行和列对应两个特性的不同类别。在表 12.8 中，$I=7$（考古场所），$J=4$（陶器类型）。

为便于图示，我们将列联表变换成适当地中心化和标准化的矩阵。若 n 为 $\mathbf{X}$ 中各种频数之和，则用 n 除 $\mathbf{X}$ 的每个元素，我们可首先构造一个比例矩阵 $\mathbf{P}=\{p_{ij}\}$，其中

$$p_{ij}=\frac{x_{ij}}{n}, i=1,2,\cdots,I,\quad j=1,2,\cdots,J,\text{或}\ \underset{(I\times J)}{\mathbf{P}}=\frac{1}{n}\underset{(I\times J)}{\mathbf{X}} \tag{12-24}$$

矩阵 $\mathbf{P}$ 称为对应阵。下一步，对 $\mathbf{P}$ 作中心化，即对每个元素减去行和与列和的乘积。这个运算产生

$$\tilde{p}_{ij}=p_{ij}-r_ic_j, i=1,2,\cdots,I, j=1,2,\cdots,J,\text{或}\ \tilde{\mathbf{P}}=\mathbf{P}-\mathbf{rc}' \tag{12-25}$$

其中

$$r_i=\sum_{j=1}^{J}p_{ij}=\sum_{j=1}^{J}\frac{x_{ij}}{n}, i=1,2,\cdots,I,\text{或}\ \underset{(I\times 1)}{\mathbf{r}}=\underset{(I\times J)}{\mathbf{P}}\underset{(J\times 1)}{\mathbf{1}}$$

$$c_j=\sum_{i=1}^{I}p_{ij}=\sum_{i=1}^{I}\frac{x_{ij}}{n}, j=1,2,\cdots,J,\text{或}\ \underset{(J\times 1)}{\mathbf{c}}=\underset{(J\times I)}{\mathbf{P}'}\underset{(I\times 1)}{\mathbf{1}} \tag{12-26}$$

及 $\mathbf{1}'=[1,1,\cdots,1]$。我们注意到秩$(\tilde{\mathbf{P}})\leqslant J-1$，因为 $\tilde{\mathbf{P}}\mathbf{1}=\mathbf{P}\mathbf{1}-\mathbf{rc}'\mathbf{1}=\mathbf{r}-\mathbf{r}=\mathbf{0}$。

定义对角矩阵

$$\mathbf{D}_r=\text{对角}(r_1,r_2,\cdots,r_I),\qquad \mathbf{D}_c=\text{对角}(c_1,c_2,\cdots,c_J) \tag{12-27}$$

并构造标准化矩阵

$$\underset{(I\times J)}{\mathbf{P}^*}=\underset{(I\times I)}{\mathbf{D}_r^{-1/2}}\underset{(I\times J)}{\tilde{\mathbf{P}}}\underset{(J\times J)}{\mathbf{D}_c^{-1/2}} \tag{12-28}$$

故 $\mathbf{P}^*$ 的第(i,j)元素为

$$p_{ij}^*=\frac{p_{ij}-r_jc_j}{\sqrt{r_ic_j}}, i=1,2,\cdots,I, j=1,2,\cdots,J \tag{12-29}$$

我们现在可以给出将二维列联表中各种联系表示为点图的步骤。

步骤 1。找到 $\mathbf{P}^*$ 的奇异值分解（见结论 2A.15）。我们有

$$\underset{(I\times J)}{\mathbf{P}^*}=\underset{I\times(J-1)}{\mathbf{U}}\underset{(J-1)\times(J-1)}{\boldsymbol{\Lambda}}\underset{(J-1)\times J}{\mathbf{V}'} \tag{12-30}$$

其中秩$(\mathbf{P}^*)$=秩$(\tilde{\mathbf{P}})\leqslant J-1$，

$$\mathbf{U}'\mathbf{U}=\mathbf{V}'\mathbf{V}=\mathbf{I}$$

对角阵 $\boldsymbol{\Lambda}=$对角$(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{J-1})$包含一些奇异值，且沿主对角线按从大到小的顺序排列。

步骤 2。令 $\tilde{\mathbf{U}}=\mathbf{D}_r^{1/2}\mathbf{U}$，及 $\tilde{\mathbf{V}}=\mathbf{D}_c^{1/2}\mathbf{V}$，此时利用式(12-28)和式(12-30)可将 $\tilde{\mathbf{P}}$ 的奇异值分解为

$$\tilde{\mathbf{P}}=\mathbf{P}-\mathbf{rc}'=\tilde{\mathbf{U}}\boldsymbol{\Lambda}\tilde{\mathbf{V}}'=\sum_{j=1}^{J-1}\lambda_j\tilde{\mathbf{u}}_j\tilde{\mathbf{v}}'_j \tag{12-31}$$

其中 $\tilde{\mathbf{u}}_j$ 为 $\tilde{\mathbf{U}}$ 的第 j 列，$\tilde{\mathbf{v}}_j$ 为 $\tilde{\mathbf{V}}$ 的第 j 列。在这一表示中，左、右两个奇异向量分别用矩阵 $\mathbf{D}_r^{-1}$ 和 $\mathbf{D}_c^{-1}$ 为权标准化，使之具有单位长度，即

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\underset{((J-1)\times I)}{\tilde{\mathbf{U}}'}\ \underset{(I\times I)}{\mathbf{D}_r^{-1}}\ \underset{(I\times(J-1))}{\tilde{\mathbf{U}}} = \underset{((J-1)\times J)}{\tilde{\mathbf{V}}'}\ \underset{(J\times J)}{\mathbf{D}_c^{-1}}\ \underset{(J\times(J-1))}{\tilde{\mathbf{V}}} = \underset{(J-1)\times(J-1)}{\mathbf{I}} \tag{12-32}$$

$\tilde{\mathbf{U}}$ 的列定义了 $\mathbf{P}$ 的列轮廓点的坐标轴。类似地，$\tilde{\mathbf{V}}$ 的列定义了 $\mathbf{P}$ 的行轮廓点的坐标轴。

步骤 3。计算行轮廓的坐标

$$\underset{(I\times(J-1))}{\mathbf{Y}} = \underset{(I\times I)}{\mathbf{D}_r^{-1}}\ \underset{(I\times(J-1))}{\tilde{\mathbf{U}}}\ \underset{((J-1)\times(J-1))}{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{12-33}$$

以及列轮廓的坐标

$$\underset{(J\times(J-1))}{\mathbf{Z}} = \underset{(J\times J)}{\mathbf{D}_c^{-1}}\ \underset{(J\times(J-1))}{\tilde{\mathbf{V}}}\ \underset{((J-1)\times(J-1))}{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{12-34}$$

$\mathbf{Y}$ 的前两列包含了数据最优二维表示中的各对行点坐标，而 $\mathbf{Z}$ 的前两列则包含了数据最优二维表示中的各对列点坐标。这两组点可绘在同一个坐标系中，产生如图 12.21 所示的图像。对一组行点或一组列点，二维图中的欧氏距离与原始数据中各对行(列)轮廓之间的统计距离相对应。重要的是要记住：在对应行轮廓的点与对应列轮廓的点之间没有直接的距离关系。

步骤 4。展现在二维点图两个坐标轴末端的惯性为与这两个维对应的奇异值的平方。总惯性定义为所有非零奇异值的平方和：

$$\text{总惯性} = \sum_{i=1}^{K}\lambda_i^2 \tag{12-35}$$

其中 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_K > 0$ 为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的非零对角元。这里 $K=$ 秩$(\tilde{\mathbf{P}})$。通常秩 $\tilde{\mathbf{P}} = \min(I-1, J-1)$。

逼近行(列)轮廓

利用奇异值分解[见式(12-31)]

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{P} - \mathbf{r}\mathbf{c}' = \sum_{k=1}^{J-1}\lambda_k\tilde{\mathbf{u}}_k\tilde{\mathbf{v}}'_k \tag{12-36}$$

对某个 $K<J-1$，我们有 $\mathbf{P}$ 的一个近似

$$\mathbf{P} \doteq \mathbf{r}\mathbf{c}' + \sum_{k=1}^{K}\lambda_k\tilde{\mathbf{u}}_k\tilde{\mathbf{v}}'_k = \hat{\mathbf{P}} \tag{12-37}$$

在所有秩不超过 $K+1$ 的矩阵中，式(12-37)右端的 $\hat{\mathbf{P}}$ 使广义最小二乘准则：

$$\text{迹}(\mathbf{D}_r^{-1}(\mathbf{P}-\hat{\mathbf{P}})\mathbf{D}_c^{-1}(\mathbf{P}-\hat{\mathbf{P}})')$$

达到极小。例如，如果我们考察 $\mathbf{P}$ 和 $\hat{\mathbf{P}}$ 的行，则 $\hat{\mathbf{P}}$ 的各行定义一个$(K+1)$维的子空间，这个子空间用加权距离平方和来表示时距 $\mathbf{P}$ 的各行最近①。正是在这个意义下我们在前面的讨论中使用“最优”这个词。

用式(12-33)，(12-34)和(12-31)，可将 $\mathbf{P}$ 用坐标矩阵 $\mathbf{Y}$ 和 $\mathbf{Z}$ 表示出来：

$$\mathbf{P} = \mathbf{r}\mathbf{c}' + \mathbf{D}_r\mathbf{Y}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\mathbf{Z}'\mathbf{D}_c \tag{12-38}$$

或

$$p_{ij} = r_ic_j + r_ic_j\sum_{k=1}^{J-1}y_{ik}z_{jk}/\lambda_k \tag{12-39}$$

其中 y_{ik} 为 $\mathbf{Y}$ 的(i,k)元，z_{jk} 为 $\mathbf{Z}$ 的(j,k)元。对于 $K+1(<J-1)$维的近似，式(12-39)右端的求和从 1 取到 K。(译者注：这句话原文如此，含义不明。)

---

① 利用 $\mathbf{P}$ 和 $\hat{\mathbf{P}}$ 的列可构造同样的论据。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

联系的卡方分析与对应分析

前面所介绍的对应分析的理论基础，是对二维列联表中诸种联系进行的卡方分析。

对一个 I 行和 J 列的二维列联表，量度行变量和列变量之间联系度的 χ^2 统计量为

$$\chi^2 = \sum_{i,j} \frac{(O_{ij} - E_{ij})^2}{E_{ij}} \tag{12-40}$$

其中 $O_{ij}=x_{ij}$ 为对第 (i,j) 单元观测到的频数，而 $E_{ij}=nr_ic_j$ 则为当行变量与列变量独立（不相关）时对同一单元的期望频数。

对式(12-40)略加整理并利用式(12-29)，可以得到

$$\chi^2 = n\sum_{i,j} \frac{(p_{ij} - r_ic_j)^2}{r_ic_j} = n\sum_{i,j} p_{ij}^{*2} \tag{12-41}$$

用矩阵表示时有

$$\frac{\chi^2}{n} = \text{迹}(\mathbf{D}_r^{-1}(\mathbf{P} - \mathbf{rc}')\mathbf{D}_c^{-1}(\mathbf{P} - \mathbf{rc}')') = \text{迹}(\mathbf{P}^*\mathbf{P}^{*\prime}) = \sum_{i,j} p_{ij}^{*2} \tag{12-42}$$

令 $\hat{\mathbf{P}}=\mathbf{rc}'$。由于秩$(\hat{\mathbf{P}})$=秩$(\mathbf{rc}')$=min 秩$(\mathbf{r},\mathbf{c})=1$，于是我们由式(12-37)及紧接此式之后的讨论知道：$\mathbf{rc}'$ 为 $\mathbf{P}$ 的最优秩 1 近似（对应于独立模型），而 χ^2/n 为 $\mathbf{P}$ 和 $\mathbf{rc}'$ 之间的歧异（在广义最小二乘意义下）。对应分析试图用图形方法表示的正是这种与独立性之间的歧异。

惯性

第 j 个元素为

$$\tilde{r}_{ij} = \frac{x_{ij}/n}{\left(\sum_j x_{ij}\right)/n} = \frac{p_{ij}}{r_i}, j = 1,2,\cdots,J$$

的第 i 行轮廓 $\tilde{\mathbf{r}}_i$ 是 $\mathbf{X}$ 的第 i 行被其和来除。这样，行轮廓的矩阵为

$$\underset{I\times J}{\tilde{\mathbf{R}}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{r}}_1' \\ \tilde{\mathbf{r}}_2' \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{r}}_I' \end{bmatrix} = \underset{I\times I}{\mathbf{D}_r^{-1}} \underset{I\times J}{\mathbf{P}} \tag{12-43}$$

类似地，列轮廓 $\tilde{\mathbf{c}}_j, j=1,2,\cdots,J$，为由 $\mathbf{X}$ 的列除以列的和，故 $\tilde{\mathbf{c}}_j$ 的第 i 个元素为

$$\tilde{c}_{ij} = \frac{p_{ij}}{c_j}, \quad i = 1,2,\cdots,I$$

用矩阵表示即为

$$\underset{J\times I}{\tilde{\mathbf{C}}} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{c}}'_1 \\ \tilde{\mathbf{c}}_2' \\ \vdots \\ \tilde{\mathbf{c}}_J' \end{bmatrix} = \underset{J\times J}{\mathbf{D}_c^{-1}} \underset{J\times I}{\mathbf{P}'} \tag{12-44}$$

陶器数据的轮廓示于图 12.20。

考虑行轮廓的加权平均 $\tilde{\mathbf{R}}'\mathbf{r}$ 或行中心。由于式(12-26)，现在 $\tilde{\mathbf{R}}'\mathbf{r}=\mathbf{P}'\mathbf{D}_r^{-1}\mathbf{r}=$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$\mathbf{P}'\mathbf{D}_r^{-1}\mathbf{P}\mathbf{1}$。又由于式(12-43),进一步有 $\mathbf{D}_r^{-1}\mathbf{D}\mathbf{1}=\mathbf{1}$,$\mathbf{D}_r^{-1}\mathbf{P}$ 的元素为 p_{ij}/r_j。最后 $\mathbf{c}=\mathbf{P}'\mathbf{1}$,故

$$\mathbf{c} = \mathbf{P}'\mathbf{D}_r^{-1}\mathbf{r} \tag{12-45}$$

类似地,列轮廓的加权平均 $\tilde{\mathbf{C}}'\mathbf{c}$ 或列中心为

$$\mathbf{r} = \mathbf{P}\mathbf{D}_c^{-1}\mathbf{c} \tag{12-46}$$

我们现在可以定义惯性了。

总惯性为行轮廓(或列轮廓)到中心的平方距离的加权和。因此,它是表示行轮廓(或列轮廓)的各点之间的全部变差或差别。可以证明①:同行点相联系的惯性与同列点相联系的惯性是一样的。这样

$$\text{惯性} = \sum_{i=1}^{I} r_i(\tilde{\mathbf{r}}_i - \mathbf{c})'\mathbf{D}_c^{-1}(\tilde{\mathbf{r}}_i - \mathbf{c}) = \sum_{j=1}^{J} c_j(\tilde{\mathbf{c}}_j - \mathbf{r})'\mathbf{D}_r^{-1}(\tilde{\mathbf{c}}_j - \mathbf{r}) \tag{12-47}$$

或

$$\begin{aligned}\text{惯性} &= \sum_i r_i \sum_j (p_{ij}/r_i - c_j)^2/c_j = \sum_j c_j \sum_i (p_{ij}/c_j - r_i)^2/r_i \\ &= \sum_i \sum_j (p_{ij} - r_i c_j)^2/r_i c_j = \chi^2/n\end{aligned} \tag{12-48}$$

利用关系

$$\mathbf{P} - \mathbf{r}\mathbf{c}' = \sum_{k=1}^{J-1} \lambda_k \tilde{\mathbf{u}}_k \tilde{\mathbf{v}}'_k$$

标度变换(12-28),以及 $\tilde{\mathbf{u}}$ 和 $\tilde{\mathbf{v}}$ 的正交性条件,我们有

$$\text{惯性} = \chi^2/n = \text{迹}(\mathbf{D}_r^{-1}(\mathbf{P} - \mathbf{r}\mathbf{c}')\mathbf{D}_c^{-1}(\mathbf{P} - \mathbf{r}\mathbf{c}')') = \sum_{k=1}^{J-1} \lambda_k^2 \tag{12-49}$$

矩阵 $\mathbf{Y}$ 和 $\mathbf{Z}$ 的各行给出中心化的行轮廓集合和列轮廓集合的坐标。利用式(12-32)可以证明

$$\mathbf{Y}'\mathbf{D}_r\mathbf{Y} = \mathbf{\Lambda}^2 = \mathbf{Z}'\mathbf{D}_c\mathbf{Z} \tag{12-50}$$

故沿第 k 个坐标轴的行点和列点坐标的加权平方和都等于 λ_k^2,称为第 k 个主惯性(这就是在图 12.21 中沿坐标轴标出的 λ_k^2 值)。

我们如何解释比例 $(\lambda_1^2+\lambda_2^2)/\sum_{k=1}^{J-1}\lambda_k^2$ 的大值?从几何上我们可以说,中心化数据中的各种联系可用平面上的点很好表示出来,而且这个最佳近似平面考虑了除独立性模型所考虑的变差以外的几乎所有的数据间变差。从代数上说,近似

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{P} - \mathbf{r}\mathbf{c}' \doteq \lambda_1\tilde{\mathbf{u}}_1\tilde{\mathbf{v}}'_1 + \lambda_2\tilde{\mathbf{u}}_2\tilde{\mathbf{v}}'_2$$

是很好的,或者等价地说,

$$\mathbf{P} \doteq \mathbf{r}\mathbf{c}' + \lambda_1\tilde{\mathbf{u}}_1\tilde{\mathbf{v}}'_1 + \lambda_2\tilde{\mathbf{u}}_2\tilde{\mathbf{v}}'_2$$

最后评注

对应分析的本质是一种在低维空间中用图形方法表示联系的技术。可以将它看作是

① 例如,见格里纳克(Greenacre)[9]。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

一种标度变换法，也可看成是诸如多维标度变换(12.5 节)和双重信息图(12.7 节)这类其他方法的补充。对应分析与主成分分析(第 10 章)和正则相关分析(第 10 章)也有联系。希望学到更多对应分析知识的读者，阅读格里纳克的书[9]是一种很好的选择。

12.7 用于观察抽样单元和变量的双重信息图

双重信息图是 $n\times p$ 数据阵中信息一种图形表示方法。“双重”是指包含在数据阵中的两类信息：行中的信息属于样本或抽样单元，而列中的信息则属于变量。

当只有两个变量时，通过散布图就能将抽样单元中的信息和变量中的信息在同一张图上表示出来。这样人们就可以通过视觉来检查一个抽样单元相对另一个抽样单元的位置以及两个变量中的每一个与任何一个单元位置的相对重要性。

当存在若干个变量时，我们可以构造散布图矩阵，但不能将抽样单元表示在一张图上。另一方面，抽样单元的二维图可以通过对前两个主成分作图来得到。(见 8.4 节。)隐藏在双重信息图背后的想法是将有关变量的信息加到主成分图中去。

图 12.22 给出表 12.5 中公用事业公司数据的双重信息图。从图中可以看出公司之间是如何分组聚集的，以及变量对它们位置的贡献。例如，变量 X_4(＝年载荷因子)和 X_8(＝总燃料成本)基本上将大部分沿海公司集中在图的右下角。变量 X_1(＝固定费用比)和 X_2(＝资本回报率)将佛罗里达和路易斯安那的公司聚集在一起。

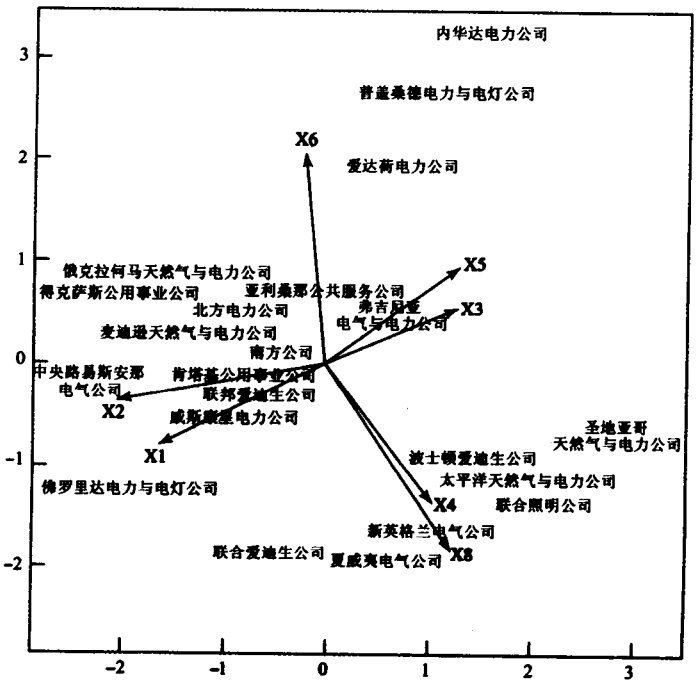


图 12.22 公用事业公司数据的双重信息图

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

构造双重信息图

双重信息图的构造由样本主成分开始。

根据结论 8A.1，数据阵 $\mathbf{X}$ 的最佳二维近似用前两个主成分的样本值来逼近第 j 个观测值 $\mathbf{x}_j$。具体说就是

$$\mathbf{x}_j \doteq \bar{\mathbf{x}} + \hat{y}_{j1}\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{y}_{j2}\hat{\mathbf{e}}_2 \tag{12-51}$$

其中 $\hat{\mathbf{e}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{e}}_2$ 为 $\mathbf{S}$ 或 $\mathbf{X}'_c\mathbf{X}_c=(n-1)\mathbf{S}$ 的前两个特征向量。这里 $\mathbf{X}_c$ 为修正的数据阵，其行为 $(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'$。这两个特征向量确定一个平面，第 j 个抽样单元(行)在这平面上的坐标为一对主成分值 $(\hat{\mathbf{y}}_{j1},\hat{\mathbf{y}}_{j2})$。

为了将关于变量的信息也包括到这个平面图中，我们考虑一对特征向量 $(\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2)$。这两个特征向量是前两个样本主成分的系数向量。因此，矩阵 $\hat{\mathbf{E}}=[\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2]$ 的每一行确定一个变量在图中的位置，而系数的大小(变量的坐标)则给出相应变量在主成分中的权值。变量在图中的位置用一个向量来指示。通常，统计计算机程序会给出一个乘子，将所有向量的长度作适当调整并像抽样单元那样标绘在同一坐标系上。同某个变量比较接近的那些单元很可能在那个变量上有较大的值。为解释一个新点 $\mathbf{x}_0$，我们在图中对它的主成分 $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{x}_0-\bar{\mathbf{x}})$ 作出标绘。

一种直接得出双重信息图的方法从奇异值分解开始。(见结论 2A.15)。首先将 $n\times p$ 均值修正矩阵 $\mathbf{X}_c$ 表为

$$\underset{n\times p}{\mathbf{X}_c} = \underset{n\times p}{\mathbf{U}}\,\underset{p\times p}{\boldsymbol{\Lambda}}\,\underset{p\times p}{\mathbf{V}'} \tag{12-52}$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda}$ 对角 $(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p)$，且 $\mathbf{V}$ 为一个正交阵，其列向量为 $\mathbf{X}'_c\mathbf{X}_c=(n-1)\mathbf{S}$ 的特征向量。也就是说，$\mathbf{V}=\hat{\mathbf{E}}=[\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,\hat{\mathbf{e}}_p]$。将式(12-52)的右端乘以 $\hat{\mathbf{E}}$，我们有

$$\mathbf{X}_c\hat{\mathbf{E}} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda} \tag{12-53}$$

此等式左端矩阵的第 j 行

$$[(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\hat{\mathbf{e}}_1,(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\hat{\mathbf{e}}_2,\cdots,(\mathbf{x}_j-\bar{\mathbf{x}})'\hat{\mathbf{e}}_p] = [\hat{\mathbf{y}}_{j1},\hat{\mathbf{y}}_{j2},\cdots,\hat{\mathbf{y}}_{jp}]$$

恰好是第 j 个单元的主成分值。也就是说，$\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}$ 包含所有的主成分值，而 $\mathbf{V}=\hat{\mathbf{E}}$ 则包含定义主成分的那些系数。

$\mathbf{X}_c$ 的最佳二维近似可以用 $\boldsymbol{\Lambda}^*=$ 对角 $(\lambda_1,\lambda_2,0,\cdots,0)$ 代替 $\boldsymbol{\Lambda}$ 得到。这个结果称为埃卡尔特-扬(Eckart-Young)定理。证明在结论 8A.1 中。于是(最佳二维)近似为

$$\mathbf{X}_c \doteq \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}^*\mathbf{V}' = [\hat{\mathbf{y}}_1,\hat{\mathbf{y}}_2]\begin{bmatrix}\hat{\mathbf{e}}'_1\\ \hat{\mathbf{e}}'_2\end{bmatrix} \tag{12-54}$$

其中 $\hat{\mathbf{y}}_1$ 和 $\hat{\mathbf{y}}_2$ 分别为前两个主成分的值的 $n\times 1$ 向量。

在双重信息图中，数据矩阵的每一行(或项目)用一个点表示，其位置由两个主成分的一对值决定。数据矩阵的第 i 列(或变量)用一个从原点引出指向该点的箭头表示，箭头端点的坐标为 (e_{1i},e_{2i})——式(12-54)右端第二个矩阵 $[\hat{\mathbf{e}}_1,\hat{\mathbf{e}}_2]'$ 第 i 列中的元素。这个尺度与主成分的尺度也许不相匹配，所以引进一个任意乘子，以同一个量将所有向量进行调整。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

双重信息图的思想(即同时将抽样单元和变量表示在一个图中)可推广到正则相关分析和多维标度变换,甚至可推广到更复杂的非线性方法。(见[7]。)

例 12.18 (大学及其特征的双重信息图)

表 12.9 给出某些大学对一些变量的数据,用于将主要大学进行比较或排队。这些变量包括 X_1=新生的平均 SAT 得分,新生中在高中时期名列班上前 10%的人数百分比,X_3=报名者被接受入学的百分比,X_4=学生与教师的比例,X_5=估计的年费用,及 X_6=毕业比例(%)。

由于其中两个变量(SAT 得分和费用)在尺度上与其他变量有很大差别,我们将数据标准化,并根据标准化观测值 z_j 的矩阵作双重信息图。这个双重信息图在图 12.23 中给出。

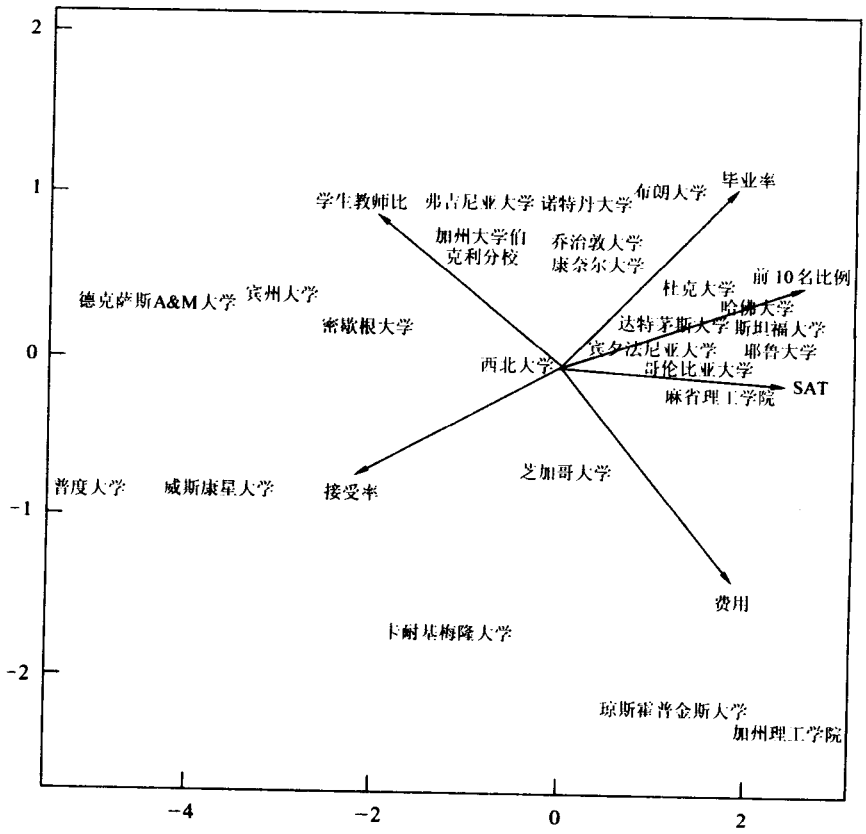


图 12.23 大学数据的双重信息图

注意加州理工学院和琼斯霍普金斯大学远离群体单独在一起,费用变量(X_5)对这种定位负主要责任。在我们的样本中,大型州立大学在图的左侧,而大部分私立大学集中在图的右侧。与私立学校组对变量 SAT(X_1),前 10 名比例(X_2)和毕业率(X_6)有较大的值。西北大学位于图的中心。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 12.9 大学数据

大　学	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6
哈佛大学(Harvard)	14.00	91	14	11	39.525	97
普林斯顿大学(Princeton)	13.75	91	14	8	30.220	95
耶鲁大学(Yale)	13.75	95	19	11	43.514	96
斯坦福大学(Stanford)	13.60	90	20	12	36.450	93
麻省理工学院(MIT)	13.80	94	30	10	34.870	91
杜克大学(Duke)	13.15	90	30	12	31.585	95
加州理工学院(CalTech)	14.15	100	25	6	63.575	81
达特茅斯大学(Dartmouth)	13.40	89	23	10	32.162	95
布朗大学(Brown)	13.10	89	22	13	22.704	94
琼斯霍普金斯大学(JohnsHopkins)	13.05	75	44	7	58.691	87
芝加哥大学(UChicago)	12.90	75	50	13	38.380	87
宾夕法尼亚大学(UPenn)	12.85	80	36	11	27.553	90
康奈尔大学(Cornell)	12.80	83	33	13	21.864	90
西北大学(Northwestern)	12.60	85	39	11	28.052	89
哥伦比亚大学(Columbia)	13.10	76	24	12	31.510	88
诺特丹大学(NotreDame)	12.55	81	42	13	15.122	94
弗吉尼亚大学(UVirginia)	12.25	77	44	14	13.349	92
乔治敦大学(Georgetown)	12.55	74	24	12	20.126	92
卡耐基梅隆大学(CarnegieMellon)	12.60	62	59	9	25.026	72
密歇根大学(UMichigan)	11.80	65	68	16	15.470	85
加州大学(伯克利分校)(UCBerkeley)	12.40	95	40	17	15.140	78
威斯康星大学(UWisconsin)	10.85	40	69	15	11.857	71
宾州大学(PennState)	10.81	38	54	18	10.185	80
普度大学(Purdue)	10.05	28	90	19	9.066	69
得克萨斯 A&M 大学(TexasA&M)	10.75	49	67	25	8.704	67

资料来源:美国新闻与世界报道,1995 年 9 月 18 日。

12.8 普罗克鲁斯特斯分析:一种比较点结构的方法

从一个与 n 个对象有关的给定的 $n\times n$ 距离阵 **D** 或相似阵 **S** 出发,用不同的方法可以得到两种或两种以上的点结构。可能的方法包括度量和非度量的多维标度变换两种。一个自然会提出的问题是:两种方法的解在多大的程度上互相一致?在例 12.16 中,图 12.18 和 12.19 分别给出大学数据的度量多维标度变换(主坐标分析)和非度量多维标度变换的解。这两个点结构看上去颇相似,但给出一个定量的量会是有用的。将两个结构之一适当移动,使得它与另一个结构尽可能对齐,从而得到这两个结构的一个数值比较,这种方法称为**普罗克鲁斯特斯分析**。这个方法的名称源于希腊神话中一个旅店老板普罗克鲁斯特斯的名字,他对每一个到他店中投宿的旅客都要强行拉长或砍去他们的脚,以便同他的一张床相适应。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

构造普罗克鲁斯特斯一致性量度

设 $n\times p$ 矩阵 $\mathbf{X}^*$ 包含用方法 1 得到的 n 个点的坐标，而 $n\times q$ 矩阵 $\mathbf{Y}^*$ 包含用方法 2 得到的 n 个点的坐标，其中 $q\leqslant p$，通过在 $\mathbf{Y}^*$ 中添加一些全部为 0 的列，我们可以假定 $q=p$，因此 $\mathbf{X}^*$ 和 $\mathbf{Y}^*$ 都是 $n\times p$ 阵。为确定这两个结构能否相容，我们可以比方说移动第二个结构，使之与第一个结构相匹配。做法是将第一个结构中的每一点平移，并将该结构绕坐标轴转动或进行反射变换①。

数学上说，对第 j 个点的坐标向量 $\mathbf{y}_i$ 加一个平移向量 $\mathbf{b}$ 并乘一个正交阵 $\mathbf{Q}$ 之后，就将它变换成

$$\mathbf{Q}\mathbf{y}_j+\mathbf{b}$$

然后改变向量 $\mathbf{b}$ 和正交阵 $\mathbf{Q}$ 使得两个结构中全部 n 对对应点之间的平方距离之和达到最小。第一个结构中第 j 个点的坐标 $\mathbf{x}_j$ 与第二个结构中变换后的对应点坐标 $\mathbf{Q}\mathbf{y}_i+\mathbf{b}$ 之间的平方距离为

$$d_j^2(\mathbf{x}_j,\mathbf{Q}\mathbf{y}_j+\mathbf{b})=(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j-\mathbf{b})'(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j-\mathbf{b}) \tag{12-55}$$

我们将残差平方和

$$PR^2=\min_{\mathbf{Q},\mathbf{b}}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j-\mathbf{b})'(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j-\mathbf{b}) \tag{12-56}$$

取作两个结构间的拟合量度或一致性量度。下面的结果告诉我们，如何计算这个普罗克鲁斯特斯一致性残差平方和量度，以及如何确定 $\mathbf{Y}^*$ 相对 $\mathbf{X}^*$ 的**普罗克鲁斯特斯旋转**。

结论 12.1 设 $n\times p$ 结构 $\mathbf{X}^*$ 和 $\mathbf{Y}^*$ 均已中心化，即各行均值皆为零，此时

$$\begin{aligned}PR^2&=\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j'\mathbf{x}_j+\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j'\mathbf{y}_j-2\sum_{i=1}^{p}\lambda_i\\&=\mathrm{tr}[\mathbf{X}^*\mathbf{X}^{*\prime}]+\mathrm{tr}[\mathbf{Y}^*\mathbf{Y}^{*\prime}]-2\mathrm{tr}[\boldsymbol{\Lambda}]\end{aligned} \tag{12-57}$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda}=$对角$(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p)$，最小化变换为

$$\hat{\mathbf{Q}}=\sum_{i=1}^{p}\mathbf{v}_i\mathbf{u}'_i=\mathbf{V}\mathbf{U}'\qquad\hat{\mathbf{b}}=\mathbf{0} \tag{12-58}$$

这里 $\boldsymbol{\Lambda}$，$\mathbf{U}$ 和 $\mathbf{V}$ 由下面的奇异值分解得到：

$$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j\mathbf{x}'_j=\underset{(p\times n)}{\mathbf{Y}^{*\prime}}\underset{(n\times p)}{\mathbf{X}^*}=\underset{(p\times p)}{\mathbf{U}}\underset{(p\times p)}{\boldsymbol{\Lambda}}\underset{(p\times p)}{\mathbf{V}'}$$

证明 由于两个点结构是已实现零均值中心化（$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j=0$，及$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j=0$），我们有

$$\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j-\mathbf{b})'(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j-\mathbf{b})=\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j)'(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j)+n\mathbf{b}'\mathbf{b}$$

---

① 西布森(Sibson)[20]建议将下面的系数用作两个结构的一致性量度：

$$\gamma=1-\frac{[\mathrm{tr}(\mathbf{Y}^{*\prime}\mathbf{X}^*\mathbf{X}^{*\prime}\mathbf{Y}^*)^{1/2}]^2}{\mathrm{tr}(\mathbf{X}^{*\prime}\mathbf{X}^*)\mathrm{tr}(\mathbf{Y}^{*\prime}\mathbf{Y}^*)}$$

对完全相同的结构，$\gamma=0$。如有必要，在完成普罗克鲁斯特斯分析后可将 γ 算出。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

右端的最后一项为非负项，因此当 $\hat{\mathbf{b}}=0$ 有最佳拟合。因此我们只需考虑

$$PR^2=\min_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j)'(\mathbf{x}_j-\mathbf{Q}\mathbf{y}_j)=\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j'\mathbf{x}_j+\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j'\mathbf{y}_j-2\max_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j'\mathbf{Q}\mathbf{y}_j$$

利用$\mathbf{x}_j'\mathbf{Q}\mathbf{y}_j=\mathrm{tr}[\mathbf{Q}\mathbf{y}_j\mathbf{x}_j']$，可将上式右端最大化的表达式变成

$$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j'\mathbf{Q}\mathbf{y}_j=\sum_{j=1}^{n}\mathrm{tr}[\mathbf{Q}\mathbf{y}_j\mathbf{x}_j']=\mathrm{tr}\Big[\mathbf{Q}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j\mathbf{x}_j'\Big]$$

由奇异值分解，

$$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j\mathbf{x}_j'=\mathbf{Y}^{*\prime}\mathbf{X}^{*}=\mathbf{U}\Lambda\mathbf{V}'=\sum_{i=1}^{p}\lambda_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}_j'$$

其中 $\mathbf{U}=[\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_p]$，$\mathbf{V}=[\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\cdots,\mathbf{v}_p]$为 $p\times p$ 正交矩阵。因此，

$$\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j'\mathbf{Q}\mathbf{y}_j=\mathrm{tr}\Big[\mathbf{Q}\Big(\sum_{i=1}^{p}\lambda_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}_i'\Big)\Big]=\sum_{i=1}^{p}\lambda_i\mathrm{tr}[\mathbf{Q}\mathbf{u}_i\mathbf{v}_i']$$

上式右端第 i 项中可变的量

$$\mathrm{tr}[\mathbf{Q}\mathbf{u}_i\mathbf{v}_i']=\mathbf{v}_i'\mathbf{Q}\mathbf{u}_i$$

有上界 1。这可以用柯西-施瓦茨不等式并令 $\mathbf{b}=\mathbf{Q}\mathbf{u}_i$ 和 $\mathbf{d}=\mathbf{v}_i$ 来证明。也就是说

$$\mathbf{v}_i'\mathbf{Q}\mathbf{u}_i\leqslant\sqrt{\mathbf{v}'_i\mathbf{Q}\mathbf{Q}'\mathbf{v}_i}\sqrt{\mathbf{u}'_i\mathbf{u}_i}=\sqrt{\mathbf{v}'_i\mathbf{v}_i}\times 1=1$$

所有 p 个这样的项，都可以令 $\mathbf{Q}=\mathbf{V}\mathbf{U}'$ 使之达到最大。在这种选择下，

$$\mathbf{v}_i'\mathbf{Q}\mathbf{u}_i=\mathbf{v}_i'\mathbf{V}\mathbf{U}'\mathbf{u}_i=[0,\cdots,0,1,0,\cdots,0]\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ 1\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix}=1$$

因此

$$-2\max_{\mathbf{Q}}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{x}_j'\mathbf{Q}\mathbf{y}_j=-2(\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_p)$$

最后，我们证实 $\mathbf{Q}\mathbf{Q}'=\mathbf{V}\mathbf{U}'\mathbf{U}\mathbf{V}'=\mathbf{V}\mathbf{I}_p\mathbf{V}'=\mathbf{I}_p$，因此 $\mathbf{Q}$ 是 $p\times p$ 正交阵。

例 12.19 （大学数据的普罗克鲁斯特斯分析）

用度量和非度量多维标度变换对例 12.16 中所给的大学数据进行分析后得出两个点结构。这两个点结构看上去很接近。对两种标度变换方法各有一个二维坐标系。最初，平方距离之和为

$$\sum_{j=1}^{25}(\mathbf{x}_j-\mathbf{y}_j)'(\mathbf{x}_j-\mathbf{y}_j)=4.090$$

计算机计算给出

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}-0.9992 & 0.0405\\ 0.0405 & 0.9992\end{bmatrix},\quad \mathbf{V}=\begin{bmatrix}-1.0000 & 0.0069\\ 0.0069 & 1.0000\end{bmatrix},\quad \Lambda=\begin{bmatrix}114.999 & 0.000\\ 0.000 & 21.418\end{bmatrix}$$

根据结论 12.1，为最好地“对齐”这两个解，我们对非度量标度变换解乘以正交矩阵

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$\hat{\mathbf{Q}} = \sum_{i=1}^{2} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i' = \mathbf{V}\mathbf{U}' = \begin{bmatrix} 0.9994 & -0.0336 \\ 0.0336 & 0.9994 \end{bmatrix}$$

这个变换大致相当于将非度量解沿顺时针方向旋转大约 2 度。经过旋转后，平方距离之和由 4.090 减少到普罗克鲁斯特斯拟合量度

$$PR^2 = \sum_{j=1}^{25} \mathbf{x}_j' \mathbf{x}_j + \sum_{j=1}^{25} \mathbf{y}_j' \mathbf{y}_j - 2\sum_{j=1}^{2} \lambda_i = 3.627$$

例 12.20 （森林数据的普罗克鲁斯特斯分析及附加定位）

在威斯康星州南部的 10 处高地收集了 8 种树的数据。这些数据列于表 12.10 中。

表 12.10 威斯康星森林数据

	场所									
树种	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
针橡	9	8	3	5	6	0	5	0	0	0
黑橡	8	9	8	7	0	0	0	0	0	0
白橡	5	4	9	9	7	7	4	6	0	2
红橡	3	4	0	6	9	8	7	6	4	3
美国榆	2	2	4	5	6	0	5	0	2	5
菩提	0	0	0	0	2	7	6	6	7	6
铁树	0	0	0	0	0	0	7	4	6	5
糖枫	0	0	0	0	0	5	4	8	8	9

资料来源：见[15]。

度量多维标度变换法（或主坐标法）和非度量标度变换法的解分别示于图 12.24 和 12.25。

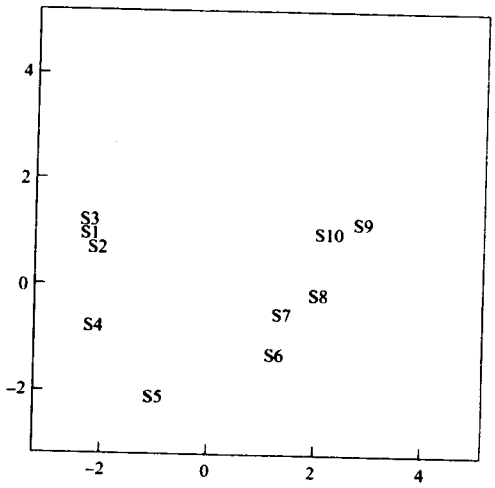


图 12.24 森林数据的度量多维标度变换

利用图 12.24 和 12.25 中各点的坐标，我们得到两个点结构的初始平方距离和为

$$\sum_{j=1}^{10} (\mathbf{x}_j - \mathbf{y}_j)'(\mathbf{x}_j - \mathbf{y}_j) = 26.437$$

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

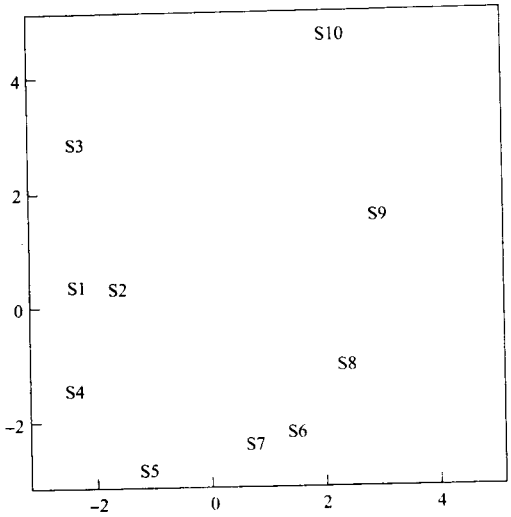


图 12.25　森林数据的非度量多维标度变换

计算机计算给出

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}-0.9826 & -0.1856\\ -0.1856 & 0.9826\end{bmatrix},\quad \mathbf{V}=\begin{bmatrix}-0.9935 & -0.1136\\ -0.1136 & 0.9935\end{bmatrix},$$

$$\Lambda=\begin{bmatrix}41.8035 & 0.000\\ 0.000 & 21.5566\end{bmatrix}$$

根据结论 12.1，为更好地对齐两个解，我们对非度量标度变换解乘以正交矩阵

$$\hat{\mathbf{Q}}=\sum_{i=1}^{2}\mathbf{v}_i\,\mathbf{u}_i'=\mathbf{VU}'=\begin{bmatrix}0.9973 & 0.0728\\ -0.0728 & 0.9973\end{bmatrix}$$

这相当于将非度量解沿顺时针方向旋转大约 4 度。旋转后，平方距离从 26.437 减少到普罗克鲁斯特斯拟合量度

$$PR^2=\sum_{j=1}^{10}\mathbf{x}_j'\mathbf{x}_j+\sum_{j=1}^{10}\mathbf{y}_j'\mathbf{y}_j-2\sum_{i=1}^{2}\lambda_i=25.430$$

我们注意到抽样场所在两个图中都大致位于一条曲线附近。这就有可能对数据作一维的**非线性排序**。可以用二次或其他曲线来拟合这些点。通过对曲线施加一个标度，我们可以得到一个一维排序。

如果将威斯康星森林数据中的抽样单元和变量同时显示在图中，就会有更多信息。对数据进行对应分析得到图 12.26 的点图。同一组数据的双重信息图示于图 12.27。

这两个点图给出非常相似的信息。场所 1 至 5 倾向于与橡树类相联系，而场所 7 至 10 倾向于与菩提树、铁树和糖枫相联系。美国榆树分布在大部分场所。由不同树种区分的场所几乎是连续的。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

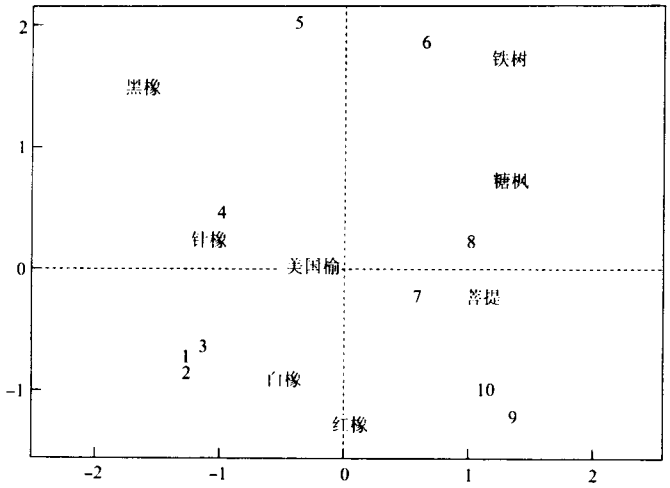


图 12.26　森林数据的对应分析图

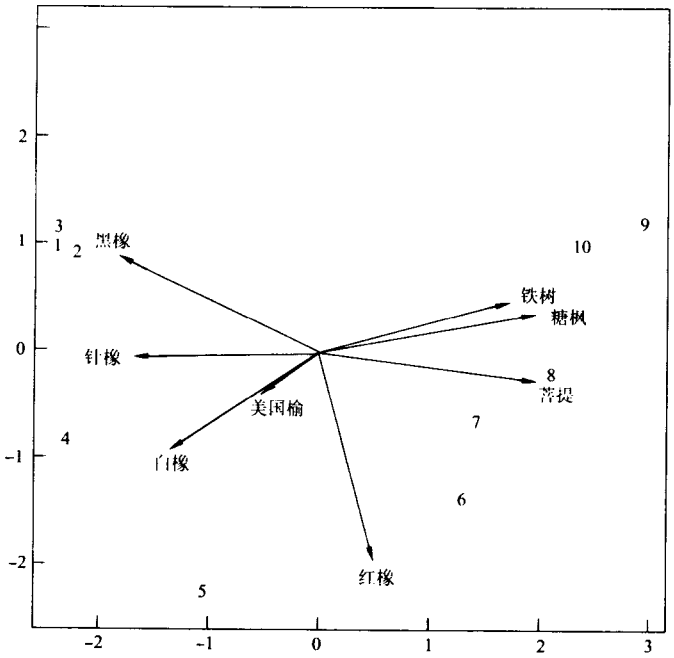


图 12.27　森林数据的双重信息图

练　　习

12.1　表 12.11 列出一些与最近的几位美国总统相联系的特征。

(a) 引进适当的二值变量，对各对总统计算表 12.2 中的相似性系数 1。

提示：可以将出生地定义为南方和非南方。

(b) 按(a)中的方式继续计算表 12.2 中的相似性系数 2 和 3。通过将每个系数的 15 个相似性数据排序的方式来验证这三种系数的单调性关系。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 12.11

总统	出生地	第一任为选出？	党派	有无议会经历？	曾否任副总统？
1. 里根	中西部	是	共和党	无	无
2. 卡特	南方	是	民主党	无	无
3. 福特	中西部	否	共和党	有	有
4. 尼克松	西部	是	共和党	有	有
5. 约翰逊	南方	否	民主党	有	有
6. 肯尼迪	东部	是	民主党	有	无

12.2 用表 12.2 中的相似性系数 5,6 和 7 重复练习 12.1。

12.3 证明：对具有后面所列频数的二值变量，样本相关系数[见式(12-11)]可以写为

$$r=\frac{ad-bc}{[(a+b)(a+c)(b+d)(c+d)]^{1/2}}$$

二值变量的频数为

		2	
		0	1
1	0	a	d
	1	c	d

12.4 试证表 12.2 中的相似性系数 1,2,3 之间有单调关系。

提示：$(b+c)=p-(a+d)$。故有(比如说)

$$\frac{a+d}{a+d+2(b+c)}=\frac{1}{1+2[p/(a+d)-1]}$$

这个方程表达了系数 3 与 1 之间的关系。求其他各对系数的类似表示。

12.5 考虑距离矩阵

$$\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} 1 & 2 & 3 & 4 \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1 & 0 & & \\ 11 & 2 & 0 & \\ 5 & 3 & 4 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

用下述方法对以上 4 个项目进行聚类。

(a) 单连接分层方法。

(b) 完全连接分层方法。

(c) 平均连接分层方法。

画出树图，并比较以上三种方法所得到的结果。

12.6 五个项目间的距离阵如下：

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

$$
\begin{array}{c}
 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\
\begin{bmatrix}
0 & & & & \\
4 & 0 & & & \\
6 & 9 & 0 & & \\
1 & 7 & 10 & 0 & \\
6 & 3 & 5 & 8 & 0
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

用练习 12.5 中的三种方法对这五个项目进行聚类。画出树图并比较结果。

12.7　例 8.5 中曾给出五种股票间的相关系数。这些相关系数在保留两位小数后重新列于下表：

$$
\begin{array}{l}
 \\ \text{联邦化学} \\ \text{杜邦} \\ \text{联合碳化物} \\ \text{埃克森} \\ \text{德士古}
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccc} \text{联邦化学} & \text{杜邦} & \text{联合碳化物} & \text{埃克森} & \text{德士古} \end{array} \\
\begin{bmatrix}
1 & & & & \\
0.58 & 1 & & & \\
0.51 & 0.60 & 1 & & \\
0.39 & 0.39 & 0.44 & 1 & \\
0.46 & 0.32 & 0.43 & 0.52 & 1
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

将样本相关系数用作相似性量度，利用练习 12.5 中的三种方法将五种股票聚类。画出树图并比较所得结果。

12.8　利用例 12.4 中的距离数据，用平均连接分层方法对项目进行聚类。画出树图。将结果与例 12.4 和 12.6 中的结果进行比较。

12.9　一本书中词汇的“丰富性”可以通过统计用过一次的词，用过两次的词，等等来描述。根据这些统计数字，一个语言学家给出了《旧约全书》耶利米哀歌的各章之间的距离如下：

$$
\begin{array}{c}
 \\ \text{耶利米哀歌，章} \\ \\ \\ \\ \\
\end{array}
\begin{array}{c}
\text{耶利米哀歌，章} \\
\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{array} \\
\begin{bmatrix}
0 & & & & \\
0.76 & 0 & & & \\
2.97 & 0.80 & 0 & & \\
4.88 & 4.17 & 0.21 & 0 & \\
3.86 & 1.92 & 1.51 & 0.51 & 0
\end{bmatrix}
\end{array}
\end{array}
$$

用我们讨论过的三种连接分层聚类方法对耶利米哀歌各章进行聚类。画树图并比较结果。

12.10　用沃德方法对四个项目聚类。这些项目在变量 X 上的测量值列于下表。

项　目	测　量　值
1	2
2	1
3	5
4	8

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(a) 起初，每个项目为一个聚类，因而我们有类{1}，{2}，{3}，{4}。证明 ESS=0。

(b) 若我们联合聚类{1}和{2}，则新聚类{12}有

$$\mathrm{ESS}_1 = \sum(x_j - \bar{x})^2 = (2-1.5)^2 + (1-1.5)^2 = 0.5$$

于是与分组{12}，{3}，{4}相联系的 ESS 为 ESS=0.5+0+0=0.5。ESS 的增量(信息损失)为 0.5−0=0.5. 对步骤 2 中的所有可能性确定 ESS 的增量，并将结果填入下表。

聚 类			ESS 的增量
{12}	{3}	{4}	0.5
{13}	{2}	{4}	
{14}	{2}	{3}	
{1}	{23}	{4}	
{1}	{24}	{3}	
{1}	{2}	{34}	

(c)完成最后两个步骤，并画出显示发生合并时 ESS 值的树图。

12.11 假定我们对四个项目 A,B,C 和 D 测量两个变量 X_1 和 X_2。数据如下：

项 目	观 测 值	
	x_1	x_2
A	5	4
B	1	−2
C	−1	1
D	3	1

用 K 均值聚类方法将这四个项目分成 $K=2$ 个聚类。从初始分组(AB)和(CD)开始。

12.12 重复例 12.12，从初始分组(AC)和(BD)开始。将你得到的结果与例中所给的结果比较。它们是否相同？将项目的坐标(x_1,x_2)作成点图，并对解作出评论。

12.13 重复例 12.12，但从项目表的底部开始，依 D,C,B,A 的顺序进行。由初始分组(AB)和(CD)开始。[首先可能的重组根据距离 $d^2(D,(AB))$和 $d^2(D,(CD))$进行。]将你的解与例中所给的解进行比较。它们是否相同？它们是否应该相同？

12.14 假定中心化矩阵 $\tilde{\mathbf{P}}=\mathbf{P}-\mathbf{rc}'$ 可用矩阵 $\hat{\mathbf{P}}=\lambda_1\tilde{\mathbf{u}}_1\tilde{\mathbf{v}}$ 来逼近，其中 λ_1 为 $\tilde{\mathbf{P}}$ 的奇异值分解中的最大奇异值，而 $\tilde{\mathbf{u}}_1$ 和 $\tilde{\mathbf{v}}_1$ 则为相应的左和右奇异向量，长度分别在度量 $\mathbf{D}_r^{-1}$ 和 $\mathbf{D}_c^{-1}$ 下标准化到 1。用广义最小二乘准则

$$\text{迹}(\mathbf{D}_c^{-1}(\mathbf{P}-\hat{\mathbf{P}})\mathbf{D}_c^{-1}(\mathbf{P}-\hat{\mathbf{P}})')$$

证明：$\mathbf{P}$ 的元素到 $\hat{\mathbf{P}}$ 相应元素的偏差平方和为 $\sum_{k=2}^{J-1}\lambda_k^2/\sum_{K=1}^{J-1}\lambda_k^2$，其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{J-1}$ 为 $\tilde{\mathbf{P}}$ 的奇异值。

12.15 证明对应分析中的两组点的坐标矩阵 $\mathbf{Y}$ 和 $\mathbf{Z}$ 之间有下列的关系：

$$\mathbf{Y}=\mathbf{D}_r^{-1}\tilde{\mathbf{P}}\mathbf{Z}\Lambda^{-1},\mathbf{Z}=\mathbf{D}_c^{-1}\tilde{\mathbf{P}}'\mathbf{Y}\Lambda^{-1}$$

下面的练习需要用计算机。

12.16 表 11.9 给出 43 种早餐方便粥的 8 个变量的测量值。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(a) 用表中的数据计算每对方便粥品牌间的欧氏距离。

(b) 将(a)中计算的距离看成是品牌间的相异性，用单连接和完全连接分层聚类方法对方便粥品牌进行聚类。构造树图并比较结果。

12.17　将表 11.9 中的数据输入一个 K 均值聚类程序。将方便粥品牌聚类成 $K=2$，3，4 组。将结果与练习 12.16 中的结果进行比较。

12.18　女子田径运动的国家和地区记录列于表 1.7。

(a) 用表 1.7 中的数据计算每对国家和地区间的欧氏距离。

(b) 将距离看成相异性，用单连接和完全连接分层方法将国家和地区聚类。构造树图并比较结果。

(c) 将表 1.7 中的数据输入一个 K 均值聚类程序。用几个不同的 K 值对国家和地区聚类。将结果与(b)中结果进行比较。

12.19　用表 8.5 的男子田径国家和地区纪录数据重复练习 12.18。将结果与练习 12.18 进行比较。解释任何存在的差别。

12.20　表 12.12 给出 12 个威斯康星及邻近州的城市间的道路距离。用多维标度变换法确定这些城市在 $q=1,2,3$ 维空间中的位置。将最小应力(q)对 q 作图并对此图作出解释。将这些城市的二维多维标度变换结构与一张地图上的城市位置进行比较。

表 12.12　威斯康星州城市与邻近各州城市之间的距离

	阿普尔顿 (1)	伯洛伊特 (2)	阿特金森堡 (3)	麦迪逊 (4)	马什菲尔德 (5)	米尔沃基 (6)	门罗 (7)	苏必利尔 (8)	沃索 (9)	迪比克 (10)	圣保罗 (11)	芝加哥 (12)
(1)	0											
(2)	130	0										
(3)	98	33	0									
(4)	102	50	36	0								
(5)	103	185	164	138	0							
(6)	100	73	54	77	184	0						
(7)	149	33	58	47	170	107	0					
(8)	315	377	359	330	219	394	362	0				
(9)	91	186	166	139	45	181	186	223	0			
(10)	196	94	119	95	186	168	61	351	215	0		
(11)	257	304	287	258	161	322	289	162	175	274	0	
(12)	186	97	113	146	276	93	130	467	275	184	395	0

12.21　表 12.13 给出某些不同年代的考古场所之间的“距离”。确定这些距离的依据是在这些考古场所发现不同类型陶器的频数。给定这些距离。用多维标度变换法确定这些考古场所在 $q=3,4,5$ 维中的坐标。将最小应力(q)对 q 作图并对此图作解释。如果可能，利用 $q=5$ 维解(将场所视作变量)的坐标确定这些场所在二维中的位置(前两个主成分)。注意与场所相联系的年代，解释二维解的点结构。

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 12.13　各考古场所之间的距离

	P1980918 (1)	P1931131 (2)	P1550960 (3)	P1530987 (4)	P1361024 (5)	P1351005 (6)	P1340945 (7)	P1311137 (8)	P13011062 (9)
(1)	0	.	.	.	.	.	.	.	.
(2)	2.202	0	.	.	.	.	.	.	.
(3)	1.004	2.025	0	.	.	.	.	.	.
(4)	1.108	1.943	0.233	0	.	.	.	.	.
(5)	1.122	1.870	0.719	0.541	0	.	.	.	.
(6)	0.914	2.070	0.719	0.679	0.539	0	.	.	.
(7)	0.914	2.186	0.452	0.681	1.102	0.916	0	.	.
(8)	2.056	2.055	1.986	1.990	1.963	2.056	2.027	0	
(9)	1.608	1.722	1.358	1.168	0.681	1.005	1.719	1.991	0

说明：P1980918 指场所编号 P198，年代为公元 918 年；P1931131 指场所编号 P193，年代为公元 1131 年；等等。

资料来源：经 M. J. Tretter 许可使用。

12.22　将由 $n=1660$ 个人组成的样本按心理健康状况和社会经济状况进行交叉分类。分类结果见表 12.14。试对这组数据完成对应分析。解释所得结果。数据间的联系是否能很好地在一维中表示出来？

表 12.14　心理健康状况与社会经济状况数据

心理健康状况	父母社会经济状况				
	A(高)	B	C	D	E(低)
好	121	57	72	36	21
轻微症状形成	188	105	141	97	71
中等症状形成	112	65	77	54	54
受损	86	60	94	78	71

资料来源：摘自 Srole，L.，等人的"Mental Health in the Metropolis：The Midtown Manhatten Study"(New York：NYU Press，1978)。

12.23　将一个由 901 人组成的样本按三个收入类别和四个职业满意度类别进行交叉分类。所得结果见表 12.15。试对这组数据完成对应分析，并解释结果。

表 12.15　收入与职业满意度数据

收入	职业满意度			
	非常不满意	有些不满意	比较满意	非常满意
<25 000 美元	42	62	184	207
25 000 美元～50 000 美元	13	28	81	113
>50 000 美元	7	18	54	92

资料来源：摘自 Agresti，A. 的 Categorical Data Analysis(New York：John Wiley，1990)表 8.2。

12.24　对表 12.10 中的森林数据进行对应分析，并验证例 12.20 中的图 12.26。

12.25　对表 12.8 中的陶器数据作双重信息图。解释结果。双重信息图的结果与图 12.21 中的对应分析结果是否一致？讨论所得答案。

12.26　对表 12.14 中的心理健康和社会经济状况数据构造双重信息图，并进行解

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

释。双重信息图的结果与练习 12.22 中的对应分析结果是否一致？讨论所得答案。

12.27　对表 12.15 的收入与职业满意度数据构造双重信息图，所得结果与练习 12.23 中对应分析的结果是否一致？讨论所得答案。

12.28　利用表 12.13 中的考古数据确定度量和非度量的二维标度变换图。(见练习 12.21。)给定每个图中各点的坐标，完成普罗克鲁斯特斯分析，解释所得结果。

参 考 文 献

1. Abramowitz, M., and I. A. Stegun, eds. *Handbook of Mathematical Functions*. U. S. Department of Commerce, National Bureau of Standards Applied Mathematical Series. 55, 1964.
2. Anderberg, M. R. *Cluster Analysis for Applications*. New York: Academic Press, 1973.
3. Cormack, R. M. "A Review of Classification (with discussion)." *Journal of the Royal Statistical Society*(*A*), 134, no. 3(1971), 321～367.
4. Evetitt, B. S. *Cluster Analysis*(3d ed.). London: Edward Arnold, 1993.
5. Gower, J. C. "Some Distance Properties of Latent Root and Vector Methods Used in Multivariate Analysis." *Biometrika*, 53(1966), 325～338.
6. Gower, J. C. "Multivariate Analysis and Multidimensional Geometry." *The Statistician*, 17(1967), 13～25.
7. Gower, J. C., and D. J. Hand. *Biplots*. London: Chapman and Hall, 1996.
8. Gnanadesikan, R. *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations*. New York: John Wiley, 1977.
9. Greenacre, M. J. *Theory and Applications of Correspondence Analysis*. London: Academic Press, 1984.
10. Hartigan, J. A. *Clustering Algorithms*. New York: John Wiley, 1975.
11. Kruskal, J. B. "Multidimensional Scaling by Optimizing Goodness of Fit to a Nonmetric Hypothesis." *Psychometrika*, 29, no. 1(1964), 1～27.
12. Kruskal, J. B. "Non-metric Multidimensional Scaling: A Numerical Method." *Psychometrika*, 29, no 1 (1964), 115～129.
13. Kruskal, J. B., and M. Wish. "Multidimensional Scaling." Sage University Paper series on Quantitative Applications in the Social Sciences, 07-011. Beverly Hills and London: Sage Publications, 1978.
14. LaPointe, F-J, and P. Legendre. "A Classification of Pure Malt Scotch Whiskies." *Applied Statistics*, 43, no. 1(1994), 237～257.
15. Ludwig, J. A., and J. F. Reynolds, *Statistical Ecology—a Primer on Methods and Computing*. New York: John Wiley, 1988.
16. MacQueen, J. B. "Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations." *Proceedings of 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, 1, Berkeley, CA: University of California Press(1967), 281～297.
17. Mardia, K. V., J. T. Kent, and J. M. Bibby. *Multivariate Analysis*. New York: Academic Press, 1979.
18. Morgan, B. J. T., and A. P. G. Ray. "Non-uniqueness and Inversions in Cluster Analysis." *Applied Statistics*, 44, no. 1(1995), 117～134.
19. Shepard, R. N. "Multidimensional Scaling, Tree-Fitting, and Clustering." *Science*, 210, no. 4468

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

(1980),390～398.

20. Sibson,R. "Studies in the Robustness of Multidimensional Scaling"*Journal of the Royal Statistical Society(B)*,40(1978),234～238.

21. Takane,Y.,F. W. Young,and J. De Leeuw. "Non-metric Individual Differences Multidimensional Scaling:Alternating Least Squares with Optimal Scaling Features."*Psycometrika*,42(1977),7～67.

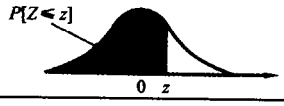
22. Ward, Jr., J. H. "Hierarchical Grouping to Optimize an Objective Function." *Journal of the American Statistical Association*,58(1963),236～244.

23. Young, F. W., and R. M. Hamer. *Multidimensional Scaling: History, Theory, and Applications.* Hillsdale,NJ:Lawrence Erlbaum Associates,Publishers,1987.

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

附录

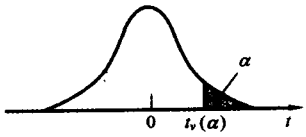
表 1　标准正态概率



z	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09
0.0	0.5000	0.5040	0.5080	0.5120	0.5160	0.5199	0.5239	0.5279	0.5319	0.5359
0.1	0.5398	0.5438	0.5478	0.5517	0.5557	0.5596	0.5636	0.5675	0.5714	0.5753
0.2	0.5793	0.5832	0.5871	0.5910	0.5948	0.5987	0.6026	0.6064	0.6103	0.6141
0.3	0.6179	0.6217	0.6255	0.6293	0.6331	0.6368	0.6406	0.6443	0.6480	0.6517
0.4	0.6554	0.6591	0.6628	0.6664	0.6700	0.6736	0.6772	0.6808	0.6844	0.6879
0.5	0.6915	0.6950	0.6985	0.7019	0.7054	0.7088	0.7123	0.7157	0.7190	0.7224
0.6	0.7257	0.7291	0.7324	0.7357	0.7389	0.7422	0.7454	0.7486	0.7517	0.7549
0.7	0.7580	0.7611	0.7642	0.7673	0.7703	0.7734	0.7764	0.7794	0.7823	0.7852
0.8	0.7881	0.7910	0.7939	0.7967	0.7995	0.8023	0.8051	0.8078	0.8106	0.8133
0.9	0.8159	0.8186	0.8212	0.8238	0.8264	0.8289	0.8315	0.8340	0.8365	0.8389
1.0	0.8413	0.8438	0.8461	0.8485	0.8508	0.8531	0.8554	0.8577	0.8599	0.8621
1.1	0.8643	0.8665	0.8686	0.8708	0.8729	0.8749	0.8770	0.8790	0.8810	0.8830
1.2	0.8849	0.8869	0.8888	0.8907	0.8925	0.8944	0.8962	0.8980	0.8997	0.9015
1.3	0.9032	0.9049	0.9066	0.9082	0.9099	0.9115	0.9131	0.9147	0.9162	0.9177
1.4	0.9192	0.9207	0.9222	0.9236	0.9251	0.9265	0.9279	0.9292	0.9306	0.9319
1.5	0.9332	0.9345	0.9357	0.9370	0.9382	0.9394	0.9406	0.9418	0.9429	0.9441
1.6	0.9452	0.9463	0.9474	0.9484	0.9495	0.9505	0.9515	0.9525	0.9535	0.9545
1.7	0.9554	0.9564	0.9573	0.9582	0.9591	0.9599	0.9608	0.9616	0.9625	0.9633
1.8	0.9641	0.9649	0.9656	0.9664	0.9671	0.9678	0.9686	0.9693	0.9699	0.9706
1.9	0.9713	0.9719	0.9726	0.9732	0.9738	0.9744	0.9750	0.9756	0.9761	0.9767
2.0	0.9772	0.9778	0.9783	0.9788	0.9793	0.9798	0.9803	0.9808	0.9812	0.9817
2.1	0.9821	0.9826	0.9830	0.9834	0.9838	0.9842	0.9846	0.9850	0.9854	0.9857
2.2	0.9861	0.9864	0.9868	0.9871	0.9875	0.9878	0.9881	0.9884	0.9887	0.9890
2.3	0.9893	0.9896	0.9898	0.9901	0.9904	0.9906	0.9909	0.9911	0.9913	0.9916
2.4	0.9918	0.9920	0.9922	0.9925	0.9927	0.9929	0.9931	0.9932	0.9934	0.9936
2.5	0.9938	0.9940	0.9941	0.9943	0.9945	0.9946	0.9948	0.9949	0.9951	0.9952
2.6	0.9953	0.9955	0.9956	0.9957	0.9959	0.9960	0.9961	0.9962	0.9963	0.9964
2.7	0.9965	0.9966	0.9967	0.9968	0.9969	0.9970	0.9971	0.9972	0.9973	0.9974
2.8	0.9974	0.9975	0.9976	0.9977	0.9977	0.9978	0.9979	0.9979	0.9980	0.9981
2.9	0.9981	0.9982	0.9982	0.9983	0.9984	0.9984	0.9985	0.9985	0.9986	0.9986
3.0	0.9987	0.9987	0.9987	0.9988	0.9988	0.9989	0.9989	0.9989	0.9990	0.9990
3.1	0.9990	0.9991	0.9991	0.9991	0.9992	0.9992	0.9992	0.9992	0.9993	0.9993
3.2	0.9993	0.9993	0.9994	0.9994	0.9994	0.9994	0.9994	0.9995	0.9995	0.9995
3.3	0.9995	0.9995	0.9995	0.9996	0.9996	0.9996	0.9996	0.9996	0.9996	0.9997
3.4	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.9997	0.9998
3.5	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998	0.9998

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

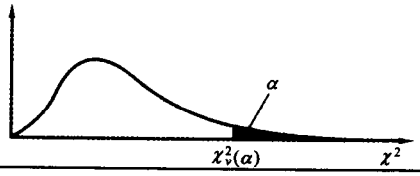
表 2　学生 t 分布百分位点



自由度	α								
v	0.250	0.100	0.050	0.025	0.010	0.00833	0.00625	0.005	0.0025
1	1.000	3.078	6.314	12.706	31.821	38.190	50.923	63.657	127.321
2	0.816	1.886	2.920	4.303	6.965	7.649	8.860	9.925	14.089
3	0.765	1.638	2.353	3.182	4.541	4.857	5.392	5.841	7.453
4	0.741	1.533	2.132	2.776	3.747	3.961	4.315	4.604	5.598
5	0.727	1.476	2.015	2.571	3.365	3.534	3.810	4.032	4.773
6	0.718	1.440	1.943	2.447	3.143	3.287	3.521	3.707	4.317
7	0.711	1.415	1.895	2.365	2.998	3.128	3.335	3.499	4.029
8	0.706	1.397	1.860	2.306	2.896	3.016	3.206	3.355	3.833
9	0.703	1.383	1.833	2.262	2.821	2.933	3.111	3.250	3.690
10	0.700	1.372	1.812	2.228	2.764	2.870	3.038	3.169	3.581
11	0.697	1.363	1.796	2.201	2.718	2.820	2.981	3.106	3.497
12	0.695	1.356	1.782	2.179	2.681	2.779	2.934	3.055	3.428
13	0.694	1.350	1.771	2.160	2.650	2.746	2.896	3.012	3.372
14	0.692	1.345	1.761	2.145	2.624	2.718	2.864	2.977	3.326
15	0.691	1.341	1.753	2.131	2.602	2.694	2.837	2.947	3.286
16	0.690	1.337	1.746	2.120	2.583	2.673	2.813	2.921	3.252
17	0.689	1.333	1.740	2.110	2.567	2.655	2.793	2.898	3.222
18	0.688	1.330	1.734	2.101	2.552	2.639	2.775	2.878	3.197
19	0.688	1.328	1.729	2.093	2.539	2.625	2.759	2.861	3.174
20	0.687	1.325	1.725	2.086	2.528	2.613	2.744	2.845	3.153
21	0.686	1.323	1.721	2.080	2.518	2.601	2.732	2.831	3.135
22	0.686	1.321	1.717	2.074	2.508	2.591	2.720	2.819	3.119
23	0.685	1.319	1.714	2.069	2.500	2.582	2.710	2.807	3.104
24	0.685	1.318	1.711	2.064	2.492	2.574	2.700	2.797	3.091
25	0.684	1.316	1.708	2.060	2.485	2.566	2.692	2.787	3.078
26	0.684	1.315	1.706	2.056	2.479	2.559	2.684	2.779	3.067
27	0.684	1.314	1.703	2.052	2.473	2.552	2.676	2.771	3.057
28	0.683	1.313	1.701	2.048	2.467	2.546	2.669	2.763	3.047
29	0.683	1.311	1.699	2.045	2.462	2.541	2.663	2.756	3.038
30	0.683	1.310	1.697	2.042	2.457	2.536	2.657	2.750	3.030
40	0.681	1.303	1.684	2.021	2.423	2.499	2.616	2.704	2.971
60	0.679	1.296	1.671	2.000	2.390	2.463	2.575	2.660	2.915
120	0.677	1.289	1.658	1.980	2.358	2.428	2.536	2.617	2.860
∞	0.674	1.282	1.645	1.960	2.326	2.394	2.498	2.576	2.813

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

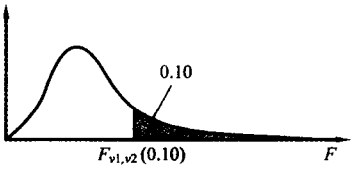
表 3　χ^2 分布百分位点



自由度 v	α 0.990	0.950	0.900	0.500	0.100	0.050	0.025	0.010	0.005
1	0.0002	0.004	0.02	0.45	2.71	3.84	5.02	6.63	7.88
2	0.02	0.10	0.21	1.39	4.61	5.99	7.38	9.21	10.60
3	0.11	0.35	0.58	2.37	6.25	7.81	9.35	11.34	12.84
4	0.30	0.71	1.06	3.36	7.78	9.49	11.14	13.28	14.86
5	0.55	1.15	1.61	4.35	9.24	11.07	12.83	15.09	16.75
6	0.87	1.64	2.20	5.35	10.64	12.59	14.45	16.81	18.55
7	1.24	2.17	2.83	6.35	12.02	14.07	16.01	18.48	20.28
8	1.65	2.73	3.49	7.34	13.36	15.51	17.53	20.09	21.95
9	2.09	3.33	4.17	8.34	14.68	16.92	19.02	21.67	23.59
10	2.56	3.94	4.87	9.34	15.99	18.31	20.48	23.21	25.19
11	3.05	4.57	5.58	10.34	17.28	19.68	21.92	24.72	26.76
12	3.57	5.23	6.30	11.34	18.55	21.03	23.34	26.22	28.30
13	4.11	5.89	7.04	12.34	19.81	22.36	24.74	27.69	29.82
14	4.66	6.57	7.79	13.34	21.06	23.68	26.12	29.14	31.32
15	5.23	7.26	8.55	14.34	22.31	25.00	27.49	30.58	32.80
16	5.81	7.96	9.31	15.34	23.54	26.30	28.85	32.00	34.27
17	6.41	8.67	10.09	16.34	24.77	27.59	30.19	33.41	35.72
18	7.01	9.39	10.86	17.34	25.99	28.87	31.53	34.81	37.16
19	7.63	10.12	11.65	18.34	27.20	30.14	32.85	36.19	38.58
20	8.26	10.85	12.44	19.34	28.41	31.41	34.17	37.57	40.00
21	8.90	11.59	13.24	20.34	29.62	32.67	35.48	38.93	41.40
22	9.54	12.34	14.04	21.34	30.81	33.92	36.78	40.29	42.80
23	10.20	13.09	14.85	22.34	32.01	35.17	38.08	41.64	44.18
24	10.86	13.85	15.66	23.34	33.20	36.42	39.36	42.98	45.56
25	11.52	14.61	16.47	24.34	34.38	37.65	40.65	44.31	46.93
26	12.20	15.38	17.29	25.34	35.56	38.89	41.92	45.64	48.29
27	12.88	16.15	18.11	26.34	36.74	40.11	43.19	46.96	49.64
28	13.56	16.93	18.94	27.34	37.92	41.34	44.46	48.28	50.99
29	14.26	17.71	19.77	28.34	39.09	42.56	45.72	49.59	52.34
30	14.95	18.49	20.60	29.34	40.26	43.77	46.98	50.89	53.67
40	22.16	26.51	29.05	39.34	51.81	55.76	59.34	63.69	66.77
50	29.71	34.76	37.69	49.33	63.17	67.50	71.42	76.15	79.49
60	37.48	43.19	46.46	59.33	74.40	79.08	83.30	88.38	91.95
70	45.44	51.74	55.33	69.33	85.53	90.53	95.02	100.43	104.21
80	53.54	60.39	64.28	79.33	96.58	101.88	106.63	112.33	116.32
90	61.75	69.13	73.29	89.33	107.57	113.15	118.14	124.12	128.30
100	70.06	77.93	82.36	99.33	118.50	124.34	129.56	135.81	140.17

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

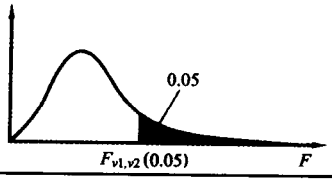
表 4　F 分布百分位点($\alpha=0.10$)



v_2 \ v_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	25	30	40	60
1	39.86	49.50	53.59	55.83	57.24	58.20	58.91	59.44	59.86	60.19	60.71	61.22	61.74	62.05	62.26	62.53	62.79
2	8.53	9.00	9.16	9.24	9.29	9.33	9.35	9.37	9.38	9.39	9.41	9.42	9.44	9.45	9.46	9.47	9.47
3	5.54	5.46	5.39	5.34	5.31	5.28	5.27	5.25	5.24	5.23	5.22	5.20	5.18	5.17	5.17	5.16	5.15
4	4.54	4.32	4.19	4.11	4.05	4.01	3.98	3.95	3.94	3.92	3.90	3.87	3.84	3.83	3.82	3.80	3.79
5	4.06	3.78	3.62	3.52	3.45	3.40	3.37	3.34	3.32	3.30	3.27	3.24	3.21	3.19	3.17	3.16	3.14
6	3.78	3.46	3.29	3.18	3.11	3.05	3.01	2.98	2.96	2.94	2.90	2.87	2.84	2.81	2.80	2.78	2.76
7	3.59	3.26	3.07	2.96	2.88	2.83	2.78	2.75	2.72	2.70	2.67	2.63	2.59	2.57	2.56	2.54	2.51
8	3.46	3.11	2.92	2.81	2.73	2.67	2.62	2.59	2.56	2.54	2.50	2.46	2.42	2.40	2.38	2.36	2.34
9	3.36	3.01	2.81	2.69	2.61	2.55	2.51	2.47	2.44	2.42	2.38	2.34	2.30	2.27	2.25	2.23	2.21
10	3.29	2.92	2.73	2.61	2.52	2.46	2.41	2.38	2.35	2.32	2.28	2.24	2.20	2.17	2.16	2.13	2.11
11	3.23	2.86	2.66	2.54	2.45	2.39	2.34	2.30	2.27	2.25	2.21	2.17	2.12	2.10	2.08	2.05	2.03
12	3.18	2.81	2.61	2.48	2.39	2.33	2.28	2.24	2.21	2.19	2.15	2.10	2.06	2.03	2.01	1.99	1.96
13	3.14	2.76	2.56	2.43	2.35	2.28	2.23	2.20	2.16	2.14	2.10	2.05	2.01	1.98	1.96	1.93	1.90
14	3.10	2.73	2.52	2.39	2.31	2.24	2.19	2.15	2.12	2.10	2.05	2.01	1.96	1.93	1.91	1.89	1.86
15	3.07	2.70	2.49	2.36	2.27	2.21	2.16	2.12	2.09	2.06	2.02	1.97	1.92	1.89	1.87	1.85	1.82
16	3.05	2.67	2.46	2.33	2.24	2.18	2.13	2.09	2.06	2.03	1.99	1.94	1.89	1.86	1.84	1.81	1.78
17	3.03	2.64	2.44	2.31	2.22	2.15	2.10	2.06	2.03	2.00	1.96	1.91	1.86	1.83	1.81	1.78	1.75
18	3.01	2.62	2.42	2.29	2.20	2.13	2.08	2.04	2.00	1.98	1.93	1.89	1.84	1.80	1.78	1.75	1.72
19	2.99	2.61	2.40	2.27	2.18	2.11	2.06	2.02	1.98	1.96	1.91	1.86	1.81	1.78	1.76	1.73	1.70
20	2.97	2.59	2.38	2.25	2.16	2.09	2.04	2.00	1.96	1.94	1.89	1.84	1.79	1.76	1.74	1.71	1.68
21	2.96	2.57	2.36	2.23	2.14	2.08	2.02	1.98	1.95	1.92	1.87	1.83	1.78	1.74	1.72	1.69	1.66
22	2.95	2.56	2.35	2.22	2.13	2.06	2.01	1.97	1.93	1.90	1.86	1.81	1.76	1.73	1.70	1.67	1.64
23	2.94	2.55	2.34	2.21	2.11	2.05	1.99	1.95	1.92	1.89	1.84	1.80	1.74	1.71	1.69	1.66	1.62
24	2.93	2.54	2.33	2.19	2.10	2.04	1.98	1.94	1.91	1.88	1.83	1.78	1.73	1.70	1.67	1.64	1.61
25	2.92	2.53	2.32	2.18	2.09	2.02	1.97	1.93	1.89	1.87	1.82	1.77	1.72	1.68	1.66	1.63	1.59
26	2.91	2.52	2.31	2.17	2.08	2.01	1.96	1.92	1.88	1.86	1.81	1.76	1.71	1.67	1.65	1.61	1.58
27	2.90	2.51	2.30	2.17	2.07	2.00	1.95	1.91	1.87	1.85	1.80	1.75	1.70	1.66	1.64	1.60	1.57
28	2.89	2.50	2.29	2.16	2.06	2.00	1.94	1.90	1.87	1.84	1.79	1.74	1.69	1.65	1.63	1.59	1.56
29	2.89	2.50	2.28	2.15	2.06	1.99	1.93	1.89	1.86	1.83	1.78	1.73	1.68	1.64	1.62	1.58	1.55
30	2.88	2.49	2.28	2.14	2.05	1.98	1.93	1.88	1.85	1.82	1.77	1.72	1.67	1.63	1.61	1.57	1.54
40	2.84	2.44	2.23	2.09	2.00	1.93	1.87	1.83	1.79	1.76	1.71	1.66	1.61	1.57	1.54	1.51	1.47
60	2.79	2.39	2.18	2.04	1.95	1.87	1.82	1.77	1.74	1.71	1.66	1.60	1.54	1.50	1.48	1.44	1.40
120	2.75	2.35	2.13	1.99	1.90	1.82	1.77	1.72	1.68	1.65	1.60	1.55	1.48	1.45	1.41	1.37	1.32
∞	2.71	2.30	2.08	1.94	1.85	1.77	1.72	1.67	1.63	1.60	1.55	1.49	1.42	1.38	1.34	1.30	1.24

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

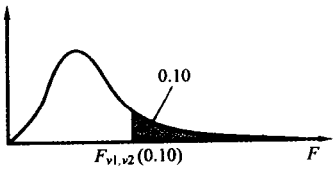
表 5　F 分布百分位点($\alpha=0.05$)



v_2 \ v_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	25	30	40	60
1	161.5	199.5	215.7	224.6	230.2	234.0	236.8	238.9	240.5	241.9	243.9	246.0	248.0	249.3	250.1	251.1	252.2
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40	19.41	19.43	19.45	19.46	19.46	19.47	19.48
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79	8.74	8.70	8.66	8.63	8.62	8.59	8.57
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.96	5.91	5.86	5.80	5.77	5.75	5.72	5.69
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74	4.68	4.62	4.56	4.52	4.50	4.46	4.43
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10	4.06	4.00	3.94	3.87	3.83	3.81	3.77	3.74
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64	3.57	3.51	3.44	3.40	3.38	3.34	3.30
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35	3.28	3.22	3.15	3.11	3.08	3.04	3.01
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.18	3.14	3.07	3.01	2.94	2.89	2.86	2.83	2.79
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98	2.91	2.85	2.77	2.73	2.70	2.66	2.62
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	3.01	2.95	2.90	2.85	2.79	2.72	2.65	2.60	2.57	2.53	2.49
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80	2.75	2.69	2.62	2.54	2.50	2.47	2.43	2.38
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.83	2.77	2.71	2.67	2.60	2.53	2.46	2.41	2.38	2.34	2.30
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65	2.60	2.53	2.46	2.39	2.34	2.31	2.27	2.22
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.71	2.64	2.59	2.54	2.48	2.40	2.33	2.28	2.25	2.20	2.16
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54	2.49	2.42	2.35	2.28	2.23	2.19	2.15	2.11
17	4.45	3.59	3.20	2.96	2.81	2.70	2.61	2.55	2.49	2.45	2.38	2.31	2.23	2.18	2.15	2.10	2.06
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.46	2.41	2.34	2.27	2.19	2.14	2.11	2.06	2.02
19	4.38	3.52	3.13	2.90	2.74	2.63	2.54	2.48	2.42	2.38	2.31	2.23	2.16	2.11	2.07	2.03	1.98
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.39	2.35	2.28	2.20	2.12	2.07	2.04	1.99	1.95
21	4.32	3.47	3.07	2.84	2.68	2.57	2.49	2.42	2.37	2.32	2.25	2.18	2.10	2.05	2.01	1.96	1.92
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.34	2.30	2.23	2.15	2.07	2.02	1.98	1.94	1.89
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.44	2.37	2.32	2.27	2.20	2.13	2.05	2.00	1.96	1.91	1.86
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.30	2.25	2.18	2.11	2.03	1.97	1.94	1.89	1.84
25	4.24	3.39	2.99	2.76	2.60	2.49	2.40	2.34	2.28	2.24	2.16	2.09	2.01	1.96	1.92	1.87	1.82
26	4.23	3.37	2.98	2.74	2.59	2.47	2.39	2.32	2.27	2.22	2.15	2.07	1.99	1.94	1.90	1.85	1.80
27	4.21	3.35	2.96	2.73	2.57	2.46	2.37	2.31	2.25	2.20	2.13	2.06	1.97	1.92	1.88	1.84	1.79
28	4.20	3.34	2.95	2.71	2.56	2.45	2.36	2.29	2.24	2.19	2.12	2.04	1.96	1.91	1.87	1.82	1.77
29	4.18	3.33	2.93	2.70	2.55	2.43	2.35	2.28	2.22	2.18	2.10	2.03	1.94	1.89	1.85	1.81	1.75
30	4.17	3.32	2.92	2.69	2.53	2.42	2.35	2.27	2.21	2.16	2.09	2.01	1.93	1.88	1.84	1.79	1.74
40	4.08	3.23	2.84	2.61	2.45	2.34	2.25	2.18	2.12	2.08	2.00	1.92	1.84	1.78	1.74	1.69	1.64
60	4.00	3.15	2.76	2.53	2.37	2.25	2.17	2.10	2.04	1.99	1.92	1.84	1.75	1.69	1.65	1.59	1.53
120	3.92	3.07	2.68	2.45	2.29	2.18	2.09	2.02	1.96	1.91	1.83	1.75	1.66	1.60	1.55	1.50	1.43
∞	3.84	3.00	2.61	2.37	2.21	2.10	2.01	1.94	1.88	1.83	1.75	1.67	1.57	1.51	1.46	1.39	1.32

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com

表 6　F 分布百分位点($\alpha=0.01$)



v_2 \ v_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	20	25	30	40	60
1	4052.	5000.	5403.	5625.	5764.	5859.	5928.	5981.	6023.	6056.	6106.	6157.	6209.	6240.	6261.	6287.	6313.
2	98.50	99.00	99.17	99.25	99.30	99.33	99.36	99.37	99.39	99.40	99.42	99.43	99.45	99.46	99.47	99.47	99.48
3	34.12	30.82	29.46	28.71	28.24	27.91	27.67	27.49	27.35	27.23	27.05	26.87	26.69	26.58	26.50	26.41	26.32
4	21.20	18.00	16.69	15.98	15.52	15.21	14.98	14.80	14.66	14.55	14.37	14.20	14.02	13.91	13.84	13.75	13.65
5	16.26	13.27	12.06	11.39	10.97	10.67	10.46	10.29	10.16	10.05	9.89	9.72	9.55	9.45	9.38	9.29	9.20
6	13.75	10.92	9.78	9.15	8.75	8.47	8.26	8.10	7.98	7.87	7.72	7.56	7.40	7.30	7.23	7.14	7.06
7	12.25	9.55	8.45	7.85	7.46	7.19	6.99	6.84	6.72	6.62	6.47	6.31	6.16	6.06	5.99	5.91	5.82
8	11.26	8.65	7.59	7.01	6.63	6.37	6.18	6.03	5.91	5.81	5.67	5.52	5.36	5.26	5.20	5.12	5.03
9	10.56	8.02	6.99	6.42	6.06	5.80	5.61	5.47	5.35	5.26	5.11	4.96	4.81	4.71	4.65	4.57	4.48
10	10.04	7.56	6.55	5.99	5.64	5.39	5.20	5.06	4.94	4.85	4.71	4.56	4.41	4.31	4.25	4.17	4.08
11	9.65	7.21	6.22	5.67	5.32	5.07	4.89	4.74	4.63	4.54	4.40	4.25	4.10	4.01	3.94	3.86	3.78
12	9.33	6.93	5.95	5.41	5.06	4.82	4.64	4.50	4.39	4.30	4.16	4.01	3.86	3.76	3.70	3.62	3.54
13	9.07	6.70	5.74	5.21	4.86	4.62	4.44	4.30	4.19	4.10	3.96	3.82	3.66	3.57	3.51	3.43	3.34
14	8.86	6.51	5.56	5.04	4.69	4.46	4.28	4.14	4.03	3.94	3.80	3.66	3.51	3.41	3.35	3.27	3.18
15	8.68	6.36	5.42	4.89	4.56	4.32	4.14	4.00	3.89	3.80	3.67	3.52	3.37	3.28	3.21	3.13	3.05
16	8.53	6.23	5.29	4.77	4.44	4.20	4.03	3.89	3.78	3.69	3.55	3.41	3.26	3.16	3.10	3.02	2.93
17	8.40	6.11	5.19	4.67	4.34	4.10	3.93	3.79	3.68	3.59	3.46	3.31	3.16	3.07	3.00	2.92	2.83
18	8.29	6.01	5.09	4.58	4.25	4.01	3.84	3.71	3.60	3.51	3.37	3.23	3.08	2.98	2.92	2.84	2.75
19	8.18	5.93	5.01	4.50	4.17	3.94	3.77	3.63	3.52	3.43	3.30	3.15	3.00	2.91	2.84	2.76	2.67
20	8.10	5.85	4.94	4.43	4.10	3.87	3.70	3.56	3.46	3.37	3.23	3.09	2.94	2.84	2.78	2.69	2.61
21	8.02	5.78	4.87	4.37	4.04	3.81	3.64	3.51	3.40	3.31	3.17	3.03	2.88	2.79	2.72	2.64	2.55
22	7.95	5.72	4.82	4.31	3.99	3.76	3.59	3.45	3.35	3.26	3.12	2.98	2.83	2.73	2.67	2.58	2.50
23	7.88	5.66	4.76	4.26	3.94	3.71	3.54	3.41	3.30	3.21	3.07	2.93	2.78	2.69	2.62	2.54	2.45
24	7.82	5.61	4.72	4.22	3.90	3.67	3.50	3.36	3.26	3.17	3.03	2.89	2.74	2.64	2.58	2.49	2.40
25	7.77	5.57	4.68	4.18	3.85	3.63	3.46	3.32	3.22	3.13	2.99	2.85	2.70	2.60	2.54	2.45	2.36
26	7.72	5.53	4.64	4.14	3.82	3.59	3.42	3.29	3.18	3.09	2.96	2.81	2.66	2.57	2.50	2.42	2.33
27	7.68	5.49	4.60	4.11	3.78	3.56	3.39	3.26	3.15	3.06	2.93	2.78	2.63	2.54	2.47	2.38	2.29
28	7.64	5.45	4.57	4.07	3.75	3.53	3.36	3.23	3.12	3.03	2.90	2.75	2.60	2.51	2.44	2.35	2.26
29	7.60	5.42	4.54	4.04	3.73	3.50	3.33	3.20	3.09	3.00	2.87	2.73	2.57	2.48	2.41	2.33	2.23
30	7.56	5.39	4.51	4.02	3.70	3.47	3.30	3.17	3.07	2.98	2.84	2.70	2.55	2.45	2.39	2.30	2.21
40	7.31	5.18	4.31	3.83	3.51	3.29	3.12	2.99	2.89	2.80	2.66	2.52	2.37	2.27	2.20	2.11	2.02
60	7.08	4.98	4.13	3.65	3.34	3.12	2.95	2.82	2.72	2.63	2.50	2.35	2.20	2.10	2.03	1.94	1.84
120	6.85	4.79	3.95	3.48	3.17	2.96	2.79	2.66	2.56	2.47	2.34	2.19	2.03	1.93	1.86	1.76	1.66
∞	6.63	4.61	3.78	3.32	3.02	2.80	2.64	2.51	2.41	2.32	2.18	2.04	1.88	1.78	1.70	1.59	1.47

PDF created with pdfFactory Pro trial version www.pdffactory.com