

國立政治大學應用數學系

數學教學碩士在職專班

碩士學位論文

以最小平方法處理有限離散型
條件分配相容性問題

**Addressing the compatibility issues of
finite discrete conditionals by the least
squares approach**

碩專班學生：李宛靜 撰

指導教授：宋傳欽 博士

中華民國一百年一月八日

誌謝

如果沒有宋傳欽老師的指導與付出，我的論文可能沒辦法順利完成；如果沒有達昌及家人的支持與包容，我無法安心的完成學業；如果沒有洵慧、玟文、鶴綺這些好朋友的鼓勵，我可能永遠不會來念研究所。我覺得自己是一個很幸運的人，在完成學位的過程中一直受到所上許多老師及同學的幫助，在此誠摯的感謝你們。

感謝郭錕霖學長在程式方面的指導，也非常感謝主任姜志銘教授及成功大學數學系陳重弘副教授在口試期間的指導及建議，使得本文可以更佳完備。最後再次感謝宋老師，在您的指導過程中，我學習到追求學問時應有的執著態度與精神，也看到了如何成爲一個好老師的範典。



目次

| | |
|-----------------|-----------|
| 中文摘要 | i |
| Abstract | ii |
| 1 緒論 | 1 |
| 1.1 研究動機與目的 | 1 |
| 1.2 研究架構 | 1 |
| 2 基礎數學工具 | 3 |
| 2.1 機率的簡介 | 3 |
| 2.2 矩陣的簡介 | 4 |
| 2.3 最小平方方法的簡介 | 6 |
| 3 文獻探討 | 8 |
| 3.1 比值矩陣法 | 9 |
| 3.2 電腦數值計算法 | 12 |
| 4 方法論 | 15 |
| 4.1 LRG 法 | 16 |
| 4.2 干擾參數法 | 19 |
| 4.3 多組解之檢驗法 | 21 |
| 4.4 檢驗理論相容之充分條件 | 23 |
| 5 實例說明 | 30 |
| 5.1 處理流程 | 30 |
| 5.2 相容且有唯一解的範例 | 31 |
| 5.3 不相容的範例 | 38 |
| 5.4 相容但有多組解的範例 | 39 |
| 6 結論 | 47 |

參考文獻

49

附錄：處理相容性問題之程式

50



中文摘要

給定兩個有限離散型條件分配，我們可以去探討有關相容性及唯一性的問題。Tian et al.(2009)提出一個統合的方法，將相容性的問題轉換成具限制條件的線性方程系統(以邊際機率為未知數)，並藉由 l_2 -距離測量解之誤差，進而求出最佳解來。他們也提出了電腦數值計算法在檢驗相容性及唯一性時的準則。

由於 Tian et al.(2009)的方法是把邊際機率和為 1 的條件放置在線性方程系統中，從理論的觀點來看，我們認為該條件在此種做法下未必會滿足。因此，本文中將邊際機率和為 1 的條件從線性方程系統中抽離出來，放入限制條件中，再對修正後的問題求最佳解。

我們提出了兩個解決問題的方法：(一) LRG 法；(二) 干擾參數法。LRG 法是先不管機率值在 0 與 1 之間的限制，在邊際機率和為 1 的條件下，利用 Lagrange 乘數法導出解的公式，之後再利用 Rao-Ghangurde 法進行修正，使解滿足機率值在 0 與 1 之間的要求。干擾參數法是在 Lagrange 乘數法公式解中有關廣義逆矩陣的計算部份引進了微量干擾值，使近似的逆矩陣及解可快速求得。理論證明，引進干擾參數所增加的誤差不超過所選定的干擾值，易言之，由干擾參數法所求出的解幾近最佳解。故干擾參數法在處理相容性問題上，是非常實用、有效的方法。從進一步分析 Lagrange 乘數法公式解的過程中，我們也發現了檢驗條件分配“理論”相容的充分條件。

最後，為了驗證 LRG 法與干擾參數法的可行性，我們利用 MATLAB 設計了程式來處理求解過程中的運算，並以 Tian et al.(2009)文中四個可涵蓋各種情況的範例來解釋說明處理的流程，同時將所獲得的結果和 Tian et al. 的結果做比較。

關鍵詞:條件分配、相容性、比值矩陣法、最小平方法、廣義逆矩陣、干擾參數法

Abstract

Given two finite discrete conditional distributions, we could study the compatibility and uniqueness issues. Tian et al.(2009) proposed a unified method by converting the compatibility problem into a system of linear equations with constraints, in which marginal probability values are assumed unknown. It locates the optimum solution by means of the error of l_2 - discrepancy. They also provided criteria for determining the compatibility and uniqueness. Because the condition of sum of the marginal probability values being equal to one is in Tian et al.s' linear system, it might not be fulfilled by the optimum solution. By separating this condition from the linear system and adding into constraints, we would look for the optimum solution after modification.

We propose two new methods: (1) LRG method and (2) Perturbation method. LRG method ignores the requirement of the probability values being between zero and one initially, it then uses the Lagrange multipliers method to derive the solution for a quadratic optimization problem subject to the sum of the marginal probability values being equal to 1. Afterward we use the Rao-Ghangurde method to modify the computed value to meet the requirement.

The perturbation method introduces tiny perturbation parameter in finding the generalized inverse for the optimum solution obtained by the Lagrange multipliers method. It can be shown that the increased error is less than the perturbation value introduced. Thus it is a practical and effective method in dealing with compatibility issues. We also find some sufficient conditions for checking the compatibility of conditional distributions from further analysis on the solution given by Lagrange multipliers method.

To show the feasibilities of LRG method and Perturbation method, we use MATLAB to device a program to conduct them. Several numerical examples raised by Tian et al.(2009) in their article are applied to illustrate our methods. Some comparisons with their method are also presented.

Keywords: Conditional distribution, Compatibility, Ratio matrix method, Least square method, Generalized inverse, Perturbation method



1 緒論

1.1 研究動機與目的

在一般的情況下，給定隨機變數 X 和 Y 的聯合分配，我們通常可以進一步去計算出 X 和 Y 的條件分配。但在實際問題的應用上，我們通常比較容易先取得條件分配而非聯合分配。所以這裡引發了一個很有趣的問題，即如果一開始給予的是隨機變數 X 和 Y 的條件分配，那麼是否有方法可以推算出 X 和 Y 的聯合分配呢？

如果給定了 X 和 Y 的條件分配，想試著找出其聯合分配，我們可以先從給定的條件分配是否相容著手。但是如何判斷它們是否相容呢？如果它們彼此是相容的，又該如何去確定它們是否擁有唯一的聯合分配呢？如果聯合分配不是唯一的，那又應該如何找出可能的聯合分配呢？

我們在 Tian et al.(2009)的文章中看到他們針對離散型條件分配在相容性及唯一性的問題做了相關的討論。他們的方法是將整個問題轉換成有限制條件的線性方程系統，並透過電腦數值計算的方式去處理其所建構出的模型，進而找出 X (或 Y)的邊際分配，並藉由 l_2 -距離測量誤差來判定給定的條件分配是否相容。最後利用所求得的邊際機率解及原先所給定的條件分配，即可求出 X 和 Y 的聯合分配。

因為 Tian et al.(2009)的方法中是把邊際機率和等於 1 的條件放置在建構的線性方程系統中，再經由邊際機率初始值的設定及電腦程式的計算去求得最後的邊際機率最佳解。我們認為他們的做法從理論上來看，邊際機率和等於 1 的限制條件未必會滿足。因此打算把這一缺點做個改進，即把邊際機率和為 1 的條件從線性系統中抽離出來放入限制條件中，接著再對修正後的具限制條件之線性方程系統求最佳解，以此做為解決條件分配相容性問題的理論基礎。最後利用 Tian et al.(2009)文中列舉的幾個範例把我們的方法和他們的方法做個具體的比較及探討。

1.2 研究架構

本文共分成六個章節。第一章包含研究動機、目的與研究的架構。第二章針對本文中使用的名詞、相關的概念及使用到的數學工具做簡單的介紹。第三章整理過去文獻資

料對相容性問題這方面的探討，包含 Arnold and Press(1989)，Song et al.(2010)的比值矩陣法及 Tian et al.(2009)的電腦數值計算法。第四章說明自己處理相容性問題時所採用的 LRG 法及干擾參數法，並提出多組解的檢驗法以及推導出檢驗理論相容之充分條件。第五章說明在實際應用上處理相容性問題的流程，再藉由 Tian et al.(2009)所提出的幾個不同類型的實例來應用我們的方法，最後比較我們的結果與他們的結果有何異同。第六章為結論。



2 基礎數學工具

這一章的內容主要是先將所需要用到的概念或數學工具做一個整理及簡介，一共分成三個部份。第一、先介紹一些本文中用到有關機率的基本名詞。第二、簡單介紹在處理矩陣計算時會使用到的概念及運算。第三、介紹最小平方法的基本概念。

2.1 機率的簡介

本節中的名詞定義及符號主要是參考鄭惟厚教授(2004)翻譯的機率學的世界。

定義 2.1. 若 X 為一離散隨機變數(*discrete random variable*)，值域(*range*)為 R_X ，則 X 的機率函數(*probability function*)為 $p_X(x) = P(X = x)$ ，由此函數可得 R_X 中每一個觀測值(*observed value*) x 的發生機率。

離散隨機變數 X 的機率函數必須符合以下兩個條件：

1. 對所有實數 x ， $p_X(x) \geq 0$ 均成立。

2. $\sum_{x \in R_X} p_X(x) = 1$ 必成立。

定義 2.2. 若兩個隨機變數的觀測值，是由同一個隨機機制同時決定，則我們稱這兩個隨機變數有聯合分配(*joint distribution*)。它們的聯合值域，就是所有可能觀測值所構成的集合。

隨機變數 X 和 Y 的聯合值域以 $R_{X,Y}$ 來表示。

定義 2.3. 假設 X 和 Y 是離散型隨機變數，則 X 和 Y 的聯合分配為 $p_{X,Y} = P(X = x, Y = y)$ ，其中 $(X, Y) \in R_{X,Y}$ 。而

X 的邊際機率函數是 $p_X(x) = \sum_y p_{X,Y}(x, y)$ ， $x \in R_X$

Y 的邊際機率函數是 $p_Y(y) = \sum_x p_{X,Y}(x, y)$ ， $y \in R_Y$

其 X 的值域 R_X ，等於所有 $R_{X,Y}$ 中的 (x, y) 第一個元素的集合。 Y 的值域 R_Y ，等於所有 $R_{X,Y}$ 中的 (x, y) 第二個元素的集合。

定義 2.4. 假設 X 和 Y 的聯合分配為 $p_{X,Y}(x, y)$ 。若已知 $Y = y$ 時， X 的條件分配為 $p_{X|Y}(x|y) = \frac{p_{X,Y}(x, y)}{p_Y(y)}$ ，此處 $X \in R_X$ ， $Y \in R_Y$ 。

也可以將此式改寫成 $p_{X,Y}(x,y) = p_{X|Y}(x|y) p_Y(y)$ ，即如果我們知道兩變數 X 和 Y 其中之一的邊際機率函數，又知道另一個條件分配的話，就可以求出 X 和 Y 的聯合分配。

2.2 矩陣的簡介

我們在處理計算的過程中會使用到一些矩陣的相關概念及運算，所以在此針對所需要使用的工具做一個簡單的整理。

以下的資料內容主要是參考李國偉(2005)所翻譯的線性代數的世界。

定義 2.5. 設向量 $\mathbf{v} = (a_1, a_2, \dots, a_n)'$ ，則 \mathbf{v} 的長度是 $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2}$ 。

定義 2.6. 設 A 是方陣，若存在方陣 B 滿足 $AB = BA = I$ ，則稱 B 為 A 的逆矩陣。通常 A 的逆矩陣以 A^{-1} 表示，即 $B = A^{-1}$ 。

定理 2.1. 設 A 是方陣。

- (1) 若 A^{-1} 存在，則 A^{-1} 是唯一的。
- (2) A^{-1} 存在 $\iff Ax = \mathbf{b}$ 有唯一解為 $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ 。

定義 2.7. 設 $A = (a_{ij}) : m \times n$ 矩陣，若 $B = (b_{ij}) : n \times m$ 矩陣滿足 $b_{ij} = a_{ji}$ ，則稱 B 為 A 的轉置矩陣。通常 A 的轉置矩陣以 A' 表示，即 $B = A'$ 。

定理 2.2. 若 r 是純量而 A 和 B 是矩陣，則

- (1) $(A')' = A$
- (2) $(A + B)' = A' + B'$
- (3) $(AB)' = B'A'$
- (4) $(rA)' = rA'$

定義 2.8. 設 A 是方陣且滿足 $A' = A$ ，則稱 A 是對稱矩陣。

定理 2.3. 設 A^{-1} 存在，則 $(A^{-1})' = (A')^{-1}$ 。

定義 2.9. 設 $A : m \times n$ 矩陣。若存在 $B : n \times m$ 矩陣滿足 $ABA = A$ ，則稱 B 是 A 的廣義逆矩陣。通常廣義逆矩陣以 A^- 來表示，即 $B = A^-$ 。

註： A^- 一定存在但通常不是唯一的。

定理 2.4. 設 $A : m \times n$ 矩陣。若 A^- 滿足 (a) $A^-AA^- = A^-$ (b) AA^- 是對稱矩陣 (c) A^-A 是對稱矩陣，則 A^- 是唯一的，並以 A^+ 來表示。 A^+ 稱為 Moore-Penrose 逆矩陣。

定理 2.5. 設 $A : m \times n$ 矩陣。若 $Ax = b$ 有解，則其通解為 $x = x_p + x_h$ ，其中 x_p 是 $Ax = b$ 的特解，而 x_h 是 $Ax = 0$ 的任意解。

定理 2.6. 設 $A : m \times n$ 矩陣。若 $Ax = b$ 有解，則其通解為 $x = A^-b + (I - A^-A)t$ ，其中 t 是 R^n 中的任意向量。

在求解的過程中，我們需要利用電腦來幫忙計算出所要的逆矩陣，過程中會根據特徵值來判斷逆矩陣的運算是否可以順利進行，故在此對特徵值等相關的概念做一個簡單的整理。

以下的內容主要是參考方世榮(1989)所譯的應用線性代數。

定義 2.10. 設 A 為一 n 階方陣，在 R^n 中，若存在一非零向量 v 滿足 $Av = \lambda v$ ，則稱實數 λ 為 A 的特徵值(eigenvalue)，向量 v 為 A 對應於 λ 的特徵向量(eigenvector)。

但要如何找出所有的特徵值呢？

定義 2.11. 設 A 為一 n 階方陣，則行列式

$$f(\lambda) = |\lambda I - A| = \begin{vmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & \lambda - a_{22} & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & \lambda - a_{nn} \end{vmatrix}$$

稱為 A 的特徵多項式(characteristic polynomial of A)。方程式 $f(\lambda) = |\lambda I - A| = 0$ 稱為 A 的特徵方程式(characteristic equation of A)。

由 A 的特徵方程式可以找出所有可能的特徵值來。

定義 2.12. 若方陣 A 滿足 $A^{-1} = A'$ 則稱 A 為正交矩陣(orthogonal matrix)。

定理 2.7. 若 A 為一 n 階的實數元對稱矩陣，則存在一正交矩陣 Γ 使得 $\Gamma' A \Gamma = D$ 為一個對角線矩陣，且 D 中對角線上的元素是 A 的特徵值。

2.3 最小平方方法的簡介

從幾何的觀點來看，如果 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 要有解， \mathbf{b} 必須屬於 A 的行空間。但是解不一定存在，所以我們只好找一個最好的近似解 $\hat{\mathbf{x}}$ 使得 $\|\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}\|$ 盡可能的小。即 $A\hat{\mathbf{x}}$ 為 \mathbf{b} 在 A 的行空間上的投影，故 $A'(\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$ ，因此 $\hat{\mathbf{x}}$ 是

$$A'A\hat{\mathbf{x}} = A'\mathbf{b} \quad (2.3.1)$$

的一解。任何在(2.3.1)式中的解都稱為 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的最小平方解，且(2.3.1)式稱為正規系統(normal system)。

若從解析的觀點來看，又是什麼樣的狀況呢？首先我們先介紹幾個在說明時會用到的定義及引理。

定義 2.13. 設 $f: R_n \rightarrow R$ ， $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)'$ ，則定義

$$\frac{df}{d\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)'$$

引理 2.1. 設 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{a}'\mathbf{x}$ ，則 $\frac{df}{d\mathbf{x}} = \mathbf{a}$ 。其中 $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)'$ 是常數向量。

引理 2.2. 若 A 是 $n \times n$ 的實數方陣， $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}'A\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}x_i x_j$ ，則 $\frac{df}{d\mathbf{x}} = 2A\mathbf{x}$ 。

$\hat{\mathbf{x}}$ 使得 $\|A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|$ 最小 $\iff \hat{\mathbf{x}}$ 使得 $\|A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|^2$ 最小，因此令 $e(\mathbf{x}) = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$ ，則

$$\begin{aligned} e(\mathbf{x}) &= \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 \\ &= (A\mathbf{x} - \mathbf{b})'(A\mathbf{x} - \mathbf{b}) \\ &= (\mathbf{x}'A' - \mathbf{b}')(A\mathbf{x} - \mathbf{b}) \\ &= \mathbf{x}'A'A\mathbf{x} - 2\mathbf{b}'A\mathbf{x} + \mathbf{b}'\mathbf{b} \end{aligned}$$

由引理2.1.和引理2.2.可得

$$\frac{de(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = 2A'A\mathbf{x} - 2A'\mathbf{b}$$

令

$$\frac{de(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} = 0$$

即

$$A'Ax - A'b = \mathbf{0}$$

或

$$A'Ax = A'b$$

因此可知 \hat{x} 是 $A'A\hat{x} = A'b$ 的一解。



3 文獻探討

讓 X 和 Y 為兩個有限離散型隨機變數，分別擁有值 x_1, x_2, \dots, x_m 及 y_1, y_2, \dots, y_n 。若給定 X 和 Y 的聯合分配，依據定義2.4.可以算出條件分配為

$$p_{X|Y}(x|y) = \frac{p(x, y)}{p_Y(y)}$$

$$p_{Y|X}(y|x) = \frac{p(x, y)}{p_X(x)}$$

我們以下列的例子來說明:

例3.1: 假設 X 和 Y 的聯合分配如下:

| | Y= | 1 | 2 | 3 | 4 | 列和 |
|----|------|------|------|------|------|------|
| X= | 1 | 0.04 | 0.04 | 0.12 | 0.04 | 0.24 |
| 2 | 0.08 | 0.08 | 0.04 | 0.08 | 0.28 | |
| 3 | 0.16 | 0.04 | 0.12 | 0.16 | 0.48 | |
| 行和 | 0.28 | 0.16 | 0.28 | 0.28 | 1 | |

則 X 和 Y 的邊際分配為:

$$p_X(1) = 0.24 \quad p_X(2) = 0.28 \quad p_X(3) = 0.48$$

$$p_Y(1) = 0.28 \quad p_Y(2) = 0.16 \quad p_Y(3) = 0.28 \quad p_Y(4) = 0.28$$

而條件分配為:

$$p_{X|Y}(1|1) = 0.04/0.28 = 1/7 \quad p_{Y|X}(1|1) = 0.04/0.24 = 1/6$$

$$p_{X|Y}(2|1) = 0.08/0.28 = 2/7 \quad p_{Y|X}(2|1) = 0.04/0.24 = 1/6$$

$$p_{X|Y}(3|1) = 0.16/0.28 = 4/7 \quad p_{Y|X}(3|1) = 0.12/0.24 = 3/6$$

$$p_{X|Y}(1|2) = 0.04/0.16 = 1/4 \quad p_{Y|X}(4|1) = 0.04/0.24 = 1/6$$

$$p_{X|Y}(2|2) = 0.08/0.16 = 2/4 \quad p_{Y|X}(1|2) = 0.08/0.28 = 2/7$$

$$p_{X|Y}(3|2) = 0.04/0.16 = 1/4 \quad p_{Y|X}(2|2) = 0.08/0.28 = 2/7$$

$$p_{X|Y}(1|3) = 0.12/0.28 = 3/7 \quad p_{Y|X}(3|2) = 0.04/0.28 = 1/7$$

$$p_{X|Y}(2|3) = 0.04/0.28 = 1/7 \quad p_{Y|X}(4|2) = 0.08/0.28 = 2/7$$

$$p_{X|Y}(3|3) = 0.12/0.28 = 3/7 \quad p_{Y|X}(1|3) = 0.16/0.48 = 4/12$$

$$p_{X|Y}(1|4) = 0.04/0.28 = 1/7 \quad p_{Y|X}(2|3) = 0.04/0.48 = 1/12$$

$$p_{X|Y}(2|4) = 0.08/0.28 = 2/7 \quad p_{Y|X}(3|3) = 0.12/0.48 = 3/12$$

$$p_{X|Y}(3|4) = 0.16/0.28 = 4/7 \quad p_{Y|X}(4|3) = 0.16/0.48 = 4/12$$

反之，若給予兩個條件分配要找出其聯合分配，此為條件分配相容性問題所要探討的主要內容。一般而言，給定條件分配 $p_{X|Y}$ 與 $p_{Y|X}$ ，若存在 (X, Y) 的聯合分配，使得由其計算出的條件分配恰好是給定的條件分配時，則稱 $p_{X|Y}$ 與 $p_{Y|X}$ 相容。

為了方便描述，我們令

$$a_{ij} = P(X = x_i | Y = y_j)$$

$$b_{ij} = P(Y = y_j | X = x_i)$$

且 $A = (a_{ij}) : m \times n$ 矩陣， $B = (b_{ij}) : m \times n$ 矩陣， $i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$ 。我們稱 A 和 B 為條件分配矩陣。其中

$$\sum_{i=1}^m a_{ij} = 1, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$\sum_{j=1}^n b_{ij} = 1, \quad i = 1, \dots, m.$$

即矩陣 A 中行的和是 1；矩陣 B 中列的和是 1。爾後在本文中，我們說 A 和 B 相兼容意指 $p_{X|Y}$ 與 $p_{Y|X}$ 相容。

在探討相容性問題時，通常需假設 $N^A = N^B (=N)$ 。其中 $N^A = \{(i, j) \mid a_{ij} > 0\}$ ， $N^B = \{(i, j) \mid b_{ij} > 0\}$ 。

在接下來的兩節中我們會把處理條件分配相容性的理論和方法先做一個回顧和整理。首先介紹 Arnold and Press(1989)所使用的比值矩陣法，其次介紹 Tian et al.(2009) 所使用的電腦數值計算法。這兩種方法都是在處理相容性的問題，只是前者的做法是比較偏重理論性的探討，但在實際運用時未必會如理論般那麼完美的呈現；而後者的做法就比較偏重實用性質。

3.1 比值矩陣法

在這一節中我們將介紹比值矩陣法的相關概念，利用它可以來處理相容性的問題。

定義 3.1. 矩陣 $C = (c_{ij}) : m \times n$ 稱為 A 和 B 的比值矩陣，其中

$$c_{ij} = \begin{cases} \frac{a_{ij}}{b_{ij}} & , (i, j) \in N \\ * & , (i, j) \notin N \end{cases}$$

Arnold and Press(1989)提出矩陣 A 和 B 是相容的充分必要條件是存在兩個向量 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 滿足 $c_{ij} = u_i v_j, \forall (i, j) \in N$ ，此時 X 的邊際分配為：

$$P(X = x_i) = \frac{u_i}{\sum u_k}$$

Y 的邊際分配為：

$$P(Y = y_j) = \frac{v_j^{-1}}{\sum v_k^{-1}}$$

Pérez-Villalta(2000)證明了 A 和 B 具相容性的充分必要條件為比值矩陣 C 的秩是 1 (rank $C=1$)，即所有的列(或行)彼此成比例。

回頭觀察例3.1: 設

$$A = (a_{ij})_{3 \times 4} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/7 & 1/4 & 3/7 & 1/7 \\ 2/7 & 2/4 & 1/7 & 2/7 \\ 4/7 & 1/4 & 3/7 & 4/7 \end{pmatrix}$$

，其中 $a_{ij} = P(X = i | Y = j)$ 。

$$B = (b_{ij})_{3 \times 4} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/6 & 1/6 & 3/6 & 1/6 \\ 2/7 & 2/7 & 1/7 & 2/7 \\ 4/12 & 1/12 & 3/12 & 4/12 \end{pmatrix}$$

，其中 $b_{ij} = P(Y = j | X = i)$ 。

$$C = (c_{ij})_{3 \times 4} = \begin{pmatrix} 6/7 & 6/4 & 6/7 & 6/7 \\ 1/1 & 7/4 & 1/1 & 1/1 \\ 12/7 & 3/1 & 12/7 & 12/7 \end{pmatrix}$$

，其中 $c_{ij} = \frac{a_{ij}}{b_{ij}}$ 。

我們發現上述矩陣 C 的列向量、行向量都是平行的，即所有的列(或行)彼此成比例。亦表示這個矩陣僅擁有一個樞軸元，該行空間是一維空間，所以可將其矩陣表示成 $C = \mathbf{u}\mathbf{v}'$ = 行乘列的形式，其中

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{pmatrix}'$$

$$\mathbf{v}' = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{pmatrix}$$

且 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 的選擇不是唯一的。例如可以將矩陣 C 改寫如下:

$$C_{3 \times 4} = \begin{pmatrix} 6/7 & 6/4 & 6/7 & 6/7 \\ 1/1 & 7/4 & 1/1 & 1/1 \\ 12/7 & 3/1 & 12/7 & 12/7 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1/1 \\ 7/6 \\ 2/1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6/7 & 6/4 & 6/7 & 6/7 \end{pmatrix}$$

$$= \mathbf{u}\mathbf{v}'$$

理由如下:

$$c_{ij} = \frac{a_{ij}}{b_{ij}}$$

$$= \frac{P(X = x_i, Y = y_j)}{P(Y = y_j)} / \frac{P(X = x_i, Y = y_j)}{P(X = x_i)}$$

$$= \frac{P(X = x_i)}{P(Y = y_j)}$$

$$= P(X = x_i) \times P(Y = y_j)^{-1}$$

我們知道在實際的應用中，零值亦有可能會出現在 A 和 B 的矩陣中，甚至會同時出現在相同的位置上。所以如果給予的 A 和 B 的矩陣中含有 0 值，應如何利用比值矩陣 C 檢驗它們是否相容?

Arnold et al.(2004)提出條件分配矩陣 A 和 B 是相容的充分必要條件為 C 有秩為 1 的正擴張矩陣，即 C 矩陣中的元素 * 用大於 0 的數補上後，其秩仍然為 1。

舉例來說:

例3.1.1: 給定兩條件分配矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 2/3 & 0 \\ 1/2 & 2/3 & 0 & 1/3 \\ 0 & 0 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix} \quad \text{和} \quad B = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 & 1/3 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 0 & 1/6 \\ 0 & 0 & 1/6 & 5/6 \end{pmatrix}$$

得知其比值矩陣如下:

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 & * \\ 1 & 2 & * & 2 \\ * & * & 2 & \frac{4}{5} \end{pmatrix}$$

從本例來看，因為無法求得 C 矩陣中 $*$ 的值使 C 的秩為 1，所以可知一開始給的條件分配矩陣 A 和 B 是不相容的。

例3.1.2: 給定兩條件分配矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 1/6 & 0 & 3/14 \\ 0 & 1/4 & 4/14 \\ 5/6 & 3/4 & 7/4 \end{pmatrix} \text{ 和 } B = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 3/4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \\ 5/18 & 6/18 & 7/18 \end{pmatrix}$$

得知其比值矩陣如下:

$$C = \begin{pmatrix} 4/6 & *_{12} & 4/14 \\ *_{21} & 3/4 & 6/14 \\ 18/6 & 9/4 & 9/7 \end{pmatrix}$$

從本例來看，因為可以求得 C 矩陣中 $*_{12} = 1/2$ ， $*_{21} = 1$ 的值使 C 的秩為 1，所以可知一開始給的條件分配矩陣 A 和 B 是相容的。

Song et al.(2010)提出了 IBD 矩陣的概念，表示任何比值矩陣 C 經由行和列的交換後，可以轉化成一個不可約化區塊對角矩陣。他們也證明了下列兩件事:

1. 矩陣 A 和 B 是相容的充分必要條件為 C 的 IBD 矩陣中的每一個對角線上的區塊都有秩為 1 的正擴張矩陣。
2. 若矩陣 A 和 B 是相容的且對角線上的區塊只有一個時，則存在唯一的聯合分配。

3.2 電腦數值計算法

若條件分配矩陣 A 和 B 彼此是相容的，則表示聯合分配一定存在。Tian et al.(2009)提供了一種數值計算的方法來討論有限離散型條件分配相容性及唯一性的問題。他們先將相容性的問題轉化成有限制條件的線性方程系統。做法如下:

求

$$0 \leq \xi_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, m$$

滿足

$$\begin{cases} 1 = \xi_1 + \cdots + \xi_m \\ 0 = \xi_i b_{ij} - a_{ij} \sum_{k=1}^m \xi_k b_{kj}, \quad \forall i, j \end{cases} \quad (3.2.1)$$

其中 $\xi_i = P(X = x_i)$, $\eta_j = P(Y = y_j)$, $i = 1, 2, \dots, m$, $j = 1, 2, \dots, n$

因爲

$$a_{ij} \times \eta_j = P(X = x_i | Y = y_j) \times P(Y = y_j) = P(X = x_i, Y = y_j)$$

$$b_{ij} \times \xi_i = P(Y = y_j | X = x_i) \times P(X = x_i) = P(X = x_i, Y = y_j)$$

所以

$$a_{ij} \times \eta_j = b_{ij} \times \xi_i, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

若令聯合分配矩陣爲 $P = (p_{ij}) : m \times n$, 則 P 滿足

$$p_{ij} = a_{ij} \eta_j = b_{ij} \xi_i, \quad \forall i, j,$$

在已知 a_{ij} 和 b_{ij} 的情況下, 到底要如何做才能求得邊際機率 ξ_i 或 η_j 的值滿足上述條件呢?

因爲

$$\eta_j = P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^m P(X = x_i, Y = y_j) = \sum_{i=1}^m b_{ij} \xi_i$$

所以

$$b_{ij} \xi_i = a_{ij} \eta_j = a_{ij} \sum_{k=1}^m b_{kj} \xi_k, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n.$$

即

$$b_{ij} \xi_i - a_{ij} \sum_{k=1}^m b_{kj} \xi_k = 0$$

再加上 $\xi_1 + \cdots + \xi_m = 1$ 的限制條件後, 系統(3.2.1)以及限制條件 $0 \leq \xi_i \leq 1$ 可用矩陣表示爲:

$$\mathbf{e}_1 = T \boldsymbol{\xi}, \quad \boldsymbol{\xi} \in [0, 1]^m, \quad (3.2.2)$$

其中 $\mathbf{e}_1 = (1, 0, \dots, 0)'$ 爲 $1 + mn$ 維度的單位向量, 且 T 是 $(1 + mn) \times m$ 的矩陣, 第一列爲 $\mathbf{1}'_m$ 且第 $(i-1)n + j + 1$ 列爲

$$\left(0'_{i-1}, b_{ij}, 0'_{m-i} \right) - a_{ij} \left(b_{1j}, \dots, b_{ij}, \dots, b_{mj} \right)$$

Tian et al.(2009)的目標就是要找到(3.2.2)式的所有可能解。並把找到的 X 之邊際分配 ξ 透過 $P = \text{diag}(\xi)B$ 即可求得聯合分配。換言之，要檢驗條件分配矩陣 A 和 B 是否相容，就是要透過 (3.2.2)式求出 ξ 的解。

一般而言，(3.2.2)式未必有解，所以他們想找 $\xi \in [0, 1]^m$ 使得 e_1 和 $T\xi$ 的差距越小越好。Tian et al. 使用 l_2 -距離來衡量 e_1 和 $T\xi$ 的距離，即

$$l_2(e_1, T\xi) = \|e_1 - T\xi\|^2$$

故 Tian et al.要求的最佳解為:

$$\hat{\xi} = \arg \min_{\xi \in [0, 1]^m} l_2(e_1, T\xi) \quad (3.2.3)$$

當要使用電腦求解時，初始值的設定如下:

從自由度為 n_i 的卡方分配(chi-square distribution)產生隨機變數值 $V_i^{(0)} (i = 1, \dots, m)$ ，且令初始值為

$$\xi^{(0)} = \left(V_1^{(0)}, \dots, V_m^{(0)} \right)' / \sum_{i=1}^m V_i^{(0)}$$

當 $\text{rank}(T) \leq m$ 且不管 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件時，(3.2.3)式的解是不唯一的，而且所有解可表示成

$$\xi_{\tau}^{LSE} = T^* e_1 + [I_m - T^* T] \tau$$

，其中 $T^* = (T' T)^+ T'$ 且 τ 是 R^m 中的一個任意向量。

一般來說，不同的初始值將產生不同的答案。他們建議另一種設定初始值的方法為

$$\xi_{\tau}^{(0)} = \min \left\{ \max \left\{ 0_m, \hat{\xi}_{\tau}^{LSE} \right\}, 1_m \right\}$$

最後他們提出判斷條件分配矩陣 A 和 B 相容與否的準則如下:

1. 如果算出的 $\hat{\xi}$ 是唯一的且 $l_2(e_1, T\hat{\xi}) < 10^{-10}$ ，則可以判定 A 和 B 是相容的且 $\hat{\xi}$ 是 X 的唯一邊際分配。
2. 如果算出的 $\hat{\xi}$ 是唯一的，但 $l_2(e_1, T\hat{\xi}) > 10^{-10}$ ，則可以判定 A 和 B 是不相容的。
3. 如果算出的 $\hat{\xi}$ 有很多組 $\{\hat{\xi} \mid \tau \in R^m\}$ 且所有的 $l_2(e_1, T\hat{\xi}) < 10^{-10}$ ，則可以判定 A 和 B 是相容的且 X 的所有可能邊際分配為 $\{\hat{\xi} \mid \tau \in R^m\}$ 。

4 方法論

Tian et al.(2009)將條件 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 放置在方程系統中，他們的問題是求 ξ 使 $l_2(\mathbf{e}_1, T\xi)$ 最小，即

$$\begin{aligned} \min_{\xi} \quad & \|\mathbf{e}_1 - T\xi\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

其中 \mathbf{e}_1 和 T 如(3.2.2)定義。從理論上看，這個做法是無法保證最後所求得解其邊際機率和會滿足 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 的條件。若將 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 的條件放入限制條件中，則上述問題就變成求 ξ 使

$$\begin{aligned} \min_{\xi} \quad & \|D\xi\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \begin{cases} \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_m = 1 \\ 0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m \end{cases} \end{aligned} \quad (4.1)$$

其中 D 的定義如下：

$$D_{(m \cdot n) \times m} = \begin{bmatrix} b_{11}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{a}^{(1)}), & b_{21}(\mathbf{e}_2 - \mathbf{a}^{(1)}), & \dots, & b_{m1}(\mathbf{e}_m - \mathbf{a}^{(1)}) \\ b_{12}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{a}^{(2)}), & b_{22}(\mathbf{e}_2 - \mathbf{a}^{(2)}), & \dots, & b_{m2}(\mathbf{e}_m - \mathbf{a}^{(2)}) \\ b_{13}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{a}^{(3)}), & b_{23}(\mathbf{e}_2 - \mathbf{a}^{(3)}), & \dots, & b_{m3}(\mathbf{e}_m - \mathbf{a}^{(3)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{1n}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{a}^{(n)}), & b_{2n}(\mathbf{e}_2 - \mathbf{a}^{(n)}), & \dots, & b_{mn}(\mathbf{e}_m - \mathbf{a}^{(n)}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{e}_m = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

且 $\mathbf{a}^{(j)} = (a_{1j}, a_{2j}, \dots, a_{mj})'$ 是條件分配矩陣 A 的第 j 行， $j = 1, \dots, n$ 。

我們處理(4.1)的構想如下：

1. 利用 Lagrange 乘數法求解：

先不管 $\xi_1 \geq 0, \xi_2 \geq 0, \dots, \xi_m \geq 0$ 的限制條件，只考慮在 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 的限制條件下，利用 Lagrange 乘數法求 ξ 使得 $\|D\xi\|^2$ 最小。

2. 利用 Rao-Ghangurde 修正:

由 Lagrange 乘數法求出的 ξ 未必符合 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件，此時可利用 Rao-Ghangurde 修正法來對 ξ 進行修正，直到所有的 ξ_i 符合限制條件的要求為止。

在本文中為了敘述的方便起見，將上述求解的過程稱為 LRG 法。

本章中我們分成四個部份來討論。第一、利用 Lagrange 乘數法推導出邊際機率值之公式解，並說明如何利用 Rao-Ghangurde 修正法來對 ξ 進行修正，第二、說明採用干擾參數法的原因及其理論依據，第三、說明邊際機率多組解之檢驗法以及求出所有可能解的做法，第四、推導出檢驗理論相容的充分條件。

4.1 LRG 法

本節中我們將對 LRG 法做詳細的說明。

先不管 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件，只考慮在 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 的限制條件下，我們利用 Lagrange 乘數法推出 ξ 的公式解。

令

$$F(\xi, \lambda) = \|D\xi\|^2 + \lambda (\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_m - 1)$$

則

$$F(\xi, \lambda) = \xi' D' D \xi + \lambda (\mathbf{1}' \xi - 1)$$

，其中 $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)'$ ， $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)'$ 。

由引理2.1.及引理2.2.可得:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial \xi} = 2D'D\xi + \lambda\mathbf{1} \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda} = \xi'\mathbf{1} - 1 \end{cases}$$

令

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial \xi} = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0 \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} 2D'D\xi + \lambda\mathbf{1} = \mathbf{0} & \dots\dots\dots \langle 1 \rangle \\ \xi'\mathbf{1} - 1 = 0 & \dots\dots\dots \langle 2 \rangle \end{cases}$$

接下來求解聯立方程式的 (ξ, λ) 值:

由(1)可知,

$$2D'D\xi = -\lambda\mathbf{1}$$

$$\Rightarrow \xi = -1/2 \cdot \lambda(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1} \dots\dots\dots \langle 3 \rangle$$

將(3)代入(2),

$$-1/2 \cdot \lambda\mathbf{1}'(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1} - 1 = 0$$

所以

$$\lambda = -2 (\mathbf{1}'(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1})^{-1} \dots\dots\dots \langle 4 \rangle$$

將(4)代入(3),

$$\begin{aligned} \xi &= -1/2 [-2 (\mathbf{1}'(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1})^{-1}](D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1} \\ &= [\mathbf{1}'(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1}]^{-1}(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1} \\ &= \frac{(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1}}{\mathbf{1}'(D'D)^{-1} \cdot \mathbf{1}} \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

以上是假設 $D'D$ 擁有逆矩陣的情形所求出的解。當條件分配矩陣 A 和 B 相容時, 會存在 ξ 使 $D\xi = \mathbf{0}$, 因此 $D'D\xi = \mathbf{0}$ 。若 $D'D$ 滿秩(即 $\text{rank}(D'D)=m$), 則可推得 $\xi = \mathbf{0}$, 如此將與限制條件 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 產生矛盾。所以當 A 和 B 相容時, $\text{rank}(D'D) \leq m - 1$ 。因此在一般的情況下, 公式(4.1.1)中的逆矩陣應以廣義逆矩陣來取代。即

$$\xi = \frac{(D'D)^- \cdot \mathbf{1}}{\mathbf{1}'(D'D)^- \cdot \mathbf{1}} \tag{4.1.2}$$

不過 $(D'D)^-$ 有無限多個, 到底要選擇那一個是沒有什麼特別的方法可依循, 所以在實際的應用上有其困難性, 因此我們選擇用 Moore-Penrose 廣義逆矩陣(即 $(D'D)^+$)來代

表。因為 $(D'D)^+$ 除了擁有一些良好的特殊性質之外，還能夠具體的被表示出來，且在很多統計理論上似乎都有不錯的表現，故當 $(D'D)^{-1}$ 不存在時，我們常會以 $(D'D)^+$ 來取代。

有時找出的 ξ 未必會滿足 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的條件，該如何處理呢？在此我們將介紹如何對未滿足條件限制的 ξ 使用 Rao-Ghangurde 修正的方法。

Rao-Ghangurde 修正法處理的方式如下：

1. 邊際機率值有出現小於 0 且沒有大於 1 的情形：

如果發現求出的 ξ 中有 ξ_i 的值是小於 0 且沒有大於 1 的情形時，我們會令這些小於 0 的 ξ_i 中最小的那一個 ξ_i 為 0，此時原始邊際機率和為 1 的限制條件會有變動，且方程系統中的矩陣 D 會縮減一行，再經由 ξ 的求解公式可得出新的 ξ 來。如果新求得的 ξ 中仍有值是小於 0 的，則繼續依上述的方式進行修正，直到所有的 ξ_i 符合 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的條件為止。

例如：

令第一次找出來的解為 $\xi^{(1)} = (\xi_1^{(1)}, \xi_2^{(1)}, \dots, \xi_m^{(1)})$ ，若發現 $\xi_1^{(1)} < 0$ 且為最小值，可令 $\xi_1^{(1)} = 0$ ，則原始的限制條件變為 $\xi_2 + \xi_3 + \dots + \xi_m = 1$ ，且矩陣 D 會少掉一行，此時經由 ξ 的求解公式，得出第一次修正後的解為 $\xi^{(2)} = (0, \xi_2^{(2)}, \xi_3^{(2)}, \dots, \xi_m^{(2)})$ 。若修正後發現新求出的 $\xi_2^{(2)} < 0$ 且為最小值，可令 $\xi_2^{(2)} = 0$ ，則限制條件就改變成 $\xi_3 + \xi_4 + \dots + \xi_m = 1$ ，且矩陣 D 會再少掉一行，此時經第二次修正後得到的新解為 $\xi^{(3)} = (0, 0, \xi_3^{(3)}, \xi_4^{(3)}, \dots, \xi_m^{(3)})$ 。若發現 $\xi_3^{(3)}$ 值小於 0，則繼續依照上述的處理模式做修正，直到所有找出的 ξ_i 都滿足 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件。

2. 邊際機率值大於 1 及小於 0 的情況同時存在：

(a) 只處理邊際機率值小於 0 的情形：

如果計算後發現其中有 ξ_i 的值大於 1 且也發現有其它 ξ_k 的值小於 0， $i \neq k$ 且 k 可能不只一個，此時先令其中一個最小的 ξ_k 值為 0，原始邊際機率和為 1 的限制條件會有變動，且系統方程中的矩陣 D 會縮減一行，再經由 ξ 的求解公式可得出新的 ξ 來。若求出的 ξ 值仍然不完全符合 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件則繼續進行修正，直到所有的 ξ_i 符合

條件要求為止。

(b) 只處理邊際機率值大於 1 的情形:

如果計算後的結果發現其中有 ξ_i 的值大於 1，則我們會令大於 1 的 ξ_i 中最大的值為 1，而其餘的 ξ_k 值都為 0，其中 $i \neq k$ ，此時表示所有 ξ_i 的值只會剩下一個且值為 1，則矩陣 D 只剩下一個行向量。

4.2 干擾參數法

若矩陣 A 和 B 相容時， $(D'D)^{-1}$ 是不存在的。而我們在使用 MATLAB 7.8.0 設計程式協助計算時發現有一個現象存在，若要求電腦將數值保留小數點後 6 位數計算時， $(D'D)^{-1}$ 的運算結果會存在，而且由公式(4.1.1)求出的 ξ 與 Tian et al.(2009)所求出的 ξ 會非常接近。但如果選擇讓電腦將數值保留使用長位數計算時，則在 A 和 B 是相容的例子中，很可能會發生 $(D'D)^{-1}$ 不存在的情形，此時只好選擇用 $(D'D)^+$ 來取代，但透過公式(4.1.2)求出 ξ 的值代入 $\|D\xi\|^2$ 之後求得的值卻會變得很大，以致於會誤判為 A 和 B 彼此是不相容的。仔細研究後發現原來是 $D'D$ 在對角化時其主對角元素中有特徵值為 0，導致電腦沒辦法替我們算出 $(D'D)^{-1}$ 。因為使用電腦數值計算法計算公式(4.1.1)時， $(D'D)^{-1}$ 必須要存在，這樣才能順利求出邊際機率 ξ 的值，故在求 ξ 值的過程中決定採用加入”干擾參數”來幫助電腦順利完成計算。會想到使用干擾參數法也是因為把要處理的數值只取小數點後 6 位的做法中得到靈感的，似乎給原本的數值一些干擾後，比較可以得出較佳的答案。其理由說明如下：
設正交矩陣 Γ 將 $D'D$ 對角線化，即

$$\Gamma' D' D \Gamma = \left(\begin{array}{ccc|c} \lambda_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_k & \\ \hline 0 & & & 0 \end{array} \right)$$

或

$$D'D = \Gamma \left(\begin{array}{c|c} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \vdots & \\ \hline & \lambda_k \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{array} \right) \Gamma'$$

其中 $\lambda_1 > 0, \dots, \lambda_k > 0$

因為主對角線上的元素有些值為 0，故在此加入一些很小的干擾參數 $\epsilon_1, \dots, \epsilon_l$ ，並且令

$$E = \Gamma \left(\begin{array}{c|c} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \vdots & \\ \hline & \lambda_k \\ \hline & \epsilon_1 \\ \hline \mathbf{0} & \vdots \\ & \epsilon_l \end{array} \right) \Gamma'$$

其中 $\epsilon_1 > 0, \dots, \epsilon_l > 0$

由公式(4.1.1)之加入干擾參數後所求得的邊際分配為:

$$\xi^* = \frac{E^{-1}\mathbf{1}}{\mathbf{1}'E^{-1}\mathbf{1}} \quad (4.2.1)$$

此時

$$(\xi^*)'E\xi^* = (\xi^*)'\Gamma \left(\begin{array}{c|c} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \vdots & \\ \hline & \lambda_k \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{array} \right) \Gamma'\xi^* + (\xi^*)'\Gamma \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline & \epsilon_1 \\ \hline \mathbf{0} & \vdots \\ & \epsilon_l \end{array} \right) \Gamma'\xi^*$$

我們可以看出上式中的第一部分為原來所要求得的結果，而第二部分為加入干擾參數後所多出的結果。但

$$\begin{aligned}
& (\boldsymbol{\xi}^*)' \Gamma \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \epsilon_1 & \\ \mathbf{0} & \ddots \\ & \epsilon_l \end{pmatrix} \Gamma' \boldsymbol{\xi}^* \\
& \leq (\boldsymbol{\xi}^*)' \Gamma \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \epsilon & \\ \mathbf{0} & \ddots \\ & \epsilon \end{pmatrix} \Gamma' \boldsymbol{\xi}^* \\
& = \epsilon (\boldsymbol{\xi}^*)' \Gamma \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ 1 & \\ \mathbf{0} & \ddots \\ & 1 \end{pmatrix} \Gamma' \boldsymbol{\xi}^* \\
& \leq \epsilon \|(\boldsymbol{\xi}^*)' \Gamma \Gamma' \boldsymbol{\xi}^*\| = \epsilon \|\boldsymbol{\xi}^*\|^2 \\
& \leq \epsilon (\xi_1^* + \dots + \xi_m^*)^2 = \epsilon
\end{aligned}$$

其中 $\epsilon = \max\{\epsilon_1, \dots, \epsilon_l\}$ 。

所以加入干擾參數後所增加的誤差值不超過所加入的干擾參數值 ϵ ，如果扣除掉加入干擾參數後所增加的誤差部份，表示在相容的情況下， $\|D\xi\|^2$ 的理論最小值應該會更小才是。因此採用干擾參數法所得的結論是相容的話，則保證條件分配矩陣 A 和 B 必定是相容的，即加入干擾參數後所增加的誤差值並不影響其判讀的結果。

基於上述的理由，我們在處理逆矩陣運算時，會先從 $D'D$ 對角化時所得的特徵值來判斷，如果其中有特徵值被判讀為 0，則會採用加入干擾參數來處理，如果每個特徵值都不為 0，則就不需要加入干擾參數。

4.3 多組解之檢驗法

若給予的條件分配矩陣 A 與 B 很龐大時，則可先將它們轉化成不可約化區塊對角矩陣，型如：

$$A = \text{diag}(A_1, A_2, \dots, A_k)$$

$$B = \text{diag}(B_1, B_2, \dots, B_k)$$

接下來再對每一對 (A_j, B_j) 檢驗是否相容。若每一對 A_j 與 B_j 都是相容的，則表示 A 和 B 是相容的；若有任何一對 (A_j, B_j) 是不相容的，則 A 和 B 不相容。最後再對每一對 (A_j, B_j) 所獲得的邊際機率解做適當的線性合併處理，所求得的结果就是所有可能的邊際機率解。

下面用一個例子來說明如何把多組解找出的方法。假設 A 和 B 相容且已是 IBD 矩陣，如下：

$$A = (a_{ij})_{4 \times 4} = \left(\begin{array}{cc|cc} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} A_1 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & A_2 \end{array} \right)$$

$$B = (b_{ij})_{4 \times 4} = \left(\begin{array}{cc|cc} b_{11} & b_{12} & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & b_{33} & b_{34} \\ 0 & 0 & b_{43} & b_{44} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} B_1 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & B_2 \end{array} \right)$$

則計算出的 $D'D$ 也是 IBD 矩陣，其中對應於 A_1 和 B_1 的 $D'D$ 記為 $D'_1 D_1$ ，對應於 A_2 和 B_2 的 $D'D$ 記為 $D'_2 D_2$ ，型如：

$$D'D = (d_{ij})_{4 \times 4} = \left(\begin{array}{cc|cc} d_{11} & d_{12} & 0 & 0 \\ d_{21} & d_{22} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & d_{33} & d_{34} \\ 0 & 0 & d_{43} & d_{44} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} \Sigma_1 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \Sigma_2 \end{array} \right)$$

其中 $\Sigma_1 = D'_1 D_1$ ， $\Sigma_2 = D'_2 D_2$ 。

因 A_1 和 B_1 相容，故可以找到邊際機率 $\xi_1 = (\xi_{11}, \xi_{12})'$ 使得

$$\xi_1' \Sigma_1 \xi_1 < 10^{-10}$$

同理，因 A_2 和 B_2 相容，故可以找到邊際機率 $\xi_2 = (\xi_{21}, \xi_{22})'$ 使得

$$\xi_2' \Sigma_2 \xi_2 < 10^{-10}$$

令

$$\boldsymbol{\xi}_1^* = (\xi_{11}, \xi_{12}, 0, 0)' = (\boldsymbol{\xi}'_1, \mathbf{0})'$$

$$\boldsymbol{\xi}_2^* = (0, 0, \xi_{21}, \xi_{22})' = (\mathbf{0}, \boldsymbol{\xi}'_2)'$$

$\forall 0 < \alpha < 1$,

$$\begin{aligned} & (\alpha\boldsymbol{\xi}_1^* + (1-\alpha)\boldsymbol{\xi}_2^*)' D'D (\alpha\boldsymbol{\xi}_1^* + (1-\alpha)\boldsymbol{\xi}_2^*) \\ &= ((\alpha\boldsymbol{\xi}'_1)', ((1-\alpha)\boldsymbol{\xi}'_2)') \left(\begin{array}{c|c} \Sigma_1 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \Sigma_2 \end{array} \right) ((\alpha\boldsymbol{\xi}_1), ((1-\alpha)\boldsymbol{\xi}_2)) \\ &= (\alpha\boldsymbol{\xi}'_1)' \Sigma_1 (\alpha\boldsymbol{\xi}_1) + ((1-\alpha)\boldsymbol{\xi}'_2)' \Sigma_2 ((1-\alpha)\boldsymbol{\xi}_2) \\ &< \alpha(10^{-10}) + (1-\alpha)10^{-10} \\ &= 10^{-10} \end{aligned}$$

所以 $\{\alpha\boldsymbol{\xi}_1^* + (1-\alpha)\boldsymbol{\xi}_2^* \mid 0 < \alpha < 1\}$ 是 $\boldsymbol{\xi}$ 的邊際機率解集合。

4.4 檢驗理論相容之充分條件

本節中想推導出相容之充分條件是指理論上的完全相容，而非由電腦數值所算出的近似相容。

由4.1節的〈1〉、〈2〉式整理後可得到下列的式子：

$$\begin{cases} D'D\boldsymbol{\xi} = -\frac{\lambda}{2} \mathbf{1} & \dots\dots\dots \langle 5 \rangle \\ \mathbf{1}'\boldsymbol{\xi} = 1 & \dots\dots\dots \langle 6 \rangle \end{cases}$$

依據2.2節的定理2.6.可知，如果 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 擁有多組解時，解的通式為：

$$\mathbf{x} = A^+\mathbf{b} + (\mathbf{I}_n - A^+A)\mathbf{t}$$

其中 $\mathbf{t} = (t_1, t_2, \dots, t_n)'$ 是 $n \times 1$ 的任意向量。

由(5)可得 $\boldsymbol{\xi}$ 的通式為：

$$\boldsymbol{\xi} = (D'D)^+(-\frac{\lambda}{2} \mathbf{1}) + (\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\boldsymbol{\tau}$$

其中 $\tau : m \times 1$ 是任意向量。將上式再整理一下，得

$$\xi = -\frac{\lambda}{2}(D'D)^+1 + (\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau \dots\dots\dots \langle 7 \rangle$$

將(7)代入(6)得:

$$\begin{aligned} 1 &= \mathbf{1}'\xi \\ &= -\frac{\lambda}{2}\mathbf{1}'(D'D)^+1 + \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau \\ \text{即 } -\frac{\lambda}{2} &= \frac{1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} \dots\dots\dots \langle 8 \rangle \end{aligned}$$

將(8)代入(7)得:

$$\xi = \frac{[1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau](D'D)^+1}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} + (\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau$$

故

$$\begin{aligned} \xi'D'D\xi &= \left\{ \frac{[1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau]\mathbf{1}'(D'D)^+(D'D)}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} + \tau(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D)) \right\} \\ &\times \left\{ \frac{[1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau](D'D)^+1}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} + (\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau \right\} \\ &= \frac{[1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau]\mathbf{1}'(D'D)^+(D'D)}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} \\ &\times \left\{ \frac{[1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau](D'D)^+1}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} + (\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau \right\} \\ &= \frac{[1 - \mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau]^2}{\mathbf{1}'(D'D)^+1} \end{aligned}$$

如果條件分配矩陣 A 和 B 是相容的，則會存在 $\tau \in R^m$ 使得

$$(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau \geq \mathbf{0} \tag{4.5.1}$$

而且

$$\mathbf{1}'(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau = 1$$

事實上，只要存在 τ^* 使得 $(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau^* > \mathbf{0}$ 成立即可。在此解釋一下所謂 $\mathbf{v} > \mathbf{0}$ 的意思，也就是給定向量 $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_m)'$ ，則所有的 $v_i > 0, i = 1, \dots, m$ 。

設正交矩陣 $\Gamma = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m)$ 將矩陣 $D'D : m \times m$ 對角化如下:

$$D'D = \Gamma \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \lambda_m \end{pmatrix} \Gamma'$$

其結果可分成三種情況來討論:

(一) $\text{rank}(D'D) = m$ 的情形:

在4.1節時我們曾經討論過，當 $\text{rank}(D'D) = m$ 的時候，會求得 $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$ 的結果，如此便無法滿足 $\xi_1 + \dots + \xi_m = 1$ 的限制條件，所以 A 和 B 是不相容的。

(二) $\text{rank}(D'D) = m - 1$ 的情形:

$$D'D = \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{m-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma'$$

則

$$(D'D)^+ = \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} 1/\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1/\lambda_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1/\lambda_{m-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma'$$

$$\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D)$$

$$= \mathbf{I} - \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} 1/\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1/\lambda_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1/\lambda_{m-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma' \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{m-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma'$$

$$\begin{aligned}
&= \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array} \right) \Gamma' - \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma' \\
&= \Gamma \left(\begin{array}{cccc|c} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array} \right) \Gamma' \\
&= \left(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m \right) \left(\begin{array}{cccc|c} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{v}'_1 \\ \mathbf{v}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{v}'_m \end{pmatrix} \\
&= \left(0, \dots, 0, \mathbf{v}_m \right) \begin{pmatrix} \mathbf{v}'_1 \\ \mathbf{v}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{v}'_m \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{v}_m \mathbf{v}'_m
\end{aligned}$$

設 $\mathbf{v}_m = \left(a_1, a_2, \dots, a_m \right)'$ ，則存在 $\boldsymbol{\tau}$ 使 $(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\boldsymbol{\tau} > \mathbf{0}$

$$\Leftrightarrow \mathbf{v}_m \mathbf{v}'_m \boldsymbol{\tau} > \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \left(a_1, a_2, \dots, a_m \right)' \left(a_1, a_2, \dots, a_m \right) \boldsymbol{\tau} > \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} a_1^2 & a_1 a_2 & \cdots & a_1 a_m \\ a_1 a_2 & a_2^2 & \cdots & a_2 a_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1 a_m & a_2 a_m & \cdots & a_m^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \vdots \\ \tau_m \end{pmatrix} > \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} a_1^2 \tau_1 + a_1 a_2 \tau_2 + \cdots + a_1 a_m \tau_m > 0 \\ a_1 a_2 \tau_1 + a_2^2 \tau_2 + \cdots + a_2 a_m \tau_m > 0 \\ \vdots \\ a_1 a_m \tau_1 + a_2 a_m \tau_2 + \cdots + a_m^2 \tau_m > 0 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} a_1(a_1 \tau_1 + a_2 \tau_2 + \cdots + a_m \tau_m) > 0 \\ a_2(a_1 \tau_1 + a_2 \tau_2 + \cdots + a_m \tau_m) > 0 \\ \vdots \\ a_m(a_1 \tau_1 + a_2 \tau_2 + \cdots + a_m \tau_m) > 0 \end{cases}$$

由上述的方程組可得知:

1. 若 a_1, a_2, \dots, a_m 全部不為 0 且為同號, 則必定存在 τ 使 $(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau > \mathbf{0}$, 所以 A 和 B 是相容的。
2. 若 a_1, a_2, \dots, a_m 全部不為 0 但不同號, 則不存在 τ 使 $(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau > \mathbf{0}$, 所以 A 和 B 是不相容的。
3. 若存在某些 $a_i = 0$, 則不存在 τ 使 $(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\tau > \mathbf{0}$, 所以 A 和 B 是不相容的。

(三) $\text{rank}(D'D) \leq m - 2$ 的情形:

為了證明方便起見, 設 $\text{rank}(D'D) = m - 2$ 。

此時

$$D'D = \Gamma \left(\begin{array}{cccc|cc} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{m-2} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma'$$

而

$$(D'D)^+ = \Gamma \left(\begin{array}{cccc|cc} 1/\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\lambda_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1/\lambda_{m-2} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \Gamma'$$

同情形(二)的證明方式，我們可以推得

$$\begin{aligned} & \mathbf{I} - (D'D)^+(D'D) \\ &= \left(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m \right) \left(\begin{array}{cccc|cc} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{v}'_1 \\ \mathbf{v}'_2 \\ \vdots \\ \mathbf{v}'_m \end{pmatrix} \end{aligned}$$

故存在 τ 使 $\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D)\tau > \mathbf{0}$

\Leftrightarrow 存在 $\mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_m)'$ 使

$$\left(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m \right) \left(\begin{array}{cccc|cc} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \mathbf{s} > \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \text{存在 } \mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_m)' \text{ 使 } (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m) \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ s_{m-1} \\ s_m \end{pmatrix} > \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \text{存在 } \mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_m)' \text{ 使 } s_{m-1}\mathbf{v}_{m-1} + s_m\mathbf{v}_m > \mathbf{0},$$

$$\text{其中 } \mathbf{s} = (s_1, s_2, \dots, s_m)' = (\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2, \dots, \mathbf{v}'_m)' \boldsymbol{\tau}$$

$$\text{令 } \mathbf{v}_m = (a_1, \dots, a_m)', \mathbf{v}_{m-1} = (b_1, \dots, b_m)', \text{ 則存在 } \boldsymbol{\tau} \text{ 使 } (\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\boldsymbol{\tau} > \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \text{存在實數 } s_{m-1}, s_m \text{ 使}$$

$$\begin{cases} b_1 s_{m-1} + a_1 s_m > 0 \\ b_2 s_{m-1} + a_2 s_m > 0 \\ \vdots \\ b_m s_{m-1} + a_m s_m > 0 \end{cases}$$

若 $(a_1, \dots, a_m)'$ 中不為 0 的分量同號， $(b_1, \dots, b_m)'$ 中不為 0 的分量同號，且這兩個向量不會在同一分量位置同時為 0，則顯然存在實數 s_{m-1}, s_m 使上述式子成立，故即存在 $\boldsymbol{\tau}$ 使 $(\mathbf{I} - (D'D)^+(D'D))\boldsymbol{\tau} > \mathbf{0}$ 。

從以上的討論，可以得到下列在理論上檢驗條件分配是否相容的結果：

定理 4.1. 給定條件分配矩陣 A 和 B ，我們有下面的結論：

1. 當 $\text{rank}(D'D) = m$ ，則 A 和 B 是不相容的。
2. 當 $\text{rank}(D'D) = m - 1$ ，則 A 和 B 相容之充要條件為存在對應於特徵值 0 的特徵向量其分量不為 0 且同號。
3. 當 $\text{rank}(D'D) \leq m - 2$ 時，若存在 $m - \text{rank}(D'D)$ 個對應於特徵值 0 的正交特徵向量，其不為 0 的分量同號且這些向量在同一分量位置不會全為 0，則 A 和 B 相容。

5 實例說明

爲了驗證 LRG 法與干擾參數法是否可行，本章中我們先將它們處理相容性問題的流程以有系統的步驟呈現。爲了快速計算，我們利用 MATLAB 7.8.0 設計了一個程式來輔助運算，程式內容詳見附錄。接著再以 Tian et al.(2009)在文中所列舉的各種不同範例依前述的流程來說明處理的情形，並將所獲得的結果和他們的結果做比較。範例的類型可分成三種，第一類型爲相容且有唯一解；第二類型爲不相容；第三類型爲相容但有多組解。

5.1 處理流程

LRG 法與干擾參數法的處理流程分述如下：

(一) LRG 法的流程：

1. 按照給定的條件分配矩陣 A 和 B ，計算出 D 、 $D'D$ 、 $\text{rank}(D'D)$ 、 $D'D$ 的特徵值及特徵向量、 $(D'D)^{-1}$ 、 $(D'D)^+$ 。(註：理論上當 A 和 B 相容時， $(D'D)^{-1}$ 是不存在的。)
2. 若 $D'D$ 滿秩，按照定理4.1可判定 A 和 B 是不相容的。
3. 若 $(D'D)^{-1}$ 不存在，則可選用 $(D'D)^+$ 來取代，並利用公式(4.1.2)求出 ξ 的值。
4. 若 ξ 符合 $0 \leq \xi_i \leq 1$ ， $i = 1, \dots, m$ 的限制條件，則由 $\|D\xi\|^2$ 的值是否小於 10^{-10} 來判斷 A 和 B 是否相容；若 ξ 不符合限制條件 $0 \leq \xi_i \leq 1$ ， $i = 1, \dots, m$ 的要求，則利用 Rao-Ghangurde 修正法對 ξ 進行修正，直到所有的 ξ_i 符合條件爲止，之後再由 $\|D\xi\|^2$ 的值來判斷 A 和 B 是否相容。此時，若 $\|D\xi\|^2 < 10^{-10}$ ，則表示 A 和 B 相容，但 $\|D\xi\|^2 > 10^{-10}$ 時，尚無法判定 A 和 B 是否相容，必須再用其它的方法來處理。

(二) 干擾參數法的流程：

1. 按照給定的條件分配矩陣 A 和 B ，計算出 D 、 $D'D$ 、 $\text{rank}(D'D)$ 、 $D'D$ 的特徵值及特徵向量、 $(D'D)^{-1}$ 、 $(D'D)^+$ 。(註：理論上當 A 和 B 相容時， $(D'D)^{-1}$ 是

不存在的。但有時在相容的情況下，電腦因為計算誤差的關係而讓 $(D'D)^{-1}$ 被計算出來，這樣求得的 $(D'D)^{-1}$ 算是一種因計算誤差而造成的假存在，頗有干擾參數法的意味在。)

2. 若 $D'D$ 滿秩，按照定理4.1可判定 A 和 B 是不相容的。此時的 $(D'D)^{-1}$ 是真的存在，不需要採用干擾參數法來處理。
3. 若 $(D'D)^{-1}$ 不存在，則採用干擾參數法來處理，即矩陣 $D'D$ 在進行對角線化時若有特徵值為 0，就加入干擾值(10^{-12}) 來替代之，使電腦能順利算出 $D'D$ 的近似矩陣 E 及 E 的逆矩陣，接著再利用公式(4.2.1)計算出 ξ 的值。
4. 若 ξ 符合 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件，則由 $\|D\xi\|^2$ 的值是否小於 10^{-10} 來判斷 A 和 B 是否相容；若 ξ 不符合限制條件 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的要求，則利用 Rao-Ghangurde 修正法對 ξ 進行修正，直到所有的 ξ_i 符合條件為止，之後再由 $\|D\xi\|^2$ 的值來判斷 A 和 B 是否相容。

值得注意的是，如果給予的條件分配矩陣 A 與 B 很龐大時，則可利用4.3節的方法把 A 和 B 轉成 IBD 矩陣後，再對每一對 (A_j, B_j) 進行上述的步驟來檢驗是否相容。若每一對 (A_j, B_j) 都是相容的，則表示 A 和 B 是相容的，最後再對每一對 (A_j, B_j) 所獲得的邊際機率做適當的線性合併處理，所求得的结果就是可能的邊際機率解。

5.2 相容且有唯一解的範例

例1:(Tian et al.(2009)的範例)

給定條件分配矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 1/7 & 1/4 & 3/7 & 1/7 \\ 2/7 & 2/4 & 1/7 & 2/7 \\ 4/7 & 1/4 & 3/7 & 4/7 \end{pmatrix} \quad \text{和} \quad B = \begin{pmatrix} 1/6 & 1/6 & 3/6 & 1/6 \\ 2/7 & 2/7 & 1/7 & 2/7 \\ 4/12 & 1/12 & 3/12 & 4/12 \end{pmatrix}$$

利用附錄的程式計算，可以得到下列有關 $D'D$ 及 ξ 的各項資訊:

| rank($D'D$) | 特徵值 | 特徵向量 | (4.1.2)中用 $(D'D)^+$ 計算的 ξ |
|---------------|---------|------------------------------|-------------------------------|
| 2 | -0.0000 | (0.3965 0.4626 0.7930) | 1.2611 |
| | 0.2364 | (-0.0310 0.1930 -0.0971) | 0.8866 |
| | 0.2798 | (-0.6989 -0.4079 0.5874) | -1.1478 |

說明:

1. $D'D$ 為 3×3 矩陣，但 $\text{rank}(D'D)=2$ ，且特徵值 0 所對應的特徵向量其分量不為 0 且同號，由定理 4.1 可知，理論上 A 和 B 是相容的。
2. 因為 $(D'D)^{-1}$ 不存在，所以我們採用 Moore-Penrose 逆矩陣 $(D'D)^+$ 來替代並利用公式(4.1.2)計算出 ξ ，但 ξ 的值並未符合 $0 \leq \xi_i \leq 1$ ， $i = 1, \dots, m$ 的限制條件，於是決定採用 Rao-Ghangurde 修正法來對 ξ 進行修正。
3. Rao-Ghangurde 修正:

因為其中的 $\xi_3 < 0$ ，所以我們可以令其值為 0，則原始的限制條件 $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 1$ 就轉變成 $\xi_1 + \xi_2 = 1$ ，而原矩陣 D 會少掉第三行，再經由公式(4.1.1)重新計算得出以下的資訊，此時的 $D'D$ 為 2×2 矩陣:

註:為了讓內容的呈現較為精簡，接下來所有表格中的 Rao-Ghangurde 修正皆以 R-G 修正表示。

| rank($D'D$) | 第一次 R-G 修正後得到的 ξ | 由 R-G 修正解計算的 $\ D\xi\ ^2$ |
|---------------|----------------------|---------------------------|
| 2 | 0.4712 | 0.0875 |
| | 0.5288 | |
| | 0 | |

我們發現:

- (a) 進行第一次 Rao-Ghangurde 修正後得到的 ξ 都有符合 $\xi_1 \geq 0, \xi_2 \geq 0, \xi_3 \geq 0$ 的條件，所以決定停止修正。
- (b) 修正後透過公式(4.1.1)求得的 ξ 去計算出的 $\|D\xi\|^2 > 10^{-10}$ ，此時在 LRG

法中沒辦法判定出 A 和 B 是否相容，可見 Rao-Ghangurde 修正後所得到的 ξ 並不是最佳解，需要再尋求其它的方法來處理 A 和 B 相容性的問題。

(c) 利用 Moore-Penrose 逆矩陣 $(D'D)^+$ 求得的 ξ ，在 Rao-Ghangurde 修正後所得的結果仍是判定為不相容的，主要的原因是 $(D'D)^+$ 只是符合某些特殊性質條件所找出的逆矩陣，利用它所求出的 ξ 未必是這個問題的最佳解，所以不管再如何對它進行修正，其求出的 ξ 很可能離真實的解還是很遠，在這種情況下進行修正所得到的效果是很有限的。而當初會選擇用 Moore-Penrose 逆矩陣的原因是因為在很多的統計理論上，它都有不錯的表現，本來很期待它在此也能有不錯的表現，沒想到結果不如預期的好。

4. 依照 LRG 法的處理流程，此時必須選用其它的方法來處理相容性的問題。因為 $(D'D)^{-1}$ 不存在，所以決定對矩陣 $D'D$ 進行干擾參數法的處理。

5. 干擾參數法:

利用附錄的程式計算時，我們發現 $\text{rank}(D'D) = 2$ ，其中有一個特徵值被電腦判定為 0，為了讓電腦在逆矩陣的計算能順利進行，於是將這個等於 0 的特徵值加上一個很小的干擾值 (10^{-12}) 使 $D'D$ 的近似矩陣 E 有逆矩陣，並將 E^{-1} 代入公式(4.2.1)以求得 ξ 的解，此時 E 為 3×3 的矩陣。有關 E 和 ξ 的各項資訊及 Tian et al.(2009)所得的邊際機率解整理如下:

| $\text{rank}(E)$ | 特徵值 | 用干擾參數法 計算的 ξ | 干擾參數法 的 $\ D\xi\ ^2$ | Tian et al. 計算的 ξ |
|------------------|------------|---------------------|-------------------------|--------------------------|
| 3 | 10^{-12} | 0.24 | $1.2996 * 10^{-25}$ | 0.24 |
| | 0.2364 | 0.28 | | 0.28 |
| | 0.2798 | 0.48 | | 0.48 |

我們發現:

(a) 因為 $\|D\xi\|^2 < 10^{-10}$ ，所以 A 和 B 可以被判定是相容的。而在 Tian et al.(2009)文中也是得出 A 和 B 是相容的結果。

(b) 我們和 Tian et al.(2009)算出 X 的邊際分配是一樣的，且 X 和 Y 的聯合分配計算如下：

$$P = \begin{pmatrix} 0.24 & 0 & 0 \\ 0 & 0.28 & 0 \\ 0 & 0 & 0.48 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/6 & 1/6 & 3/6 & 1/6 \\ 2/7 & 2/7 & 1/7 & 2/7 \\ 4/12 & 1/12 & 3/12 & 4/12 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0.04 & 0.04 & 0.12 & 0.04 \\ 0.08 & 0.08 & 0.04 & 0.08 \\ 0.16 & 0.04 & 0.12 & 0.16 \end{pmatrix}$$

(c) 此例給了我們一個很重要的結果，由電腦所提供有關 $D'D$ 的資訊中若發現它不是滿秩，則 A 和 B 有可能是相容的情形，所以在求邊際機率解的計算過程中可直接採用干擾參數法來進行 A 和 B 是否相容的檢定，以求得邊際機率解。若有邊際機率解，就可以進一步求得 X 和 Y 的聯合分配。而且從處理的過程中可看出干擾參數法比 LRG 法便捷有效許多。

6. 利用 LRG 法與干擾參數法求 ξ 最佳解的結果整理如下：

| (4.1.2)中用 $(D'D)^+$ 計算的 ξ | 第一次 R-G 修正後得到的 ξ | 用干擾參數法 計算的 ξ |
|----------------------------------|-------------------------|---------------------|
| 1.2611 | 0.4712 | 0.24 |
| 0.8866 | 0.5288 | 0.28 |
| -1.1478 | 0 | 0.48 |

我們發現利用 LRG 法求得的 ξ 與干擾參數法求得的 ξ 差異很大，而且利用後者所求得的 ξ 離真正的解較為接近。

7. 因為 A 和 B 已是不可約化區塊對角矩陣且對角線上的區塊只有一個，所以 ξ 的值是唯一的。

例2:(Tian et al.(2009)的範例)

給定條件分配矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 1/6 & 0 & 3/14 \\ 0 & 1/4 & 4/14 \\ 5/6 & 3/4 & 7/14 \end{pmatrix} \text{ 和 } B = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 3/4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \\ 5/18 & 6/18 & 7/18 \end{pmatrix}$$

利用附錄的程式計算，可以得到下列有關 $D'D$ 及 ξ 的各項資訊:

| rank($D'D$) | 特徵值 | 特徵向量 | (4.1.2)中用 $(D'D)^+$ 計算的 ξ |
|---------------|--------|--------------------------|-------------------------------|
| 2 | 0.0000 | (0.2063 0.3094 0.9283) | 0.6993 |
| | 0.5272 | (0.1703 0.9229 -0.3455) | 0.6842 |
| | 0.6520 | (-0.9636 0.2293 0.1377) | -0.3835 |

說明:

1. $D'D$ 為 3×3 矩陣，但 $\text{rank}(D'D)=2$ ，且特徵值 0 所對應的特徵向量其分量不為 0 且同號，由定理4.1可知，理論上 A 和 B 是相容的。
2. 因為用 $(D'D)^+$ 透過公式(4.1.2)去算出的 ξ 不符合 $0 \leq \xi_i \leq 1$ ， $i = 1 \cdots m$ 的限制條件，於是決定採用 Rao-Ghangurde 修正法來對 ξ 進行修正。
3. Rao-Ghangurde 修正:

因為用 $(D'D)^+$ 去算出的 $\xi_3 < 0$ ，故先令 $\xi_3 = 0$ ，此時限制條件 $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 = 1$ 就轉變成 $\xi_1 + \xi_2 = 1$ ，而原矩陣 D 會少掉第三行，再經由公式(4.1.1)重新計算得出以下的資訊，此時的 $D'D$ 為 2×2 矩陣:

| rank($D'D$) | 第一次 R-G 修正後得到的 ξ | 由 R-G 修正解計算的 $\ D\xi\ ^2$ |
|---------------|----------------------|---------------------------|
| 2 | 0.444 | 0.2415 |
| | 0.556 | |
| | 0 | |

我們發現:

- (a) 進行第一次 Rao-Ghangurde 修正後所得的 ξ 值都有符合 $\xi_1 \geq 0, \xi_2 \geq 0, \xi_3 \geq 0$ 的條件，所以決定停止修正。
- (b) 修正後透過公式(4.1.1)求得的 ξ 去計算出的 $\|D\xi\|^2 > 10^{-10}$ ，此時在 LRG 法中沒辦法判定出 A 和 B 是否相容，需要再尋求其它的方法來處理 A 和 B 相容性的問題。
- (c) 利用 $(D'D)^+$ 找出的 ξ 未必是這個問題的最佳解，所以進行 Rao-Ghangurde 修正後的效果不佳，只能說這裏的 Moore-Penrose 逆矩陣的表現不如預期的好。
4. 依照 LRG 法的處理流程，此時必須選用其它的方法來處理相容性的問題。因為 $(D'D)^{-1}$ 不存在，所以決定對矩陣 $D'D$ 進行干擾參數法的處理。

5. 干擾參數法:

利用附錄的程式計算時，我們發現 $\text{rank}(D'D) = 2$ ，其中有一個特徵值被電腦判定為 0，為了讓電腦在逆矩陣的計算能順利進行，於是將這個等於 0 的特徵值加上一個很小的干擾值 (10^{-12}) 使 $D'D$ 的近似矩陣 E 有逆矩陣，並將 E^{-1} 代入公式(4.2.1)以求得 ξ 的解，此時 E 為 3×3 的矩陣。有關 E 和 ξ 的各項資訊及 Tian et al.(2009)所得的邊際機率解整理如下:

| $\text{rank}(E)$ | 特徵值 | 用干擾參數法 計算的 ξ | 干擾參數法 的 $\ D\xi\ ^2$ | Tian et al. 計算的 ξ |
|------------------|------------|---------------------|-------------------------|--------------------------|
| 3 | 10^{-12} | 0.1429 | $3.6941 * 10^{-25}$ | $2/14 = 0.1429$ |
| | 0.5272 | 0.2143 | | $3/14 = 0.2143$ |
| | 0.6520 | 0.6429 | | $9/14 = 0.6429$ |

我們發現:

- (a) 所求得的 $\|D\xi\|^2 < 10^{-10}$ ，所以 A 和 B 可以判定是相容的。這個判定與 Tian et al.(2009)文中的結果相同。
- (b) 我們和 Tian et al.(2009)算出 X 的邊際分配是一樣的，且 X 和 Y 的聯合分配計算如下:

$$\begin{aligned}
P &= \begin{pmatrix} 0.1429 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2143 & 0 \\ 0 & 0 & 0.6429 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 3/4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \\ 5/18 & 6/18 & 7/18 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0.0357 & 0 & 0.1071 \\ 0 & 0.0714 & 0.1429 \\ 0.1786 & 0.2143 & 0.2500 \end{pmatrix} \\
&\approx \begin{pmatrix} 1/28 & 0 & 3/28 \\ 0 & 2/28 & 4/28 \\ 5/28 & 6/28 & 7/28 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

(c) 此例再次驗證，由電腦所提供有關 $D'D$ 的資訊中若發現它不是滿秩，則 A 和 B 有可能是相容的情形，所以在求邊際機率解的計算過程中可以直接採用干擾參數法的效果會比採用 LRG 法好很多。建議在一般的處理時，可先選用干擾參數法，將會節省許多處理的時間。

6. 利用 LRG 法與干擾參數法求 ξ 最佳解的結果整理如下：

| (4.1.2)中用 $(D'D)^+$ 計算的 ξ | 第一次 R-G 修正後得到的 ξ | 用干擾參數法 計算的 ξ |
|----------------------------------|-------------------------|---------------------|
| 0.6993 | 0.444 | 0.1429 |
| 0.6842 | 0.556 | 0.2143 |
| -0.3835 | 0 | 0.6429 |

我們發現利用 LRG 法求得的 ξ 與干擾參數法求得的 ξ 差異很大，而且利用後者所求得的 ξ 離真正的解較為接近。

7. 在本例中出現一個很有趣的現象，即電腦運算時告訴我們 $D'D$ 不是滿秩 (即 $\text{rank}(D'D)=2$)，卻很勉強的幫我們算出 $(D'D)^{-1}$ 。理論上當 A 和 B 相容時， $(D'D)^{-1}$ 應該是不存在的，所以這理求出的 $D'D$ 應該是電腦在計算上的誤差所造成的一種假存在，而且利用它所求得的 $(D'D)^{-1}$ 代入公式(4.1.1)後所求得的 $\xi = (0.1429, 0.2143, 0.6429)'$ 與我們用干擾參數法及 Tian et al.(2009)所求的解

都與真正的解很接近，且它的 $\|D\xi\|^2 = 8.6667 * 10^{-34} < 10^{-10}$ ，表示 A 和 B 是相容的。這個因電腦計算誤差所造成的效果很有我們干擾參數法的意味在。

8. 因為 A 和 B 已是不可約化區塊對角矩陣且對角線上的區塊只有一個，所以 ξ 的值是唯一的。

5.3 不相容的範例

例3:(Tian et al.(2009)的範例)

給定條件分配矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 1/6 & 0 & 3/14 \\ 0 & 1/4 & 4/14 \\ 5/6 & 3/4 & 7/14 \end{pmatrix} \text{ 和 } B = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \\ 5/18 & 6/18 & 7/18 \end{pmatrix}$$

利用附錄的程式計算，可以得到下列有關 $D'D$ 的各項資訊:

| rank($D'D$) | 特徵值 | 特徵向量 |
|---------------|--------|------------------------------|
| 3 | 0.0172 | (0.1116 0.3042 0.9460) |
| | 0.5308 | (-0.0259 0.9526 -0.3033) |
| | 0.8512 | (-0.9934 0.0093 0.1142) |

因為 $(D'D)^{-1}$ 存在，利用公式(4.1.1)可得 ξ 的解，並把 Tian et al.(2009)求出的解整理如下:

| 用 $(D'D)^{-1}$ 計算的 ξ | 用 $(D'D)^{-1}$ 求 ξ 後 計算的 $\ D\xi\ ^2$ | Tian et al. 計算的 ξ |
|-----------------------------|--|--------------------------|
| 0.0897 | 0.0091 | 0.088927 |
| 0.2302 | | 0.228110 |
| 0.6801 | | 0.673934 |

說明:

1. $D'D$ 為 3×3 矩陣，且 $\text{rank}(D'D)=3$ ，由定理4.1可知，在理論上 A 和 B 是不相容的。

2. 因為計算出的 ξ 值也都符合 $\xi_1 \geq 0, \xi_2 \geq 0, \xi_3 \geq 0$ 的條件，於是不需要採用 Rao-Ghangurde 修正法來對 ξ 進行修正。
3. 因為 $(D'D)^{-1}$ 存在(非電腦計算誤差所造成的存在)，所以無須對 $D'D$ 進行干擾參數法的處理。
4. 因為 $\|D\xi\|^2 = 0.0091 > 10^{-10}$ ，所以 A 和 B 可以判定為不相容的。
5. 我們所求出的 ξ 與 Tian et al.(2009)所求得的數據非常的接近，他們採用 l_2 -距離所得到的值為 $0.00902916 > 10^{-10}$ ，所以我們和他們一樣都把這個範例判定為不相容的情形。
6. 值得注意的是，由電腦所提供有關 $D'D$ 的資訊中若發現它是滿秩，則 A 和 B 一定是屬於不相容的情形。

5.4 相容但有多組解的範例

例4:(Tian et al.(2009)的範例)

給定條件分配矩陣

$$A = \begin{pmatrix} 1/7 & 1 & 0 & 0 \\ 6/7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/5 & 4/5 \\ 0 & 0 & 3/5 & 1/5 \end{pmatrix} \quad \text{和} \quad B = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/6 & 4/6 \\ 0 & 0 & 3/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

利用附錄的程式計算，可以得到下列有關 $D'D$ 及 ξ 的各項資訊:

| rank($D'D$) | 特徵值 | 特 徵 向 量 | (4.1.2)中用 $(D'D)^+$ 計算的 ξ |
|---------------|---------|------------------------|-------------------------------|
| 2 | -0.0000 | (-0.5547 -0.8321 0 0) | 2.2169 |
| | 0.0000 | (0 0 -0.8321 -0.5547) | -1.4780 |
| | 0.1327 | (-0.8321 0.5547 0 0) | -0.5220 |
| | 0.3756 | (0 0 -0.5547 0.8321) | 0.7831 |

說明:

1. $D'D$ 為 4×4 矩陣，但 $\text{rank}(D'D)=2$ ，由定理4.1可知，存在 2 個對應於特徵值 0 的正交特徵向量，其不為 0 的分量同號且這些向量在同一分量位置不會全為 0，理論上 A 和 B 是相容的。
2. 因為 $(D'D)^{-1}$ 不存在，所以我們採用 $(D'D)^+$ 並利用公式(4.1.2)計算 ξ ，但 ξ 的值並未符合 $0 \leq \xi_i \leq 1, i = 1, \dots, m$ 的限制條件，於是決定採用 Rao-Ghangurde 修正法來對 ξ 進行修正。

3. Rao-Ghangurde 修正:

(1)第一種 Rao-Ghangurde 修正:

因為其中的 ξ_2 和 ξ_3 都是小於 0 的，但是 ξ_2 的值最小，所以我們可以先令 $\xi_2 = 0$ ，此時限制條件 $\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + \xi_4 = 1$ 就轉變成 $\xi_1 + \xi_3 + \xi_4 = 1$ ，而原矩陣 D 會少掉第二行，再經由公式(4.1.2)重新計算得出以下的資訊，此時的 $D'D$ 為 3×3 矩陣:

| $\text{rank}(D'D)$ | 特徵值 | 特徵向量 | 第一次 R-G 修正後得到的 ξ |
|--------------------|--------|-------------------------------------|----------------------|
| 2 | 0 | $(0 \quad -0.8321 \quad -0.5547)$ | 0.9815 |
| | 0.0918 | $(1 \quad 0 \quad 0)$ | 0 |
| | 0.3756 | $(0 \quad -0.5547 \quad 0.8321)$ | -0.0369 |
| | | | 0.0554 |

我們發現修正後所得的邊際機率值中的 ξ_3 仍是小於 0 的，所以我們可以令其值為 0，此時限制條件 $\xi_1 + \xi_3 + \xi_4 = 1$ 就轉變成 $\xi_1 + \xi_4 = 1$ ，而原矩陣 D 只剩下兩行，再經由公式(4.1.1)重新計算得出以下的資訊，此時的 $D'D$ 為 2×2 矩陣:

| rank($D'D$) | 第二次 R-G 修正後得到的 ξ | 由 R-G 修正解 計算的 $\ D\xi\ ^2$ |
|---------------|----------------------------|-------------------------------|
| 2 | 0.7390 0 0 0.2610 | 0.0679 |

我們發現 $\|D\xi\|^2$ 的值依然大於 10^{-10} ，對 ξ 進行兩次 Rao-Ghangurde 修正後仍是不理想，由 LRG 法的處理流程可知，目前無法判定 A 和 B 是否相容。因為利用 $(D'D)^+$ 所找出的 ξ 未必是最佳解，所以不管再如何修正，效果還是很有有限的。

(2)第二種 Rao-Ghangurde 修正:

因為求出的邊際機率值其中的 ξ_1 大於 1，所以我們可以令 $\xi_1 = 1$ ， $\xi_2 = \xi_3 = \xi_4 = 0$ ，而原來的矩陣 D 只剩下第一行，經公式(4.1.1)計算出 ξ 並求得 $\|D\xi\|^2 = 0.0918 > 10^{-10}$ ，可知採取此種方式修正後的結果仍不理想，由 LRG 法的處理流程是無法判定 A 和 B 是否相容。

(3)從上述的兩種 Rao-Ghangurde 修正來看，雖然在本例中修正之後的結果仍不夠理想，但採用第一種修正方式的結果似乎比採用第二種修正的方式更理想一些。

4. 依照 LRG 法的處理流程，此時必須選用其它的方法來處理相容性的問題。因為 $(D'D)^{-1}$ 不存在，故採用干擾參數法對 $D'D$ 進行處理。

5. 干擾參數法:

利用附錄的程式計算後，我們發現 $\text{rank}(D'D)=2$ ，其中有兩個特徵值被判定為 0，為了讓電腦在逆矩陣的計算能順利進行，於是將這兩個等於 0 的特徵值各加上一個很小的干擾值 (10^{-12}) 使 $D'D$ 的近似矩陣 E 有逆矩陣，並將 E^{-1} 代入公式(4.2.1)以求得 ξ 的解，此時 E 為 4×4 的矩陣， $\text{rank}(E)=4$ 。有關 E 和 ξ 的各項資訊及 Tian et al.(2009)所得的 ξ 整理如下:

| 特徵值 | 用干擾參數法 計算的 ξ | 干擾參數法 的 $\ D\xi\ ^2$ | Tian et al. 計算的 ξ | Tian et al. 計算的 ξ |
|------------|---------------------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|
| 10^{-12} | 0.2 | $5.3032 * 10^{-26}$ | 0.134848 | 0.0867424 |
| 10^{-12} | 0.3 | | 0.202273 | 0.1301136 |
| 0.1327 | 0.3 | | 0.397727 | 0.4698864 |
| 0.3756 | 0.2 | | 0.265152 | 0.3132576 |

我們發現:

(a) 採用干擾參數法所算出的 $\|D\xi\|^2 < 10^{-10}$ ，所以判定 A 和 B 是相容的。這個判定相容的結果與 Tian et al. 所得的結果一樣。

(b) 計算 X 和 Y 的聯合分配如下:

$$P = \begin{pmatrix} 0.2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2 \\ 0.05 & 0.15 & 0 & 0 \\ 0.3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0.15 & 0.05 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/6 & 4/6 \\ 0 & 0 & 3/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

(c) 我們把 Tian et al.(2009)所得到的兩種邊際機率解代入我們的 $\|D\xi\|^2$ 中計算，得到的值分別為 $6.7408 * 10^{-34}$ 及 $1.7935 * 10^{-33}$ 。雖然我們和 Tian et al.(2009) 所求出 ξ 都不同，但 $\|D\xi\|^2$ 都小於 10^{-10} ，確定 A 和 B 是相容的，由此更可確認本範例為多組解的情形。

6. 利用 LRG 法與干擾參數法求 ξ 最佳解的結果整理如下:

| 用 $(D'D)^+$ 計算的 ξ | 第一次 R-G 修正後得到的 ξ | 第二次 R-G 修正後得到的 ξ | 用干擾參數法 計算的 ξ |
|--------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------|
| 2.2169 | 0.9815 | 0.7390 | 0.2 |
| -1.4780 | 0 | 0 | 0.3 |
| -0.5220 | -0.0369 | 0 | 0.3 |
| 0.7831 | 0.0554 | 0.2610 | 0.2 |

我們發現利用 LRG 法求得的 ξ 與干擾參數法求得的 ξ 差異很大，而且利用後者所求得的 ξ 與真正的解較為接近。

本例中 A 和 B 已是不可約化區塊對角矩陣，在此我們可以利用4.3節所提到多組解之檢驗法來處理 A 和 B 是否相容的問題。若相容，則再將各個對應區塊所求出的邊際機率解做適當的線性合併處理，合併之後的邊際機率解也是它的解。這個例子中 X 和 Y 的聯合分配確實擁有多組解，詳細說明如下：

令

$$A = \left(\begin{array}{cc|cc} 1/7 & 1 & 0 & 0 \\ 6/7 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 2/5 & 4/5 \\ 0 & 0 & 3/5 & 1/5 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} A_1 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & A_2 \end{array} \right)$$

$$B = \left(\begin{array}{cc|cc} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 2/6 & 4/6 \\ 0 & 0 & 3/4 & 1/4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} B_1 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & B_2 \end{array} \right)$$

提出矩陣 A_1 及 B_1 ，透過附錄的程式運算，我們得到 $D_1'D_1$ 並發現 $\text{rank}(D_1'D_1)=1$ 且其中有一個特徵值為 0，所以決定採用干擾參數法來處理 $D_1'D_1$ ，於是將這個等於 0 的特徵值加上一個很小的干擾值 (10^{-12}) 使 $D_1'D_1$ 的近似矩陣 E_1 有逆矩陣，並將 E_1^{-1} 代入公式(4.2.1)以求得 ξ_1^* 的解，此時 E_1 為 2×2 的矩陣。有關 E_1 和 ξ_1^* 的各項資訊整理如下：

| rank(E_1) | 特徵值 | 用干擾參數法 計算的 ξ_1^* | 用干擾參數法 計算的 $\ D\xi\ ^2$ |
|---------------|----------------------|-------------------------|----------------------------|
| 2 | 10^{-12} 0.1327 | 0.4 0.6 | $1.5679 * 10^{-25}$ |

提出矩陣 A_2 及 B_2 ，透過附錄的程式運算，我們我們得到 D'_2D_2 並發現 $\text{rank}(D'_2D_2)=1$ 且其中有一個特徵值為 0，所以決定採用干擾參數法來處理 D'_2D_2 ，於是將這個等於 0 的特徵值加上一個很小的干擾值 (10^{-12}) 使 D'_2D_2 的近似矩陣 E_2 有逆矩陣，並將 E_2^{-1} 代入公式(4.2.1)以求得 ξ_2^* 的解，此時 E_2 為 2×2 的矩陣。有關 E_2 和 ξ_2^* 的各項資訊整理如下：

| rank(E_2) | 特徵值 | 用干擾參數法 計算的 ξ_2^* | 用干擾參數法 計算的 $\ D\xi\ ^2$ |
|---------------|----------------------|-------------------------|----------------------------|
| 2 | 10^{-12} 0.3756 | 0.6 0.4 | $5.5358 * 10^{-26}$ |

接下來只要將所求得的 ξ_1^* 和 ξ_2^* 做線性合併，即令

$$\xi = a \begin{pmatrix} \xi_1^* \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}' + b \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \xi_2^* \end{pmatrix}'$$

其中 $a + b = 1$ ，且 $a \geq 0, b \geq 0$ 。由此可以看出這個例子是相容的且有多組的邊際機率解。以下舉三個例子來說明：

(一) 令 $a = 0.4, b = 0.6$ ，則 ξ 的解為：

$$\begin{aligned} \xi &= 0.4 \begin{pmatrix} 0.4, 0.6, 0, 0 \end{pmatrix}' + 0.6 \begin{pmatrix} 0, 0, 0.6, 0.4 \end{pmatrix}' \\ &= \begin{pmatrix} 0.16, 0.24, 0.36, 0.24 \end{pmatrix}' \end{aligned}$$

我們發現：

1. 線性合併後所得出的 $\|D\xi\|^2 = 8.1852 * 10^{-34} < 10^{-10}$ ，所以判定 A 和 B 是相容的。

2. 此時 X 和 Y 的聯合分配如下:

$$P = \begin{pmatrix} 0.16 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.24 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.36 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.24 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/6 & 4/6 \\ 0 & 0 & 3/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0.04 & 0.12 & 0 & 0 \\ 0.24 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.12 & 0.24 \\ 0 & 0 & 0.18 & 0.06 \end{pmatrix}$$

(二) 令 $a = 0.7, b = 0.3$, 則 ξ 的解為:

$$\xi = 0.7 \begin{pmatrix} 0.4, 0.6, 0, 0 \end{pmatrix}' + 0.3 \begin{pmatrix} 0, 0, 0.6, 0.4 \end{pmatrix}'$$

$$= \begin{pmatrix} 0.28, 0.42, 0.18, 0.12 \end{pmatrix}'$$

我們發現:

1. 線性合併後所算出的 $\|D\xi\|^2 = 9.87034 * 10^{-34} < 10^{-10}$, 因此判定 A 和 B 是相容的。
2. 此時 X 和 Y 的聯合分配如下:

$$P = \begin{pmatrix} 0.28 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.42 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.18 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/6 & 4/6 \\ 0 & 0 & 3/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0.07 & 0.21 & 0 & 0 \\ 0.42 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.06 & 0.12 \\ 0 & 0 & 0.09 & 0.03 \end{pmatrix}$$

(三) 令 $a = 0.33712, b = 0.66288$, 則 ξ 的解為:

$$\xi = 0.33712 \begin{pmatrix} 0.4, 0.6, 0, 0 \end{pmatrix}' + 0.66288 \begin{pmatrix} 0, 0, 0.6, 0.4 \end{pmatrix}'$$

$$= \begin{pmatrix} 0.134848, 0.202272, 0.397728, 0.265152 \end{pmatrix}'$$

我們發現:

1. 當 $a = 0.33712$, $b = 0.66288$ 時, 所求得的 ξ 與 Tian et al.(2009)求的其中一組解極為接近。
2. 線性合併後所算出的 $\|D\xi\|^2 = 6.7408 * 10^{-34} < 10^{-10}$, 因此判定 A 和 B 是相容的。

適度的將各個區塊所求得的邊際機率值做線性合併處理後, ξ 最佳解的結果整理如下:

| 用 $a = 0.4, b = 0.6$ | 用 $a = 0.7, b = 0.3$ | 用 $a = 0.33712, b = 0.66288$ |
|----------------------|----------------------|------------------------------|
| 計算的 ξ | 計算的 ξ | 計算的 ξ |
| 0.16 | 0.28 | 0.134848 |
| 0.24 | 0.42 | 0.202272 |
| 0.36 | 0.18 | 0.397728 |
| 0.24 | 0.12 | 0.265152 |

由上述的結果可知, 本例的條件分配矩陣 A 和 B 是相容的, 且 X 和 Y 的聯合分配確實擁有多組解。

6 結論

透過上述各章節的討論後，將得到的結論整理如下：

1. 我們將 Tian et al.(2009)的方法改良後，對條件分配相容性的議題提出了 LRG 法及干擾參數法這兩種電腦數值計算的方法，可對條件分配矩陣 A 和 B 是否相容的問題做出判斷。我們方法的優點是可以確定邊際機率和 (即 $\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_m = 1$) 的限制條件一定會成立，而 Tian et al. 最後求得的邊際機率解之和從理論的觀點來看未必會等於 1。
2. 由 Lagrange 乘數法公式解中，我們推導出檢驗條件分配是否理論相容的充分條件。給定矩陣 A 和 B 可求出 $D'D : m \times m$ 矩陣，要判斷 A 和 B 是否理論相容，可從 $D'D$ 的秩來討論。當 $\text{rank}(D'D) = m$ ，則 A 和 B 一定不相容；當 $\text{rank}(D'D) = m - 1$ ，則 A 和 B 相容之充要條件為存在對應於特徵值 0 的特徵向量其分量不為 0 且同號；當 $\text{rank}(D'D) \leq m - 2$ 時，若存在 $m - \text{rank}(D'D)$ 個對應於特徵值 0 的正交特徵向量，其不為 0 的分量同號且這些向量在同一分量位置不會全為 0，則 A 和 B 相容。
3. 在利用 LRG 法求邊際機率解的過程中，當 $(D'D)^{-1}$ 不存在時，我們常會考慮以 Moore-Penrose 逆矩陣 $(D'D)^+$ 來替代。在列舉的幾個實例中，我們發現利用 Moore-Penrose 逆矩陣所得到的計算結果都不如預期的好，不像它在一般的統計理論上有不錯的表現。
4. 從實例說明中可看出干擾參數法比 LRG 法在處理問題上便捷許多，所以在使用電腦數值計算法處理相容性問題時，建議優先使用干擾參數法，而且採用干擾參數法對於我們求邊際機率解的過程幫助很大。
5. 在例 3 中經由電腦給的資訊可知，當 $(D'D)^{-1}$ 存在(非電腦計算誤差造成的存在)，則 A 和 B 這兩個條件分配是不相容的，此時不需要採用干擾參數法來處理矩陣 $D'D$ 。而例 2 為相容的情形，理論上 $(D'D)^{-1}$ 本該不存在，然而電腦卻因為計算誤差的關係，導致 $(D'D)^{-1}$ 存在，且透過公式(4.1.1)求出的邊際機率解幾乎是最佳解，這個現象與干擾參數法有相同效果存在。

6. 如果一開始給予的兩條件分配矩陣很龐大時，我們建議可以先將之轉換成不可約化區塊對角矩陣。若每一對對應的區塊對角矩陣都符合相容的條件，則可以將每對所求出的邊際機率解做適當的線性合併處理，那麼合併之後的解都是它的解，此為相容的且有多組解的情形。但只要其中有任何一對區塊對角矩陣是不相容的，則兩條件分配矩陣是不相容的。



參考文獻

一、西文部份:

- [1] Arnold, B. C., Press, S. J.(1989). Compatible conditional distributions. *J. Amer. Statist. Assoc.*, **84**, 152-156.
- [2] Arnold, B. C., Castillo, E. and Sarabia, J. M.(2004). Compatibility of partial or complete conditional probability specifications. *J. Statist. Plann. Inference*, **123**, 133-159.
- [3] Kolman, B. and Hill, D. R.(2005). *Introductory Linear Algebra-An Applied First Course*, 8/E, Pearson Education Inc.
- [4] Pérez-Villalta, R.(2000). Variables finitas condicionalmente especificadas. *Questioó*, **24**, 425-448.
- [5] Rao, C. R.(1976). *Linear Statistical Inference and Its Applications*, 2nd ed. New York: Wiley.
- [6] Song, C.C., Li L. A., Chen, C. H.,Jiang, T.J.,and Kuo,K.L.(2010). Compatibility of finite discrete conditional distributions. *Statistica Sinica*, **20**, n.1, 423-440.
- [7] Tian, G. L., Tan, M., Ng, K. W., and Tang, M. L. (2009). A Unified Method for Checking Compatibility and Uniqueness for Finite Discrete Conditional Distributions. *Communications in Statistics-Theory and Methods*, **38**, 115-129.

二、中文部份：

- [1] 方世榮(譯)(1989)，應用線性代數，曉園出版社，台北市。
- [2] 李國偉(譯)(2005)，線性代數的世界，天下遠見出版社，台北市。
- [3] 鄭惟厚(譯)(2004)，機率學的世界，天下遠見出版社，台北市。

附錄：處理相容性問題之程式

第一階段: 求出基本相關資料

```
clear
A=input('輸入A矩陣:A=');
B=input('輸入B矩陣:B=');
I=size(A,1);
J=size(A,2);
E=[ ];
for j=1:J
E=[E;eye(I)];
end
A1=reshape(A,I*J,1);
B1=[ ];
for j=1:J
B1=[B1;ones(I,1)*transpose(B(:,j))];
end
D=[B1.*(E-A1*ones(1,I))];
Q=J;
D1=[ ];
for K=1:J
for j=1:I
D1=[D1;D(K,:)];
K=K+Q;
end;
end;
G=D1
W1=G'*G
r=rank(W1)
```

```

[v e]=eig(W1)
t=input('特徵值是否有為0的情況,如果有請輸入1,沒有請輸入0:t=')
if t==1
    k=input('有幾個特徵值為0:k=')
    f=input('設干擾值f=')
    for k= 1:k
        i=input('輸入第幾列要設干擾值:i=')
        j=input('輸入第幾行要設干擾值:j=')
        e(i,j)=f
    end;
    F2=v*inv(e)*v'
    X2=sum(F2,2)/sum(sum(F2))
    H2=diag(X2);
    P2=H2*B
    SSS=G*X2;
    SSS1=(G*X2)'*(G*X2)
elseif t==0
    F=pinv(G'*G)
    F1=inv(G'*G)
    X=sum(F,2)/sum(sum(F))
    X1=sum(F1,2)/sum(sum(F1))
    H=diag(X);
    H1=diag(X1);
    P=H*B
    P1=H1*B
    S=G*X;
    S1=X'*G'*G*X
    SS=G*X1;
    SS1=(G*X1)'*(G*X1)

```

end

第二階段: Rao-Ghangurde修正

G1=G

t=input('輸入t=1表示有修正值小於0;輸入t=2表示有修正值大於1:t=');

if t==1

 k=input('請問是第幾個X值為0:k=')

 G1(:,k)=[]

 g=G1;

 w1=g'*g

 r=rank(w1)

 [v e]=eig(w1)

 m=input('特徵值是否有為0的情況,如果有請輸入1,沒有請輸入0:m=')

 if m==1

 k=input('有幾個特徵值為0:k=')

 f=input('設干擾值f=')

 for k= 1:k

 i=input('輸入第幾列要設干擾值:i=')

 j=input('輸入第幾行要設干擾值:j=')

 e(i,j)=f;

 end;

 else

 end

 f=v*inv(e)*v'

 x=sum(f,2)/sum(sum(f))

 a=x

 m=input('原始的xi共有多少個:m=')

 c=input('要補上第幾個xi的值為0:c=')

 for k=-(m-1):-c

```

        a(abs(k)+1)=a(abs(k))
    end;
    a(c,1)=0;
else t==2
    k=input('請問是第幾個X值為1:k=')
    g=G1(:,k);
    w1=g'*g
    r=rank(w1)
    [v e]=eig(w1)
    f=v*inv(e)*v'
    x=sum(f,2)/sum(sum(f))
    a=x
    m=input('原始的xi共有多少個:m=')
    c=input('要補上第幾個xi的值為1:c=')
    a(m,1)=0;
    a(c,1)=1
end;
h=diag(a);
p=h*B
s=g*x;
s1=a'*G'*G*a

```