

Mirosław K r z y ś k o (Poznań)
Waldemar R a t a j c z a k (Poznań)

ANALIZA KANONICZNA

1. Wstęp

Wygodnym narzędziem służącym do badania zależności między jedną zmienną zależną (objaśnianą) a zespołem p zmiennych niezależnych (objaśniających) jest regresja wielokrotna. Często jednakże interesuje nas zależność bardziej złożona, a mianowicie zależność między zbiorem q zmiennych objaśnianych i zbiorem p zmiennych objaśniających. Hotelling [10] wprowadził pojęcia zmiennych kanonicznych i korelacji kanonicznych, za pomocą których proponował badanie zależności między dwoma wektorami zmiennych. Koncepcje Hotellinga zostały rozwinięte w wielu pracach i znalazły liczne zastosowania. Zmienne kanoniczne i korelacje kanoniczne szeroko omówione są w następujących monografiach z wielowymiarowej analizy statystycznej Anderson [1], Rao [18], Kendall, Stuart [11], Morrison [16], Cooley, Lohnes [4], Tatsuoka [21], Kshirsagar [13], Harris [8], Bertier, Bouroche [2], Lefebvre [14].

W niniejszej pracy systematyzuje się dotychczas znane wyniki, podaje się metodę interpretacji zmiennych kanonicznych a także

dokonyje się porównań między koncepcjami współczynnika redundacji (Cooley, Lohnes [4], Ray, Lohnes [19], Nowosadzki [17]) i złożonego współczynnika korelacji (Glahn [6],[7], Mejza [15]). Teoria zilustrowana jest przykładem dotyczącym badań w geografii ekonomicznej.

2. Zmienne kanoniczne i korelacje kanoniczne

Niech $x = (x_1, x_2, \dots, x_p)'$ i $y = (y_1, y_2, \dots, y_q)'$ będą wektorami kolumnowymi p i q zmiennych losowych.

Niech macierz kowariancji tych $p + q$ zmiennych losowych będzie macierzą postaci

$$(1) \quad \text{Kowar} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} p \\ q \end{matrix},$$

gdzie $\Sigma_{21}' = \Sigma_{12}$. Zakłada się, że macierz (1) jest macierzą dodatnio określoną. Niech rząd $\Sigma_{12} = s \leq \min(p, q)$.

Rozpatrzmy funkcję liniową zmiennych x postaci

$$u = l'x = l_1x_1 + l_2x_2 + \dots + l_px_p,$$

oraz funkcję liniową zmiennych y postaci

$$v = m'y = m_1y_1 + m_2y_2 + \dots + m_qy_q.$$

Współczynniki $l = (l_1, l_2, \dots, l_p)'$ i $m = (m_1, m_2, \dots, m_q)'$ występujące w tych funkcjach chcemy wyznaczyć tak, by korelacja między zmiennymi u i v była maksymalna.

Wyliczmy współczynnik korelacji między tymi zmiennymi.

Mamy

$$(2) \quad \text{War } u = \text{War}(l'x) = E[l'x - E(l'x)]^2 = \\ = l'[E(x - Ex)(x - Ex)']l = l' \Sigma_{11} l,$$

$$(3) \quad \text{War } v = \text{War}(m'y) = E[m'y - E(m'y)]^2 = \\ = m'[E(y - Ey)(y - Ey)']m = m' \Sigma_{22} m,$$

$$(4) \quad \text{Kowar}(u, v) = \text{Kowar}(l'x, m'y) = \\ = E\{[l'x - E(l'x)][m'y - E(m'y)]\} = \\ = l'E[(x - Ex)(y - Ey)']m = l' \Sigma_{12} m,$$

$$(5) \quad \text{Kor}(u, v) = \text{Kor}(l'x, m'y) = \frac{l' \Sigma_{12} m}{\sqrt{(l' \Sigma_{11} l)(m' \Sigma_{22} m)}}.$$

Ponieważ współczynnik korelacji między zmienną różniącą się od zmiennej $l'x$ tylko stałym mnożnikiem i zmienną różniącą się od zmiennej $m'y$ tylko stałym mnożnikiem jest równy współczynnikowi korelacji między zmiennymi $l'x$ i $m'y$, to wektory l i m możemy normować w dowolny sposób.

Stąd, dla wygody obliczeń, wektory l i m dobierzemy tak, by

$$(6) \quad \text{War}(l'x) = l' \Sigma_{11} l = 1,$$

$$(7) \quad \text{War}(m'y) = m' \Sigma_{22} m = 1.$$

Wtedy współczynnik korelacji między zmiennymi u i v jest równy

$$(8) \quad \text{Kor}(l'x, m'y) = l' \Sigma_{12} m.$$

Zadanie nasze polega na zmaksymalizowaniu wyrażenia (8) przy dodatkowych warunkach (6) i (7). Funkcja, która ma być zmaksymalizowana ma postać

$$(9) \quad F(l, m) = l' \Sigma_{12} m - (\lambda/2)(l' \Sigma_{11} l - 1) - (\mu/2)(m' \Sigma_{22} m - 1),$$

gdzie $\lambda/2$ i $\mu/2$ są mnożnikami Lagrange'a (stałą $1/2$ przyjęto dla wygody obliczeń).

Zrózniczkujemy funkcję $F(l, m)$ względem składowych wektorów l i m . Przyrównując pochodne cząstkowe do zera otrzymujemy

$$(10) \quad \frac{\partial F}{\partial l} = \Sigma_{12} m - \lambda \Sigma_{11} l = 0,$$

$$(11) \quad \frac{\partial F}{\partial m} = \Sigma_{12}' l - \mu \Sigma_{22} m = 0.$$

Mnożąc wyrażenie (10) lewostronnie przez l' , a wyrażenie (11) lewostronnie przez m' otrzymujemy

$$(12) \quad l' \Sigma_{12} m - \lambda l' \Sigma_{11} l = 0,$$

$$(13) \quad m' \Sigma_{12}' l - \mu m' \Sigma_{22} m = 0.$$

Ponieważ $l' \Sigma_{11} l = 1$ i $m' \Sigma_{22} m = 1$, to

$$\lambda = \mu = l' \Sigma_{12} m = \rho.$$

Zatem wyrażenia (10) i (11) można napisać w postaci

$$(14) \quad -\rho \Sigma_{11} l + \Sigma_{12} m = 0,$$

$$(15) \quad \Sigma_{21} l - \rho \Sigma_{22} m = 0 ,$$

ponieważ $\Sigma'_{12} = \Sigma_{21}$.

Z równania (15) można wyrazić zmienną m za pomocą zmiennej l następująco:

$$(16) \quad m = \rho^{-1} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} l, \quad \text{dla } \rho \neq 0 .$$

Wstawmy wyrażenie (16) do równania (14). Mamy

$$(17) \quad -\rho \Sigma_{11} l + \rho^{-1} \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} l = 0 .$$

Mnożąc równanie (17) lewostronnie przez $\rho \Sigma_{11}^{-1}$ otrzymujemy

$$(18) \quad (\Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} - \rho^2 I) l = 0 .$$

Z równania (14) można wyrazić zmienną l za pomocą zmiennej m następująco:

$$(19) \quad l = \rho^{-1} \Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} m, \quad \text{dla } \rho \neq 0 .$$

Wstawmy wyrażenie (19) do równania (15). Mamy

$$(20) \quad \rho^{-1} \Sigma_{21} \Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} m - \rho \Sigma_{22} m = 0 .$$

Mnożąc równanie (20) lewostronnie przez $\rho \Sigma_{22}^{-1}$ otrzymujemy

$$(21) \quad (\Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} \Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} - \rho^2 I) m = 0 .$$

Aby istniały nietrywialne rozwiązania równań (18) i (21) (jest to niezbędne po to, by rozwiązania te spełniały warunki (6) i (7)), macierze występujące w tych równaniach winny być osobliwe, tj.

$$(22) \quad |\Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} - \rho^2 I| = 0,$$

$$(23) \quad |\Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} \Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} - \rho^2 I| = 0.$$

Równanie (22) ma p pierwiastków, natomiast równanie (23) ma q pierwiastków. Niezerowe pierwiastki (22) i (23) są jednakowe tak, że można oznaczyć je jednakowymi symbolami. Liczba niezerowych pierwiastków tych równań jest równa rzędowi macierzy Σ_{12} .

Wektory charakterystyczne, odpowiadające pierwiastkom równań (22) i (23) wyznaczamy z równań (18) i (21), przy czym między tymi wektorami zachodzą związki (16) i (19).

Niech $\rho_1^2 \geq \rho_2^2 \geq \dots \geq \rho_p^2$ będą pierwiastkami równania (22), natomiast l_1, l_2, \dots, l_p odpowiadającymi im wektorami charakterystycznymi. Niech $\rho_1^2 \geq \rho_2^2 \geq \dots \geq \rho_q^2$ będą pierwiastkami równania (23), natomiast m_1, m_2, \dots, m_q odpowiadającymi im wektorami charakterystycznymi. Wprowadźmy następujące oznaczenia:

$$(24) \quad L = [l_1 | l_2 | \dots | l_p],$$

$$(25) \quad M = [m_1 | m_2 | \dots | m_q].$$

Niezerowe wartości $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_s$ będące dodatnimi pierwiastkami kwadratowymi z $\rho_1^2, \rho_2^2, \dots, \rho_s^2$ nazywane są korelacjami kanonicznymi. Zmienne $u = L'x$ nazywane są zmiennymi kanonicznymi przestrzeni x -ów, natomiast zmienne $v = M'y$ nazywane są zmiennymi kanonicznymi przestrzeni y -ów.

3. Własności zmiennych kanonicznych

I. Niech

$$(26) \quad P_{pxq} = \left[\begin{array}{cccc|c} \rho_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \rho_2 & \dots & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \rho_s & 0 \\ \hline & 0 & & & 0 \\ & (p-s)x_s & & & (p-s)x(q-s) \end{array} \right]$$

Prawdziwe jest następujące twierdzenie (Kshirsagar [13]).

TWIERDZENIE. Macierz kowariancji zmiennych kanonicznych u oraz v ma postać

$$(27) \quad \text{Kowar} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} L' & \Sigma_{11} & L & L' & \Sigma_{12} & M \\ \hline M' & \Sigma_{21} & L & M' & \Sigma_{22} & M \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} I_p & P \\ \hline P' & I_q \end{array} \right].$$

Z (27) zauważmy, że wariancje wszystkich zmiennych u_i oraz v_i są równe 1, stąd kowariancje są równe korelacjom. Z (27) znajdujemy również, że

$$(28) \quad \text{Kor}(u_i, v_j) = \begin{cases} \rho_i, & \text{jeżeli } i = j, \\ 0, & \text{jeżeli } i \neq j. \end{cases}$$

Również z (27) zauważmy, że

$$(29) \quad \text{Kor}(u_i, u_j) = 0, \quad \text{Kor}(v_i, v_j) = 0, \quad \text{jeżeli } i \neq j.$$

Innymi słowy, pierwsza zmienna kanoniczna przestrzeni x -ów jest skorelowana jedynie z pierwszą zmienną kanoniczną przestrzeni y -ów, druga z drugą itd. Korelacje te są odpowiednio równe

$$\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_s.$$

II. Wprowadźmy następujące oznaczenia:

$$(30) \quad \Delta_1 = \text{diag}(\sqrt{\text{War } x_1}, \sqrt{\text{War } x_2}, \dots, \sqrt{\text{War } x_p}) ,$$

$$(31) \quad \Delta_2 = \text{diag}(\sqrt{\text{War } y_1}, \sqrt{\text{War } y_2}, \dots, \sqrt{\text{War } y_q}) .$$

$$(32) \quad D_1 = [\text{Kor}(x_i, u_j)] = R_{11} \Delta_1 L = \Delta_1^{-1} \Sigma_{11} L ,$$

$p \times p$

gdzie R_{11} jest macierzą korelacji zmiennych x , spełniającą więc związek

$$(33) \quad R_{11} = \Delta_1^{-1} \Sigma_{11} \Delta_1^{-1} ,$$

natomiast $\text{diag}(a_1, \dots, a_p)$ jest macierzą o elementach diagonalnych równych a_1, \dots, a_p a pozadiagonalnych równych zero.

Elementy macierzy D_1 można zapisać następująco:

$$(34) \quad d_{ij}^{(1)} = \text{Kor}(x_i, u_j) = \sum_{k=1}^p l_{kj} \text{Kor}(x_i, x_k) \sqrt{\text{War } x_k} ,$$

gdzie l_{kj} jest k -tą składową wektora l_j ($i=1, 2, \dots, p$, $j=1, 2, \dots, p$). Mamy również

$$(35) \quad D_2 = [\text{Kor}(y_i, v_j)] = R_{22} \Delta_2 M = \Delta_2^{-1} \Sigma_{22} M ,$$

$q \times q$

gdzie R_{22} jest macierzą korelacji zmiennych y , spełniającą więc związek

$$(36) \quad R_{22} = \Delta_2^{-1} \Sigma_{22} \Delta_2^{-1} .$$

Elementy macierzy D_2 można zapisać następująco:

$$(37) \quad d_{ij}^{(2)} = \text{Kor}(y_i, v_j) = \sum_{k=1}^q m_{kj} \text{Kor}(y_i, Y_k) \sqrt{\text{War } Y_k} ,$$

gdzie m_{kj} jest k -tą składową wektora m_j ($i=1,2,\dots,q$, $j=1,2,\dots,q$). Ponadto zachodzą następujące zależności:

$$(38) \quad z_1 = [\text{Kor}(x_i, v_j)] = \Delta_1^{-1} \Sigma_{12} M_s ,$$

pxs

$$(39) \quad z_2 = [\text{Kor}(y_i, u_j)] = \Delta_2^{-1} \Sigma_{21} L_s ,$$

qxs

gdzie L_s oraz M_s są macierzami L oraz M obciętymi do s pierwszych kolumn.

Elementy macierzy Z_1 można zapisać następująco:

$$(40) \quad z_{ij}^{(1)} = \text{Kor}(x_i, v_j) = \sum_{k=1}^q m_{kj} \text{Kor}(x_i, Y_k) \sqrt{\text{War } Y_k} ,$$

dla $i=1,2,\dots,p$, $j=1,2,\dots,s$.

Elementy macierzy Z_2 można zapisać następująco:

$$(41) \quad z_{ij}^{(2)} = \text{Kor}(y_i, u_j) = \sum_{k=1}^p l_{kj} \text{Kor}(y_i, X_k) \sqrt{\text{War } X_k} ,$$

dla $i=1,2,\dots,q$, $j=1,2,\dots,s$.

Oznaczmy przez $d_i^{(1)}$, $d_i^{(2)}$, $z_i^{(1)}$, $z_i^{(2)}$ i -te kolumny macierzy D_1, D_2 , Z_1, Z_2 odpowiednio ($i=1, 2, \dots, s$).

Z równania (19) mamy

$$\Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} m_i = \rho_i l_i \quad \text{lub} \quad \Sigma_{12} m_i = \rho_i \Sigma_{11} l_i \quad \text{lub}$$

$$(42) \quad \Delta_1^{-1} \Sigma_{12} m_i = \rho_i \Delta_1^{-1} \Sigma_{11} l_i, \quad \text{dla } i=1, 2, \dots, s.$$

To ostatnie równanie, dzięki związkom (32) i (38), można zapisać następująco:

$$(43) \quad z_i^{(1)} = \rho_i d_i^{(1)}, \quad \text{dla } i=1, 2, \dots, s.$$

Z równania (16) mamy

$$\Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} l_i = \rho_i m_i \quad \text{lub} \quad \Sigma_{21} l_i = \rho_i \Sigma_{22} m_i \quad \text{lub}$$

$$(44) \quad \Delta_2^{-1} \Sigma_{21} l_i = \rho_i \Delta_2^{-1} \Sigma_{22} m_i, \quad \text{dla } i=1, 2, \dots, s.$$

To ostatnie równanie, dzięki związkom (35) i (39), można zapisać następująco:

$$(45) \quad z_i^{(2)} = \rho_i d_i^{(2)}, \quad \text{dla } i=1, 2, \dots, s.$$

Ze związków (43) i (45) wynikają następujące zależności:

$$(46) \quad \text{Kor}(x_i, v_j) = \rho_j \text{Kor}(x_i, u_j), \quad \text{dla } i=1, 2, \dots, p, \\ j=1, 2, \dots, s$$

oraz

$$(47) \quad \text{Kor}(y_i, u_j) = \rho_j \text{Kor}(y_i, v_j), \text{ dla } i=1, 2, \dots, q, \\ j=1, 2, \dots, s.$$

$$\text{III. Niech } x^* = \left(\frac{x_1}{\sqrt{\text{War } x_1}}, \frac{x_2}{\sqrt{\text{War } x_2}}, \dots, \frac{x_p}{\sqrt{\text{War } x_p}} \right),$$

$$\text{i } y^* = \left(\frac{y_1}{\sqrt{\text{War } y_1}}, \frac{y_2}{\sqrt{\text{War } y_2}}, \dots, \frac{y_q}{\sqrt{\text{War } y_q}} \right),$$

będą wektorami kolumnowymi p i q zmiennych losowych unormowa-
nych. Macierz kowariancji tych $p+q$ zmiennych losowych unormo-
wanych będzie macierzą postaci

$$(48) \quad \text{Kowar} \begin{bmatrix} x^* \\ y^* \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|c} R_{11} & R_{12} \\ \hline R_{21} & R_{22} \end{array} \right],$$

gdzie $R'_{21} = R_{12}$.

Macierz (48) jest zarazem macierzą korelacji $p+q$ zmiennych x
i y . Prawdziwe są następujące związki:

$$(49) \quad \Sigma_{11} = \Delta_1 R_{11} \Delta_1, \quad \Sigma_{12} = \Delta_1 R_{12} \Delta_2,$$

$$\Sigma_{21} = \Delta_2 R_{21} \Delta_1, \quad \Sigma_{22} = \Delta_2 R_{22} \Delta_2.$$

Korzystając z powyższych związków równania (22) i (23) można za-
pisać następująco:

$$(50) \quad |\Delta_1| \cdot |R_{12} R_{22}^{-1} R_{21} - \rho^2 R_{11}| \cdot |\Delta_1| = 0, \\ |\Delta_2| \cdot |R_{21} R_{11}^{-1} R_{12} - \rho^2 R_{22}| \cdot |\Delta_2| = 0.$$

Ze względu na nieosobliwość macierzy Δ_1 oraz Δ_2 równania (50) można zapisać następująco:

$$(51) \quad | R_{12} R_{22}^{-1} R_{21} - \rho^2 R_{11} | = 0,$$

$$| R_{21} R_{11}^{-1} R_{12} - \rho^2 R_{22} | = 0.$$

Stąd dostajemy następujący wniosek.

WNIOSEK 1. Korelacje kanoniczne zmiennych x, y oraz zmiennych unormowanych x^*, y^* są identyczne.

Korzystając ze związków (49), równań (18) oraz (21) zapisać można następująco:

$$(52) \quad (R_{12} R_{22}^{-1} R_{21} - \rho^2 R_{11}) l^* = 0,$$

$$(R_{21} R_{11}^{-1} R_{12} - \rho^2 R_{22}) m^* = 0, \text{ gdzie}$$

$$(53) \quad l^* = \Delta_1 l, \quad m^* = \Delta_2 m.$$

Oznaczając przez u^* i v^* zmienne kanoniczne odpowiadające zmiennym unormowanym x^* i y^* otrzymujemy

$$(54) \quad u^* = (l^*)' x^* = (\Delta_1 l)' x^* = l' x = u,$$

$$v^* = (m^*)' y = (\Delta_2 m)' y = m' y = v.$$

Stąd prawdziwy jest następujący wniosek.

WNIOSEK 2. Zmienne kanoniczne odpowiadające zmiennym x, y oraz zmiennym unormowanym x^*, y^* są identyczne.

IV. Zachodzą następujące związki:

$$\begin{aligned} D_1 D_1' &= (\Delta_1^{-1} \Sigma_{11} L) (\Delta_1^{-1} \Sigma_{11} L)' = \\ &= \Delta_1^{-1} \Sigma_{11} L L' \Sigma_{11} \Delta_1^{-1} = \Delta_1^{-1} \Sigma_{11} \Delta_1^{-1} = R_{11} \end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned} D_2 D_2' &= (\Delta_2^{-1} \Sigma_{22} M) (\Delta_2^{-1} \Sigma_{22} M)' = \\ &= \Delta_2^{-1} \Sigma_{22} M M' \Sigma_{22} \Delta_2^{-1} = \Delta_2^{-1} \Sigma_{22} \Delta_2^{-1} = R_{22} \end{aligned}$$

Z powyższych związków mamy

$$(55) \quad \sum_{j=1}^p \text{Kor}^2(x_i, u_j) = 1, \quad \sum_{j=1}^q \text{Kor}^2(y_k, v_j) = 1,$$

dla $i=1, \dots, p, \quad k=1, \dots, q.$

Związki (55) można również zapisać następująco:

$$(56) \quad \text{War } x_i = \sum_{j=1}^p \text{Kowar}^2(x_i, u_j), \quad \text{War } y_k = \sum_{j=1}^q \text{Kowar}^2(y_k, v_j),$$

dla $i=1, \dots, p, \quad k=1, \dots, q.$

Wzory (55) oraz (56) stanowią podstawę do interpretacji zmiennych kanonicznych. Ze wzorów tych jest widoczne, że poszczególne zmienne kanoniczne w różnym stopniu wyjaśniają wariancję zmiennych pierwotnych. Miarą tego wyjaśnienia jest kwadrat kowariancji między zmienną kanoniczną i zmienną pierwotną.

4. Zmienne kanoniczne i korelacje kanoniczne z próby

Niech $W_1 = [w_{ki}^{(1)}]$ oraz $W_2 = [w_{kj}^{(2)}]$, gdzie $k=1,2,\dots,N$, $i=1,2,\dots,p$, $j=1,2,\dots,q$, będą macierzami obserwacji odpowiednio zmiennych x_1, x_2, \dots, x_p oraz y_1, y_2, \dots, y_q .

Wprowadźmy następujące oznaczenia:

$$(57) \quad x_{ki} = w_{ki}^{(1)} - \bar{w}_i^{(1)},$$

$$(58) \quad y_{kj} = w_{kj}^{(2)} - \bar{w}_j^{(2)},$$

gdzie

$$(59) \quad \bar{w}_i^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N w_{ki}^{(1)}, \quad \bar{w}_j^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N w_{kj}^{(2)},$$

dla $i=1,2,\dots,p$, $j=1,2,\dots,q$, $k=1,2,\dots,N$.

Oznaczmy ponadto przez X i Y macierze, których elementami są odpowiednio x_{ki} oraz y_{kj} .

Wtedy nieobciążonymi ocenami z próby macierzy Σ_{11} , Σ_{12} i Σ_{22} są odpowiednio macierze S_{11} , S_{12} i S_{22} zdefiniowane następująco:

$$(60) \quad S_{11} = \frac{1}{N-1} X'X,$$

$$(61) \quad S_{12} = S'_{21} = \frac{1}{N-1} X'Y,$$

$$(62) \quad S_{22} = \frac{1}{N-1} Y'Y.$$

Oznaczmy przez r_i ($i=1,2,\dots,s=\min(p,q)$)¹⁾ korelacje kanoniczne z próby, przez R macierz typu $p \times q$, której s pierwszych elementów diagonalnych jest $r_1 \geq r_2 \geq \dots \geq r_s$, a pozostałe elementy są zerami natomiast przez R_s macierz R obciętą do s pierwszych kolumn i s pierwszych wierszy. Oznaczmy przez $\hat{u}_i = \hat{l}_i'x$ oraz $\hat{v}_j = \hat{m}_j'y$ zmienne kanoniczne z próby ($i=1,2,\dots,p$, $j=1,2,\dots,q$). Niech ponadto $\hat{L}=[\hat{l}_1|\hat{l}_2|\dots|\hat{l}_p]$, $\hat{M}=[\hat{m}_1|\hat{m}_2|\dots|\hat{m}_q]$, natomiast \hat{L}_s oraz \hat{M}_s będą macierzami \hat{L} oraz \hat{M} obciętymi do s pierwszych kolumn. Korelacje kanoniczne z próby i zmienne kanoniczne z próby wyznaczone są z następujących równań:

dla $s=p$ mamy

$$(63) \quad |S_{11}^{-1} S_{12} S_{22}^{-1} S_{21} - r^2 I| = 0,$$

$$(64) \quad (S_{11}^{-1} S_{12} S_{22}^{-1} S_{21} - r_i^2 I)\hat{l}_i = 0, \quad i=1,2,\dots,p,$$

dla $s=q$ mamy

$$(65) \quad |S_{22}^{-1} S_{21} S_{11}^{-1} S_{12} - r^2 I| = 0,$$

$$(66) \quad (S_{22}^{-1} S_{21} S_{11}^{-1} S_{12} - r_j^2 I)\hat{m}_j = 0, \quad j=1,2,\dots,q.$$

5. Prognozowanie

Niech x_1, x_2, \dots, x_p będą zmiennymi objaśniającymi, natomiast y_1, y_2, \dots, y_q zmiennymi objaśnianymi.

1) Z prawdopodobieństwem 1 zachodzi bowiem następująca równość:

$$\text{rzęd } S_{12} = \min(p,q) = s.$$

Zmienne objaśniane można prognozować (w sensie metody najmniejszych kwadratów) za pomocą zmiennych kanonicznych przestrzeni zmiennych objaśniających. Przyjmujemy następujący model liniowy.

$$(67) \quad E(Y) = \begin{pmatrix} X & \hat{L} \\ N \times q & N \times p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Xi_1 \\ p \times q \end{pmatrix}$$

gdzie macierze X , Y oraz \hat{L} zdefiniowane są w punkcie czwartym tej pracy, Ξ_1 jest macierzą parametrów, które mają być estymowane. Zakładamy, że wiersze macierzy Y mają niezależne q -wymiarowe rozkłady normalne z macierzą kowariancji Ξ_{22} , i że macierz $X\hat{L}$ jest rzędu p . Układ równań normalnych ma postać

$$(68) \quad (X\hat{L})'(X\hat{L}) \Xi_1 = (X\hat{L})'Y.$$

Mnożąc powyższy układ przez $(N-1)^{-1}$ i korzystając z zależności (60) oraz (61) otrzymujemy

$$(69) \quad (\hat{L}'S_{11} \hat{L}) \Xi_1 = \hat{L}'S_{12}.$$

Prawdziwe są następujące związki:

$$(70) \quad \hat{L}'S_{11} \hat{L} = I_p, \quad \hat{M}'S_{22} \hat{M} = I_q, \quad \hat{L}'S_{12} \hat{M} = R.$$

Z powyższych związków mamy

$$\hat{L}'S_{12} = R \hat{M}^{-1} = R \hat{M}'S_{22}.$$

Stąd

$$(71) \quad \hat{\Xi}_1 = R \hat{M}' S_{22}$$

i ostatecznie równanie prognozy ma postać

$$(72) \quad \hat{Y} = X \hat{L} R \hat{M}' S_{22} .$$

Rozpatrzmy teraz prognozę zmiennych zależnych y_1, y_2, \dots, y_q za pomocą tylko s pierwszych zmiennych kanonicznych przestrzeni x -ów odpowiadających niezerowym pierwiastkom równania (63).

Przyjmujemy następujący model liniowy:

$$(73) \quad E(Y) = \begin{pmatrix} X & \hat{L} \\ N \times q & N \times p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Xi_2 \\ p \times s \\ s \times q \end{pmatrix}$$

gdzie wiersze macierzy Y mają niezależne q -wymiarowe rozkłady normalne z macierzą kowariancji Ξ_{22} , macierz $X \hat{L}_s$ jest rzędu s . Układ równań normalnych ma postać

$$(74) \quad (X \hat{L}_s)' (X \hat{L}_s) \Xi_2 = (X \hat{L}_s)' Y .$$

Mnożąc powyższy układ przez $(N-1)^{-1}$ i korzystając z zależności (60) oraz (61) otrzymujemy

$$(75) \quad (\hat{L}'_s S_{11} \hat{L}_s) \Xi_2 = \hat{L}'_s S_{12} .$$

Prawdziwe są związki

$$(76) \quad \hat{L}'_s S_{11} \hat{L}_s = I_s , \hat{M}'_s S_{22} \hat{M}_s = I_s , \hat{L}'_s S_{12} \hat{M}_s = R_s .$$

Prostą konsekwencją wzorów (16) i (19) są zależności

$$(77) \quad \hat{L}_s = S_{11}^{-1} S_{12} \hat{M}_s R_s^{-1}, \quad \hat{M}_s = S_{22}^{-1} S_{21} \hat{L}_s R_s^{-1}.$$

Stąd estymator $\hat{\Xi}_2$ macierzy nieznanych parametrów Ξ_2 , uzyskany metodą najmniejszych kwadratów, ma postać

$$(78) \quad \hat{\Xi}_2 = \hat{L}_s' S_{12} = R_s \hat{M}_s' S_{22}.$$

Druga równość wynika z zależności (77).

Zatem równanie prognozy zapisać można następująco:

$$(79) \quad \hat{Y} = X \hat{L}_s R_s \hat{M}_s' S_{22}.$$

Porównując prognozy (72) i (79) oraz korzystając z faktu, że $\hat{L} R \hat{M}' = \hat{L}_s R_s \hat{M}_s'$ możemy stwierdzić, że prognoza zmiennych zależnych Y_1, Y_2, \dots, Y_q za pomocą wszystkich zmiennych kanonicznych przestrzeni x -ów jest równa prognozie tychże zmiennych za pomocą tylko s zmiennych kanonicznych przestrzeni x -ów odpowiadających niezerowym pierwiastkom równania (63). Tym samym zmienne kanoniczne odpowiadające pierwiastkom zerowym nie wnoszą żadnej informacji w procesie prognozowania. Stąd w dalszym ciągu możemy ograniczyć się do równania prognozy danego wzorem (79).

6. Złożony współczynnik determinacji, współczynnik redundacji

Wprowadźmy następujące oznaczenie:

$$(80) \quad E = Y - \hat{Y}.$$

Zachodzi następująca równość:

$$(81) \quad Y'Y = (\hat{Y} + E)'(\hat{Y} + E) .$$

Mnożąc tę równość przez $(N-1)^{-1}$ oraz korzystając z faktów, że $(N-1)^{-1} Y'Y = S_{22}$ oraz $E'\hat{Y} = \hat{Y}'E = 0$ otrzymujemy

$$(82) \quad S_{22} = S_{22} \hat{M}'_S R'_S \hat{L}'_S S_{11} \hat{L}_S R_S \hat{M}'_S S_{22} + (N-1)^{-1} E'E .$$

Ale ponieważ $\hat{L}'_S S_{11} \hat{L}_S = I_S$, więc otrzymujemy

$$(83) \quad S_{22} = S_{22} \hat{M}'_S R_S^2 \hat{M}'_S S_{22} + (N-1)^{-1} E'E .$$

Zauważmy, że i -ty element diagonalny macierzy S_{22} jest równy wariancji całkowitej zmiennej y_i , natomiast i -ty element diagonalny macierzy $V = S_{22} \hat{M}'_S R_S^2 \hat{M}'_S S_{22}$ jest równy tej części wariancji zmiennej y_i , która jest wyjaśniona przez prognozę za pomocą zmiennych kanonicznych $\hat{u}_1, \hat{u}_2, \dots, \hat{u}_s$ przestrzeni x -ów, dla $i=1, 2, \dots, q$. Dzieląc i -ty element diagonalny macierzy V przez i -ty element diagonalny macierzy S_{22} otrzymujemy frakcję wariancji zmiennej y_i wyjaśnioną przez prognozę, dla $i=1, 2, \dots, q$. Frakcje te są równe elementom diagonalnym macierzy

$$(84) \quad Q = B^{-1} S_{22} \hat{M}'_S R_S^2 \hat{M}'_S S_{22} B^{-1} ,$$

gdzie B jest macierzą, której elementami diagonalnymi są pierwiastki kwadratowe z elementów diagonalnych macierzy S_{22} , a elementami pozadiagonalnymi są zera.

Macierz Q jest niezmiennicza względem liniowych przekształceń skali zmiennych objaśnianych i objaśniających.

Suma tych części wariancji zmiennych y_1, y_2, \dots, y_q , które są wyjaśnione przez prognozę, jest równa sumie elementów diagonalnych macierzy V , czyli jest równa

$$(85) \quad \text{tr}(S_{22} \hat{M}_S R_S^2 \hat{M}_S' S_{22}) .$$

Stosunek sumy wariancji wyjaśnionych zmiennych y_1, y_2, \dots, y_q do sumy wariancji całkowitej tych zmiennych jest równy

$$(86) \quad R_{Y.X}^2 = \frac{\text{tr}(S_{22} \hat{M}_S R_S^2 \hat{M}_S' S_{22})}{\text{tr } S_{22}} .$$

Współczynnik $R_{Y.X}$ nazwiemy (za Glahnem [6],[7]) złożonym współczynnikiem korelacji, natomiast $R_{Y.X}^2$ złożonym współczynnikiem determinacji.

Złożony współczynnik determinacji jest uogólnieniem współczynnika determinacji stosowanego w regresji wielokrotnej i dla $q=1$ pokrywa się z tym współczynnikiem.

Przedstawmy macierz R_S^2 w następującej postaci:

$$(87) \quad R_S^2 = \begin{bmatrix} r_1^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r_2^2 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} + \dots + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & r_s^2 \end{bmatrix} =$$

$$= C_1^2 + C_2^2 + \dots + C_s^2 .$$

Korzystając z własności, że ślad sumy macierzy jest równy sumie śladów poszczególnych macierzy, możemy zapisać następującą równość:

$$(88) \quad \text{tr}(S_{22} \hat{M}_s R_s^2 \hat{M}'_s S_{22}) = \sum_{i=1}^s \text{tr}(S_{22} \hat{M}_s C_i^2 \hat{M}'_s S_{22}) = \sum_{i=1}^s \text{tr} A_i .$$

Stąd złożony współczynnik determinacji zapisać można następująco:

$$(89) \quad R_{y \cdot x}^2 = \sum_{i=1}^s \frac{\text{tr} A_i}{\text{tr} S_{22}} .$$

Element diagonalny a_{jj} macierzy A_i można zapisać następująco:

$$(90) \quad a_{jj} = [\text{Kor}(\hat{u}_i, \hat{v}_i) \sum_{k=1}^q \hat{m}_{ki} \text{Kowar}(y_j, y_k)]^2 ,$$

dla $i=1, \dots, s, j=1, \dots, q$.

Mamy

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^q \hat{m}_{ki} \text{Kowar}(y_j, y_k) &= \sum_{k=1}^q \hat{m}_{ki} \text{Kor}(y_j, y_k) \sqrt{\text{War } y_j \cdot \text{War } y_k} = \\ &= \sqrt{\text{War } y_j} \sum_{k=1}^q \hat{m}_{ki} \text{Kor}(y_j, y_k) \sqrt{\text{War } y_k} = \sqrt{\text{War } y_j} \text{Kor}(y_j, \hat{v}_i) , \end{aligned}$$

dla $i=1, 2, \dots, s, j=1, 2, \dots, q$.

Ostatnia równość wynika ze wzoru (37).

Zatem j -ty element diagonalny macierzy A_i zapisać można następująco:

$$(91) \quad a_{jj} = r_i^2 \text{War } y_j \text{Kor}^2(y_j, \hat{v}_i) ,$$

dla $i=1, 2, \dots, s, j=1, 2, \dots, q$.

Stąd

$$(92) \quad \text{tr } A_i = \sum_{k=1}^q r_i^2 \text{War } y_k \text{ Kor}^2(y_k, \hat{v}_i), \quad \text{dla } i=1,2,\dots,s.$$

Zatem złożony współczynnik determinacji zapisać można następująco:

$$(93) \quad R_{y.x}^2 = \sum_{i=1}^s \frac{\sum_{k=1}^q r_i^2 \text{War } y_k \text{ Kor}^2(y_k, \hat{v}_i)}{\sum_{k=1}^q \text{War } y_k}$$

Poszczególne składniki tej sumy można interpretować następująco: i -ty składnik jest frakcją sumy wariancji wyjaśnionych przez prognozę za pomocą i -tej zmiennej kanonicznej zmiennych y_1, y_2, \dots, y_q .

Gdy $\text{War } y_k = 1$, dla $k = 1, 2, \dots, q$, to i -ty składnik wyrażenia (93) jest równy .

$$(94) \quad \frac{1}{q} \sum_{k=1}^q r_i^2 \text{Kowar}^2(y_k, \hat{v}_i),$$

gdzie $\text{Kowar}(y_k, \hat{v}_i)$, dla $k=1,2,\dots,q$, $i=1,2,\dots,s$, dana jest wzorem

$$(95) \quad \text{Kowar}(y_k, \hat{v}_i) = \sum_{j=1}^q \hat{m}_{ji} \text{Kowar}(y_j, y_k).$$

Wyrażenie (94) jest równe współczynnikowi redundacji zmiennej \hat{v}_i rozważanemu przez Cooley'a i Lohnesa [4], Ray'a i Lohnesa [19] oraz Nowosadzkiego [17].

Również przy założeniu, że $\text{War } y_k = 1$, dla $k=1,2,\dots,q$, mamy

$$(96) \quad R_{y \cdot x}^2 = \frac{1}{q} \sum_{i=1}^s \sum_{k=1}^q r_i^2 \text{Kowar}^2(y_k, \hat{v}_i),$$

gdzie Kowar (y_k, \hat{v}_i) dla $k=1, 2, \dots, q$, $i=1, 2, \dots, s$ dana jest wzorem (95).

Współczynnik $R_{y \cdot x}^2$ dany wzorem (96) jest równy współczynnikowi redundacji całkowitej rozważanemu przez Cooley'a i Lohnesa [4], Ray'a i Lohnesa [19] oraz Nowosadzkiego [17].

Wypada więc stwierdzić, że różni autorzy, używając odmiennego zapisu i swoistej terminologii, dyskutują o tej samej wielkości.

Weźmy pod uwagę macierz A_i , dla $i=1, 2, \dots, s$. Element diagonalny a_{jj} tej macierzy jest równy wariancji wyjaśnionej przez i -tą zmienną kanoniczną zmiennej y_j , dla $j=1, 2, \dots, q$, $i=1, 2, \dots, s$. Natomiast ślad tej macierzy jest sumą wariancji wyjaśnionych przez i -tą zmienną kanoniczną zmiennych y_1, y_2, \dots, y_q , dla $i=1, 2, \dots, s$. Jeśli macierz Q daną wzorem (84) zapiszemy w postaci sumy s macierzy Q_1, Q_2, \dots, Q_s (korzystając z (87)), to i -ty element diagonalny, j -tej macierzy jest frakcją wariancji wyjaśnionej przez j -tą zmienną kanoniczną zmiennej y_i , dla $i=1, 2, \dots, q$, $j=1, 2, \dots, s$.

Zauważmy, że dzięki wzorowi (91) j -ty element diagonalny macierzy V można zapisać następująco:

$$(97) \quad v_{jj} = \text{War } y_j \sum_{i=1}^s r_i^2 \text{Kor}^2(y_j, \hat{v}_i), \quad \text{dla } j=1, 2, \dots, q.$$

Element ten jest częścią wariancji wyjaśnionej przez regresję za pomocą s zmiennych kanonicznych zmiennej y_j . Biorąc iloraz elementu v_{jj} oraz wariancji $\text{War } y_j$ otrzymamy frakcję wariancji wyjaśnionej przez regresję za pomocą s zmiennych kanonicznych zmiennej y_j .

$$(98) \quad R_{Y_j \cdot x_1, \dots, x_p}^2 = \frac{\text{War } y_j \sum_{i=1}^s r_i^2 \text{Kor}^2(y_j, \hat{v}_i)}{\text{War } y_j} =$$

$$= \sum_{i=1}^s r_i^2 \text{Kor}^2(y_j, \hat{v}_i),$$

dla $j=1, 2, \dots, q$.

Fracje te noszą nazwę współczynników determinacji w regresji wielokrotnej i są równe elementom diagonalnym macierzy Q danej wzorem (84). Korzystając ze wzoru (98), złożony współczynnik determinacji $R_{Y \cdot X}^2$ można zapisać następująco:

$$(99) \quad R_{Y \cdot X}^2 = \frac{\sum_{k=1}^q \text{War } y_k R_{Y_k \cdot x_1, \dots, x_p}^2}{\sum_{k=1}^q \text{War } y_k}.$$

Złożony współczynnik determinacji jest niezmienniczy względem liniowej transformacji skali zmiennych objaśniających lecz nie jest niezmienniczy względem liniowej transformacji skali zmiennych objaśnianych. Ta sama uwaga odnosi się do macierzy V .

7. Testowanie hipotez związanych z korelacjami kanonicznymi

W celu weryfikacji istotności pierwiastków równania (63) posłużymy się testem maksymalnego pierwiastka Roy'a (patrz Roy [20], Krishnaiah i Waikar [12]). Założymy, że wektory losowe x i y mają łączny rozkład normalny z macierzą kowariancji daną wzorem (1). Niech $\rho_1^2 \geq \rho_2^2 \geq \dots \geq \rho_s^2$ będą pierwiastkami macierzy

$\Sigma_{11}^{-1} \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21}$, natomiast $r_1^2 \geq r_2^2 \geq \dots \geq r_s^2$ pierwiastkami macierzy $S_{11}^{-1} S_{12} S_{22}^{-1} S_{21}$, gdzie $E(S_{ij}) = \Sigma_{ij}$ ($i, j=1, 2$). Weźmy pod uwagę hipotezy $H_j: \rho_j^2 = 0$, $H: \rho_1^2 = \dots = \rho_s^2 = 0$ ($H = \bigcap_{j=1}^s H_j$) przeciwko hipotezom alternatywnym $K_j: \rho_j^2 > 0$, $K = \bigcup_{j=1}^m K_j$, dla $j = 1, 2, \dots, s$.

Hipotezy H_1, \dots, H_s, H możemy weryfikować jednocześnie przeciwko hipotezom alternatywnym K_1, \dots, K_s, K następująco:

przyjmujemy H_i wtedy i tylko wtedy, gdy $r_i^2 \leq c_\alpha$,

odrzucaamy H_i wtedy i tylko wtedy, gdy $r_i^2 > c_\alpha$,

gdzie

$$(100) \quad P[r_i^2 \leq c_\alpha, i=1, 2, \dots, s | H] = P[r_{\max}^2 \leq c_\alpha | H] = 1 - \alpha.$$

Hipotezę ogólną H przyjmujemy wtedy i tylko wtedy, gdy przyjęte są wszystkie indywidualne hipotezy H_i , dla $i=1, 2, \dots, s$.

Wartości krytyczne c_α można odczytać np. z tablicy A5 zamieszczonej w monografii Harrisa [8]. Tam też znajduje się szersza dyskusja związana z różnymi testami istotności korelacji kanonicznych.

8. Przykład

W niniejszym przykładzie rozpatruje się przy pomocy analizy kanonicznej współzależność pomiędzy urbanizacją i uprzemysłowieniem w układzie gmin województwa poznańskiego (podział administracyjny sprzed 1974r.) oraz dokonuje się delimitacji obszarów zurbanizowanych tegoż województwa przy pomocy dwóch pierwszych zmiennych kanonicznych. Dane do tej analizy zostały udostępnione przez dra H. Rogackiego z Zakładu Geografii Ekonomicznej UAM.

Ponieważ w analizie kanonicznej, podobnie jak w analizie składowych głównych, nie rozstrzygnięto jak dotąd problemu normowania lub nie normowania zmiennych wyjściowych, dlatego w tym przypadku dokonano podwójnych obliczeń. Raz dla zmiennych nieunormowanych oraz powtórnie dla zmiennych unormowanych i porównano otrzymane wyniki. Ponadto w celu pokazania dalszych możliwości, które mogą zwiększyć przydatność tej metody w badaniach empirycznych, w odniesieniu do zbioru zmiennych niezależnych x zastosowano wielomian stopnia drugiego i przeprowadzono ponownie analizę kanoniczną. W regresji wielokrotnej odpowiada to stosowaniu wielomianu stopnia drugiego jako równania regresji.

8.1. Charakterystyka zbiorów zmiennych wyjściowych

Zbiór zmiennych niezależnych zawiera zmienne charakteryzujące uprzemysłowienie, natomiast zbiór zmiennych zależnych zawiera zmienne charakteryzujące urbanizację gmin województwa poznańskiego.

(a) Zbiór zmiennych niezależnych (objasniających):

- x_1 - zatrudnienie w przemyśle na 1000 mieszkańców,
- x_2 - moc zainstalowanych maszyn i urządzeń na 1000 mieszkańców,
- x_3 - wartość środków trwałych na 1000 mieszkańców,
- x_4 - zatrudnienie w przemyśle na 100 km² powierzchni bezleśnej,
- x_5 - moc zainstalowanych maszyn i urządzeń na 100 km² powierzchni bezleśnej,
- x_6 - wartość środków trwałych na 100 km² powierzchni bezleśnej.

(b) Zbiór zmiennych zależnych (objaśnianych):

Y_1 - odsetek ludności utrzymującej się ze źródeł pozarolniczych,

Y_2 - gęstość zaludnienia na 1 km² powierzchni bezleśnej,

Y_3 - przeciętna liczba izb w budynku,

Y_4 - odsetek mieszkań wyposażonych w wodociąg,

Y_5 - odsetek mieszkań wyposażonych w urządzenia sanitarno-kanalizacyjne.

(c) Macierz obserwacji.

W macierzy obserwacji o wymiarach 201 x 11 zestawiono wartości liczbowe zmiennych zbiorów (a) oraz (b).

Stanowiła ona punkt wyjścia analizy kanonicznej. Mając jednak na względzie ograniczoną ilość miejsca, w prezentowanej pracy jej nie zamieszczono.

8.2. Wyniki analizy kanonicznej dla danych nieunormowanych

Jak wspomniano uprzednio, analizę kanoniczną przeprowadzono dla zmiennych unormowanych i nieunormowanych. Wyniki przedstawiono poniżej, oznaczając przez S rezultaty uzyskane ze zmiennych nieunormowanych i przez K rezultaty uzyskane ze zmiennych unormowanych. Obliczenia numeryczne zostały wykonane według nieopublikowanego programu L.Konysa i S.Mejzy z Akademii Rolniczej w Poznaniu. Ponieważ zbiór zmiennych zależnych zawierał $q=5$ zmiennych, otrzymano pięć par zmiennych kanonicznych, spośród których przykładowo przytacza się dwie:

$$\hat{u}_{1S} = 0,0024x_1 - 0,0001x_2 + 0,0038x_3 - 0,0003x_4 + 0,0001x_5 - 0,0003x_6$$

$$\hat{v}_{1S} = 0,0054y_1 - 0,0055y_2 - 0,0788y_3 + 0,0013y_4 + 0,0065y_5$$

$$\hat{u}_{2S} = -0,0159x_1 + 0,0011x_2 - 0,0220x_3 + 0,0001x_4 - 0,0001x_5$$

$$\hat{v}_{2S} = 0,2768y_1 + 0,0037y_2 + 0,0839y_3 + 0,0164y_4 - 0,1007y_5$$

Ze względu na duże wymiary macierzy (201 x 10) nie podano tutaj wartości zmiennych kanonicznych. Natomiast wartości współczynników korelacji kanonicznych między wszystkimi parami zmiennych kanonicznych zestawiono w tabeli 1.

TABELA 1

Wartości współczynników korelacji kanonicznych

Para zmiennych	Współczynniki korelacji kanonicznych
$\hat{u}_{1S}, \hat{v}_{1S}$	0,993923
$\hat{u}_{2S}, \hat{v}_{2S}$	0,784880
$\hat{u}_{3S}, \hat{v}_{3S}$	0,482510
$\hat{u}_{4S}, \hat{v}_{4S}$	0,184584
$\hat{u}_{5S}, \hat{v}_{5S}$	0,152184

Współczynniki korelacji kanonicznych stanowią cenną wskazówkę, która może być wykorzystana przy redukcji zbiorów zmiennych wyjściowych. Można bowiem (jeśli istnieje taka potrzeba) zbiory zmiennych wyjściowych zastąpić najsilniej skorelowanymi zmiennymi kanonicznymi.

Korzystając z zależności (93) można uzyskać współczynniki determinacji w sensie regresji wielokrotnej, które informują jaki procent wariacji zmiennych zależnych jest objaśniany przez zbiór zmiennych niezależnych. Zatem relacja (93) umożliwia orientację co do tej części wariacji zmiennych zależnych, która ulega dalszemu podziałowi w wyniku zastosowania analizy kanonicznej. Jest jasne, iż w przypadku niskiego stopnia wyjaśniania wariacji zmiennej zależnej przez zbiór zmiennych niezależnych, dalszy podział wartości R^2 nie jest zbyt sensowny. Widać tu uzależnienie wyników korelacji kanonicznej od właściwego doboru zmiennych niezależnych. Tabela 2 zawiera wszystkie współczynniki determinacji.

TABELA 2

Wartości współczynników determinacji wielokrotnej

Zmienna	R^2
Y_1	59,5
Y_2	98,1
Y_3	65,2
Y_4	54,2
Y_5	71,6

Informacji o tym, jak przebiega podział współczynników R^2 , gdy zbiór x_1, \dots, x_p zredukuje się do pewnej liczby zmiennych kanonicznych, dostarcza macierz Q . Wiadomo, że macierz Q można wyrazić w postaci sumy s macierzy Q_1, Q_2, \dots, Q_s . Zatem np.: i -ty element przekątnej macierzy Q_1 określa w procentach część wariacji i -tej zmiennej wyjściowej ze zbioru y wyjaśnioną

przez pierwszą zmienną kanoniczną przestrzeni x -ów, czyli u_1 .
Zestawienie elementów przekątnych macierzy Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 i Q_5
zawiera tabela 3.

TABELA 3

Zasób wariacji kolejnych zmiennych urbanizacji wyjaśnio-
nych w procentach przez zmienne kanoniczne uprzemysłowienia.

Zmienne kanoniczne \ Zmienne zależne	Y_1	Y_2	Y_3	Y_4	Y_5
\hat{u}_{1S}	13,7	97,6	47,8	21,3	34,6
\hat{u}_{2S}	42,1	0,5	16,7	31,8	36,6
\hat{u}_{3S}	3,6	0,0	0,0	0,4	0,3
\hat{u}_{4S}	0,0	0,0	0,2	0,2	0,0
\hat{u}_{5S}	0,0	0,0	0,4	0,4	0,1
Σ	59,4 R^2	98,1 R^2	65,1 R^2	54,1 R^2	71,6 R^2

Natomiast informacji, w jakim stopniu wszystkie zmienne kanoniczne przestrzeni x -ów, brane łącznie, wyjaśniają sumę wariacji wszystkich zmiennych zależnych (śląd macierzy S_{22}), dostarcza uogólniony współczynnik determinacji wielokrotnej $R^2_{Y.X}$ określony formułą (99). W tym przypadku jego wartość wynosi 97,2%, jest zatem bardzo wysoka i wskazuje na dużą przydatność zmiennych kanonicznych w prognozowaniu zmiennych zależnych. Stosując

formułę (93) można określić jak duży jest udział poszczególnych zmiennych przestrzeni x -ów w wyjaśnianiu łącznej wariancji zmiennych zbioru y . Trzeba jednak zauważyć, że pierwsza zmienna kanoniczna nie zawsze ma największy udział w tym wyjaśnianiu. Odpowiednie wartości dotyczące analizowanego przykładu zestawiono w tabeli 4.

TABELA 4

Zasób sumy wariancji zmiennych urbanizacji wyjaśniony przez poszczególne zmienne kanoniczne uprzemysłowienia.

Zmienne kanoniczne	%
\hat{u}_{1S}	95,7
\hat{u}_{2S}	1,4
\hat{u}_{3S}	0,1
\hat{u}_{4S}	0,0
\hat{u}_{5S}	0,0
Σ	.97,2 $R^2_{Y.X}$

8.2.1. Interpretacja zmiennych kanonicznych

Z praktycznego punktu widzenia bardzo ważne jest nadanie zmiennym kanonicznym odpowiedniej interpretacji, zwłaszcza gdy zbiory zmiennych wyjściowych zastępuje się np. parą lub dwiema parami zmiennych kanonicznych. Zmienne te bowiem mogą być następnie wykorzystywane jako zmienne dyskryminacyjne. W badaniu geo-

graficznym odpowiada to np. wykorzystaniu zmiennych kanonicznych do wydzielenia tzw. regionów geograficznych. W niniejszym przykładzie odpowiadałoby to wykorzystaniu ich do delimitacji obszarów zurbanizowanych i uprzemysłowionych. Nie można jednak wydzielać obszarów o specyficznych własnościach na podstawie zmiennych, o których nie wiadomo, w jakim stopniu charakteryzują (opisują) owe własności, stanowiące podstawę delimitacji.

W pracach geograficznych niektórzy autorzy próbowali interpretować udział zmiennych kanonicznych w zmienności cech wyjściowych na zasadzie analogii do składowych głównych, czyli poprzez elementy wektorów własnych (por. Gauthier H.L. [5], Bourne L.S. i Mourdie R.A. [3]). Niestety, nie jest to postępowanie poprawne. W składowych głównych bowiem, ze względu na ortonormalność wektorów własnych, ich elementy składowe wskazują (choć są inne sposoby) na udział składowej w zmienności cech wyjściowych. Natomiast w zmiennych kanonicznych występuje jedynie tzw. sigma-ortonormalność, stąd rozumowanie przez analogię prowadzi do nieporozumień.

W prezentowanym opracowaniu interpretacji zmiennych kanonicznych dokonuje się poprzez współczynniki determinacji między zmiennymi wyjściowymi a zmiennymi kanonicznymi. Pozwalają one bowiem na orientację odnośnie udziału zmiennych kanonicznych w zmienności cech wyjściowych. Przykładowo podaje się tutaj interpretację zmiennych kanonicznych dotyczących urbanizacji. Potrzebne do tego celu współczynniki determinacji uzyskać można w dwojaki sposób:

- (1) poprzez obliczanie wartości zmiennych kanonicznych \hat{v} (wartości y_1, \dots, y_5 są znane) i zastosowanie znanego wzoru,
- (2) poprzez proste przekształcenie formuły (47), w wyniku którego uzyskuje się następujący wzór:

$$(101) \quad \text{Kor}^2(y_i, \hat{v}_j) = \frac{1}{r_j} \text{Kor}^2(y_i, \hat{u}_j) .$$

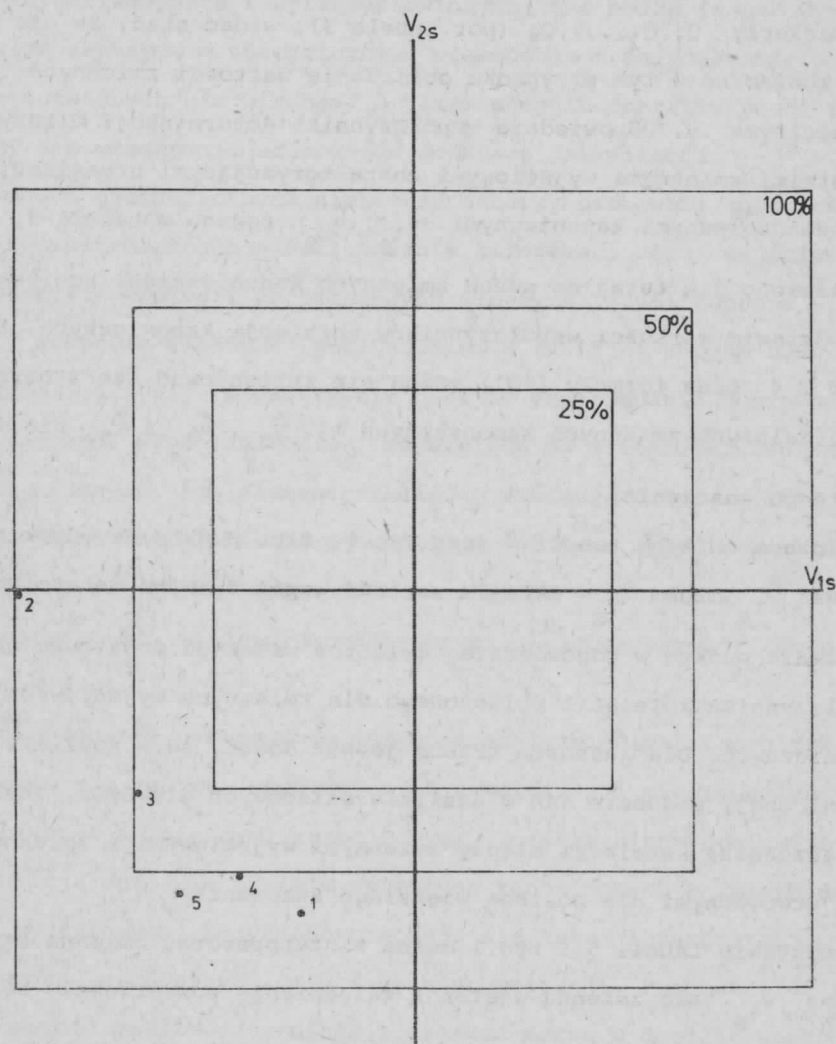
Ponieważ elementy $\text{Kor}^2(y_i, \hat{u}_j)$ znajdują się na głównej przekątnej macierzy Q_1, Q_2, \dots, Q_5 (por. tabela 3), widać stąd, że nie jest konieczne w tym przypadku obliczanie wartości zmiennych kanonicznych \hat{v} . Odpowiednie współczynniki determinacji między wszystkimi zmiennymi wyjściowymi charakteryzującymi urbanizację i dwiema zmiennymi kanonicznymi $\hat{v}_{1S}, \hat{v}_{2S}$ podano w tabeli 5.

Ograniczono się tutaj do dwóch zmiennych kanonicznych, ponieważ na podstawie wartości współczynników korelacji kanonicznych, tabel 3 i 4 oraz formuły (101) można się zorientować, że interpretacja dalszych zmiennych kanonicznych tj. $\hat{v}_{3S}, \hat{v}_{4S}$ i \hat{v}_{5S} nie ma istotnego znaczenia.

Graficznym obrazem tabeli 5 jest ryc.1. Rzut punktu na odpowiednią oś \hat{v}_{1S} lub \hat{v}_{2S} określa wartość współczynnika determinacji.

Położenie punktu w odpowiedniej ćwiartce wskazuje dodatkowo znak współczynnika korelacji obliczonego dla zmiennych wyjściowych i kanonicznych. Dla jasności trzeba jednak dodać, że w analizie kanonicznej, podobnie jak w analizie składowych głównych, znak współczynnika korelacji między zmiennymi wyjściowymi a zmiennymi nowo utworzonymi nie posiada większego znaczenia.

Na podstawie tabeli 5 i ryc.1 można zinterpretować zmienną kanoniczną \hat{v}_{1S} jako zmienną gęstości zaludnienia powierzchni bezleśnej i koncentracji powierzchni mieszkaniowej. Natomiast zmienną kanoniczną \hat{v}_{2S} - jako zmienną charakteryzującą ludność utrzymującą się ze źródeł pozarolniczych i wyposażenia mieszkań w urządzenia komunalne.



Ryc.1. Procent wariacji zmiennych zależnych objaśnianych przy pomocy zmiennych kanonicznych

UWAGA! Numery punktów odpowiadają kolejnym zmiennym zależnym tzn. 1- Y_1 i.t.d.

TABELA 5

Współczynniki determinacji pomiędzy zmiennymi urbanizacji
a dwiema zmiennymi kanonicznymi \hat{v}_{1S} i \hat{v}_{2S} .

Zmienne zależne	Zmienne kanoniczne	\hat{v}_{1S}	\hat{v}_{2S}
y_1		13,9	68,3
y_2		98,8	0,9
y_3		48,4	26,7
y_4		21,6	51,7
y_5		35,0	59,5

Jest oczywiste, iż ze względu na istniejący (w tym przypadku) rozkład wartości współczynników determinacji, prezentowana interpretacja jest w pewnym stopniu arbitralna. Brak jest jednak innych, w pełni obiektywnych kryteriów interpretacji a występujący w tym miejscu element subiektywizmu badacza jest właściwie nie do uniknięcia. W każdym jednak razie, przeprowadzenie interpretacji w sposób przedstawiony powyżej, zapewnia całkowitą informację co do udziału zmiennej kanonicznej w zmienności innych cech wyjściowych, które nie stanowiły podstawy interpretacji (np. w odniesieniu do zmiennej \hat{v}_{1S} są to cechy y_1, y_4, y_5) i sądzić należy, że jest to informacja bardzo cenna.

8.2.2. Kartograficzne opracowanie wyników analizy kanonicznej

Delimitacji obszarów zurbanizowanych województwa poznańskiego dokonano traktując \hat{v}_{1S} i \hat{v}_{2S} jako zmienne dyskryminacyjne. Przykładowo ryc.2 przedstawia rozkład przestrzenny zmiennej kanonicznej \hat{v}_{1S} . Obszary zakreślone najgęstszym szrafem charakteryzują się najsilniejszym wykształceniem cech urbanizacji wyrażonych zmienną kanoniczną \hat{v}_{1S} . Oczywiście szraf rzadki świadczy o słabym wykształceniu tych cech. Wykorzystując ryc.2 oraz dendryt utworzony w układzie $\hat{v}_{1S}, \hat{v}_{2S}$ (ze względu na rozmiary nie zamieszczono tutaj jego graficznego obrazu), dokonano podziału obszaru województwa poznańskiego na obszary jednolite, różniące się jednak między sobą stopniem wykształcenia cech urbanizacji. Oznacza to, że faktycznie dokonano regionalizacji województwa poznańskiego ze względu na urbanizację. Wynik regionalizacji przedstawia ryc.3.

Dla porównania zamieszczono także rozkład przestrzenny zmiennej kanonicznej \hat{u}_{1S} - dotyczącej uprzemysłowienia (por. ryc.4). Porównanie ryc.2 oraz ryc.4 (na ryc.4 najgęstszy szraf odpowiada obszarom najsilniej uprzemysłowionym) wskazuje natychmiast na silne współzależności pomiędzy urbanizacją i uprzemysłowieniem.

8.3. Wyniki analizy kanonicznej dla zmiennych unormowanych

Na podstawie własności zmiennych kanonicznych przedstawionych w pierwszej części opracowania wiadomo, że zmienne te są niezmiennicze względem normalizacji. Stąd, z wyjątkiem wartości zestawionych w tabeli 4, wszystkie wartości zestawione w pozostałych tabelach (1,2,3,5) są identyczne z wynikami analizy kano-

nicznej przeprowadzonej na danych znormalizowanych. Oznacza to, że normowanie zmiennych wyjściowych zmienia jedynie wartość uogólnionego współczynnika determinacji wielokrotnej $R_{Y.X}^2$, który w tym przypadku wynosi 69,8%. Wartość $R_{Y.X}^2$ obliczona dla zmiennych unormowanych może być wyższa lub niższa od wartości $R_{Y.X}^2$ obliczonej dla zmiennych nieunormowanych. Zależy to jedynie od charakteru zmiennych wyjściowych. W tabeli 6 zestawiono dla porównania z tabelą 4 odpowiednie wartości składające się na $R_{Y.X}^2$.

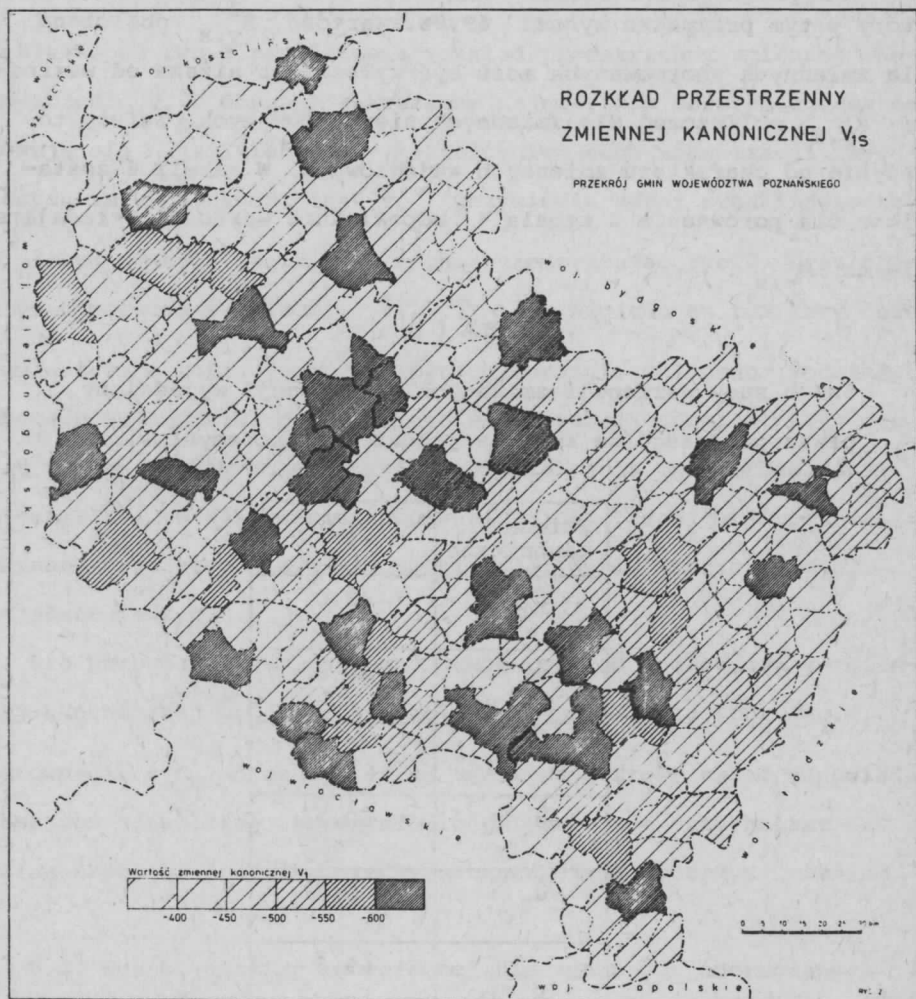
TABELA 6

Zasób sumy wariancji zmiennych urbanizacji wyjaśniony przez poszczególne zmienne kanoniczne uprzemysłowienia.

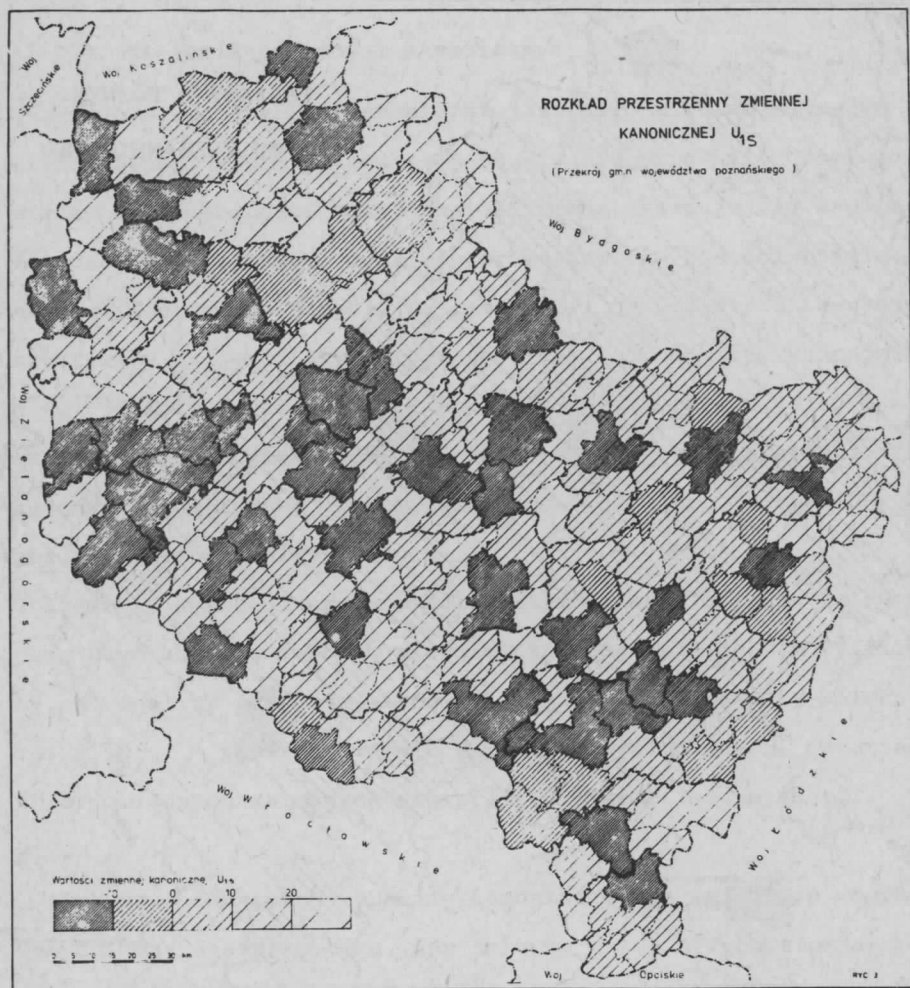
Zmienne kanoniczne	%
\hat{u}_{1k}	43,0
\hat{u}_{2k}	25,6
\hat{u}_{3k}	0,9
\hat{u}_{4k}	0,1
\hat{u}_{5k}	0,2
Σ	69,8 $R_{Y.X}^2$

Ponieważ $R_{Y.X}^2$ nie wpływa bezpośrednio na interpretację zmiennych kanonicznych, jest oczywiste, iż interpretacja przedstawiona uprzednio obowiązuje i w tym przypadku.

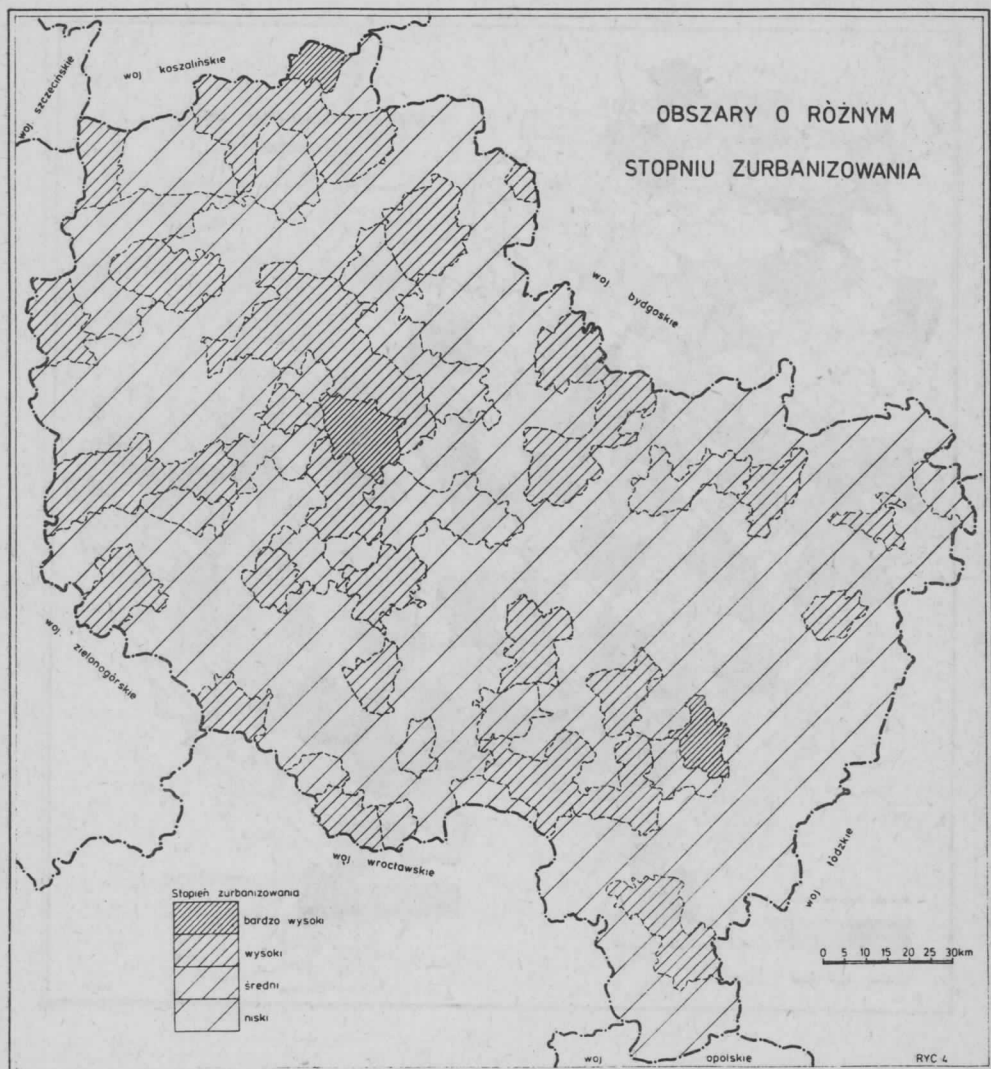
Identyczny jest także obraz graficzny rozkładu przestrzennego



ryc.2



ryc.3



ryc.4

zmiennych kanonicznych (ryc.2 i 3), dendryt oraz podział województwa na obszary (regiony) o różnym stopniu zurbanizowania (ryc.4).

8.4. Wielomianowy model kanoniczny

Wiadomo, że analiza kanoniczna jest uogólnieniem regresji wielokrotnej, która polega na poszukiwaniu współzależności pomiędzy dwoma zbiorami zmiennych. Intuicja wskazuje, że współzależności te nie zawsze dają się przedstawić w postaci modelu liniowego pierwszego stopnia, a taki model jest faktycznie wykorzystywany w teorii i praktycznym stosowaniu analizy kanonicznej. W tym punkcie opracowania proponuje się zatem wykorzystanie w analizie kanonicznej modeli wielomianowych wyższych stopni. Przykładowo rozpatrywany jest model stopnia drugiego, odniesiony do zbioru zmiennych niezależnych.

Obliczenia wykonano na uprzednio sformułowanym zbiorze zmiennych, przy czym zbiór zmiennych niezależnych został nieco zmodyfikowany. Do analizy przyjęto mianowicie tylko trzy pierwsze zmienne tj. x_1, x_2, x_3 spośród sześciu uprzednio wymienionych, natomiast zbiór zmiennych zależnych zawierał tyle samo zmiennych tj.

$$Y_1, \dots, Y_5.$$

Dokonano dwukrotnej analizy kanonicznej na zmiennych unormowanych. Raz dla przypadku, gdy zmienne \hat{v} i \hat{u} były wielomianami pierwszego stopnia i dla przypadku, gdy zmienne kanoniczne \hat{u} były wielomianami stopnia drugiego a \hat{v} pierwszego. W sensie regresji wielokrotnej odpowiada to badaniu współzależności pomiędzy zbiorem x_1, x_2, x_3 i pojedynczymi elementami zbioru Y_1, \dots, Y_5 przy pomocy wielomianu stopnia drugiego, czyli

$$\hat{u} = \hat{l}_1 x_1 + \hat{l}_2 x_2 + \hat{l}_3 x_3 + \hat{l}_4 x_1^2 + \hat{l}_5 x_2^2 + \hat{l}_6 x_3^3 + \\ + \hat{l}_7 x_1 x_2 + \hat{l}_8 x_1 x_3 + \hat{l}_9 x_2 x_3 .$$

Poniżej w tabelach 7, 8 i 9 przedstawiono wyniki uzyskane dla obu przypadków oznaczając przez I wyniki uzyskane, gdy wszystkie zmienne kanoniczne były wielomianami pierwszego stopnia i przez II dla przypadku drugiego.

TABELA 7

Wartości współczynników korelacji kanonicznych

Para zmiennych	I	II
$\hat{u}_{1k}, \hat{v}_{1k}$	0,806	0,842
$\hat{u}_{2k}, \hat{v}_{2k}$	0,460	0,500
$\hat{u}_{3k}, \hat{v}_{3k}$	0,128	0,293
$\hat{u}_{4k}, \hat{v}_{4k}$	0,000	0,245
$\hat{u}_{5k}, \hat{v}_{5k}$	0,000	0,097

TABELA 8

Wartości współczynników determinacji wielokrotnej

Zmienna	R^2 I	R^2 II
Y_1	57,5	65,0
Y_2	20,1	24,8
Y_3	39,9	46,0
Y_4	48,9	53,7
Y_5	58,9	63,7

TABELA 9

Zasób sumy wariancji zmiennych urbanizacji wyjaśnionych przez poszczególne zmienne kanoniczne uprzemysłowienia

Zmienna kanoniczna	I	II
\hat{u}_{1k}	44,1	43,2
\hat{u}_{2k}	0,8	0,6
\hat{u}_{3k}	0,1	1,5
\hat{u}_{4k}	-	0,3
\hat{u}_{5k}	-	0,1
Σ	45,0 $R^2_{Y \cdot X}$	50,7 $R^2_{Y \cdot X}$

Wyniki zestawione w powyższych tabelach wyraźnie potwierdzają przydatność modeli wielomianowych (rzecz jasna nie tylko drugiego stopnia) w analizie kanonicznej. Zwłaszcza, gdy główny problem badawczy sprowadzony jest do znalezienia zadawalającego modelu predykcji elementów zbioru y przy pomocy elementów zbioru x . Należy jednak otwarcie zaznaczyć, że w przypadku redukcji zbiorów x lub y do zmiennych kanonicznych o postaci wielomianowej, pojawić się mogą trudności w interpretacji zmiennych kanonicznych zawierających np. zmienne $x_1 \cdot x_2, x_1 \cdot x_3$ itp. Nie jest to jednak wówczas problem sposobu interpretacji, który w tym opracowaniu przedstawiono szczegółowo lecz w ogóle sensu istnienia w modelu zmiennych o takim charakterze. Wiadomo, że jest to problem szerszy, od dawna występujący w regresji wielokrotnej, wymagający odrębnego potraktowania. Dlatego też w tym miejscu nie mógł być szerzej dyskutowany.

Literatura cytowana

- [1] Anderson, T.W., 1958, *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, Wiley, New York.
- [2] Bertier, P., Bouroche, J.M., 1975, *Analyse des données multidimensionnelles*, Presses Universitaires de France, Paris.
- [3] Bourne, L.S., Murdie, R.A., 1972, *Interrelationships of social and physical space in the city; A multivariate analysis of metropolitan Toronto*, *Canadian geographer*, XVI, str.211-229.
- [4] Cooley, W.W., Lohnes, P.R., 1971, *Multivariate Data Analysis*, Wiley, New York.
- [5] Gauthier, H.L., 1968, *Transportation and the growth of the Sao Paulo economy*, *Journal of Regional Science*, 8, str.77-94.
- [6] Glahn, H.R., 1968, *Canonical correlation and its relationship to discriminant analysis and multiple regression*, *Journal of Atmospheric Sciences*, 25, str.23-31.
- [7] Glahn, H.R., 1969, *Some relationships derived from canonical correlation theory*, *Econometrica*, 37, str.252-256.
- [8] Harris, R.J., 1975, *A Primer of Multivariate Statistics*, Academic Press, New York-London.
- [9] Hooper, J.W., 1959, *Simultaneous equations and canonical correlation theory*, *Econometrica*, 27, str.245-256.
- [10] Hotelling, H., 1936, *Relations between two sets of variates*, *Biometrika*, 28, str.139-142.
- [11] Kendall, M.G., Stuart, A., 1966, *The Advanced Theory of Statistics, Vol.3. Design and Analysis, and Time-Series*, Griffin, London.

- [12] Krishnaiah, P., Waikar, V., 1971, Simultaneous test for equality of latent roots against certain alternatives - I, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 23, str.451-468.
- [13] Kshirsagar, A.M., 1972, *Multivariate Analysis*, Dekker, New York.
- [14] Lefebvre, J., 1976, *Introduction aux analyses statistiques multidimensionnelles*, Masson, Paris.
- [15] Mejza, S., 1975, Korelacje kanoniczne i ich zastosowanie w badaniach rolniczych, *Materiały Piątego Colloquium Metodologicznego z Agro-Biometrii*, PAN, str.253-274, Warszawa.
- [16] Morrison, D.F., 1967, *Multivariate Statistical Methods*, McGraw-Hill, San Francisco.
- [17] Nowosadzki, M., 1975, Analiza kanoniczna i analiza redundacji, *Materiały Piątego Colloquium Metodologicznego z Agro-Biometrii*, PAN, str.230-252, Warszawa.
- [18] Rao, C.R., 1965, *Linear Statistical Inference and Its Applications*, Wiley, New York.
- [19] Ray, D.M., Lohnes, P.R., 1973, Canonical correlation in geographical analysis, *Geographia Polonica*, 25, str. 49-65.
- [20] Roy, S., 1957, *Some Aspects of Multivariate Analysis*, Wiley, New York.
- [21] Tatsuoka, M.M., 1971, *Multivariate Analysis: Techniques for Educational and Psychological Research*, Wiley, New York.

CANONICAL ANALYSIS

M.Krzyśko, W.Ratajczak

Summary

Both the theoretical and practical aspects of canonical correlation are presented in detail. The advantages of the method in empirical research are underlined, especially the reduction in dimensionality of multivariable space, and the invariance of results with regard to input variable standardization. Special stress is placed on the interpretation of canonical variates, which is here carried out using coefficients of determination between the input variables and the variates. It is also shown that the composite coefficient of determination and the redundancy coefficient are identical when the input variables are standardized. The prediction of response variables using canonical variates is discussed, and on this basis the use of higher order canonical models proposed.