第四章：假设检验与区间估计

4.1 $F$检验

考虑如下线性模型：

$$Y = X_{n\times p}\beta + e，\ e \sim N(0,\sigma^2 I_n)，$$

设$rank(X)=r$，矩阵$H_{m\times p}$(已知)，线性假设

$$H_0 : H\beta = 0 \leftrightarrow H_1 : H\beta \neq 0，$$

不失一般性设$rank(H)=m$，现要检验假设$H_0$(作出拒绝或接受该假设的判断)。

考虑该假设的似然比(likelihood ratio)检验。设似然函数

$$L(Y;\beta,\sigma^2) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}\right)^n \exp\left(-\frac{\|Y-X\beta\|^2}{2\sigma^2}\right),$$

则似然比定义为

$$\lambda = \frac{\sup\limits_{\beta,\sigma^2} L(Y;\beta,\sigma^2)}{\sup\limits_{\substack{\beta,\sigma^2\\ H\beta=0}} L(Y;\beta,\sigma^2)}。$$

注意到当$\hat\beta=(X'X)^- X'Y$，$\tilde\sigma^2=\dfrac{\|Y-X\hat\beta\|^2}{n}$时似然比的分子达到最大，且$\sup\limits_{\beta,\sigma^2} L(Y;\beta,\sigma^2) = \left(\sqrt{\dfrac{2\pi e}{n}}\|Y-X\hat\beta\|\right)^{-n}$，当$\hat\beta_H$为约束$H\beta=0$下最小二乘估计，$\tilde\sigma_H^2=\dfrac{\|Y-X\hat\beta_H\|^2}{n}$时似然比的分母达到最大，且$\sup\limits_{\substack{\beta,\sigma^2\\ H\beta=0}} L(Y;\beta,\sigma^2) = \left(\sqrt{\dfrac{2\pi e}{n}}\|Y-X\hat\beta_H\|\right)^{-n}$。

因此似然比

$$\lambda = \left(\frac{\|Y-X\hat\beta_H\|^2}{\|Y-X\hat\beta\|^2}\right)^{\frac{n}{2}} = \left(1+\frac{k}{n-r}F\right)^{\frac{n}{2}},$$

这里

$$F = \frac{(ESS_H - ESS)/k}{ESS/(n-r)},$$

$$ESS = \|Y - X\hat\beta\|^2，\ ESS_H = \|Y - X\hat\beta_H\|^2,$$

$$k = rank(X) + rank(H) - rank\begin{pmatrix} X \\ H \end{pmatrix}。$$

$ESS$——error sum of squares(误差平方和)

由定义似然比$\lambda \geq 1$，直观上若$H_0$成立，则$\lambda$应充分接近 1，故若$\lambda$偏离 1 很远则应该拒绝$H_0$，由于$\lambda$是$F$的单调函数，故当$F$很大时应该拒绝$H_0$。

定理 4.1.1：在本节线性模型假设下，

1. $\frac{ESS}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-r}$；
2. $\frac{ESS_H - ESS}{\sigma^2} \sim \chi^2_{k,\delta}$，这里$\delta = \frac{\left\| X(\beta - E\hat{\beta}_H) \right\|^2}{\sigma^2}$；
3. $ESS_H - ESS$与$ESS$独立；
4. 在假设$H_0$下，$F \sim F_{k,n-r}$。

当$\mu(H') \subset \mu(X')$，即$H\beta$的每个分量都是可估的，此时$rank\begin{pmatrix} X \\ H \end{pmatrix} = rank(X)$，因此$k = rank(H) = m$，$F = \frac{(ESS_H - ESS)/m}{ESS/(n-r)}$在假设$H_0$下服从$F_{m,n-r}$分布。由定理 3.3.2 的推论，此时

$$\hat{\beta}_H = \hat{\beta} - (X'X)^- H' \left[ H(X'X)^- H' \right]^{-1} H\hat{\beta}。$$

$$ESS_H - ESS = \left\| X(\hat{\beta}_H - \hat{\beta}) \right\|^2 = (H\hat{\beta})' \left[ H(X'X)^- H' \right]^{-1} (H\hat{\beta})。$$

给定水平$\alpha \in (0,1)$，若$F > F_{m,n-r}(\alpha)$，则拒绝假设$H_0$：$H\beta = 0$。此检验称为 F-检验。

关于$F$统计量的另一种形式。由于$ESS = Y'Y - \hat{\beta}'X'Y$，$ESS_H = Y'Y - \hat{\beta}_H'X'Y$，记$RSS = \hat{\beta}'X'Y$，$RSS_H = \hat{\beta}_H'X'Y$，则$F = \frac{(RSS - RSS_H)/m}{ESS/(n-r)}$。

$RSS$ ——regression sum of squares(回归平方和)

$TSS$ ——total sum of squares(总和)

令$TSS = Y'Y$，则有$TSS = RSS + ESS$。

下面从投影矩阵的角度来看$F$统计量。线性模型可表示为$Y = \theta + e, e \sim N(0, \sigma^2 I_n)$，其中$\theta \in \mu(X)$。在假设$H_0$下(设$\mu(H') \subset \mu(X')$)，模型可表为$Y = \theta + e, e \sim N(0, \sigma^2 I_n)$，其中$\theta \in S = \left\{ X\beta \middle| H\beta = 0, \beta \in R^p \right\}$，注$S \subset \mu(X)$。

$\dim S = rank\begin{pmatrix} X \\ H \end{pmatrix} - rank(H) = r - m$。记 $P$，$P_S$ 分别为子空间$\mu(X)$，$S$上的投影矩阵，线性模型$\theta$的最小二乘估计为$\hat{\theta} = PY$，在假设下的最小二乘估计为$\hat{\theta}_H = P_S Y$，由于$\theta \in \mu(X)$，$(I_n - P)\theta = 0$，因此

$SSE = \left\| Y - \hat{\theta} \right\|^2 = Y'(I_n - P)Y = e'(I_n - P)e$。

在假设$H_0$下的线性模型，$\theta \in S$，$(I_n - P_S)\theta = 0$，因此 $ESS_H = \left\| Y - \hat{\theta}_H \right\|^2 = Y'(I_n - P_S)Y = e'(I_n - P_S)e$。由定理 3.2.1，$\frac{ESS}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-r}$，在假设 $H_0$ 下 $\frac{ESS_H}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n+m-r}$，$ESS_H - ESS = e'(P - P_S)e$，由于$(P - P_S)(I - P) = 0$，故 $ESS_H - ESS$与 $ESS$独立且$\frac{ESS_H - ESS}{\sigma^2} \sim \chi^2_m$。因此在 $H_0$下，$F \sim F_{m,n-r}$。

4.2 有初始约束时的假设检验

设有初始约束的线性模型

$$\begin{cases} Y = X\beta + e, e \sim N(0, \sigma^2 I_n) \\ L\beta = 0, rank(L_{q \times p}) = q \end{cases}$$

考虑假设$H_0$: $H\beta = 0$的检验问题，这里$H\beta$为$m$个条件可估函数，即$\mu(H') \subset \mu(X' \vdots L')$。记$\hat{\beta}_L$，$\hat{\beta}_{LH}$ 分别为 $\beta$ 在约束 $L\beta = 0$ 和 $L\beta = 0, H\beta = 0$ 的最小二乘估计，由定理 3.3.2，$\hat{\beta}_L = G_{11} X'Y$(参见$G_{11}$的定义)。

$\hat{\beta}_{LH}$ 可以简单由$\begin{pmatrix} L \\ H \end{pmatrix}$代替$\hat{\beta}_L$中的$L$得到。

从而由残差平方和：

$$ESS_L = \left\| Y - X\hat{\beta}_L \right\|^2 = Y'Y - \hat{\beta}_L' X'Y,$$

$$ESS_{LH} = \left\| Y - X\hat{\beta}_{LH} \right\|^2 = Y'Y - \hat{\beta}_{LH}' X'Y。$$

此时投影子空间分别为：

$$S = \left\{ X\beta \middle| L\beta = 0, \beta \in R^p \right\},$$

$$S_1 = \left\{ X\beta \middle| L\beta = 0, H\beta = 0, \beta \in R^p \right\}。$$

$$\dim S = rank\begin{pmatrix} X \\ L \end{pmatrix} - rank(L) \equiv m_1,$$

$$\dim S_1 = rank\begin{pmatrix} X \\ L \\ H \end{pmatrix} - rank\begin{pmatrix} L \\ H \end{pmatrix} \equiv m_2。$$

此时假设$H_0$的似然比检验$F$-统计量为：

$$F = \frac{(ESS_{LH} - ESS_L)/(m_1 - m_2)}{ESS_L/(n - m_1)},$$

当 $H_0$成立时$F \sim F_{m_1 - m_2, n - m_1}$分布。

4.3 一般线性假设检验

至此都是讨论假设检验为$H\beta = 0$，对一般线性假设检验$H_{m\times p}\beta = d$，$rank(H) = m$且方程$H\beta = d$是相容的，先考虑线性假设$H\beta$每个分量都是可估的，即$\mu(H') \subset \mu(X')$。

设$rank(X) = r$，$\beta_0$为方程$H\beta = d$某一特解即 $H\beta_0 = d$ ，对线性模型 $Y = X\beta + e$ ，$e \sim N(0, \sigma^2 I_n)$，令$Z = Y - X\beta_0$，$\theta = \beta - \beta_0$，得到线性模型：

$$Z = X\theta + e，\ e \sim N(0, \sigma^2 I_n),$$

此时，对该模型要检验的假设变为$H\theta = 0$。因此对于假设 $H\beta = d$ ，$rank(H) = m$ ，$\mu(H') \subset \mu(X')$，检验的$F$-统计量为

$$F = \frac{\left(H\hat{\beta} - d\right)' \left[H(X'X)^- H'\right]^{-1} \left(H\hat{\beta} - d\right)/m}{\left\| Y - X\hat{\beta} \right\|^2/(n - r)},$$

在假设$H\beta = d$的条件下$F \sim F_{m, n-r}$，给定水平$\alpha \in (0,1)$，若$F > F_{m, n-r}(\alpha)$，则拒绝该假设。

更一般的，若线性假设$H\beta$包含有不可估函数，即$\mu(H')\not\subset\mu(X')$，不失一般性，把$H$剖分成$H=\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix}$，其中$H_1\beta$可估，$H_2\beta$不可估。考虑线性模型

$$Y=\theta+e，\theta\in\mu(X)，e\sim N(0,\sigma^2 I_n)$$

的如下两个假设检验问题：

$$H_0\ ：\ H\beta=0，$$

$$H_{01}\ ：\ H_1\beta=0。$$

从正交投影来看，两个假设相当于

$$H_0：\ \theta\in S=\{X\beta|H\beta=0,\beta\in R^p\}，$$

$$H_{01}\ ：\ \theta\in S_1=\{X\beta|H_1\beta=0,\beta\in R^p\}。$$

显然有$S\subset S_1$，另一方面$H_1\beta$可估，$H_2\beta$不可估，因此

$$\begin{aligned}\dim S_1&=rank\begin{pmatrix}X\\H_1\end{pmatrix}-rank(H_1),\\&=rank(X)-rank(H_1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dim S&=rank\begin{pmatrix}X\\H\end{pmatrix}-rank(H)\\&=rank\begin{pmatrix}X\\H_2\end{pmatrix}-rank\begin{pmatrix}H_1\\H_2\end{pmatrix},\\&=rank(X)-rank(H_1)\end{aligned}$$

故$S=S_1$。这表明假设$H_0:\theta\in S$与假设$H_{01}$：$\theta\in S_1$是一样的。因此对于不可估的假设是无法检验的，称为不可检验的假设(non-testable hypothesis)。

例 4.3.1：检验两样本是否同一线性模型

$$y_i=\beta_0^{(1)}+\beta_1^{(1)}x_{i1}+\cdots\beta_{p-1}^{(1)}x_{i,p-1}+e_i,i=1,\cdots,n_1,$$

$$y_i=\beta_0^{(2)}+\beta_1^{(2)}x_{i1}+\cdots\beta_{p-1}^{(2)}x_{i,p-1}+e_i,i=n_1+1,\cdots,n_1+n_2,$$

其中误差$i.i.d\sim N(0,\sigma^2)$，要检验两组数据是否来于同一模型，即检验$\beta_i^{(1)}=\beta_i^{(2)},0\le i\le p-1$。

首先写成矩阵形式，有两个线性模型$i=1,2$

$Y_i=X_i\beta_i+e_i$，$e_i\sim N_{n_i}(0,\sigma^2 I_{n_i})$，$rank(X_i)=p$

要检验 $H_0$：$\beta_1=\beta_2$。

将原问题写成一个线性模型：

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 & 0 \\ 0 & X_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \end{pmatrix}$$

要检验假设$H_0$：$\begin{pmatrix} I_p & -I_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = 0$。

在假设$H_0$下，$\beta_1 = \beta_2 = \beta$，模型为$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \beta + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \end{pmatrix}$，最小二乘估计

$$\hat{\beta}_H = (X_1'X_1 + X_2'X_2)^{-1}(X_1'Y_1 + X_2'Y_2)。$$

记$\hat{\beta}_i = (X_i'X_i)^{-1} X_i'Y_i, i = 1,2$，则检验的$F$统计量为$F = \dfrac{(ESS_H - ESS)/p}{ESS/(n_1 + n_2 - 2p)}$，其中

$$ESS_H = Y_1'Y_1 + Y_2'Y_2 - \hat{\beta}_H'(X_1'Y_1 + X_2'Y_2),$$

$$ESS = Y_1'Y_1 + Y_2'Y_2 - (\hat{\beta}_1'X_1'Y_1 + \hat{\beta}_2'X_2'Y_2)。$$

在假设$H_0$下，$F \sim F_{p, n_1+n_2-2p}$分布，给定水平$\alpha \in (0,1)$，若$F > F_{p, n_1+n_2-2p}(\alpha)$，则拒绝该假设。

4.4 置信椭球(confidence ellipsoid)

设线性模型$Y = X_{n\times p}\beta + e$，$e \sim N(0, \sigma^2 I_n)$，$rank(X) = r$，$\Phi = H_{m\times p}\beta = \begin{pmatrix} h_1'\beta \\ \vdots \\ h_m'\beta \end{pmatrix}$为$m$个独立的可估函数，即$rank(H) = m$，$\mu(H') = \mu(X')$。

令$\hat{\beta} = (X'X)^- X'Y$，则$\hat{\Phi} = H\hat{\beta}$为$\Phi$的BLUE，且$\hat{\Phi} \sim N_m(\Phi, \sigma^2 V)$，这里$V = H(X'X)^- H' > 0$。由推论 3.2.2

$$\frac{(\hat{\Phi} - \Phi)'V^{-1}(\hat{\Phi} - \Phi)}{\sigma^2} \sim \chi_m^2。$$

由定理 3.2.1，$\sigma^2$的估计$\hat{\sigma}^2 = \dfrac{\|Y - X\hat{\beta}\|^2}{n - r}$且与$\hat{\Phi}$独立，$\dfrac{(n-r)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-r}^2$，从而

$$\frac{(\hat{\Phi}-\Phi)'V^{-1}(\hat{\Phi}-\Phi)}{m\hat{\sigma}^2} \sim F_{m,n-r}。$$

因此对$\forall \alpha \in (0,1)$，

$$P\left(\frac{(\hat{\Phi}-\Phi)'V^{-1}(\hat{\Phi}-\Phi)}{m\hat{\sigma}^2} \le F_{m,n-r}(\alpha)\right) = 1-\alpha。$$

令

$$D = \left\{\Phi \middle| (\Phi-\hat{\Phi})'V^{-1}(\Phi-\hat{\Phi}) \le m\hat{\sigma}^2 F_{m,n-r}(\alpha)\right\},$$

是以$\hat{\Phi}$为中心的一个椭球，$P(\Phi \in D) = 1-\alpha$，$D$称为$\Phi$的置信系数为$1-\alpha$的置信椭球。

用$H\beta$，$H\hat{\beta}$，$H(X'X)^{-}H'$代替$\Phi,\hat{\Phi},V$，则置信椭球可写为

$$\left(H\beta-H\hat{\beta}\right)'\left[H(X'X)^{-}H'\right]^{-1}\left(H\beta-H\hat{\beta}\right) \le m\hat{\sigma}^2 F_{m,n-r}(\alpha)。$$

特别若$m=1$，由于$F_{1,n-r}$与$t^2{}_{n-r}$分布一致，令$t_{n-r}(\alpha/2)$为上$\alpha/2$分位点，则此时可估函数$h'\beta$的$1-\alpha$置信区间为：

$$h'\hat{\beta} \pm t_{n-r}(\alpha/2)\hat{\sigma}\sqrt{h'(X'X)^{-}h},$$

或$h'\hat{\beta} \pm t_{n-r}(\alpha/2)\hat{\sigma}_{h'\hat{\beta}}$，其中$\hat{\sigma}^2_{h'\hat{\beta}} = \hat{\sigma}^2 h'(X'X)^{-}h$为$Var(h'\beta)$的估计。

## 4.5 同时置信区间与 Bonferroni　$t$-区间

往往要对若干个可估函数同时给出区间估计。设有$m$个可估函数$\phi_1 = h_1'\beta,\cdots,\phi_m = h_m'\beta$，用上一节的方法可以对每个$\phi_i$作一个置信水平为$1-\alpha$的$t$-区间估计$\hat{\phi}_i \pm t_{n-r}(\alpha/2)\hat{\sigma}_{\hat{\phi}_i}$，$1 \le i \le m$。由不等式

$$P\left(\bigcap_{i=1}^{m} A_i\right) = 1-P\left(\bigcup_{i=1}^{m} \bar{A}_i\right) \ge 1-\sum_{i=1}^{m} P(\bar{A}_i), \quad (*)$$

若每个事件发生的概率$P(A_i) = 1-\alpha$，则所有事件同时发生的概率不是$1-\alpha$，而是只能保证$P\left(\bigcap_{i=1}^{m} A_i\right) \ge 1-m\alpha$。例如$\alpha = 0.05$，$m=10$，则只能保证$\ge 0.5$。一般来说虽然每个置信区间置信系数是$1-\alpha$，同时置信区间的置信系数比$1-\alpha$要低。若要确保 $m$ 个联合置信区间同时成立的概率达到名义上的$1-\alpha$，一个可供选择的办法是把每个置信区间的置信系数提高到$1-\dfrac{\alpha}{m}$。

上述作法当$m$不太大($m \le 5$)，效果还可以，但总的来说过于保守，特别当 $m$很大时，此时每个置信区间都太宽以致没有多大的实际意义。切合实际的折衷办法是增大$\alpha$。

由于不等式(*)称为 Bonferroni 不等式，基于用$\frac{\alpha}{m}$替换 $\alpha$的方法得到的同时置信区间 $h_i'\hat{\beta} \pm t_{n-r}(\alpha/2m)\hat{\sigma}_{h_i'\hat{\beta}}, i=1,\cdots,m$ 称为 Bonferroni t-区间。

4.6 最大模 $t$-区间

对 $m$个独立可估函数$h_1'\beta,\cdots,h_m'\beta$作同时区间估计，令 $H_{m\times p}=\begin{pmatrix} h_1' \\ \vdots \\ h_m' \end{pmatrix}$， $rank(H)=m$，$V=(v_{ij})_{m\times m}=H(X'X)^{-}H'$，则$H\hat{\beta}\sim N_m(H\beta,\sigma^2 V)$，$H\hat{\beta}$ 与 $\hat{\sigma}^2$ 独立且 $\frac{(n-r)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2}\sim\chi^2_{n-r}$ 分布。令 $x_i=\frac{h_i'\hat{\beta}-h_i'\beta}{\sqrt{v_{ii}}}$，

$X=(x_1,\cdots,x_m)'$， 则 $X\sim N_m(0,\sigma^2 R)$， 其中 $R=(r_{ij})_{m\times m}$，$r_{ij}=\frac{v_{ij}}{\sqrt{v_{ii}v_{jj}}}$。因此令$t=(t_1,\cdots,t_m)'$，$t_i=\frac{h_i'\hat{\beta}-h_i'\beta}{\hat{\sigma}\sqrt{v_{ii}}}$， 则

$$t\sim t_m(0,R,n-r)(\text{多元 } t\text{-分布})。$$

令$t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r)$使得

$$P\left(-t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r)\le t_i\le t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r), 1\le i\le m\right)=1-\alpha$$

即 $P\left(\max_{1\le i\le m}|t_i|\le t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r)\right)=1-\alpha$。

这样 $m$个区间

$$h_i'\hat{\beta}\pm\hat{\sigma}\sqrt{v_{ii}}t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r), i=1,\cdots,m$$

为置信系数$1-\alpha$的同时置信区间。由于$t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r)$是由 $m$个 $t$分布变量取最大模分布确定的，故上同时置信区间称为最大模 t 区间(maximum modulus $t$-intervals)。

计算上区间的关键是求出$t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r)$，一般是比较困难。Sidak(1968)证明了

$$t_m^{\alpha/2}(0,R,n-r)\le t_m^{\alpha/2}(0,I_m,n-r),$$

因此

$$P\left(h_i'\beta\in h_i'\hat{\beta}\pm\hat{\sigma}\sqrt{v_{ii}}\,t_m^{\alpha/2}(0,I_m,n-r),1\le i\le m\right)\ge 1-\alpha,$$

而$t_m^{\alpha/2}(0,I_m,n-r)$是易求出的。

## 4.7 Scheffe 区间和置信带

引理 4.7.1：设$A_{n\times n}>0$，则$\sup\limits_{b\neq 0}\dfrac{(a'b)^2}{b'Ab}=a'A^{-1}a$。

定理 4.7.1：设线性模型$Y=X\beta+e$，$e\sim N(0,\sigma^2 I_n)$，$rank(H_{m\times p})=m$，$\mu(H')\subset\mu(X')$，则对任意可估$l'\beta$，$l\in\mu(H')$，其置信系数为$1-\alpha$的同时置信区间为

$$l'\hat{\beta}\pm\left[mF_{m,n-r}(\alpha)\right]^{1/2}\hat{\sigma}\left[l'(X'X)^{-}l\right]^{1/2}。$$

上述同时置信区间是 Scheffe(1953)提出来的，称为 Scheffe 区间。注意 Scheffe 区间不是有限多个可估函数的同时置信区间，它是所有$l'\beta$，$l\in\mu(H')$的同时置信区间。对有限可估函数同时置信区间，Scheffe 方法不一定最好，其长度可能会偏长，但 Scheffe 方法可以用于所有线性模型而无需对设计矩阵做任何限制。

当$m=r$即$\mu(H')=\mu(X')$时，可以得到所有可估函数$l'\beta$的同时$1-\alpha$置信区间。

若$rank(X_{n\times p})=p$，此时任何线性函数$l'\beta$都是可估的，此时

$$P\left(l'\beta\in l'\hat{\beta}\pm\left[pF_{p,n-p}(\alpha)\right]^{1/2}\hat{\sigma}\left[l'(X'X)^{-}l\right]^{1/2},\forall l\in R^p\right)=1-\alpha。$$

当 $l$变化时，区间

$$l'\hat{\beta}\pm\left[pF_{p,n-p}(\alpha)\right]^{1/2}\hat{\sigma}\left[l'(X'X)^{-}l\right]^{1/2}$$

也变化，形成一个区域，称为置信带(confidence band)，其宽度为$2\left[pF_{p,n-p}(\alpha)\right]^{1/2}\hat{\sigma}\left[l'(X'X)^{-}l\right]^{1/2}$。

例 4.7.1：设简单线性模型

$y_i=\beta_0+\beta_1x_i+e_i$，$i=1,\cdots,n$，$e_i\sim N(0,\sigma^2)$独立同分布。$\hat{\beta}=\begin{pmatrix}\hat{\beta}_0\\ \hat{\beta}_1\end{pmatrix}$，其中

$\hat{\beta}_1=\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})/\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2$，

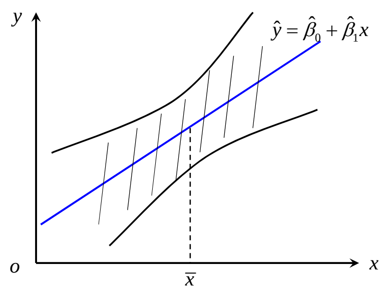
$\hat{\beta}_0=\bar{y}-\hat{\beta}_1\bar{x}$，　$\bar{x}=\sum_{i=1}^{n}x_i/n$，　$\bar{y}=\sum_{i=1}^{n}y_i/n$，

$\hat{\sigma}^2=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{\beta}_0-\hat{\beta}_1x_i)^2/(n-2)$。

对任线性函数$\beta_0+\beta_1x$，其$1-\alpha$置信带为

$(\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1x)\pm\left[2F_{2,n-2}(\alpha)\right]^{1/2}\hat{\sigma}\sqrt{\frac{1}{n}+\frac{(x-\bar{x})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}}$。

置信带关于经验直线$\hat{y}=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1x$对称，当$x=\bar{x}$时带宽最小。




## 4.8 预测问题

假定响应变量 $y$与协变量$x_1,\cdots,x_p$存在线性关系$y=\beta_1x_1+\cdots+\beta_px_p+e$，设有 $n$次观测，则未知参数$\beta_1,\cdots,\beta_p$可以由前面的结果来作出估计，设估计为$\hat{\beta}_1,\cdots,\hat{\beta}_p$，这样得到经验模型$\hat{y}=\hat{\beta}_1x_1+\cdots+\hat{\beta}_px_p$，该经验模型近似的描述了响应变量 $y$与协变量$x_1,\cdots,x_p$之间的关系，给定协变量的值，可以对响应变量作出预测。

点预测

考虑线性模型$y_i = x_i'\beta + e_i$，$i = 1,\cdots,n$，写成矩阵形式：

$Y = X\beta + e$，$Ee = 0$，$Cov(e) = \sigma^2\Sigma$，$rank(X_{n\times p}) = r$，$\Sigma > 0$(已知)。现有$m$个点$x_i = (x_{i1},\cdots,x_{ip})'$，$i = n+1,\cdots,n+m$，感兴趣的问题是由此预测响应变量$y$的$m$个值$y_{n+1},\cdots,y_{n+m}$。

令$X_0 = \begin{pmatrix} x'_{n+1} \\ \vdots \\ x'_{n+m} \end{pmatrix}$，$Y_0 = \begin{pmatrix} y_{n+1} \\ \vdots \\ y_{n+m} \end{pmatrix}$，$e_0 = \begin{pmatrix} e_{n+1} \\ \vdots \\ e_{n+m} \end{pmatrix}$，则$Y_0 = X_0\beta + e_0$，$Ee_0 = 0$，$Cov(e_0) = \sigma^2\Sigma_0$。

假设$\mu(X_0') \subset \mu(X')$。

首先考虑被预测量 $Y_0$与历史数据 $Y$不相关，此时$Cov(e_0, e) = 0$，为预测 $Y_0$，一个直观的方法就是用$EY_0 = X_0\beta$的估计作为预测。即用

$$Y_0^* = X_0\beta^* = X_0(X'\Sigma^{-1}X)^- X'\Sigma^{-1}Y$$

来预测$Y_0$，这里$\beta^*$为广义最小二乘估计。由于$\mu(X_0') \subset \mu(X')$，所以$Y_0^*$与广义逆的选取无关。预测的偏差$Z = Y_0^* - Y_0$，则$EZ = 0$，即预测$Y_0^*$为$Y_0$的一个无偏估计。偏差的协方差阵$Cov(Z) = \sigma^2\left[\Sigma_0 + X_0(X'\Sigma^{-1}X)^- X_0'\right]$。

以上传统预测方法假定被预测量 $Y_0$与历史数据 $Y$不相关，但在一些情形 $Y_0$与 $Y$相关。

设$Y_0$与 $Y$相关程度$Cov(e_0, e) = \sigma^2 V_{m\times n}$( $V$已知)，设$Y_0^* = C_{m\times n}Y$为 $Y_0$的一个线性预测，评价预测 $Y_0^*$好坏目前常用的度量是广义预测均方误差(generalized prediction mean squared error，简写 PMSE)。给定$A > 0$，$PMSE(Y_0^*) = E(Y_0^* - Y_0)'A(Y_0^* - Y_0)$。若线性预测是无偏的且广义预测均方误差最小，则称该线性预测是最优线性无偏预测(best linear unbiased predictor，简写 BLUP)。

定理 4.8.1：对于本节线性模型，若 $Cov(e_0,e)=\sigma^2 V_{m\times n}$（$V$已知)且$X_0\beta$可估，则

$$Y_0^*=X_0\beta^*+V\Sigma^{-1}(Y-X\beta^*)$$

为$Y_0$的最优线性无偏预测。特别若 $V=0$，则$Y_0$的最优线性无偏预测为$Y_0^*=X_0\beta^*$。

区间预测

以下假设误差为正态分布，即 $e\sim N_n(0,\sigma^2\Sigma)$，$e_0\sim N_n(0,\sigma^2\Sigma_0)$，为简单起见，只考虑 $Y$与 $Y_0$不相关情形，即 $V=0$。在正态误差假设下，偏差$Z=Y_0^*-Y_0$服从正态分布 $N\left(0,\sigma^2\left[\Sigma_0+X_0(X'\Sigma^{-1}X)^- X_0'\right]\right)$。设 $\mu(X_0')\subset\mu(X')$，$rank(X_{n\times p})=r$，$\sigma^{*2}=\dfrac{(Y-X\beta^*)'\Sigma^{-1}(Y-X\beta^*)}{n-r}$，$\Sigma_0=\left(\sigma_{ij}^{(0)}\right)_{n+1\le i,j\le n+m}$，

则类似 4.5 节，对每个$i=n+1,\cdots,n+m$，$y_i$的$1-\alpha$预测区间为

$$x_i'\beta^*\pm t_{n-r}(\alpha/2)\sigma^*\left[\sigma_{ii}^{(0)}+x_i'(X'\Sigma^{-1}X)^- x_i\right]^{1/2},$$

利用 Bonferroni 方法，$y_{n+1},\cdots,y_{n+m}$的一个置信系数至少$1-\alpha$同时预测区间为

$$x_i'\beta^*\pm t_{n-r}(\alpha/2m)\sigma^*\left[\sigma_{ii}^{(0)}+x_i'(X'\Sigma^{-1}X)^- x_i\right]^{1/2},$$

$n+1\le i\le n+m$。

也可以由 Scheffe 方法得到$y_{n+1},\cdots,y_{n+m}$的一个置信系数至少$1-\alpha$的同时预测区间：

$$x_i'\beta^*\pm\left[mF_{m,n-r}(\alpha)\right]^{1/2}\sigma^*\left[\sigma_{ii}^{(0)}+x_i'(X'\Sigma^{-1}X)^- x_i\right]^{1/2},$$

$n+1\le i\le n+m$。

例 4.8.1：简单线性回归模型 $y_i=\beta_0+\beta_1 x_i+e_i$，$e_i\sim N(0,\sigma^2)$独立同分布。现感兴趣的是同时预测$y_{n+1},\cdots,y_{n+m}$(设相互独立)。对每个$i=n+1,\cdots,n+m$，$y_i$的点预测为：$\hat{y}_i=\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1 x_i$。

$y_{n+1},\cdots,y_{n+m}$的一个置信系数至少$1-\alpha$同时预测 Bonferroni 区间为：

$$(\hat\beta_0+\hat\beta_1 x_i)\pm t_{n-r}\left(\frac{\alpha}{2m}\right)\hat\sigma\left[1+\frac{1}{n}+\frac{(x_i-\bar x)^2}{\sum_{k=1}^{n}(x_k-\bar x)^2}\right]^{1/2}$$

，$n+1\le i\le n+m$。

$y_{n+1},\cdots,y_{n+m}$的一个置信系数至少$1-\alpha$同时预测 Scheffe 区间为：

$$(\hat\beta_0+\hat\beta_1 x_i)\pm\left[mF_{m,n-r}(\alpha)\right]^{1/2}\hat\sigma\left[1+\frac{1}{n}+\frac{(x_i-\bar x)^2}{\sum_{k=1}^{n}(x_k-\bar x)^2}\right]^{1/2}$$

，$n+1\le i\le n+m$。