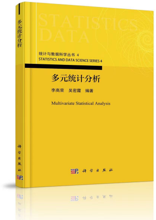
第5章
多元正态分布的参数估计

李高荣

北京师范大学统计学院

E-mail: *ligaorong@bnu.edu.cn*



微信公众号：BNUlgr

- 扫二维码获取在线课件和相关教学电子资源
- 请遵守电子资源使用协议

- 设$\mathbf{X} = (\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n)'$ 为p元正态总体$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的样本容量为$n$的简单随机样本矩阵，其中$\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^p$，$\boldsymbol{\Sigma} > 0$，$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'$和$n > p$。

样本均值向量

设$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为一组随机样本，则称

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i = \frac{1}{n}\mathbf{X}'\mathbf{1}_n = (\bar{x}_1, \cdots, \bar{x}_p)'$$

为样本均值向量，其中$\bar{x}_k = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ik}, k = 1, \cdots, p$。

样本离差阵

设$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为一组随机样本，则称

$$\begin{aligned}\mathbf{V} &= \sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})' = \mathbf{X}'\mathbf{X} - n\bar{\boldsymbol{x}}\,\bar{\boldsymbol{x}}' \\ &= \mathbf{X}'\left[\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n'\right]\mathbf{X}\end{aligned}$$

为样本离差阵，其中$\mathbf{X}$为$n \times p$的样本矩阵。

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})' &= \sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})' + n(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})' \\ &= \mathbf{V} + n(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})'\end{aligned}$$

样本协方差阵

设$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为一组随机样本，则称

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1}\mathbf{V} = (s_{ij})_{p\times p}$$

为样本协方差阵。其中$s_{kk} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{ik} - \bar{x}_k)^2(k = 1, \cdots, p)$称为第$k$个样本变量$\boldsymbol{x}_k$的样本方差；$\sqrt{s_{kk}}$称为变量$\boldsymbol{x}_k$的样本标准差。

作用：

- 估计多元正态总体分布的协方差阵
- 对有关总体分布均值向量和协方差阵的假设进行检验

样本相关阵

设$\mathbf{S} = (s_{ij})_{p\times p}$为样本协方差阵，则称$\widetilde{\mathbf{R}} = (r_{ij})_{p\times p}$为样本相关阵，其中

$$r_{ij} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}}\sqrt{s_{jj}}}, \quad i,j = 1,\cdots,p.$$

若记$\widetilde{\mathbf{D}}^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{s_{11}},\cdots,\sqrt{s_{pp}})$为样本标准差对角阵，则

$$\widetilde{\mathbf{R}} = \widetilde{\mathbf{D}}^{-1/2}\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{D}}^{-1/2}, \qquad \mathbf{S} = \widetilde{\mathbf{D}}^{1/2}\widetilde{\mathbf{R}}\widetilde{\mathbf{D}}^{1/2}.$$

例1：设从某小学某班随机抽取10个同学了解该班学生身高和体重的情况，每个同学的身高为X_1(单位：厘米)，体重为X_2(单位：公斤)，具体数值如下：

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 142.0 & 32.7 \\ 143.0 & 33.5 \\ 143.0 & 33.0 \\ 145.0 & 34.2 \\ 148.0 & 37.4 \\ 149.0 & 43.1 \\ 138.0 & 31.5 \\ 144.0 & 43.2 \\ 150.0 & 37.5 \\ 153.0 & 51.3 \end{pmatrix}.$$

多元正态分布样本统计量

```
 X1 = c(142.0, 143.0, 143.0, 145.0, 148.0,
          149.0, 138.0, 144.0, 150.0, 153.0)
 X2 = c(32.7,  33.5,  33.0,  34.2,  37.4,
          43.1,  31.5,  43.2,  37.5,  51.3)
 X = cbind(X1, X2)
> apply(X, 2, mean)
    X1      X2
145.50  37.74
> cov(X)
         X1       X2
X1 19.83333 22.11111
X2 22.11111 39.98933
> cor(X)
          X1        X2
X1 1.0000000 0.7851283
X2 0.7851283 1.0000000
```

定理5.1.1

设$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为来自$p$元正态总体$N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的一组随机样本，$\bar{\boldsymbol{x}}$为样本均值向量，$\mathbf{V}$为样本离差阵，则

1. $\bar{\boldsymbol{x}} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}/n)$；
2. $\mathbf{V} \sim W_p(n-1, \boldsymbol{\Sigma})$，其中$n > p$，并且$W_p(n-1, \boldsymbol{\Sigma})$是自由度是$n-1$的Wishart分布；
3. $\bar{\boldsymbol{x}}$与$\mathbf{V}$相互独立。
4. $\Pr(\mathbf{V} > 0) = 1$的充要条件是$n > p$。

证明： 设$\boldsymbol{\Gamma}$是第1个行向量为$(1/\sqrt{n},\cdots,1/\sqrt{n})$ 的n阶正交矩阵，具有如下形式：

$$\boldsymbol{\Gamma}=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{n}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \gamma_{21} & \cdots & \gamma_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ \gamma_{n1} & \cdots & \gamma_{nn} \end{pmatrix}=(\gamma_{ij})_{n\times n}.$$

令

$$\mathbf{Y}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_1' \\ \vdots \\ \boldsymbol{y}_n' \end{pmatrix}=\boldsymbol{\Gamma}\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1' \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_n' \end{pmatrix}=\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{X},$$

证明(续)： 则有

$$\boldsymbol{y}_i = \sum_{k=1}^{n} \gamma_{ik}\boldsymbol{x}_k, \qquad (i = 1, \cdots, n)$$

为p维随机向量。

因为$\boldsymbol{y}_i$是p维正态随机向量$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$的线性组合，则$\boldsymbol{y}_i$也是$p$维正态随机向量。由$\boldsymbol{\Gamma}$的定义，则有

$$E(\boldsymbol{y}_i) = \sum_{k=1}^{n} \gamma_{ik} E(\boldsymbol{x}_k) = \begin{cases} \sqrt{n}\boldsymbol{\mu}, & \text{当}\, i = 1\text{时}, \\ \boldsymbol{0}, & \text{当}\, i \neq 1\text{时}; \end{cases}$$

$$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{y}_i, \boldsymbol{y}_j) = \sum_{k=1}^{n} \gamma_{ik}\gamma_{jk}\boldsymbol{\Sigma} = \begin{cases} \boldsymbol{\Sigma}, & \text{当}\, i = j\text{时}, \\ \boldsymbol{0}, & \text{当}\, i \neq j\text{时}. \end{cases}$$

(1) 因为$\boldsymbol{y}_1 = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{i=1}^n \boldsymbol{x}_i = \sqrt{n}\bar{\boldsymbol{x}} \sim N_p(\sqrt{n}\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$。故有：

$$\bar{\boldsymbol{x}} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma/n).$$

(2) 由于$\boldsymbol{y}_1 = \sqrt{n}\bar{\boldsymbol{x}}$, 则

$$\sum_{i=1}^n \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i' = \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})' + n\bar{\boldsymbol{x}}\,\bar{\boldsymbol{x}}' = \mathbf{V} + \boldsymbol{y}_1\boldsymbol{y}_1'.$$

因为$\mathbf{Y}'\mathbf{Y} = (\mathbf{X}'\mathbf{\Gamma}')(\mathbf{\Gamma}\mathbf{X}) = \mathbf{X}'\mathbf{X}$，则

$$\sum_{i=1}^n \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i' = \sum_{i=1}^n \boldsymbol{y}_i\boldsymbol{y}_i'.$$

因此，有：

$$\begin{aligned}\mathbf{V} &= \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i' - \boldsymbol{y}_1 \boldsymbol{y}_1' = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{y}_i \boldsymbol{y}_i' - \boldsymbol{y}_1 \boldsymbol{y}_1' \\ &= \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{y}_i \boldsymbol{y}_i' \sim W_p(n-1, \Sigma).\end{aligned}$$

(3) 因为$\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{y}_1/\sqrt{n}$是$\boldsymbol{y}_1$的函数，而$\mathbf{V} = \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{y}_i \boldsymbol{y}_i'$ 是$\boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_n$的函数，且$\boldsymbol{y}_1$ 与$\boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_n$ 相互独立，故$\bar{\boldsymbol{x}}$ 与$\mathbf{V}$ 相互独立。

(4) 令$\mathbf{Y}_* = (\boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_n)'$。由$\mathbf{V} \overset{d}{=} \mathbf{Y}_*'\mathbf{Y}_*$，知：$\text{rank}(\mathbf{V}) = \text{rank}(\mathbf{Y}_*'\mathbf{Y}_*) = \text{rank}(\mathbf{Y}_*)$. 而$\mathbf{Y}_*$为$(n-1)\times p$ 随机阵，各行向量独立同分布。故，$\Pr(\mathbf{V} > 0) = \Pr(\text{rank}(\mathbf{V}) = p) = \Pr(\text{rank}(\mathbf{Y}_*) = p) = 1 \Leftrightarrow n-1 \geq p$，即$n > p$。

- 设$\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$是来自多元正态总体$\boldsymbol{X}\sim N_p(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$的随机样本，其中$n>p,\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{R}^p,\boldsymbol{\Sigma}>0$
- 样本$\boldsymbol{x}_i(i=1,\cdots,n)$的似然函数记为

$$\begin{aligned}
L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) &= \prod_{i=1}^{n}\frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})\right]\\
&= \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})\right]\\
&= \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\left\{\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{\mu})'\right\}\right)\right]\\
&= \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\{\mathbf{V}+n(\bar{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{\mu})'\}\right)\right].
\end{aligned}$$

MLE

- 首先给定$\boldsymbol{\Sigma} > 0$时，求$\boldsymbol{\mu}$的极大似然估计，即求对数似然函数$\ln L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的极大值点
- 给定$\boldsymbol{\Sigma} > 0$，关于$\boldsymbol{\mu}$的对数似然函数为：

$$
\begin{aligned}
\ln L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) &= -\frac{np}{2}\ln 2\pi - \frac{n}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\Big(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\{\mathbf{V} + n(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})'\}\Big) \\
&= -\frac{np}{2}\ln 2\pi - \frac{n}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{V}) - \frac{n}{2}\Big[(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\mu})\Big] \\
&\le -\frac{np}{2}\ln 2\pi - \frac{n}{2}\ln|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{V}).
\end{aligned}
$$

- 不等式中等号成立当且仅当$\boldsymbol{\mu} = \bar{\boldsymbol{x}}$。因此，总体均值向量$\boldsymbol{\mu}$的MLE为$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \bar{\boldsymbol{x}}$。

- 由定理5.1.1的结论(1)：$\bar{\boldsymbol{x}} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}/n)$，可知$\bar{\boldsymbol{x}}$是$\boldsymbol{\mu}$的无偏估计。
- 将$\boldsymbol{\mu}$用它的MLE替换，得到$\boldsymbol{\Sigma}$的似然函数为：

$$L(\bar{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{n/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{V})\right].$$

- 利用矩阵的性质：存在可逆对称阵$\mathbf{C}$，使得$\mathbf{B} = \mathbf{C}\mathbf{C}$。记$\widetilde{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}^{-1}$，则$|\boldsymbol{\Sigma}| = |\mathbf{B}||\widetilde{\boldsymbol{\Sigma}}|$。
- 令$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}'$，其中$\mathbf{U}$是正交矩阵，$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_p)$是对角矩阵。

- 利用$\mathrm{tr}(\mathbf{AB})=\mathrm{tr}(\mathbf{BA})$，可知：

$$|\mathbf{V}|^{n/2}=|\mathbf{\Sigma}|^{n/2}\prod_{k=1}^{p}\lambda_k^{n/2},$$

$$\mathrm{tr}(\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{V})=\mathrm{tr}(\mathbf{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{V})=\sum_{k=1}^{p}\lambda_k.$$

- 则似然函数可简化为：

$$L(\bar{\boldsymbol{x}},\mathbf{\Sigma})=\frac{1}{(2\pi)^{np/2}|\mathbf{V}|^{n/2}}\prod_{k=1}^{p}\left[\lambda_k^{n/2}\exp\left\{-\frac{\lambda_k}{2}\right\}\right].$$

MLE

- 由于$f(x) = x^{n/2}\exp\{-x/2\}$在$x = n$处取最大值，可知上式在$\lambda_1 = \cdots = \lambda_p = n$时取最大值。
- 因此，$\mathbf{\Sigma}$的极大似然估计$\widehat{\mathbf{\Sigma}}$满足条件：

$$\widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1/2}\mathbf{V}\widehat{\mathbf{\Sigma}}^{-1/2} = n\mathbf{I}_p.$$

- 则，$\mathbf{\Sigma}$的MLE为：$\widehat{\mathbf{\Sigma}} = \mathbf{V}/n$。
- 可见，似然函数的最大值为：

$$L(\overline{\boldsymbol{x}}, \widehat{\mathbf{\Sigma}}) = \frac{1}{(2\pi)^{np/2}} e^{-np/2} \frac{1}{|\widehat{\mathbf{\Sigma}}|^{n/2}}.$$

在统计学中，评价参数的点估计通常有一些准则：

1. 无偏性
2. 充分性
3. 相合性
4. 完备性
5. 有效性
6. minimax性

无偏性

令$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$是来自总体$\boldsymbol{X} \sim f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})$的一组独立随机样本，其中$\boldsymbol{\theta}$是未知的参数向量。假设$\widehat{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n)$ 是$\boldsymbol{\theta}$的一个估计，并且它是一个统计量。对于不同的样本$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$，估计$\widehat{\boldsymbol{\theta}}$取不同的值，如果$\widehat{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n)$的均值等于未知参数向量$\boldsymbol{\theta}$，即

$$E[\widehat{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n)] = \boldsymbol{\theta}, \quad \text{对一切可能的}\boldsymbol{\theta}\text{成立},$$

则称$\widehat{\boldsymbol{\theta}}$为$\boldsymbol{\theta}$的无偏估计。

- 根据定理5.1.1的结论(2): $\mathbf{V} \sim W_p(n-1, \boldsymbol{\Sigma})$，则$E(\mathbf{V}) = (n-1)\boldsymbol{\Sigma}$，所以极大似然估计$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{V}/n$并不是$\boldsymbol{\Sigma}$的无偏估计。
- 记样本协方差阵$\mathbf{S} = \mathbf{V}/(n-1)$，则样本协方差阵$\mathbf{S}$才是$\boldsymbol{\Sigma}$的无偏估计。

定理5.2.1

设$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为来自$p$元正态总体$N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的一组随机样本，$n > p$，$\bar{\boldsymbol{x}}$为样本均值向量，$\mathbf{V}$为样本离差阵，$\mathbf{S}$为样本协方差阵，则$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{\Sigma}$的MLE分别为$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \bar{\boldsymbol{x}}$和$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{V}/n$。进一步，$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{\Sigma}$的无偏估计分别为$\bar{\boldsymbol{x}}$和$\mathbf{S}$。

- 充分统计量：就是包含了样本中对兴趣待估参数向量全部信息的统计量。
- 如何判断一个统计量是充分统计量？

Neyman-Fisher因子判别法则

令$\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n$是来自总体$\boldsymbol{X}\sim f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})$的一组独立随机样本，其中$\boldsymbol{\theta}$是未知的兴趣待估参数向量。设$t\equiv t(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n)$为一统计量，若样本的分布密度函数可以分解为：

$$\prod_{i=1}^{n} f(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\theta}) = g(t,\boldsymbol{\theta})h(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n),$$

其中$h(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_n)$与$\boldsymbol{\theta}$无关；$g(t,\boldsymbol{\theta})$可能与参数向量$\boldsymbol{\theta}$有关，但与样本有关是通过统计量$t$发生关系，则称$t$是$\boldsymbol{\theta}$的充分统计量。

定理5.2.2

设$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$，并且$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为来自$p$元正态总体$N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$的一组随机样本，$n > p$, $\bar{\boldsymbol{x}}$为样本均值向量，$\mathbf{S}$为样本协方差阵，则

1. 当Σ已知时，$\bar{\boldsymbol{x}}$是$\boldsymbol{\mu}$的充分统计量；
2. 当$\boldsymbol{\mu}$已知时，$\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})'$是$\Sigma$的充分统计量；
3. 当$\boldsymbol{\mu}$和Σ未知时，$(\bar{\boldsymbol{x}}, \mathbf{S})$为$(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$的充分统计量。

几点说明：

- 根据样本$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$的联合密度函数和Neyman-Fisher 因子判别法则，很容易完成定理5.2.2的证明；
- 定理5.2.2说明，$(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$一切“好的"估计都是$(\bar{\boldsymbol{x}}, \mathbf{S})$ 的函数；
- 对多元正态总体而言，充分统计量的重要性体现在关于$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{\Sigma}$的所有信息包含在$\bar{\boldsymbol{x}}$和$\mathbf{S}$中；
- 对于非多元正态总体的情形，一般是不正确的，除了$\bar{\boldsymbol{x}}$和$\mathbf{S}$的信息外，还有其他有用的样本信息。

相合性

令$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$是来自总体$\boldsymbol{X} \sim f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})$的一组独立随机样本，其中$\boldsymbol{\theta}$是未知的兴趣待估参数向量，$\boldsymbol{\theta}$的变化范围为参数空间$\Theta$，$g(\boldsymbol{\theta})$是$\boldsymbol{\theta}$的函数。设$T_n \equiv T_n(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n)$为样本$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$的统计量。如果对任给的$\varepsilon > 0$，有

$$\lim_{n \to \infty} \Pr\{|T_n - g(\boldsymbol{\theta})| > \varepsilon\} = 0,$$

则称T_n是$g(\boldsymbol{\theta})$的弱相合估计，记为$T_n \xrightarrow{P} g(\boldsymbol{\theta})$。如果

$$\Pr\left\{\lim_{n \to \infty} T_n = g(\boldsymbol{\theta})\right\} = 1,$$

则称T_n是$g(\boldsymbol{\theta})$的强相合估计，记为$T_n \xrightarrow{a.s.} g(\boldsymbol{\theta})$。

- 注：$T_n \xrightarrow{a.s.} g(\boldsymbol{\theta}) \Rightarrow T_n \xrightarrow{P} g(\boldsymbol{\theta})$

定理5.2.3

在定理5.2.1的假设及记号下，$\bar{\boldsymbol{x}}$和$\mathbf{V}/n$分别为$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{\Sigma}$的强(弱)相合估计。

证明： 由于$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为来自$p$元正态总体$N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的一组随机样本，$n > p$,$\overline{\boldsymbol{x}}$为样本均值向量。从而由Kolmogorov 强大数律(若$\{X_i\}$为相互独立同分布的随机变量, 则

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \xrightarrow{a.s.} c \Longleftrightarrow E|X_1| < \infty, \quad c = EX_1).$$

显然$\overline{\boldsymbol{x}}$为$\boldsymbol{\mu}$的强相合估计。

由于$\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计为$\frac{1}{n}\mathbf{V}$，记

$$\mathbf{V}/n = (v_{ij}/n)_{1 \le i,j \le p}$$

且

$$\frac{1}{n}v_{ij} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(x_{ki}-\bar{x}_i\right)\left(x_{kj}-\bar{x}_j\right)$$
$$= \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_{ki}x_{kj} - \left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_{ki}\right)\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_{kj}\right).$$

显然 $\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_{ki} \xrightarrow{a.s.} \mu_i$，$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_{kj} \xrightarrow{a.s.} \mu_j$， 而

$$E\left(x_{ki}x_{kj}\right) = E\left(x_{ki}-\mu_i\right)\left(x_{kj}-\mu_j\right) + \mu_i\mu_j = \sigma_{ij} + \mu_i\mu_j.$$

由Cauchy-Schwarz不等式，则有

$$E\left|x_{ki}x_{kj}\right| \leq \left[Ex_{ki}^2 Ex_{kj}^2\right]^{1/2} = \left[\left(\sigma_{ii}+\mu_i^2\right)\left(\sigma_{jj}+\mu_j^2\right)\right]^{1/2} < \infty.$$

因此由Kolmogorov 强大数律有

$$\frac{1}{n}v_{ij} \xrightarrow{a.s.} \sigma_{ij}.$$

综合上面的结果，可证得$\mathbf{V}/n$为$\mathbf{\Sigma}$的强相合估计。

定理5.2.4

假设$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$是来自$p$元正态分布$N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的i.i.d.随机样本，记$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \bar{\boldsymbol{x}})'$，则

$$\mathbf{B}_n = \frac{1}{\sqrt{n}}(\mathbf{V} - n\boldsymbol{\Sigma})$$

收敛于一个正态随机矩阵$\mathbf{B} = (b_{ij})$，其元素均值为0，协方差为

$$E(b_{ij}b_{kl}) = \sigma_{ik}\sigma_{jl} + \sigma_{il}\sigma_{jk}.$$

定理5.2.4的证明留为作业，课下完成。

- 完备统计量的理解：
- 不管参数θ怎么变化，统计量T的任何一种构造(比如函数$g(T)$)，都不可能是0 的无偏估计，即无法得到

$$E_{\theta}(g(T)) = 0.$$

除非$g(T)$本身就是0。

- 完备统计量和充分统计量一样，也是为寻求参数估计的优良统计量起重要的作用。
- 考虑参数统计模型$(\mathcal{X},\mathcal{B},\mathcal{F})$，其中
  1. $\mathcal{X}$为样本空间，为样本$\boldsymbol{X}$的一切可能取值；
  2. $\mathcal{B}$是$\mathcal{X}$的某些子集构成的σ域，并称$(\mathcal{X},\mathcal{B})$为可测空间；
  3. $\mathcal{F}=\{F_{\boldsymbol{\theta}}:\boldsymbol{\theta}\in\Theta\}$为关于参数向量$\boldsymbol{\theta}$的分布族。
- 设$\phi(\boldsymbol{x})$是定义在$\mathcal{X}$上的$\mathcal{B}$可测函数
- 则$\phi(\boldsymbol{X})$的期望为：

$$E_{\boldsymbol{\theta}}[\phi(\boldsymbol{X})]=\int_{\mathcal{X}}\phi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}F_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{\theta}\in\Theta,$$

其中$E_{\boldsymbol{\theta}}$是强调期望是在参数为$\boldsymbol{\theta}$的分布下进行的。

完备性

- 希望$E_\theta[\phi(\boldsymbol{X})]$对每一个固定的$\boldsymbol{\theta}$都有唯一确定的值。
- 这时考虑下面的命题成立：

$$\phi_1(\boldsymbol{x}) = \phi_2(\boldsymbol{x}),\ \ a.s.\ F_\theta \Leftrightarrow E_\theta[\phi_1(\boldsymbol{X})] = E_\theta[\phi_2(\boldsymbol{X})].$$

- 必要性“$\Rightarrow$"是显然的;
- 充分性“$\Leftarrow$"：如果命题

$$E_\theta[\phi(\boldsymbol{X})] = 0 \Rightarrow \phi(\boldsymbol{x}) = 0, \quad a.s.\ \ F_\theta$$

  成立，就可证明上面的充分性。
- 因为$E_\theta[\phi_1(\boldsymbol{X})] = E_\theta[\phi_2(\boldsymbol{X})]$，则$E_\theta[\phi_1(\boldsymbol{X}) - \phi_2(\boldsymbol{X})] = 0$
- 故可利用上面的命题，可证得：

$$\phi_1(\boldsymbol{x}) = \phi_2(\boldsymbol{x}),\ \ a.s.\ F_\theta.$$

完备性

设T是一个连续的随机变量，其密度函数为$f_T(t,\boldsymbol{\theta}),\boldsymbol{\theta}\in\Theta,\Theta$为参数$\boldsymbol{\theta}$变化的范围。分布密度族$\{f_T(t,\boldsymbol{\theta}):\boldsymbol{\theta}\in\Theta\}$称为完备的，如果对任意的实数函数$g(T)$，当

$$E_{\boldsymbol{\theta}}[g(T)]=\int g(t)f_T(t,\boldsymbol{\theta})\mathrm{d}t=0$$

对每个$\boldsymbol{\theta}\in\Theta$成立时，能推出$g(T)$几乎处处为0，或$\Pr_{\boldsymbol{\theta}}(g(T)=0)=1$对任何$\boldsymbol{\theta}\in\Theta$。如果一个充分统计量的分布密度族是完备的，则称它是完备充分统计量。

注：定理5.2.2证明了$(\bar{\boldsymbol{x}},\mathbf{S})$是$(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$的充分统计量，同样也可以证明它们是完备的，详细的证明可见Anderson (2003)。因此称$(\bar{\boldsymbol{x}},\mathbf{S})$是$(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma})$的完备充分统计量。

有效性

令$X_1, \cdots, X_n$是来自总体$X \sim f(x, \boldsymbol{\theta})$的一组独立随机样本，其中$\boldsymbol{\theta}$是未知的兴趣待估参数向量，$\boldsymbol{\theta}$的变化范围为参数空间$\Theta$，$g(\boldsymbol{\theta})$是$\boldsymbol{\theta}$的函数。设$T$为样本$X_1, \cdots, X_n$的统计量，且是$g(\boldsymbol{\theta})$的无偏估计。如果对$g(\boldsymbol{\theta})$的任一无偏估计$\widetilde{T}$都有

$$E[T - g(\boldsymbol{\theta})]^2 \leq E[\widetilde{T} - g(\boldsymbol{\theta})]^2, \quad \text{对任意}\boldsymbol{\theta} \in \Theta,$$

则称T为$g(\boldsymbol{\theta})$的有效估计。

- **推广：** 当待估函数$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\theta}) = (g_1(\boldsymbol{\theta}), \cdots, g_r(\boldsymbol{\theta}))'$是一个向量时，设它的某个无偏估计$\boldsymbol{T} = (T_1, \cdots, T_r)'$有协方差矩阵。如果对于任意一个具有协方差矩阵的无偏估计$\widetilde{\boldsymbol{T}}$，有

$$\mathrm{Cov}(\boldsymbol{T}) \leq \mathrm{Cov}(\widetilde{\boldsymbol{T}}), \quad \text{对任意}\boldsymbol{\theta} \in \Theta,$$

即$\mathrm{Cov}(\widetilde{\boldsymbol{T}}) - \mathrm{Cov}(\boldsymbol{T})$是非负定矩阵，则称$\boldsymbol{T}$为待估函数$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\theta})$ 的有效估计。

定理5.2.5

在定理1的假设及记号下，$(\bar{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{S})$为$(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的一致最小方差无偏估计(UMVUE)。

相关系数的极大似然估计

- 在有了$\boldsymbol{\mu}$和$\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \bar{\boldsymbol{x}}$和$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{V}/n$ 后，我们是否可以通过使用$\widehat{\boldsymbol{\mu}}$和$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 替换前面定义过的回归系数，相关系数，条件协方差阵和偏相关系数等中的$\widehat{\boldsymbol{\mu}}$和$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}$来得到相应的MLE? 由下面引理知道这是可以的。

引理5.4.1

设$\boldsymbol{\theta}$的极大似然估计为$\widehat{\boldsymbol{\theta}}$，若$\boldsymbol{\theta} \to \phi(\boldsymbol{\theta})$为一一变换，则$\phi(\boldsymbol{\theta})$ 的极大似然估计为$\phi(\widehat{\boldsymbol{\theta}})$。

问题

求相关系数的极大似然估计？

解: 由相关系数矩阵$\mathbf{R}=\mathbf{D}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{D}^{-1/2}$，其中

$$\mathbf{D}^{1/2}=\operatorname{diag}(\sqrt{\sigma_{11}},\cdots,\sqrt{\sigma_{pp}}),$$

$\boldsymbol{\Sigma}\rightarrow(\mathbf{D},\mathbf{R})$一一对应，因此由$\boldsymbol{\Sigma}$的极大似然估计$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}$，可知$\widehat{\mathbf{D}}=\sqrt{\operatorname{diag}(\widehat{\boldsymbol{\Sigma}})}$，则$\mathbf{R}$的MLE为：

$$\widehat{\mathbf{R}}=\widehat{\mathbf{D}}^{-1/2}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}\widehat{\mathbf{D}}^{-1/2},$$

其(i,j)元素为，$i,j=1,\cdots,p$

$$\widehat{\rho}_{ij}=\frac{\sum_{k=1}^{n}\left(x_{ki}-\bar{x}_i\right)\left(x_{kj}-\bar{x}_j\right)}{\sqrt{\sum_{k=1}^{n}\left(x_{ki}-\bar{x}_i\right)^2\sum_{k=1}^{n}\left(x_{kj}-\bar{x}_j\right)^2}}=\frac{v_{ij}}{\sqrt{v_{ii}v_{jj}}}=:r_{ij}.$$

- 既然相关系数仅与两个变量有关，不失一般性，我们仅考虑r_{12}的精确分布。
- 假设总体$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$，由多元正态分布的性质，可知$(X_1, X_2)'$服从二元正态分布，即

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \sim N_2\left(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}\right),$$

其中$-\infty < \mu_1, \mu_2 < \infty$，$\sigma_1, \sigma_2 > 0$，$-1 < \rho < 1$。

- 假设下面的样本来自于二元正态分布总体$(X_1, X_2)'$，即

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

- 令$v_{kl} = \sum_{i=1}^{n}(x_{ik} - \bar{x}_k)(x_{il} - \bar{x}_l)$，$k, l = 1, 2$。由上面的样本，可定义样本离差矩阵为

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{pmatrix}.$$

- 样本均值为$\bar{x}_1 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{i1}$，$\bar{x}_2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{i2}$。
- X_1和X_2的相关系数ρ的极大似然估计，即样本相关系数估计定义为：

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1} - \bar{x}_1\right)\left(x_{i2} - \bar{x}_2\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_{i1} - \bar{x}_1\right)^2 \sum_{i=1}^{n}\left(x_{i2} - \bar{x}_2\right)^2}} = \frac{v_{12}}{\sqrt{v_{11}}\sqrt{v_{22}}}.$$

样本相关系数的平移不变性

- 下面说明样本相关系数r与分布的参数μ_1, μ_2, σ_1和σ_2 无关。
- 令$u_{i1} = \dfrac{x_{i1} - \mu_1}{\sigma_1}$, $u_{i2} = \dfrac{x_{i2} - \mu_2}{\sigma_2}$, $i = 1, \cdots, n.$
- 则$\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u_{21} \\ u_{22} \end{pmatrix}, \cdots, \begin{pmatrix} u_{n1} \\ u_{n2} \end{pmatrix}$ 为i.i.d.的样本，服从分布

$$N_2\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}\right).$$

- 把$x_{ik}=\sigma_k u_{ik}+\mu_k$代入样本相关系数，则有

$$r=\frac{v_{12}}{\sqrt{v_{11}}\sqrt{v_{22}}}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{n}\left(u_{i1}-\overline{u}_1\right)\left(u_{i2}-\overline{u}_2\right)}{\sqrt{\sum\limits_{i=1}^{n}\left(u_{i1}-\overline{u}_1\right)^2\sum\limits_{i=1}^{n}\left(u_{i2}-\overline{u}_2\right)^2}}.$$

- 可见，r的分布与参数μ_1,μ_2,σ_1和σ_2无关，只与ρ有关。

- 讨论r的分布时，假设$\mu_1 = \mu_2 = 0$和$\sigma_1 = \sigma_2 = 1$。
- 由定理5.1.1(2)的证明，可知

$$\mathbf{V} = \sum_{i=2}^{n} \mathbf{y}_i \mathbf{y}_i' \sim W_2(n-1, \boldsymbol{\Sigma}), \quad \text{其中} \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}.$$

- 则v_{11}, v_{12}, v_{22}可以表示为

$$v_{ij} = \sum_{k=2}^{n} y_{ki} y_{kj}, \qquad i, j = 1, 2,$$

其中$(y_{k1}, y_{k2})'$来自于二元正态总体

$$N_2\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix} \right).$$

- 样本$(y_{21}, y_{22}), \cdots, (y_{n1}, y_{n2})$相互独立。
- 进一步，把y_{k1}和y_{k2}表示成

$$y_{k1} = u_k, \qquad y_{k2} = \rho u_k + \sqrt{1-\rho^2} v_k,$$

其中$\{u_k, v_k, k = 2, \cdots, n\}$ i.i.d.，并服从标准正态分布。

- 记$\boldsymbol{u} = (u_2, \cdots, u_n)', \boldsymbol{v} = (v_2, \cdots, v_n)'$为$n-1$维向量。
- 以$\boldsymbol{u}'/\|\boldsymbol{u}\|$为第一行构造一个$n-1$阶正交矩阵$\mathbf{C}$。令$\boldsymbol{w} = \mathbf{C}\boldsymbol{v}$，由性质3.2.3可知，$\boldsymbol{w}$仍是一个由i.i.d.的标准正态随机变量构成的$n-1$维随机向量，且与$\boldsymbol{u}$相互独立。

- 简单计算，有

$$r=\frac{v_{12}}{\sqrt{v_{11}}\sqrt{v_{22}}}=\frac{\sum_{k=2}^{n}y_{k1}y_{k2}}{\sqrt{\sum_{k=2}^{n}y_{k1}^2\sum_{k=2}^{n}y_{k2}^2}}=\frac{\sum\limits_{k=2}^{n}u_k(\rho u_k+\sqrt{1-\rho^2}v_k)}{\sqrt{\sum\limits_{k=2}^{n}u_k^2\sum\limits_{k=2}^{n}(\rho u_k+\sqrt{1-\rho^2}v_k)^2}}$$

$$=\frac{\boldsymbol{u}'(\rho\boldsymbol{u}+\sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{v})}{\|\boldsymbol{u}\|\cdot\|\rho\boldsymbol{u}+\sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{v}\|}=\frac{\boldsymbol{u}'\mathbf{C}'(\rho\mathbf{C}\boldsymbol{u}+\sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{w})}{\|\boldsymbol{u}\|\cdot\|\rho\mathbf{C}\boldsymbol{u}+\sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{w}\|}$$

$$=\frac{\rho\|\boldsymbol{u}\|+\sqrt{1-\rho^2}w_1}{\sqrt{(\rho\|\boldsymbol{u}\|+\sqrt{1-\rho^2}w_1)^2+(1-\rho^2)\sum\limits_{k=2}^{n-1}w_k^2}}.$$

样本相关系数的精确分布

- 由正交矩阵C的定义，有

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \frac{u_1}{\|\boldsymbol{u}\|} & \frac{u_2}{\|\boldsymbol{u}\|} & \cdots & \frac{u_{n-1}}{\|\boldsymbol{u}\|} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2,n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n-1,1} & c_{n-1,2} & \cdots & c_{n-1,n-1} \end{pmatrix}$$

- 由C的正交性，则有

$$\frac{\boldsymbol{u}'}{\|\boldsymbol{u}\|}\mathbf{C}'\boldsymbol{w} = w_1.$$

- 进一步，有

$$
\begin{aligned}
&\|\rho \mathbf{C}\boldsymbol{u} + \sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{w}\|^2 \\
=&(\rho \mathbf{C}\boldsymbol{u} + \sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{w})'(\rho \mathbf{C}\boldsymbol{u} + \sqrt{1-\rho^2}\boldsymbol{w}) \\
=&\rho^2\|\boldsymbol{u}\|^2 + 2\rho\sqrt{1-\rho^2}\|\boldsymbol{u}\|\omega_1 + (1-\rho^2)\sum_{k=1}^{n-1}\omega_k^2 \\
=&(\rho\|\boldsymbol{u}\| + \sqrt{1-\rho^2}\omega_1)^2 + (1-\rho^2)\sum_{k=2}^{n-1}\omega_k^2.
\end{aligned}
$$

样本相关系数的精确分布

- 考虑一种特殊情况，当$\rho=0$时，则有

$$r=\frac{w_1}{\sqrt{w_1^2+\sum_{k=2}^{n-1}w_k^2}}\overset{d}{=}\frac{t}{\sqrt{t^2+n-2}},$$

- $\sum_{k=2}^{n-1}w_k^2\sim\chi_{n-2}^2$，$t\sim t_{n-2}$，根据$t$分布的定义，可以证明上式左右两边有相同的分布。
- 因为t_{n-2}的密度函数为

$$\frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\sqrt{(n-2)\pi}\Gamma\left(\frac{n-2}{2}\right)}\left(1+\frac{t^2}{n-2}\right)^{-\frac{n-1}{2}}.$$

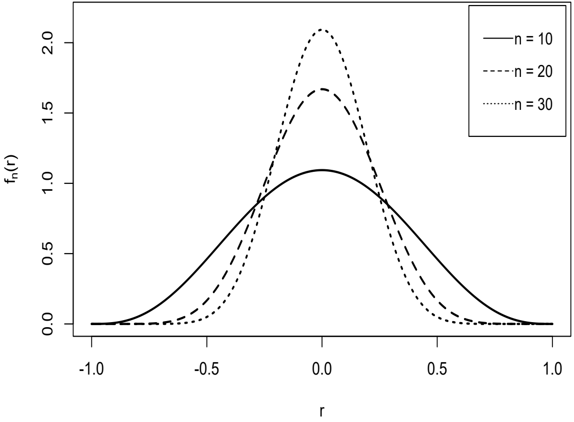
- 则样本相关系数$r = t/\sqrt{t^2+n-2}$，其逆变换为：$t = \sqrt{(n-2)r^2/(1-r^2)}$，由随机变量函数的密度函数公式，可得$r$的密度函数为：

$$f_n(r) = \frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{n-2}{2}\right)}\left(1-r^2\right)^{\frac{n-4}{2}}, \quad -1 \le r \le 1. \tag{1}$$

定理5.4.1

假设$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$是来自$p$元正态分布$N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$的独立同分布样本，如果$\rho_{ij} = 0$，则样本相关系数$r_{ij}$的密度函数由式(1)所定义。

$\rho = 0$时，r的密度函数曲线



样本相关系数的精确分布

- 密度函数关于原点对称
- 当$n > 4$时，它在$r = 0$处有众数
- 密度函数是偶函数
- 样本相关系数r的奇数阶矩等于0
- r的偶数阶矩为

$$E(r^{2m}) = \frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\Gamma\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{n-1}{2}+m\right)}.$$

定理5.4.1的应用：假设检验

对于给定的数对(i,j)，考虑如下的假设检验：

$$H_0:\rho_{ij}=0,\qquad H_1:\rho_{ij}>0. \tag{2}$$

- 当$r_{ij}>r_0$时，将拒绝原假设H_0
- 问题：如何确定阈值r_0？

对于给定的数对(i,j)，考虑如下的假设检验：

$$H_0: \rho_{ij} = 0, \qquad H_1: \rho_{ij} > 0. \tag{2}$$

- 当$r_{ij} > r_0$时，将拒绝原假设H_0
- 问题：如何确定阈值r_0？
- 对给定的显著性水平α，当原假设H_0为真时，拒绝原假设H_0的概率为

$$\int_{r_0}^{1} f_n(r)\mathrm{d}r = \alpha.$$

- 若感兴趣的是原假设H_0对备择假设$H_1: \rho_{ij} < 0$时，当$r_{ij} < -r_0$时，将拒绝原假设H_0。

考虑下面的假设检验：

$$H_0: \rho_{ij} = 0, \qquad H_1: \rho_{ij} \neq 0. \tag{3}$$

- 当$r_{ij} > \tilde{r}_0$或$r_{ij} < -\tilde{r}_0$时，将拒绝原假设H_0
- $\tilde{r}_0$满足：当原假设H_0为真时，拒绝原假设H_0的概率为

$$\int_{\tilde{r}_0}^{1} f_n(r)\mathrm{d}r = \alpha/2.$$

考虑下面的假设检验：

$$H_0 : \rho_{ij} = 0, \qquad H_1 : \rho_{ij} \neq 0. \tag{3}$$

- 当$r_{ij} > \tilde{r}_0$或$r_{ij} < -\tilde{r}_0$时，将拒绝原假设H_0
- $\tilde{r}_0$满足：当原假设H_0为真时，拒绝原假设H_0的概率为

$$\int_{\tilde{r}_0}^{1} f_n(r)\mathrm{d}r = \alpha/2.$$

- 对于阈值r_0和$\tilde{r}_0$，可以通过上面的积分确定，也可以通过查表确定。

- 当$\rho=0$时，$t=\sqrt{n-2}\dfrac{r}{\sqrt{1-r^2}}\sim t_{n-2}$
- 可以通过自由度是$n-2$的t分布来确定阈值r_0 和$\tilde{r}_0$
- 令$t_{n-2}(\alpha)$为自由度为$n-2$的t分布的上α分位点
- 对假设检验问题(2)，若

$$\sqrt{n-2}\frac{r_{ij}}{\sqrt{1-r_{ij}^2}}>t_{n-2}(\alpha)$$

时，则拒绝原假设H_0。

- 对于双边假设检验问题(3)，令$t_{n-2}(\alpha/2)$为自由度为$n-2$的t分布的上$\alpha/2$分位点，若

$$\sqrt{n-2}\frac{|r_{ij}|}{\sqrt{1-r_{ij}^2}} > t_{n-2}(\alpha/2)$$

时，则拒绝原假设H_0。

应用：回归系数的检验

- 当$\rho = 0$时，$t = \sqrt{n-2}\frac{r}{\sqrt{1-r^2}} \sim t_{n-2}$，可用于回归系数是否为0的检验问题

- 假设$x_{i2} = a + bx_{i1} + \varepsilon_i$，$i = 1, \cdots, n$，可得斜率$b$的极大似然估计为：

$$\widehat{b} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)}{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1} - \bar{x}_1)^2}.$$

- 计算并整理，有

$$
\begin{aligned}
&\sqrt{n-2}\frac{r}{\sqrt{1-r^2}} \\
=\ & \frac{\hat{b}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{i1}-\bar{x}_1)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}[x_{i2}-\bar{x}_2-\hat{b}(x_{i1}-\bar{x}_1)]^2/(n-2)}} \\
\sim\ & t_{n-2}.
\end{aligned}
$$

- 上面结果可以对回归系数b进行单边或双边的显著性检验。

$\rho \neq 0$时样本相关系数的分布

- 分子分母同除$\sqrt{1-\rho^2}$，简单计算有：

$$r = \frac{\rho\|\boldsymbol{u}\| + \sqrt{1-\rho^2}w_1}{\sqrt{(\rho\|\boldsymbol{u}\| + \sqrt{1-\rho^2}w_1)^2 + (1-\rho^2)\sum_{k=2}^{n-1} w_k^2}}$$

$$= \frac{\delta + w_1}{\sqrt{(\delta + w_1)^2 + \sum_{k=2}^{n-1} w_k^2}},$$

其中$\delta = \phi\|\boldsymbol{u}\|$, $\phi = \rho/\sqrt{1-\rho^2}$。

$\rho \neq 0$时样本相关系数的分布

- 由前可知：$w_1 \sim N(0,1)$，$\displaystyle\sum_{k=2}^{n-1} w_k^2 \sim \chi^2_{n-2}$
- 因此，给定$\boldsymbol{u}$时，r的条件分布与$t/\sqrt{t^2+n-2}$的分布相同，即

$$r = \frac{\delta + w_1}{\sqrt{(\delta+w_1)^2 + \sum_{k=2}^{n-1} w_k^2}} \overset{d}{=} \frac{t}{\sqrt{t^2+n-2}},$$

- 其中$t = \dfrac{\delta + w_1}{\sqrt{\sum_{k=2}^{n-1} w_k^2/(n-2)}}$服从自由度为$n-2$的非中心化$t$分布，非中心化参数为$\delta = \phi\|\boldsymbol{u}\|$，$\phi = \rho/\sqrt{1-\rho^2}$。

$\rho \neq 0$时样本相关系数的分布

※ 目标：当$\rho \neq 0$时，计算样本相关系数r的密度函数

■ 解决方案：为了找到样本相关系数r的密度函数，可分下面三步完成

1. 给定$\boldsymbol{u}$，计算t的条件密度函数$f_n(t|\boldsymbol{u})$
2. 给定$\boldsymbol{u}$，计算r的条件密度函数$f_n(r|\boldsymbol{u})$
3. 计算样本相关系数r的密度函数$f_n(r)$

- 第一步：计算t的条件密度函数$f_n(t|\boldsymbol{u})$
  - 给定$\|\boldsymbol{u}\|$时，由于w_1，$\sum_{k=2}^{n-1} w_k^2$ 和$\|\boldsymbol{u}\|$相互独立，且

$$w_1 \sim N(0,1) \qquad \sum_{k=2}^{n-1} w_k^2 \sim \chi^2_{n-2}$$

  - 注意到：$t = \dfrac{\delta + w_1}{\sqrt{\sum_{k=2}^{n-1} w_k^2/(n-2)}}$，可用卷积公式计算如下。

$$f_n(t|\delta,\boldsymbol{u}) = \int_0^\infty \sqrt{\frac{w}{n-2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}[t\sqrt{w/(n-2)}-\delta]^2}\frac{w^{n/2-2}}{2^{n/2-1}\Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)}e^{-w/2}\mathrm{d}w$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k\delta^k e^{-\delta^2/2}}{\sqrt{2\pi}k!(n-2)^{\frac{1}{2}(k+1)}2^{n/2-1}\Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)}\int_0^\infty w^{\frac{1}{2}(k+n-1)-1}e^{-\frac{1}{2}w(1+\frac{t^2}{n-2})}\mathrm{d}w$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k\delta^k e^{-\delta^2/2}2^{\frac{1}{2}(k+n-1)}\Gamma\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\sqrt{2\pi}k!(n-2)^{\frac{1}{2}(k+1)}2^{n/2-1}\Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)}\left(1+\frac{t^2}{n-2}\right)^{-\frac{1}{2}(k+n-1)}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k\delta^k e^{-\delta^2/2}2^{k/2}\Gamma\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\sqrt{\pi}k!(n-2)^{\frac{1}{2}(k+1)}\Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)}\left(1+\frac{t^2}{n-2}\right)^{-\frac{1}{2}(k+n-1)}.$$

- 第二步：计算r的条件密度函数$f_n(r|\boldsymbol{u})$
  - 由$t = \sqrt{n-2}r/\sqrt{1-r^2}$知，$1 + t^2/(n-2) = 1/(1-r^2)$，且$dt/dr = \sqrt{n-2}/\sqrt{(1-r^2)^3}$。
  - 给定$\boldsymbol{u}$时，r的条件分布密度函数为：

$$
\begin{aligned}
f_n(r|\boldsymbol{u}) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^k \delta^k e^{-\delta^2/2} 2^{k/2} \Gamma\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\sqrt{\pi} k! \Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)} \left(1-r^2\right)^{\frac{n-4}{2}} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^k \phi^k \|\boldsymbol{u}\|^k e^{-\frac{1}{2}\phi^2\|\boldsymbol{u}\|^2} 2^{k/2} \Gamma\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\sqrt{\pi} k! \Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)} \left(1-r^2\right)^{\frac{n-4}{2}}.
\end{aligned}
$$

- **第三步：** 计算r的密度函数$f_n(r)$

- 由于$\|\boldsymbol{u}\|^2 \sim \chi^2_{n-1}$，并假设$\|\boldsymbol{u}\|^2$的密度函数为$f(\|\boldsymbol{u}\|^2)$，则$r$的密度函数为：

$$
\begin{aligned}
f_n(r|\rho) &= \int_0^\infty f_n(r|\boldsymbol{u}) f(\|\boldsymbol{u}\|^2) \mathrm{d}\|\boldsymbol{u}\|^2 \\
&= \sum_{k=0}^\infty \frac{r^k \phi^k 2^{k/2} \Gamma\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\sqrt{\pi} k! \Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)} \left(1-r^2\right)^{\frac{1}{2}(n-4)} E[\|\boldsymbol{u}\|^k e^{-\frac{1}{2}\phi^2\|\boldsymbol{u}\|^2}],
\end{aligned}
$$

其中$E[\|\boldsymbol{u}\|^k e^{-\frac{1}{2}\phi^2\|\boldsymbol{u}\|^2}] = \dfrac{2^{k/2}\Gamma\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)}(1+\phi^2)^{-\frac{k+n-1}{2}}$.

- 因此，r的密度函数为

$$f_n(r|\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^k \phi^k 2^k \Gamma^2\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{\sqrt{\pi} k! \Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)} \times \left(1-r^2\right)^{\frac{1}{2}(n-4)}\left(1+\phi^2\right)^{-\frac{1}{2}(k+n-1)} = \frac{(1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)}}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{2}(n-1)\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}n-1\right)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^k \rho^k 2^k \Gamma^2\left(\frac{1}{2}(k+n-1)\right)}{k!}. \tag{4}$$

定理5.4.2

来自总体相关系数为ρ的二元正态分布的n个观测值的样本相关系数r的密度函数由式(4)所定义。

$\rho \neq 0$时，r的密度函数曲线

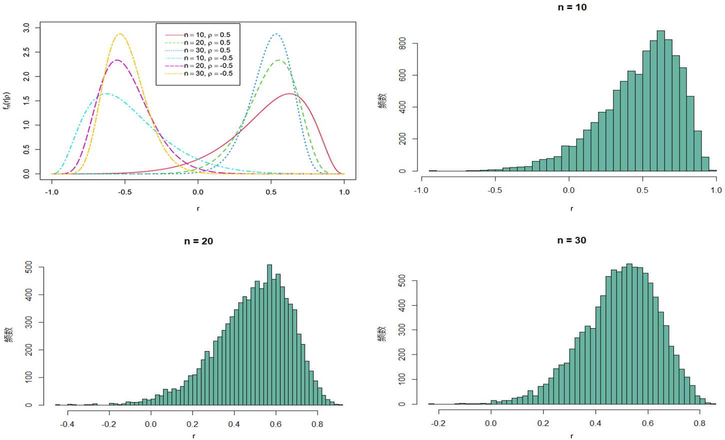


Figure: 密度函数曲线和基于10000次重复试验的直方图；当$n = 10$时，$\bar{r} = 0.4814$；当$n = 20$时，$\bar{r} = 0.4894$；当$n = 30$时，$\bar{r} = 0.5072$。

$\rho \neq 0$时样本相关系数的分布

- 样本相关系数r的精确分布最早由Fisher (1915)得到，他给出了密度函数的另一个形式：

$$\frac{(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)}(1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}}{(n-3)!\pi}\left|\frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}\left\{\frac{\arccos(-x)}{\sqrt{1-x^2}}\right\}\right|_{x=r\rho}.$$

- Hotelling (1953)对r的密度函数做了一个彻底研究，并推荐使用如下的密度函数：

$$\frac{(n-2)\Gamma(n-1)}{\sqrt{2\pi}\Gamma\left(n-\frac{1}{2}\right)}(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}(n-1)}(1-r^2)^{\frac{1}{2}(n-4)}(1-\rho r)^{n-\frac{3}{2}}F\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2};n-\frac{3}{2};\frac{1+\rho r}{2}\right),$$

其中$F(a,b;c;x)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{\Gamma(a+j)\Gamma(b+j)\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)\Gamma(c+j)}\frac{x^j}{j!}$是一个超几何函数。

- Olkin 和Pratt (1958)证明，样本相关系数r是总体相关系数ρ的一个有偏估计，并给出了ρ的唯一一致最小方差无偏估计为
$$G(r) = r \cdot F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{n-2}{2}; 1 - r^2\right).$$
- David (1938) 计算了样本相关系数r的分布函数
$$F(r^*|n, \rho) = \Pr(r \leq r^*).$$
- 由密度函数的对偶性知：
$$F(r^*|n, \rho) = 1 - F(-r^*|n, -\rho).$$
- 为了方便实际的应用，David (1938)把相应的数值制成表格。

- 考虑下面的假设检验问题：

$$H_0: \rho = \rho_0, \qquad H_{11}: \rho > \rho_0; \tag{5}$$

$$H_0: \rho = \rho_0, \qquad H_{21}: \rho < \rho_0; \tag{6}$$

$$H_0: \rho = \rho_0, \qquad H_{31}: \rho \neq \rho_0. \tag{7}$$

- 令r_0是分布函数$F(r^*|n, \rho_0)$的上α分位点，如果$r > r_0$，则拒绝H_0，并接受H_{11}，即$\rho > \rho_0$成立；
- 令r_0'是分布函数$F(r^*|n, \rho_0)$的下α分位点，如果$r < r_0'$，则拒绝H_0，并接受H_{21}，即$\rho < \rho_0$成立；

精确分布下ρ的假设检验

- 当$r > r_1$和$r < r_1'$，其中r_1和r_1'满足$1 - F(r_1|n, \rho_0) + F(r_1'|n, \rho_0) = \alpha$，则拒绝$H_0$，并接受$H_{31}$，即$\rho \neq \rho_0$。
- David (1937)建议r_1和r_1'满足：

$$1 - F(r_1|n, \rho_0) = F(r_1'|n, \rho_0) = \alpha/2.$$

例子

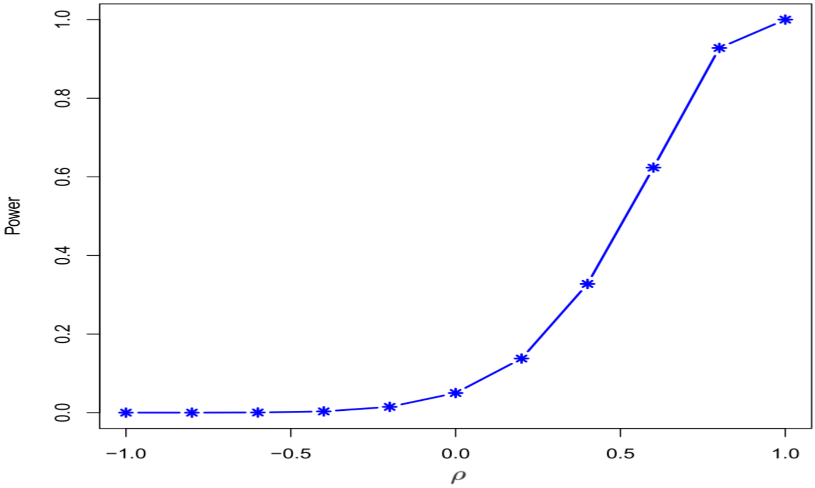
假设计划在5% 的显著性水平下，使用15个观测值来检验$H_0 : \rho = 0.5 \leftrightarrow H_{11} : \rho \neq 0.5$。在David (1938)的表格中，可以发现$F(0.027|15, 0.5) = 0.025$和$F(0.805|15, 0.5) = 0.975$，因而当$r < 0.027$或者$r > 0.805$时，就拒绝原假设$H_0$。

- David (1938)的表格可以计算功效函数，若拒绝域是$r > r_1$和$r < r_1'$，检验的功效就是真实总体相关系数的函数，即$1 - F(r_1|n, \rho_0) + F(r_1'|n, \rho_0)$，反映的是当总体相关系数是$\rho$时拒绝原假设$H_0$的概率。
- 考虑检验$\rho = 0$的单边功效函数。在5%的显著性水平下，功效函数见表格和图。

精确分布下ρ的假设检验

ρ	拒绝概率	ρ	拒绝概率
-1.0	0.0000	0.2	0.1376
-0.8	0.0000	0.4	0.3275
-0.6	0.0004	0.6	0.6235
-0.4	0.0032	0.8	0.9279
-0.2	0.0147	1.0	1.0000
0.0	0.0500		

精确分布下ρ的假设检验



精确分布下ρ的区间估计

- David (1938)的表格可用于计算ρ的置信区间，对给定n和显著性水平α，$r_1' = f_1(\rho)$和$r_1 = f_2(\rho)$ 是ρ的两个函数，使得它们满足

$$\Pr\{f_1(\rho) < r < f_2(\rho)|\rho\} = 1 - \alpha. \tag{8}$$

- 如果r_1和r_1'满足$1 - F(r_1|n,\rho) = F(r_1'|n,\rho) = \frac{\alpha}{2}$，则$f_1(\rho)$ 和$f_2(\rho)$ 是ρ的单调递增函数。

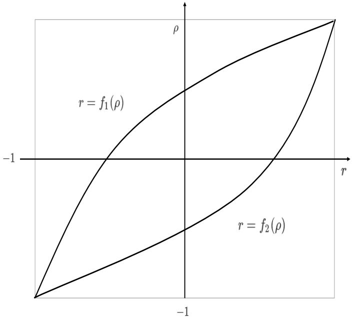
- 若$\rho = f_k^{-1}(r)$是$r = f_k(\rho)$的反函数，其中$k = 1, 2$，那么不等式$f_1(\rho) < r$等价于$\rho < f_1^{-1}(r)$且$r < f_2(\rho)$等价于$f_2^{-1}(r) < \rho$。
- 则式(8)可以重新写成

$$\Pr\{f_2^{-1}(r) < \rho < f_1^{-1}(r)|\rho\} = 1 - \alpha. \tag{9}$$

- 对于给定n和显著性水平α，下图给出了曲线$r = f_1(\rho)$和$r = f_2(\rho)$。

精确分布下ρ的区间估计

- 在检验$\rho = \rho_0$时，直线$\rho = \rho_0$和这两条曲线的交点给出了临界点r_1和r_1'。
- 对于给定的样本相关系数$\tilde{r}$，ρ的置信区间就是直线$r = \tilde{r}$夹在这两条曲线之间的部分$(f_2^{-1}(\tilde{r}), f_1^{-1}(\tilde{r}))$。



- 定义下面的样本相关系数：

$$r(n) = \frac{v_{ij}(n)}{\sqrt{v_{ii}(n)v_{jj}(n)}}, \qquad i \neq j.$$

- 既然样本相关系数具有位置和尺度的不变性，则$r(n)$ 也可以改写成：

$$r(n) = \frac{c_{ij}(n)}{\sqrt{c_{ii}(n)c_{jj}(n)}}, \qquad i \neq j,$$

其中$c_{ij}(n) = \dfrac{v_{ij}(n)}{\sqrt{\sigma_{ii}(n)\sigma_{jj}(n)}}$。

- 令$c_{ij}(n), c_{ii}(n), c_{jj}(n)$ 的分布与下面矩阵元素的分布相同：

$$\sum_{k=1}^{n} \begin{pmatrix} Z_{ki}^* \\ Z_{kj}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_{ki}^* & Z_{kj}^* \end{pmatrix}$$
$$= \sum_{k=1}^{n} \begin{pmatrix} Z_{ki}/\sqrt{\sigma_{ii}} \\ Z_{kj}/\sqrt{\sigma_{jj}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_{ki}/\sqrt{\sigma_{ii}} & Z_{kj}/\sqrt{\sigma_{jj}} \end{pmatrix}$$

- 其中$(Z_{ki}^*, Z_{kj}^*)'$独立且服从二元正态分布，即

$$N_2\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}\right), \qquad \text{其中}\ \rho = \frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}.$$

回顾定理5.2.4

定理5.2.4

假设$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$是来自$p$元正态分布$N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的i.i.d.随机样本，记$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})'$，则

$$\mathbf{B}_n = \frac{1}{\sqrt{n}}(\mathbf{V} - n\boldsymbol{\Sigma})$$

收敛于一个正态随机矩阵$\mathbf{B} = (b_{ij})$，其元素均值为0，协方差为

$$E(b_{ij}b_{kl}) = \sigma_{ik}\sigma_{jl} + \sigma_{il}\sigma_{jk}.$$

样本相关系数的渐近正态分布

- 令
$$U(n) = \frac{1}{n}\begin{pmatrix} c_{ii}(n) \\ c_{jj}(n) \\ c_{ij}(n) \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \rho \end{pmatrix}. \tag{10}$$
- 利用定理5.2.4，可证明向量$U(n)$的渐近正态分布为
$$\sqrt{n}(U(n) - b) \xrightarrow{d} N_3(\mathbf{0}, \Sigma), \quad n \to \infty,$$
其中
$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 2\rho^2 & 2\rho \\ 2\rho^2 & 2 & 2\rho \\ 2\rho & 2\rho & 1+\rho^2 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

总结，给出下面一般性定理：

定理5.4.3

令$\{\boldsymbol{U}(n)\}$是一列m维的随机向量，$\boldsymbol{b}$是一个m维的固定向量，当$n\to\infty$时，使得$\sqrt{n}(\boldsymbol{U}(n)-\boldsymbol{b})\xrightarrow{d}N_m(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\Sigma})$，这儿$\boldsymbol{0}$是$m$维的零向量，$\boldsymbol{\Sigma}$为$m\times m$的协方差矩阵。假设$f(\boldsymbol{u})$为一个向量值函数，其每个分量$f_j(\boldsymbol{u})$在$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}$处有非零导数，定义矩阵$\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{b}}$，其$(i,j)$元素为$\left.\frac{\partial f_j(\boldsymbol{u})}{\partial u_i}\right|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}}$。当$n\to\infty$时，则

$$\sqrt{n}\Big[f(\boldsymbol{U}(n))-f(\boldsymbol{b})\Big]\xrightarrow{d}N_m(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{b}}'\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{b}}).$$

- 可以验证：分别由式(10)和(11)所定义的$U(n)$，$\boldsymbol{b}$ 和Σ满足定理5.4.3 的条件，这时也定义满足定理5.4.3条件的函数f，即

$$r=\frac{u_3}{\sqrt{u_1u_2}}.$$

- 下面计算矩阵$\boldsymbol{\Phi}_b$的元素，即

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial r}{\partial u_1}\right|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}} &= -\frac{1}{2}u_3u_1^{-3/2}u_2^{-1/2}\Big|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}}=-\frac{1}{2}\rho,\\
\left.\frac{\partial r}{\partial u_2}\right|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}} &= -\frac{1}{2}u_3u_2^{-3/2}u_1^{-1/2}\Big|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}}=-\frac{1}{2}\rho,\\
\left.\frac{\partial r}{\partial u_3}\right|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}} &= u_1^{-1/2}u_2^{-1/2}\Big|_{\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}}=1,
\end{aligned}$$

且$f(\boldsymbol{b})=\rho$。

- 利用定理5.4.3，则可证得

$$\sqrt{n}\left[r(n)-\rho\right] \xrightarrow{d} N(0,\sigma^2), \qquad n\to\infty, \tag{12}$$

其中

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \left(-\frac{1}{2}\rho, -\frac{1}{2}\rho, 1\right)\begin{pmatrix} 2 & 2\rho^2 & 2\rho \\ 2\rho^2 & 2 & 2\rho \\ 2\rho & 2\rho & 1+\rho^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\rho \\ -\frac{1}{2}\rho \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= (1-\rho^2)^2. \end{aligned}$$

- 有了样本相关系数$r(n)$的渐近正态分布，可以构造ρ的区间估计。

问题：渐近方差中含有未知参数ρ，如何解决这个问题？

方法1：插入(plug-in)方法

- 渐近方差$\sigma^2 = (1-\rho^2)^2$包含未知的参数ρ，可用它的极大似然估计$r(n)$ 来替换。
- 当$n \to \infty$时，可以证明$r(n) \xrightarrow{P} \rho$。
- 利用Slutsky定理，可得

$$\frac{\sqrt{n}[r(n)-\rho]}{1-r^2(n)} = \frac{\sqrt{n}[r(n)-\rho]}{1-\rho^2}\frac{1-\rho^2}{1-r^2(n)} \xrightarrow{d} N(0,1).$$

- ρ的置信水平为$1-\alpha$的置信区间为

$$\left[r(n)-\frac{1-r^2(n)}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2},\ \ r(n)+\frac{1-r^2(n)}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2}\right],$$

其中$z_{1-\alpha/2}$是标准正态分布的上$\alpha/2$分位点。

- 解决办法： 求函数f，使得$f(r(n))$的渐近方差为1，即

$$\sqrt{n}[f(r(n))-f(\rho)] \xrightarrow{d} N(0,1).$$

- 根据定理5.4.3，有

$$\sqrt{n}[f(r(n))-f(\rho)] \xrightarrow{d} N\left(0,(f'(\rho))^2(1-\rho^2)^2\right).$$

- 解函数f，使得$(f'(\rho))^2(1-\rho^2)^2=1$。解得函数为：$f(x)=\frac{1}{2}\ln\frac{1+x}{1-x}$。
- 故有

$$\sqrt{n}\left[\frac{1}{2}\ln\frac{1+r(n)}{1-r(n)}-\frac{1}{2}\ln\frac{1+\rho}{1-\rho}\right] \xrightarrow{d} N(0,1).$$

- 由上面结果，可构造$\frac{1}{2}\ln\frac{1+\rho}{1-\rho}$的置信水平为$1-\alpha$的置信区间为：

$$\left[\frac{1}{2}\ln\frac{1+r(n)}{1-r(n)}-\frac{1}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2},\ \frac{1}{2}\ln\frac{1+r(n)}{1-r(n)}+\frac{1}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2}\right].$$

- 为构造ρ的置信区间，对上面的置信区间进行变换，可得到ρ的置信水平为$1-\alpha$的置信区间为：

$$\left[\frac{\frac{1+r(n)}{1-r(n)}\exp\left(-\frac{2}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2}\right)-1}{\frac{1+r(n)}{1-r(n)}\exp\left(-\frac{2}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2}\right)+1},\ \frac{\frac{1+r(n)}{1-r(n)}\exp\left(\frac{2}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2}\right)-1}{\frac{1+r(n)}{1-r(n)}\exp\left(\frac{2}{\sqrt{n}}z_{1-\alpha/2}\right)+1}\right].$$

样本偏相关系数

- 假设随机向量$\boldsymbol{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$, $p > 2$，将$\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\mu}$和$\Sigma$剖分为

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}^{(1)} \\ \boldsymbol{X}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix}.$$

- $\boldsymbol{X}^{(1)}$和$\boldsymbol{\mu}^{(1)}$为$q \times 1$的向量
- Σ_{11}为$q \times q$矩阵
- $\boldsymbol{X}^{(2)}$和$\boldsymbol{\mu}^{(2)}$ 为$(p-q) \times 1$的向量
- Σ_{22}为$(p-q) \times (p-q)$矩阵
- Σ_{12} 为$q \times (p-q)$矩阵

- 给定$\boldsymbol{X}^{(2)}=\boldsymbol{x}^{(2)}$时$\boldsymbol{X}^{(1)}$的条件分布服从$q$元正态分布，即 $(\boldsymbol{X}^{(1)}|\boldsymbol{X}^{(2)}=\boldsymbol{x}^{(2)})\sim N_q(\boldsymbol{\mu}^{(1)}+\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{\mu}^{(2)}),\boldsymbol{\Sigma}_{11.2})$.
- $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}$为$\boldsymbol{X}^{(1)}$ 对$\boldsymbol{X}^{(2)}$ 的回归系数。
- $\boldsymbol{\Sigma}_{11.2}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ 为条件协方差矩阵，它的元素用$\sigma_{ij\cdot q+1,\cdots,p}$表示，$i,j=1,\cdots,q$。
- 给定$\boldsymbol{X}^{(2)}=\boldsymbol{x}^{(2)}$条件下，$X_i$ 与X_j 的偏相关系数 $(\mathrm{corr}(\boldsymbol{X}^{(1)}|\boldsymbol{X}^{(2)}))$定义为：

$$\rho_{ij\cdot q+1,\cdots,p}=\frac{\sigma_{ij\cdot q+1,\cdots,p}}{(\sigma_{ii\cdot q+1,\cdots,p}\sigma_{jj\cdot q+1,\cdots,p})^{1/2}},\quad i,j=1,\cdots,q.$$

- 类似地，对样本均值$\overline{\boldsymbol{x}}$，离差矩阵$\mathbf{V}$和样本协方差矩阵$\mathbf{S}$进行如下剖分：

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} \\ \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} q \\ p-q \end{array} \end{array}, \quad \mathbf{V} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_{11} & \mathbf{V}_{12} \\ \mathbf{V}_{21} & \mathbf{V}_{22} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} q \\ p-q \end{array} \end{array},$$

$$\mathbf{S} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} & \begin{array}{c} q \\ p-q \end{array} \end{array}.$$

- 由定理5.1.2，在给定$\boldsymbol{X}^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(2)}$时，则条件期望$\boldsymbol{\mu}_{1.2}$的MLE为：

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{1.2} &= \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} + (\mathbf{V}_{12}/n)(\mathbf{V}_{22}/n)^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}) \\ &= \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} + \mathbf{V}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}). \end{aligned}$$

- 由$\mathbf{V}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1}=\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}$，所以条件期望$\boldsymbol{\mu}_{1.2}$的MLE也可表示为：

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{1.2}=\overline{\boldsymbol{x}}^{(1)}+\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)}-\overline{\boldsymbol{x}}^{(2)}).$$

- 条件协方差阵$\boldsymbol{\Sigma}_{11.2}$的MLE为：

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{11.2}=\frac{\mathbf{V}_{11}}{n}-\frac{\mathbf{V}_{12}}{n}\left(\frac{\mathbf{V}_{22}}{n}\right)^{-1}\frac{\mathbf{V}_{21}}{n}=\frac{\mathbf{V}_{11}-\mathbf{V}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1}\mathbf{V}_{21}}{n}=\frac{\mathbf{V}_{11.2}}{n}.$$

- 可得偏相关系数的极大似然估计为：

$$\widehat{\rho}_{ij\cdot q+1,\cdots,p}=\frac{\widehat{\sigma}_{ij\cdot q+1,\cdots,p}}{(\widehat{\sigma}_{ii\cdot q+1,\cdots,p}\widehat{\sigma}_{jj\cdot q+1,\cdots,p})^{1/2}},\quad i,j=1,\cdots,q,$$

其中$\widehat{\sigma}_{ij\cdot q+1,\cdots,p}$是$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{11.2}$的第$(i,j)$元素。

定理5.4.4

设$X \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$，并且$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}, \cdots, x_{ip})'(i = 1, \cdots, n)$为来自$p$元正态总体$N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$的一组随机样本，$n > p$, $\bar{\boldsymbol{x}}$为样本均值向量，$\mathbf{V}$为样本离差阵，$\mathbf{S}$为样本协方差阵，在给定$X^{(2)} = \boldsymbol{x}^{(2)}$时, 则

1. 条件期望$\boldsymbol{\mu}_{1.2}$和条件协方差阵$\Sigma_{11.2}$的MLE分别为$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{1.2} = \bar{\boldsymbol{x}}^{(1)} + \mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)})$和$\widehat{\Sigma}_{11.2} = \mathbf{V}_{11.2}/n$，同时$\beta$的MLE为$\widehat{\beta} = \mathbf{V}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1}$;
2. 进一步，条件期望$\boldsymbol{\mu}_{1.2}$和条件协方差阵$\Sigma_{11.2}$的无偏估计分别为$\bar{\boldsymbol{x}}^{(1)} + \mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(2)} - \bar{\boldsymbol{x}}^{(2)})$和$\mathbf{S}_{11.2}$，其中

$$\mathbf{S}_{11.2} = \mathbf{S}_{11} - \mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21} = \mathbf{V}_{11.2}/(n-1).$$

定理5.4.5

设$\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_n$为来自$p$元正态总体$N_p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$的一组随机样本，$n > p$，则给定后$p-q$个分量条件下，前$q$个分量的偏相关系数$\rho_{ij\cdot q+1,\cdots,p}$的MLE为

$$\widehat{\rho}_{ij\cdot q+1,\cdots,p} = \frac{v_{ij\cdot q+1,\cdots,p}}{\left(v_{ii\cdot q+1,\cdots,p} v_{jj\cdot q+1,\cdots,p}\right)^{1/2}}, \quad i,j = 1,\cdots,q,$$

其中$(v_{ij\cdot q+1,\cdots,p}) = \mathbf{V}_{11} - \mathbf{V}_{12}\mathbf{V}_{22}^{-1}\mathbf{V}_{21} = \mathbf{V}_{11.2}$。

- 为了简单，把极大似然估计$\widehat{\rho}_{ij\cdot q+1,\cdots,p}$记为$r_{ij\cdot q+1,\cdots,p}$，称为**样本偏相关系数**。
- 由估计的回归系数$\widehat{\boldsymbol{\beta}}$，矩阵$\mathbf{V}_{11.2}$也可以表示为：

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{11.2} &= \sum_{k=1}^{n}\left[\boldsymbol{x}_k^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x}_k^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})\right]\left[\boldsymbol{x}_k^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x}_k^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})\right]' \\ &= \mathbf{V}_{11} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}\mathbf{V}_{22}\widehat{\boldsymbol{\beta}}'\end{aligned}$$

- 其中向量$\widehat{\varepsilon}_k^{(1.2)} = \boldsymbol{x}_k^{(1)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(1)} - \widehat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{x}_k^{(2)} - \overline{\boldsymbol{x}}^{(2)})$称为$\boldsymbol{x}_k^{(1)}$对$\boldsymbol{x}_k^{(2)}$的回归残差，样本偏相关系数就是这些回归残差之间简单的相关系数。


多元统计分析
STATISTICS
DATA
统计与数据科学丛书 4
STATISTICS AND DATA SCIENCE SERIES 4
多元统计分析
李高荣 吴密霞 编著
Multivariate Statistical Analysis
科学出版社

谢谢，请多提宝贵意见！