

概率论与数理统计

授课教师：唐宏岩

前言

本讲义基于清华大学数学系唐宏岩老师于 2023 - 2024 学年秋季学期开设的《概率论与数理统计》课程，用于辅助同学们课后复习。

由于时间与能力所限，本讲义可能不会出现大段的文字论述（但会包含重要的定义、定理与公式等）。但是，对许多基本概念的深入理解是非常有必要的，同学们可以在浏览时检查自己是否能够回忆起课上的内容，对掌握不够扎实的地方，鼓励大家查阅参考书或在课程群提问以解决问题。

由于此为教学团队第一年尝试整理讲义，诸如格式编排、内容完整性方面可能存在许多不足，欢迎大家联系我提出宝贵的意见与建议。

曹子尧

2023 年 9 月

目录

| | |
|--------------|----|
| 前言 | i |
| 第一部分 初等概率论 | 1 |
| 第一章 事件的概率 | 2 |
| 1.1 概率的发展史 | 2 |
| 1.2 随机试验与事件 | 2 |
| 1.3 事件的运算 | 3 |
| 1.4 概率的几种解释 | 3 |
| 1.5 概率的公理化定义 | 3 |
| 1.6 条件概率 | 5 |
| 1.7 事件的独立性 | 6 |
| 1.8 Bayes 公式 | 6 |
| 第二章 随机变量 | 8 |
| 2.1 一维随机变量 | 8 |
| 2.2 离散随机变量 | 10 |
| 2.3 常见离散分布 | 11 |
| 2.4 连续随机变量 | 12 |
| 2.5 常见连续分布 | 12 |
| 2.6 随机变量的函数 | 14 |
| 第三章 联合分布 | 16 |
| 3.1 随机向量 | 16 |
| 3.2 离散分布 | 16 |
| 3.3 连续分布 | 17 |

| | | |
|-------------|---------------------|-----------|
| 3.4 | 边际分布 | 17 |
| 3.5 | 条件分布 | 18 |
| 3.6 | 独立性 | 18 |
| 3.7 | 随机向量的函数 | 19 |
| 第四章 | 随机变量的数字特征 | 22 |
| 4.1 | 期望 | 22 |
| 4.2 | 分位数 | 22 |
| 4.3 | 方差 | 23 |
| 4.4 | 协方差与相关系数 | 23 |
| 4.5 | 矩 | 24 |
| 4.6 | 矩母函数 | 25 |
| 4.7 | 条件期望 | 27 |
| 第五章 | 不等式与极限定理 | 29 |
| 5.1 | 概率不等式 | 29 |
| 5.2 | 大数定律 | 30 |
| 5.3 | 中心极限定理 | 31 |
| 第二部分 | 统计推断 | 33 |
| 第六章 | 参数估计 | 36 |
| 6.1 | 矩估计 | 36 |
| 6.2 | 极大似然估计 | 36 |
| 6.3 | 优良性准则 | 37 |
| 6.4 | 置信区间 | 39 |
| 6.5 | Bayes 估计 | 42 |
| 第七章 | 假设检验 | 44 |
| 7.1 | 基本概念 | 44 |
| 7.2 | Neyman-Pearson 假设检验 | 46 |
| 7.3 | 假设检验与置信区间 | 47 |
| 7.4 | 检验的 p 值 | 47 |
| 7.5 | 拟合优度检验 | 48 |

| | | |
|------------|-------------|-----------|
| 7.6 | 似然比检验 | 49 |
| 7.7 | 两总体比较 | 50 |
| 7.8 | Bayes 假设检验 | 51 |
| 第八章 | 线性回归 | 52 |
| 8.1 | 回归问题 | 52 |
| 8.2 | 简单线性回归 | 52 |
| 8.3 | 最小二乘法估计参数 | 53 |
| 8.4 | 回归参数推断 | 53 |
| 8.5 | 预测 | 54 |

第一部分

初等概率论

第一章 事件的概率

1.1 概率的发展史

赌博中的 de Méré's Problem: 连续掷一个均匀六面骰 4 次, 获得至少一次 “6” 的概率为 $1 - (\frac{5}{6})^4 \approx 0.5177$; 而连续掷两个均匀六面骰 24 次, 获得至少一次 “对 6” 的概率为 $1 - (35/36)^{24} \approx 0.4914$ 。

Pascal 和 Fermat 的通信中使用初等数学的方法, 首创了概率论相当多的数学理论, 虽然当时没有总结成通用的定理。

Laplace 创立了采用分析方法的分析概率论。

Kolmogorov 利用测度论方法发展了现代概率理论。

1.2 随机试验与事件

定义 1.1. 概率论中的随机试验指的是符合下面两个特点的试验:

1. 不能预先确知结果
2. 可以预测所有可能的结果

定义 1.2. 样本空间是指一个试验的所有可能结果的集合, 常用 Ω 表示。

定义 1.3. 事件是样本空间的一个良定义子集。

一次随机试验中, 一个事件可能发生或不发生。

下面是一些常见的事件:

1. 全事件 Ω (必然事件)
2. 空事件 \emptyset (不可能事件)
3. 基本事件 $\{a\}$, 其中 $a \in \Omega$, 即仅包含单一试验结果的事件

1.3 事件的运算

由于事件是集合，因此事件之间可以进行集合之间的运算，如：

1. 余 $A^c = \Omega \setminus A$
2. 和 $A + B = A \cup B = (A^c \cap B^c)^c$
3. 差 $A - B = A \setminus B$
4. 积 $AB = A \cap B = (A^c \cup B^c)^c$

集合的 De Morgan's laws 也适用于事件： $(\bigcup_n A_n)^c = \bigcap_n A_n^c$ 。

事件的运算像集合的运算一样，可以用 Venn 图来表示。

1.4 概率的几种解释

对于概率这一数学概念，人们形成了几种从不同角度出发的解释：

1. 古典解释：基于等可能性的解释
2. 频率解释：基于大量重复试验的解释（频率学派采用的解释）
3. 主观解释：概率是一种对确信程度的度量（Bayes 学派采用的解释）

1.5 概率的公理化定义

用 2^Ω 表示 Ω 的幂集，即 Ω 的所有子集组成的集合。

定义 1.4. 事件集类 $\mathcal{F} \subset 2^\Omega$ 必须满足所谓 σ -代数的性质：

1. $\Omega \in \mathcal{F}$
2. $A \in \mathcal{F} \Rightarrow A^c \in \mathcal{F}$ （对补运算的封闭性）
3. $A_i \in \mathcal{F}, \forall i \in \mathbb{N}^* \Rightarrow \bigcup_{i=1}^\infty A_i \in \mathcal{F}$ （对可列并的封闭性）

例 1.1. $\Omega = \{a, b, c, d\}$ ，以下是一些合法的事件集类：

1. $\mathcal{F}_1 = 2^\Omega$
2. $\mathcal{F}_2 = \{\Omega, \emptyset\}$
3. $\mathcal{F}_3 = \{\Omega, \emptyset, \{a, b\}, \{c, d\}\}$

定义 1.5. (Kolmogorov) 概率函数 $P: \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ 是满足以下三条公理的映射：

1. $P(A) \geq 0, \forall A \in \mathcal{F}$
2. $P(\Omega) = 1$

3. $A_i \in \mathcal{F}, \forall i \in \mathbb{N}^*, A_i A_j = \emptyset, \forall i \neq j \Rightarrow P(\sum_{i=1}^{\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$ (加法公理/可列可加性)

称 (Ω, \mathcal{F}, P) 是一个概率空间。

命题 1.1. 关于概率空间, 有如下性质:

1. $P(A) \leq 1, \forall A \in \mathcal{F}$
2. $P(\emptyset) = 0$
3. $P(A) + P(A^c) = 1$
4. $A_i \in \mathcal{F}, \forall i \in \{1, 2, \dots, n\}, A_i A_j = \emptyset, \forall i \neq j \Rightarrow P(\sum_{i=1}^n A_i) = \sum_{i=1}^n P(A_i)$ (有限可加性)

5. $A \subset B \Rightarrow P(A) \leq P(B)$ (称事件 A 蕴涵事件 B)

$$6. P(A_1 + \dots + A_n) = \sum_{i=1}^n P(A_i) - \sum_{i_1 < i_2} P(A_{i_1} A_{i_2}) \quad (\text{容斥公式})$$

$$+ \dots + (-1)^{r+1} \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_r} P(A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_r})$$

$$+ \dots + (-1)^{n+1} P(A_1 \dots A_n)$$

特别地, $P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB)$ 。

例 1.2. (配对问题)

有 n 个人, 每人有一顶帽子。现将所有帽子放到一起, 再随机分配给每人一顶, 考虑无人拿到自己的帽子的概率。

为此, 设事件 A_i 为“第 i 个人拿到自己的帽子”, 则 $P(A_i) = 1/n$ 。

利用容斥公式, 至少一人拿到自己帽子的概率为

$$P(A_1 + \dots + A_n)$$

$$= \sum_{i=1}^n P(A_i) - \sum_{i_1 < i_2} P(A_{i_1} A_{i_2})$$

$$+ \dots + (-1)^{r+1} \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_r} P(A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_r})$$

$$+ \dots + (-1)^{n+1} P(A_1 \dots A_n)$$

其中 $\sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_r} P(A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_r}) = \frac{(n-r)!}{n!} \binom{n}{r} = \frac{1}{r!}$, 即 $P(A_1 + \dots + A_n) = 1 - \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} - \frac{1}{4!} + \dots + (-1)^{r+1} \frac{1}{r!} + \dots + (-1)^{n+1} \frac{1}{n!}$ 。

所求概率 $P_n = 1 - P(A_1 + \dots + A_n) = 1 - (1 - \frac{1}{2!} + \dots + (-1)^{n+1} \frac{1}{n!}) \rightarrow e^{-1} (n \rightarrow +\infty)$ 。

思考: 恰有 k 个人拿到自己的帽子的概率?

1.6 条件概率

定义 1.6. 若 $P(B) > 0$, 定义条件概率 $P(A|B) = \frac{P(AB)}{P(B)}$ 。

通常, 计算条件概率的方法有两种:

1. 在缩小 (受限) 的样本空间 (要求事件 B 发生) 上, 考虑事件 A 发生的概率
2. 根据定义计算

一种常用的形式是 $P(AB) = P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A)$, 这可以视作是求解两个事件的积的概率的方法 (乘法法则)。

例 1.3. 掷一个均匀六面骰, $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, $A = \{2, 3, 4, 5\}$, $B = \{1, 3, 5\}$, 则 $P(A) = 4/6$, $P(B) = 3/6$, $P(AB) = 2/6$, $P(A|B) = \frac{P(AB)}{P(B)} = 2/3$ 。

例 1.4. 袋子中有 8 个红球和 4 个白球, 无放回地取出两个球, 利用组合数可知, 两个都是红球的概率为 $\frac{\binom{8}{2}}{\binom{12}{2}}$ 。

用条件概率可以简化计算: $P(R_1 R_2) = P(R_1)P(R_2|R_1) = \frac{8}{12} \times \frac{7}{11}$ 。

更一般地, 有 $P(A_1 A_2 \cdots A_n) = P(A_1)P(A_2|A_1)P(A_3|A_1 A_2) \cdots P(A_n|A_1 A_2 \cdots A_{n-1})$, 常用于序贯发生的一系列事件的积的概率求解。

例 1.5. 回忆上一节的“配对问题”。我们有

$$\begin{aligned} & P(A_{i_1} A_{i_2} \cdots A_{i_r}) \\ &= P(A_{i_1})P(A_{i_2}|A_{i_1}) \cdots P(A_{i_r}|A_{i_1} \cdots A_{i_{r-1}}) \\ &= \frac{1}{n} \times \frac{1}{n-1} \times \cdots \times \frac{1}{n-(r-1)} \\ &= \frac{(n-r)!}{n!}. \end{aligned}$$

命题 1.2. 对于给定的事件 B , $P(\cdot|B) : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ 是概率函数, 即 $(\Omega, \mathcal{F}, P(\cdot|B))$ 仍是概率空间。

对于上述命题的证明, 只需验证 $P(\cdot|B)$ 满足概率的三条公理即可。

这提示我们, 条件概率也是一种概率, 如果将 $P(A)$ 称为观察到事件 B 之前 A 的“先验概率”, 则 $P(A|B)$ 就是相应的“后验概率”。

一个常见的迷思是: 观测到事件 A 已经发生后, 是否可以说事件 A 发生的概率 $P(A) = 1$? 学过条件概率之后, 我们知道答案是否定的, 实际上是后验概率 $P(A|A) = 1$ 。

1.7 事件的独立性

定义 1.7. 若 $P(AB) = P(A)P(B)$, 则称事件 A, B 相互独立。

如果 $P(B) > 0$, 我们注意到 A, B 独立等价于 $P(A|B) = P(A)$ 。

命题 1.3. 若 A, B 独立, 则 A^c, B 独立。

定义 1.8. 若 $P(ABC) = P(A)P(B)P(C)$, 且 A, B, C 两两独立, 则称事件 A, B, C 独立。

注意, 仅有 A, B, C 两两独立, 不能推出三者独立。

定义 1.9. 若对于事件列 $\{A_i\}_{i=1}^\infty$, 任意取有限个事件 $A_{i_1}, A_{i_2}, \dots, A_{i_r}$, 都有 $P(A_{i_1}A_{i_2}\cdots A_{i_r}) = P(A_{i_1})P(A_{i_2})\cdots P(A_{i_r})$, 则称 $\{A_i\}_{i=1}^\infty$ 相互独立。

例 1.6. 每周开奖的彩票, 各次中奖率均为 10^{-5} 且独立, 问连续十年 (520 周) 不中奖的概率? 令事件 A_i 为第 i 周不中奖, 则 $P(A_i) = 1 - 10^{-5}$, 故 $P(A_1 \cdots A_{520}) = (1 - 10^{-5})^{520} \approx 0.9948$ 。

定义 1.10. 若事件 A, B, E 满足 $P(AB|E) = P(A|E)P(B|E)$, 则称 A, B 关于 E 条件独立。

注意, 条件独立性和独立性之间没有蕴涵关系。

1.8 Bayes 公式

定理 1.1. (全概率公式)

设 $\{B_i\}$ 是 Ω 的一个分割, 即

1. $\sum_i B_i = \Omega$
2. $B_i B_j = \emptyset, \forall i \neq j$
3. $P(B_i) > 0, \forall i$

则 $P(A) = P(\sum_i (AB_i)) = \sum_i P(AB_i) = \sum_i P(A|B_i)P(B_i)$ 。

注: $\{B_i\}$ 可以是有限集合, 或可数无穷集合。

例 1.7. 对于调查问卷中的敏感问题 (如 “你是否有过某病史”), 被调查者可能会有所顾虑而做出虚假的回答。为保护被调查者的隐私, 同时取得其信任, 考虑引入一个 “保护性问题”, 即不具有敏感性的问题 (如 “你是否会游泳”), 并让被调查者以抛硬币的方式, 随机抽取一个问题回答。这样, 抽到敏感问题的、确有过该病史的被调查者在回答 “是” 时也无须有病史暴露之虞。

设人群中, 敏感问题答案为 “是” 的比例为 p (未知), 保护性问题答案为 “是” 的比例为 q (假设已知), 则若收集到 n 个被调查者的结果, 其中 k 个为 “是”, 便有 $\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}q \approx \frac{k}{n}$, 可以据此得到 p 的估计。

定理 1.2. (Bayes 公式 / Bayes 准则)

设 $\{B_i\}$ 是 Ω 的一个分割, 则 $P(B_i|A) = \frac{P(B_i)P(A|B_i)}{\sum_j P(B_j)P(A|B_j)}$ 。

例 1.8. (假阳性悖论)

对于一种流行病, A 表示一个人检查呈阳性, B 表示此人确实患病。

设 $P(B) = 10^{-4}$, $P(A|B) = 0.99$, $P(A|B^c) = 10^{-3}$,

则一个检查呈阳性的人真的患病的概率仅为 $P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A|B)P(B)+P(A|B^c)P(B^c)} \approx 9\%$ 。

如果再次检测仍呈阳性, 且两次检测效率不变, 结果彼此独立, 则此人真的患病的概率为

$P(B|A_1A_2) = \frac{P(A_1A_2|B)P(B)}{P(A_1A_2|B)P(B)+P(A_1A_2|B^c)P(B^c)} = \frac{P(A_1|B)P(A_2|B)P(B)}{P(A_1|B)P(A_2|B)P(B)+P(A_1|B^c)P(A_2|B^c)P(B^c)} \approx 99\%$ 。

第二章 随机变量

2.1 一维随机变量

定义 2.1. 随机变量是样本空间上的实值函数。

注意，上述定义是不严格的。

更严谨的定义：若对于可测空间 (Ω, \mathcal{F}) 和函数 $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ，有 $\forall x \in \mathbb{R}, \{\omega | X(\omega) \leq x\} \in \mathcal{F}$ ，则称 X 是 (Ω, \mathcal{F}) 上的随机变量。其中“可测空间”是指 \mathcal{F} 是样本空间 Ω 上的 σ -代数。此处不要求“概率空间”，即随机变量的定义并不依赖概率测度 P 的存在。

例 2.1. 下表展示了两个随机变量。其中“像集”即 $\{X(\omega) | \omega \in \Omega\}$ 。

| 试验 | 样本空间 Ω | 随机变量 X | 像集 |
|-------------------|--------------------------------|-----------------------|-----------------------|
| 随机调查 50 人对某议题支持与否 | $\Omega_1 = \{0, 1\}^{50}$ | $X_1 = \text{“1”的个数}$ | $\{0, 1, \dots, 50\}$ |
| 随机抽取一名北京成年市民 | $\Omega_2 = \text{所有北京成年市民之集}$ | $X_2 = \text{其年收入}$ | \mathbb{R} |

注意，我们经常用“ $X_1 = 20$ ”、“ $X_2 > 100000$ ”等简化的记号来表示事件。例如，前者实际上指的是 $\{\omega \in \Omega_1 | X_1(\omega) = 20\}$ 。

诸如此类的试验结果集合需是事件，这体现出前述的随机变量严谨定义的意义。事实上，如果满足该严谨定义，则对于任意可测集 $I \subset \mathbb{R}$ ，都有 $\{\omega \in \Omega | X(\omega) \in I\} \in \mathcal{F}$ 。

随机变量是试验结果的数值摘要，起到一种概括的作用。随机变量的“随机”要素来自于样本点 $\omega \in \Omega$ 的随机选择。在实际应用中，随机变量常常比样本空间具有更直观的意义。

随机变量可以分为：

1. 离散型：至多可数多个取值
2. 连续型：区间型取值（非严格定义）
3. 其他

“其他”中的一个非常特殊的子类是所谓的混合型随机变量。

定义 2.2. 对于随机变量 X 和 \mathbb{R} 的可测子集 I (例如 $I = (a, b]$), 令 $X^{-1}(I) = \{\omega \in \Omega | X(\omega) \in I\} \subset \Omega$ 为 I 的原像集, 定义记号 $P(X \in I)$ 表示“ X 的取值在 I 中的概率”, 其值为 $P(X^{-1}(I))$ 。

例如, $P(a < X \leq b) = P(\{\omega | X(\omega) \in (a, b]\})$ 。

定义 2.3. $F_X(x) = P(X \leq x), \forall x \in \mathbb{R}$ 称为随机变量 X 的累积分布函数 (Cumulative Distribution Function, CDF)。下标 X 在无歧义时可省略。

我们有 $P(a < X \leq b) = F(b) - F(a)$ 。

例 2.2. 令 X 表示掷两个均匀六面骰所得的点数和, 则 X 的分布表 (详见 2.2 节) 为

| | | | | | | | | | | | |
|-----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| X | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| P | 1/36 | 2/36 | 3/36 | 4/36 | 5/36 | 6/36 | 5/36 | 4/36 | 3/36 | 2/36 | 1/36 |

相应的 CDF 见图 2.1。

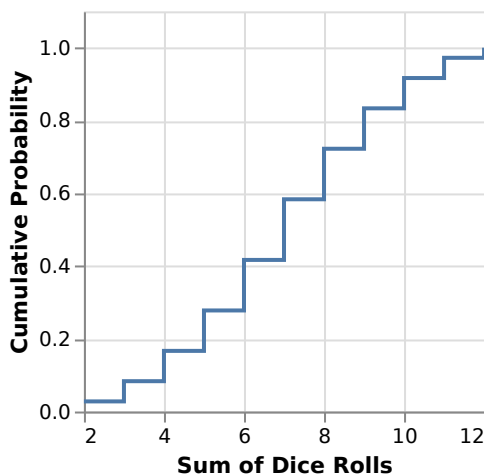


图 2.1: X 的 CDF 图象

注: 由于软件限制, 各个阶跃点的绘制方式不太规范, 实际上从其左侧逼近应该为一个空圈, 例如 $F(3) = 3/36$ 而不是 $1/36$ 。另外, $\forall x < 2, F(x) = 0; \forall x \geq 12, F(x) = 1$ 。

命题 2.1. CDF 的性质:

1. F 单调递增 (未必严格单调递增)
2. $\lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1, \lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0$
3. F 右连续

可以证明, 上述三条性质是任意函数 $F: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 成为 CDF 的充要条件。

思考: 如果将 CDF 的定义改为 $P(X < x)$, 上述性质会如何变化?

命题 2.2. 若 X, Y 为随机变量, 则 $aX + bY, XY, X/Y$ (需 $Y \neq 0$) 都是随机变量。一般地, 若 g 为可测函数, 则 $g(X, Y)$ 是随机变量。

定义 2.4. 设 X_1, X_2 的 CDF 分别为 F_1, F_2 , 称 X_1 与 X_2 同分布, 若 $\forall x \in \mathbb{R}, F_1(x) = F_2(x)$ 。

命题 2.3. 随机变量 X_1 与 X_2 同分布的一个充要条件是 \forall 可测集 $I \subset \mathbb{R}, P(X_1 \in I) = P(X_2 \in I)$ 。

注意, 同分布不等价于“同变量”, 即两个同分布的变量的取值不一定恒等。

例 2.3. 掷一次硬币, X 表示正面向上次数, Y 表示反面向上次数, 显然 X 与 Y 同分布, 但取值不等。

2.2 离散随机变量

定义 2.5. 离散随机变量 X 的概率质量函数 (Probability Mass Function, PMF) f 是指该随机变量取各个可能值的概率, 即 $f(x) = P(X = x), \forall x \in \mathbb{R}$ 。可以用分布表的形式展示各个可能取值与概率的对应关系。

命题 2.4. 如果离散随机变量 X 的所有可能取值为 $\{x_i\}$, 则 X 的 PMF 具有如下性质:

1. $f(x_i) = p_i \geq 0, \forall i$
2. $\sum_i p_i = 1$
3. $F(x) = \sum_{x_i \leq x} f(x_i)$

定义 2.6. 离散随机变量 X 的期望定义为 $E(X) = \sum_i x_i p_i$ 。

称 X 的期望存在, 当且仅当 $\sum_i |x_i| p_i < +\infty$ 。

当期望存在时, 其方差定义为 $\text{Var}(X) = \sum_i (x_i - E(X))^2 p_i = E((X - E(X))^2) = E(X^2) - E^2(X)$ 。

当方差有限时, 称其算术平方根为 X 的标准差, 记作 $\text{SD}(X)$ 。

注意, 通常我们所说的一个随机变量的均值指的就是期望。

标准化指的是对 X 作线性变换 $\frac{X - \mu}{\sigma}$, 其中 μ 和 σ 分别为 X 的期望和标准差, 得到均值为 0, 标准差为 1 的随机变量。

对于可测函数 g , $g(X)$ 也是随机变量, 其期望 $E(g(X)) = \sum_i g(x_i) p_i$ 。

期望反映了随机变量的集中趋势, 而方差反映了其分散程度。

2.3 常见离散分布

定义 2.7. 称一个随机变量 X 服从 *Bernoulli* 分布, 若 $\exists p \in (0, 1)$, X 的取值集合为 $\{0, 1\}$, 且 $P(X = 1) = p, P(X = 0) = 1 - p$. 记作 $X \sim B(p)$.

$B(p)$ 中的 p 称为该 *Bernoulli* 分布的参数。后续介绍的其他分布同理。

常将两种取值分别称为“成功”和“失败”。

计算可得, 若 $X \sim B(p)$, 则 $E(X) = p, \text{Var}(X) = p(1 - p)$ 。

定义 2.8. 称一个随机变量 X 服从二项分布, 若 $\exists N \in \mathbb{N}^*, p \in (0, 1)$, X 的取值集合为 $\{0, 1, \dots, N\}$, 且 $P(X = k) = \binom{N}{k} p^k (1 - p)^{N-k} (k \in \{0, 1, \dots, N\})$. 记作 $X \sim B(N, p)$ 。

常将 k 理解为“ N 次独立 *Bernoulli* 试验中的成功次数”。

计算可得, 若 $X \sim B(N, p)$, 则 $E(X) = Np, \text{Var}(X) = Np(1 - p)$ 。

定义 2.9. 称一个随机变量 X 服从 *Poisson* 分布, 若 $\exists \lambda > 0$, X 的取值集合为 \mathbb{N} , 且 $P(X = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!} (k \in \mathbb{N})$. 记作 $X \sim P(\lambda)$ 。

计算可得, 若 $X \sim P(\lambda)$, 则 $E(X) = \lambda, \text{Var}(X) = \lambda$ 。

对 *Poisson* 分布的一种常见理解是“一段时间内某个小概率事件发生的次数”所服从的分布。例如, 观察时间 $(0, 1]$ 内某路口的交通事故数 X , 将 $(0, 1]$ 区间等分成 n 个小区间, 即 $l_i = (\frac{i-1}{n}, \frac{i}{n}] (i = 1, 2, \dots, n)$ 。考虑到 n 很大时, 每个区间的长度很小, 作如下假设:

1. 每段区间内, 至多发生一次事故
2. l_i 上发生一次事故的概率与区间长度 $(1/n)$ 成正比, 为 $p = \lambda/n$
3. 各区间内是否发生事故彼此独立

则 $P(X = k) = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k} \rightarrow \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!} (n \rightarrow +\infty)$, 即 $X \sim P(\lambda)$ 。

例 2.4. 设某医院平均每天出生婴儿数为 λ , 则接下来 t 天内出生婴儿数服从参数为 $t\lambda$ 的 *Poisson* 分布。

对于一般的二项分布 $X \sim B(N, p)$, 若 p 很小, N 很大, 而 $\lambda = Np$ 不太大, 则近似有 $X \sim P(\lambda)$, 且近似误差不超过 $\min\{p, Np^2\}$ 。

进一步, 若 N 次 *Bernoulli* 试验并非严格独立, 但满足弱相依条件, 则 *Poisson* 分布仍为一种较好的近似。

例 2.5. (配对问题)

A_i 表示第 i 个人拿到自己的帽子, 则 $P(A_i) = 1/n, P(A_i | A_j) = \frac{1}{n-1} (j \neq i)$, 当 n 很大时, $1/n$

和 $\frac{1}{n-1}$ 很接近, 可以认为满足弱相依条件。

记 X 为拿到自己帽子的人数, 则 X 近似服从参数为 $\lambda = np = n \cdot \frac{1}{n} = 1$ 的 Poisson 分布, 即 $P(X = k) \approx \frac{e^{-1}}{k!}$ 。

我们用常规做法检查这种近似是否合理。首先考虑指定的某 k 人, 记事件 E 表示这 k 人拿到自己的帽子, 事件 F 表示其余 $(n - k)$ 人未拿到自己的帽子, 则 $P(EF) = P(E)P(F|E) = \frac{(n-k)!}{n!} \cdot P_{n-k}$, 其中 P_{n-k} 为 $(n - k)$ 人随机拿帽子时无人拿对的概率。那么 $P(X = k) = \binom{n}{k}P(EF) = \frac{1}{k!}P_{n-k} \rightarrow \frac{e^{-1}}{k!} (n \rightarrow +\infty)$ 。这说明前述的近似是较好的。

2.4 连续随机变量

定义 2.10. 对随机变量 X , 若存在 $f: \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty)$, 使得 \forall 可测集 $I \subset \mathbb{R}$, 都有 $P(X \in I) = \int_I f(x)dx$, 则称 X 为连续型随机变量, f 称为其概率密度函数 (Probability Density Function, PDF)。

命题 2.5. 连续随机变量 X 的 PDF 具有如下性质:

1. $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \equiv 1$
2. $P(a < X \leq b) = \int_a^b f(x)dx = P(a \leq X \leq b) = P(a \leq X < b) = P(a < X < b)$
3. $P(X = a) \equiv 0, \forall a \in \mathbb{R}$
4. 若 f 在 x_0 处连续, 则 $P(x_0 - \delta < X < x_0 + \delta) = \int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} f(t)dt \approx f(x_0) \cdot 2\delta$
5. $F(x) = \int_{-\infty}^x f(t)dt$ 连续, 且若 f 在 x 处连续, 有 $F'(x) = f(x)$
6. PDF 若存在, 则不唯一 (可以修改其在任意零测集上的值, 得到不同的 PDF)

定义 2.11. 连续随机变量 X 的期望定义为 $E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx$ 。

称 X 的期望存在, 当且仅当 $\int_{-\infty}^{+\infty} |x|f(x)dx < +\infty$ 。

当期望存在时, 其方差定义为 $\text{Var}(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - E(x))^2 f(x)dx = E((X - E(X))^2) = E(X^2) - E^2(X)$ 。

当方差有限时, 称其算术平方根为 X 的标准差, 记作 $\text{SD}(X)$ 。

对于可测函数 g , $g(X)$ 也是随机变量, 其期望 $E(g(X)) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)f(x)dx$ 。

2.5 常见连续分布

定义 2.12. 称一个连续型随机变量 X 服从均匀分布, 若其 PDF 为 $f(x) = \frac{1}{b-a}(x \in (a, b))$, f 在其余各处取 0。记作 $X \sim U(a, b)$ 。

常将 $X \sim U(0, 1)$ 称为随机数。

计算可得, 若 $X \sim U(a, b)$, 则 $E(X) = \frac{a+b}{2}$, $\text{Var}(X) = \frac{(b-a)^2}{12}$ 。

定义 2.13. 称一个连续型随机变量 X 服从正态分布, 若其 PDF 为 $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ ($\sigma > 0$)。记作 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 。

计算可得, 若 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 则 $E(X) = \mu$, $\text{Var}(X) = \sigma^2$ 。

著名的“经验法则”见图 2.2。



图 2.2: 经验法则

$X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 的充要条件是 $Y = \frac{X-\mu}{\sigma} \sim N(0, 1)$ 。 $N(0, 1)$ 称为标准正态分布。

定义 2.14. 称一个连续型随机变量 X 服从指数分布, 若其 PDF 为 $f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$ ($\lambda > 0, x > 0$), f 在其余各处取 0。记作 $X \sim \text{Exp}(\lambda)$ 。

指数分布常用于刻画等待时间、寿命等。

计算可得, 若 $X \sim \text{Exp}(\lambda)$, 则 $E(X) = 1/\lambda$, $\text{Var}(X) = 1/\lambda^2$ 。

指数分布有另一种符号约定, 以 $\beta = 1/\lambda$ 为参数, 一些数学软件可能采用此种约定。

指数分布的 CDF 为 $F(x) = 1 - e^{-\lambda x}$ ($x > 0$), 所谓的“尾概率”为 $P(X > x) = 1 - F(x) = e^{-\lambda x}$ ($x > 0$)。

例 2.6. 设某医院平均每天出生婴儿数为 λ ，现在观察到一名婴儿出生，则接下来 t 天内有婴儿出生的概率为 $P(X \leq t)$ ，其中 X 表示到下一个婴儿出生所需等待的时间。

记 $N(t)$ 为 t 天内出生婴儿数，我们已经知道 $N(t) \sim P(t\lambda)$ ，则 $P(X > t) = P(N(t) = 0) = e^{-\lambda t}$ ，故 $P(X \leq t) = 1 - e^{-\lambda t}$ ，即 X 服从参数为 λ 的指数分布。

我们从另一个角度理解指数分布。

首先引入失效率或危险率的概念。设 X 为连续型随机变量（表示某种零件的寿命），其 CDF 为 $F(x)$ ，且 $F(0) = 0$ 。考虑条件概率 $P(x < X < x + dx | X > x) = \frac{P(x < X < x + dx)}{P(X > x)} = \frac{F(x+dx) - F(x)}{1 - F(x)} \approx \frac{F'(x)}{1 - F(x)} dx$ ，即“年龄”为 x 的零件不能继续工作的条件概率密度为 $\frac{F'(x)}{1 - F(x)}$ ，称其为瞬时失效率 $\lambda(x)$ ，则 $F(x) = 1 - e^{-\int_0^x \lambda(t) dt}$ 。

在“无老化”假设下，即 $\lambda(t) \equiv \lambda$ 不随时间变化，则 $F(x) = 1 - e^{-\lambda x} (x > 0)$ ， X 服从指数分布。

指数分布有所谓“无记忆性”： $P(X > t+s | X > s) = \frac{P(X > t+s)}{P(X > s)} = e^{-\lambda t} = P(X > t) (t, s > 0)$ 。

“无老化”假设并不总是成立。为此，可以进行一定程度的改进，例如令 $\lambda(x) = \alpha \frac{x^{\alpha-1}}{\beta^\alpha} (x > 0, \alpha, \beta > 0 \text{ 为常数})$ ，则 $F(x) = 1 - e^{-(\frac{x}{\beta})^\alpha} (x > 0)$ ，称之为 Weibull 分布。当 $\alpha = 1$ 时，Weibull 分布退化为参数为 $1/\beta$ 的指数分布。

总览至此介绍过的各个分布的参数，可以将其大致分为以下几类：

1. 位置参数：决定了分布平移到的位置，通常在 PMF/PDF 中体现为 $f(x) = g(x - \cdot)$ 的形式，如正态分布的参数 μ
2. 尺度参数：决定了分布伸缩的程度，通常在 PMF/PDF 中体现为 $f(x) = g(\frac{x}{\cdot})$ 的形式，如正态分布的参数 σ 、Weibull 分布的参数 β
3. 形状参数：决定了分布的形状，如 Weibull 分布的参数 α

2.6 随机变量的函数

对于随机变量 X 和可测函数 g ， $Y = g(X)$ 也是随机变量。特别地，若 X 为离散型随机变量，则 Y 也离散。但若 X 为连续型随机变量， Y 未必连续。

例 2.7. $X \sim \text{Exp}(\lambda)$ ， $Y = \begin{cases} 0, & X \leq t_0, \\ 1, & X > t_0, \end{cases}$ 其中 $t_0 > 0$ 为常数，则 $Y \sim B(e^{-\lambda t_0})$ 。

例 2.8. 设 X 为连续型随机变量，PDF 为 $f(x)$ ，考虑 $Y = X^2$ 。

从 CDF 入手， $\forall y > 0, P(Y \leq y) = P(X^2 \leq y) = P(-\sqrt{y} \leq X \leq \sqrt{y}) = \int_{-\sqrt{y}}^{\sqrt{y}} f(x) dx$ ，有 Y 的 PDF 为 $l(y) = \frac{d}{dy} P(Y \leq y) = \frac{1}{2\sqrt{y}} (f(\sqrt{y}) + f(-\sqrt{y})) (y > 0)$ 。

特别地，若 $X \sim N(0, 1)$ ，称 Y 服从自由度为 1 的 χ^2 -分布，读作“卡方分布”。

若 $Y = g(X)$ 为随机变量，可以计算 Y 的分布如下：

- $P(Y = y) = P(g(X) = y) = P(X \in g^{-1}(y))$
- $P(Y \leq y) = P(g(X) \leq y) = P(X \in g^{-1}((-\infty, y]))$

第三章 联合分布

3.1 随机向量

定义 3.1. 称 $(X_1, X_2, \dots, X_n) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ 为 $(n \text{ 维})$ 随机向量, 若 $\{X_i\}_{i=1}^n$ 均为随机变量。

定义 3.2. n 维随机向量的 (联合) (累积) 分布函数 (CDF) 定义为 $F(x_1, \dots, x_n) = P(X_1 \leq x_1, \dots, X_n \leq x_n), \forall (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ 。

对于 $n = 2$ (二元分布) 的情形, 常用 (X, Y) 来表示随机向量, 对应的 CDF 为 $F(x, y)$ 。

3.2 离散分布

定义 3.3. 称 n 维随机向量 (X_1, \dots, X_n) 是离散的, 当且仅当 $\{X_i\}_{i=1}^n$ 均为离散随机变量。

离散随机向量 (X_1, \dots, X_n) 的 (联合) 概率质量函数 (PMF) 定义为 $f(x_1, \dots, x_n) = P(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n), \forall (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ 。

命题 3.1. 离散随机向量 (X_1, \dots, X_n) 的 PMF 具有如下性质:

1. $f(x_1, \dots, x_n) \geq 0, \forall (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$
2. $\sum_{x_i \in \{X_i(\omega) | \omega \in \Omega\}, \forall i \in \{1, \dots, n\}} f(x_1, \dots, x_n) \equiv 1$

注意第 2 条性质中求和的项数为至多可数, 原因是有限个至多可数集的笛卡尔积仍是至多可数集。

例 3.1. 设 $\{B_i\}_{i=1}^n$ 为 Ω 的一个分割 (分割的定义见 1.8 节), $P(B_i) = p_i \geq 0, \forall i \in \{1, \dots, n\}$, $\sum_{i=1}^n p_i = 1$ 。

进行 N 次独立试验, 设 $\forall i \in \{1, \dots, n\}$, 有 X_i 个试验结果落在 B_i 中, 则若 $k_1 + \dots + k_n = N$, 其中 k_i 均为非负整数, 有 $P(X_1 = k_1, \dots, X_n = k_n) = \binom{N}{k_1, \dots, k_n} p_1^{k_1} \dots p_n^{k_n}$ 。其中 $\binom{N}{k_1, \dots, k_n} = \frac{N!}{k_1! \dots k_n!}$ 为多项式 $(a_1 + \dots + a_n)^N$ 中 $a_1^{k_1} \dots a_n^{k_n}$ 项的系数。

称 (X_1, \dots, X_n) 服从多项分布。

3.3 连续分布

定义 3.4. 对 n 维随机向量 (X_1, \dots, X_n) , 若存在 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow [0, +\infty)$, 使得 \forall 可测集 $Q \subset \mathbb{R}^n$, 都有 $P((X_1, \dots, X_n) \in Q) = \int_Q f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n$, 则称 (X_1, \dots, X_n) 为连续型随机向量, f 称为其 (联合) 概率密度函数 (PDF)。

命题 3.2. 连续随机向量 (X_1, \dots, X_n) 的 PDF 具有如下性质:

1. $\int_{\mathbb{R}^n} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n \equiv 1$
2. 以 $n=2$ 为例, $F(x, y) = \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y f(t, s) ds dt$, $f(a, b) = \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}(a, b)$, a.e.

其中 a.e. 表示 “almost everywhere”。

例 3.2. 矩形域上的均匀分布的 PDF: $f(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{(b-a)(d-c)}, & (x, y) \in (a, b) \times (c, d), \\ 0, & \text{其他.} \end{cases}$

例 3.3. 二元正态分布 $(X, Y) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$ 的 PDF:

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2} \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} e^{-\frac{1}{2(1-\rho^2)}((\frac{x-\mu_1}{\sigma_1})^2 + (\frac{y-\mu_2}{\sigma_2})^2 - 2\rho\frac{x-\mu_1}{\sigma_1}\frac{y-\mu_2}{\sigma_2})}, \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, \sigma_1, \sigma_2 > 0, |\rho| < 1.$$

令 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \frac{x-\mu_1}{\sigma_1} \\ \frac{y-\mu_2}{\sigma_2} \end{bmatrix}$, $W = \frac{1}{1-\rho^2} \begin{bmatrix} 1 & -\rho \\ -\rho & 1 \end{bmatrix}$, $W = A^T A$ 为正定矩阵 W 的 Cholesky 分解, 则 $-\frac{1}{2(1-\rho^2)}((\frac{x-\mu_1}{\sigma_1})^2 + (\frac{y-\mu_2}{\sigma_2})^2 - 2\rho\frac{x-\mu_1}{\sigma_1}\frac{y-\mu_2}{\sigma_2}) = -\frac{1}{2}\mathbf{x}^T W \mathbf{x} = -\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A^T A \mathbf{x} = -\frac{1}{2}(A\mathbf{x})^T (A\mathbf{x})$.

上述 Cholesky 分解的结果为 $A = \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \begin{bmatrix} 1 & -\rho \\ 0 & \pm\sqrt{1-\rho^2} \end{bmatrix}$ 或 $A = \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \begin{bmatrix} -1 & \rho \\ 0 & \pm\sqrt{1-\rho^2} \end{bmatrix}$ 。

3.4 边际分布

对 n 维随机向量 (X_1, \dots, X_n) , 称 $F_i(x) = P(X_i \leq x) = P(X_i \leq x, -\infty < X_j < +\infty, \forall j \neq i)$ 为 X_i 的边际分布。

例如, 若 $n=2$, 随机向量 (X, Y) 有 CDF $F(x, y)$, 则 X 的边际分布为 $F_X(x) = P(X \leq x) = P(X \leq x, Y \in \mathbb{R}) = \lim_{y \rightarrow +\infty} P(X \leq x, -\infty < Y \leq y) = \lim_{y \rightarrow +\infty} F(x, y)$ 。

若 $n=3$, 随机向量 (X, Y, Z) 有 CDF $F(x, y, z)$, 则 $F_X(x) = \lim_{y, z \rightarrow +\infty} F(x, y, z)$, 而 (X, Y) 的边际分布为 $F_{X,Y}(x, y) = P(X \leq x, Y \leq y) = P(X \leq x, Y \leq y, -\infty < Z < +\infty) = \lim_{z \rightarrow +\infty} F(x, y, z)$ 。

例 3.4. 设二维随机向量 (X, Y) 的 CDF 为 $F(x, y)$, 则 $\forall a, b \in \mathbb{R}, P(X > a, Y > b) = 1 - F_X(a) - F_Y(b) + F(a, b)$ 。

对于离散型随机向量, 以 $n = 2$ 为例, 定义边际 PMF 为 $P(X = x) = \sum_y P(X = x, Y = y)$ 。

对于连续型随机向量, 以 $n = 2$ 为例, 设联合 PDF 为 $f(x, y)$, 则 $F_X(x) = P(X \leq x, Y \in \mathbb{R}) = \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, s) ds dt$, 则 X 的边际 PDF 为 $f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dy$ 。

例 3.5. $(X, Y) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$, 则 $f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}}$, 即 $X \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$ 。同理 $Y \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$ 。

3.5 条件分布

以 $n = 2$ 为例说明条件分布的概念, 考虑随机向量 (X, Y) 。

对于离散型随机向量, 设联合 PMF 为 $P(X = a_i, Y = b_j) = p_{ij} \geq 0, \sum_{i,j} p_{ij} \equiv 1$, 则在 $Y = b_j$ 条件下的 X 的条件 PMF 为 $P(X = a_i | Y = b_j) = \frac{P(X=a_i, Y=b_j)}{P(Y=b_j)} = \frac{p_{ij}}{\sum_k p_{kj}}$ 。条件 PMF 满足 $\sum_i P(X = a_i | Y = b_j) \equiv 1, \forall j$ 。

对于连续型随机向量, 设联合 PDF 为 $f(x, y)$, 首先考虑条件概率 $P(X \leq x | y \leq Y \leq y + dy) = \frac{P(X \leq x, y \leq Y \leq y + dy)}{P(y \leq Y \leq y + dy)} = \frac{\int_{-\infty}^x \int_y^{y+dy} f(t, s) ds dt}{\int_y^{y+dy} f_Y(s) ds}$, 对 x 求导得 X 在 $y \leq Y \leq y + dy$ 条件下的条件 PDF 为 $\frac{\int_y^{y+dy} f(x, s) ds}{\int_y^{y+dy} f_Y(s) ds} \rightarrow \frac{f(x, y)}{f_Y(y)} (dy \rightarrow 0)$ 。

定义 3.5. 对于连续型随机向量 (X, Y) , 设联合 PDF 为 $f(x, y)$, 若 $f_Y(y) > 0$, 则称 X 在 $Y = y$ 条件下的条件 PDF 为 $f_{X|Y}(x|y) = \frac{f(x, y)}{f_Y(y)}$ 。

可以验证 $f_{X|Y}(x|y)$ 满足 PDF 的各性质。

相应的条件 CDF 为 $F_{X|Y}(a|y) = P(X \leq a | Y = y) = \int_{-\infty}^a f_{X|Y}(x|y) dx$ 。

我们熟知的各个定理均有适用于连续型随机向量的版本:

1. $f(x, y) = f_{X|Y}(x|y)f_Y(y) = f_{Y|X}(y|x)f_X(x)$ (乘法法则)
2. $f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{X|Y}(x|y)f_Y(y) dy$ (全概率公式)
3. $f_{Y|X}(y|x) = \frac{f(x, y)}{f_X(x)} = \frac{f_{X|Y}(x|y)f_Y(y)}{\int_{-\infty}^{+\infty} f_{X|Y}(x|y)f_Y(y) dy}$ (Bayes 公式)

例 3.6. $(X, Y) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$, 则 $f_{Y|X}(y|x) = \frac{f(x, y)}{f_X(x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} e^{-\frac{(y-(\mu_2+\rho\frac{\sigma_2}{\sigma_1}(x-\mu_1)))^2}{2(1-\rho^2)\sigma_2^2}}$, 即 $Y|X = x \sim N(\mu_2 + \rho\frac{\sigma_2}{\sigma_1}(x - \mu_1), (1 - \rho^2)\sigma_2^2)$ 。

3.6 独立性

定义 3.6. 设二维随机向量 (X, Y) 的 CDF 为 $F(x, y)$, 若 $F(x, y) = F_X(x)F_Y(y), \forall x, y \in \mathbb{R}$, 则称 X, Y 相互独立。

可以证明, 对于二维离散型 (或连续型) 随机向量 (X, Y) , X, Y 相互独立的充要条件是 $f(x, y) = f_X(x)f_Y(y), \forall x, y \in \mathbb{R}$, 其中 $f(x, y)$ 为联合 PMF (或 PDF)。

定义 3.7. 设 n 维随机向量 (X_1, \dots, X_n) 的 CDF 为 $F(x_1, \dots, x_n)$, 若 $F(x_1, \dots, x_n) = F_1(x_1) \cdots F_n(x_n), \forall x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, 则称 X_1, \dots, X_n 相互独立。

可以证明, 对于 n 维离散型 (或连续型) 随机向量 (X_1, \dots, X_n) , X_1, \dots, X_n 相互独立的充要条件是 $f(x_1, \dots, x_n) = f_1(x_1) \cdots f_n(x_n), \forall x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, 其中 $f(x_1, \dots, x_n)$ 为联合 PMF (或 PDF)。

定理 3.1.

1. 若 X_1, \dots, X_n 相互独立, 则 $\forall m \in \{1, \dots, n-1\}$, 可测函数 g_1, g_2 , 有 $Y_1 = g_1(X_1, \dots, X_m)$ 与 $Y_2 = g_2(X_{m+1}, \dots, X_n)$ 相互独立。
2. 若 n 维连续型随机向量 (X_1, \dots, X_n) 的联合 PDF 满足

$$f(x_1, \dots, x_n) = g_1(x_1) \cdots g_n(x_n), \forall x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R},$$

其中 $g_i: \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty), \forall i \in \{1, \dots, n\}$, 则 X_1, \dots, X_n 相互独立, 且 X_i 的边际 PDF f_i 与 g_i 相差常数因子, $\forall i \in \{1, \dots, n\}$ 。

例 3.7. 设 (X, Y) 服从如图 3.1 的三角形域 D 上的均匀分布, 即 $f(x, y) = \begin{cases} c, & (x, y) \in D, \\ 0, & \text{其他,} \end{cases}$ 则 X, Y 不独立。



图 3.1: 三角形域上的均匀分布

3.7 随机向量的函数

本节中, 考虑给定随机向量 (X_1, \dots, X_n) 和可测函数 g , 如何求 $Y = g(X_1, \dots, X_n)$ 的分布。

首先介绍“直接法”。

例 3.8. $X_i \sim B(n_i, p) (i = 1, 2)$ 独立, $Y = X_1 + X_2$, 则 $\forall k \in \{0, 1, \dots, n_1 + n_2\}$,

$$\begin{aligned}
 P(Y = k) &= P(X_1 + X_2 = k) \\
 &= \sum_{k_1=0}^k P(X_1 = k_1, X_2 = k - k_1) \\
 &= \sum_{k_1=0}^k P(X_1 = k_1)P(X_2 = k - k_1) \\
 &= \sum_{k_1=0}^k \binom{n_1}{k_1} p^{k_1} (1-p)^{n_1-k_1} \binom{n_2}{k-k_1} p^{k-k_1} (1-p)^{n_2-(k-k_1)} \\
 &= \left(\sum_{k_1=0}^k \binom{n_1}{k_1} \binom{n_2}{k-k_1} \right) p^k (1-p)^{n_1+n_2-k} \\
 &= \binom{n_1+n_2}{k} p^k (1-p)^{n_1+n_2-k}
 \end{aligned}$$

因此 $Y \sim B(n_1 + n_2, p)$ 。

例 3.9. 随机向量 (X_1, X_2) 有联合 PDF $f(x_1, x_2)$, 且 $X_1 > 0$, 考虑 $Y = X_2/X_1$, 有 $\forall y \in \mathbb{R}, P(Y \leq y) = P(\frac{X_2}{X_1} \leq y) = P(X_2 \leq X_1 y) = \int_D f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{yx_1} f(x_1, x_2) dx_2 dx_1$, 作 $x_2 = x_1 t$ 换元得 $P(Y \leq y) = \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^y f(x_1, x_1 t) x_1 dt dx_1$, 故 Y 的 PDF 为 $l(y) = \int_0^{+\infty} x_1 f(x_1, yx_1) dx_1$ 。

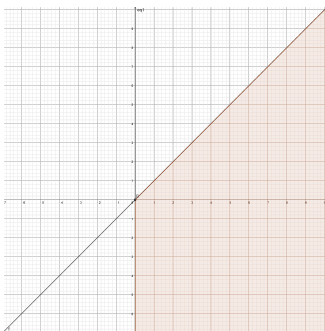


图 3.2: 区域 D 的范围, 其中边界线的斜率为 y

接下来介绍“密度函数变换法”。

设随机向量 (X_1, X_2) 有联合 PDF $f(x_1, x_2)$, 且有可逆可微的映射关系 $\begin{cases} Y_1 = g_1(X_1, X_2), \\ Y_2 = g_2(X_1, X_2), \end{cases}$

据此解出逆映射 $\begin{cases} X_1 = h_1(Y_1, Y_2), \\ X_2 = h_2(Y_1, Y_2), \end{cases}$ 则对于任意可测集 A , 若 (h_1, h_2) 将 A 映射到集合 B ,

则由可逆性可知 B 在 (g_1, g_2) 的映射下的值域为 A 。因此 $P((Y_1, Y_2) \in A) = P((X_1, X_2) \in B) = \int_B f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \int_A f(h_1(y_1, y_2), h_2(y_1, y_2)) |J| dy_1 dy_2$, 其中 J 为 Jacobi 行列式 $\det \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial y_1} & \frac{\partial h_1}{\partial y_2} \\ \frac{\partial h_2}{\partial y_1} & \frac{\partial h_2}{\partial y_2} \end{bmatrix}$, 因此 (Y_1, Y_2) 的联合 PDF 为 $l(y_1, y_2) = f(h_1(y_1, y_2), h_2(y_1, y_2)) |J|$ 。

例 3.10. 随机向量 (X_1, X_2) 有联合 PDF $f(x_1, x_2)$, 为求 $Y = X_1 + X_2$ 的 PDF, 引入 $Z = X_1$, 则 $\begin{cases} X_1 = Z, \\ X_2 = Y - Z, \end{cases}$ Jacobi 行列式为 $\det \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = -1$, 故 (Y, Z) 的联合 PDF 为 $f(z, y - z) | -1 | = f(z, y - z)$, Y 的边际 PDF 为 $l_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(z, y - z) dz$ 。

上例中, 若 X_1, X_2 相互独立, 则 $f(x_1, x_2) = f_1(x_1)f_2(x_2) \Rightarrow l_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(z)f_2(y - z)dz$, 这称之为 f_1 和 f_2 的卷积, 记作 $f_1 * f_2$ 。

特别地, 若 $(X_1, X_2) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$, 则 $X_1 + X_2 \sim N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2\rho\sigma_1\sigma_2)$ 。

利用上述随机向量的函数的 PDF 求解方法, 可以得到所谓卡方分布 (χ^2 -分布)、 t -分布和 F -分布的 PDF。这些分布的表达式较为复杂, 在此不一一罗列。感兴趣的同学可以查阅资料, 简单了解一下它们与标准正态分布的联系。

第四章 随机变量的数字特征

4.1 期望

离散型和连续型随机变量的期望分别参见定义 2.6 和定义 2.11。

对于随机向量，期望自然推广定义为 $E((X_1, \dots, X_n)) = (E(X_1), \dots, E(X_n))$ 。

命题 4.1. 期望有如下性质：

1. 离散型和连续型随机向量的函数的期望 $E(g(X_1, \dots, X_n))$ 分别等于

$$\sum_{x_i \in \{X_i(\omega) | \omega \in \Omega, \forall i \in \{1, \dots, n\}\}} g(x_1, \dots, x_n) f(x_1, \dots, x_n)$$

$$\text{和 } \int_{\mathbb{R}^n} g(x_1, \dots, x_n) f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n,$$

其中 g 为可测函数， f 分别为联合 PMF 与联合 PDF

2. $E(aX + bY) = aE(X) + bE(Y), \forall$ 常数 $a, b \in \mathbb{R}$
3. 若 X_1, \dots, X_n 相互独立，则 $E(X_1 \cdots X_n) = E(X_1) \cdots E(X_n)$

4.2 分位数

定义 4.1. 设 X 为连续型随机变量，若 $P(X \leq m) = F(m) = 1/2$ ，则称 m 为 X 的中位数。

和均值一样，中位数也是随机变量集中趋势的一种刻画。中位数不一定唯一。

若 m 是连续型随机变量 X 的中位数，则 $P(X < m) = P(X > m) = 1/2$ 。

以下给出更一般的中位数定义。

定义 4.2. 对随机变量 X ，若 $P(X < m) \leq 1/2$ ，且 $P(X > m) \leq 1 - 1/2 = 1/2$ ，则称 m 为 X 的中位数。

例 4.1. 设离散型随机变量 X 的分布表为

| | | | | |
|-----|-----|-----|------|------|
| X | 1 | 2 | 3 | 4 |
| P | 1/3 | 1/2 | 1/12 | 1/12 |

则其中位数为 2。

定义 4.3. 对随机变量 X , $\forall \alpha \in (0, 1)$, 若 $P(X < a) \leq \alpha$ 且 $P(X > a) \leq 1 - \alpha$, 则称 a 为 X 的 (下侧) α -分位数。

上述定义的 α -分位数是不唯一的。为了唯一性, 考虑定义 $F^{-1}(\alpha) = \inf\{x | F(x) \geq \alpha\}$ 。

我们给出众数 (mode) 的方便定义: $f(x)$ 的最大值点, 其中 $f(x)$ 为 PMF 或 PDF。由于 PDF 可在任意零测集上修改取值, 故这一定义并非严谨的。

4.3 方差

离散型和连续型随机变量的方差分别参见定义 2.6 和定义 2.11。

方差的意义: 若 X 为收益率, 则 $SD(X)$ 称为波动率, 刻画了风险的大小。定义变异系数 $CV = \frac{SD(X)}{\mu}$, 其中 $\mu = E(X) \neq 0$ 。

命题 4.2. 方差有如下性质:

1. $\text{Var}(C) \equiv 0, C$ 为常数
2. $\text{Var}(CX) = C^2 \text{Var}(X)$
3. $\text{Var}(X + Y) = \text{Var}(X) + \text{Var}(Y) + 2E((X - E(X))(Y - E(Y)))$, 且若 X, Y 独立, 则 $E((X - E(X))(Y - E(Y))) = 0$

4.4 协方差与相关系数

对随机变量 X, Y , 设 $E(X) = \mu_1, E(Y) = \mu_2, \text{Var}(X) = \sigma_1^2, \text{Var}(Y) = \sigma_2^2$ 。

定义 4.4. 称 X 与 Y 的协方差 $\text{Cov}(X, Y) = E((X - \mu_1)(Y - \mu_2))$ 。

命题 4.3. 协方差有如下性质:

1. $\text{Cov}(X, X) = \text{Var}(X)$
2. $\text{Cov}(X, Y) = \text{Cov}(Y, X)$
3. $\text{Cov}(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y)$
4. $\text{Cov}(aX_1 + bX_2 + c, Y) = a\text{Cov}(X_1, Y) + b\text{Cov}(X_2, Y), \forall$ 常数 $a, b, c \in \mathbb{R}$

定义 4.5. 称 X 与 Y 的 (线性) 相关系数 $\text{Corr}(X, Y) = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma_1 \sigma_2} = E\left(\frac{X - \mu_1}{\sigma_1} \frac{Y - \mu_2}{\sigma_2}\right)$ 。

若 $\text{Corr}(X, Y) = 0$, 称 X, Y 不相关。

定理 4.1. 相关系数有如下性质:

1. 若 X, Y 相互独立, 则 X, Y 不相关 (反之未必成立)

2. $|\text{Corr}(X, Y)| \leq 1$, 且等号成立当且仅当 $\exists a, b, P(Y = aX + b) = 1$, 即 $Y = aX + b, \text{a.s.}$

其中 a.s. 表示 “almost surely”。

为证明上述定理的 (2), 首先利用 Cauchy-Schwartz 不等式证明引理: 对随机变量 U, V , 有 $E^2(UV) \leq E(U^2)E(V^2)$, 且等号成立当且仅当 $\exists t_0 \in \mathbb{R}, P(V = t_0 U) = 1$ 。接下来令 $U = \frac{X - \mu_1}{\sigma_1}, V = \frac{Y - \mu_2}{\sigma_2}$, 即得。

当 $\text{Corr}(X, Y) = \pm 1$, 可以证明 $a = \pm \sigma_2 / \sigma_1$ 。

例 4.2. $X \sim N(0, 1), Y = X^2$, 则 X 与 Y 不相关, 但不独立。

例 4.3. $(X, Y) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$, 则

$$\begin{aligned} & \text{Corr}(X, Y) \\ &= E\left(\frac{X - \mu_1}{\sigma_1} \frac{Y - \mu_2}{\sigma_2}\right) \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{x - \mu_1}{\sigma_1} \frac{y - \mu_2}{\sigma_2} \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2} \frac{1}{\sqrt{1 - \rho^2}} e^{-\frac{1}{2(1 - \rho^2)}\left(\left(\frac{x - \mu_1}{\sigma_1}\right)^2 + \left(\frac{y - \mu_2}{\sigma_2}\right)^2 - 2\rho \frac{x - \mu_1}{\sigma_1} \frac{y - \mu_2}{\sigma_2}\right)} dx dy \end{aligned}$$

进行换元 $(u, v)^T = A\left(\frac{x - \mu_1}{\sigma_1}, \frac{y - \mu_2}{\sigma_2}\right)^T$, 其中 A 的定义参见例 3.3, 则指数上的项化为 $-\frac{1}{2}(u^2 + v^2)$, 这一步实质上是进行了二次型的标准化。后续过程留作习题, 最终计算结果为 $\text{Corr}(X, Y) = \rho$ 。

4.5 矩

定义 4.6. 对 $k = 1, 2, \dots$, 称 $E((X - c)^k)$ 为 X 关于 c 点的 k 阶矩。特别地, $c = 0$ 的情况下称为 k 阶原点矩, $c = E(X)$ 的情况下称为 k 阶中心矩。

根据定义, $E(X)$ 为 1 阶原点矩, 而 1 阶中心矩恒等于 0; $\text{Var}(X) = E(X^2) - E^2(X)$ 为 2 阶中心矩。

若 $E(X) = \mu, \text{SD}(X) = \sigma$, 称 $E\left(\left(\frac{X - \mu}{\sigma}\right)^k\right) = \frac{E((X - \mu)^k)}{\sigma^k}$ 为 k 阶标准矩。

1 阶标准矩恒等于 0, 2 阶标准矩恒等于 1, 3 阶标准矩称为 X 的偏度系数, 记作 $\text{Skew}(X)$ 。

例 4.4. $X \sim N(0, 1)$, 则 $\text{Skew}(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^3 f(x) dx = 0$, 其中 f 为 X 的 PDF。

称偏度系数 < 0 的分布为 “负偏” 或 “左偏”, 如图 4.1。

5 阶以上的奇数阶标准矩计算更复杂, 受噪声影响更大。

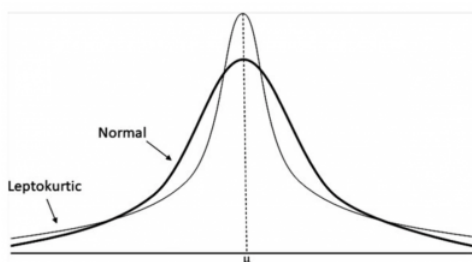
4 阶标准矩称为 X 的峰度系数, 记作 $\text{Kurt}(X)$ 。由于正态分布的峰度系数恒等于 3, 因此常定义超额峰度系数为 $\text{Kurt}(X) - 3$ 。

常将 $\mu \pm \sigma$ 以内的范围称为 “峰”, 范围在 “峰” 以外但在 $\mu \pm 2\sigma$ 以内的范围称为 “肩”, 范围在 “肩” 以外的部分称为 “尾”。

通常, 峰度系数 > 3 表现为相对于正态分布 “尖峰厚尾”, 如图 4.2。



图 4.1: 负偏分布

图 4.2: “Leptokurtic” 一词的含义即峰度系数 > 3

4.6 矩母函数

定义 4.7. 记 $M_X(t) = E(e^{tX})$, 若 $M_X(t)$ 在 $t = 0$ 的某邻域内存在, 则称其为 X 的矩母函数 (Moment Generating Function, MGF), 否则称 X 的矩母函数不存在。

例 4.5. 若 $X \sim \text{Exp}(\lambda)$, 则 $M_X(t) = E(e^{tX}) = \int_0^{+\infty} e^{tx} \lambda e^{-\lambda x} dx = \frac{\lambda}{\lambda - t}, t < \lambda$ 。

例 4.6. 若 $X \sim N(0, 1)$, 则 $M_X(t) = E(e^{tX}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{tx} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = e^{\frac{t^2}{2}}, t \in \mathbb{R}$ 。

命题 4.4. 矩母函数有如下性质:

1. $M_X(0) \equiv 1$
2. $Y = aX + b$, 则 $M_Y(t) = E(e^{tY}) = E(e^{t(aX+b)}) = e^{tb} M_X(at)$

例 4.7. 若 $Y \sim N(\mu, \sigma^2)$, 令 $Y = \sigma X + \mu$, 则 $X \sim N(0, 1)$, 故 $M_Y(t) = e^{\mu t} M_X(\sigma t) = e^{\mu t} e^{\frac{(\sigma t)^2}{2}} = e^{\frac{\sigma^2 t^2}{2} + \mu t}, t \in \mathbb{R}$ 。

矩母函数可以用于确定矩。

定理 4.2. 随机变量 X 的 n 阶 (原点) 矩与其矩母函数有如下关系: $E(X^n) = M_X^{(n)}(0)$ 。

证明. 由 Taylor 展开有 $M_X(t) = \sum_{n=0}^{+\infty} M_X^{(n)}(0) \frac{t^n}{n!}$, 又 $M_X(t) = E(e^{tX}) = E(\sum_{n=0}^{+\infty} X^n \frac{t^n}{n!}) = \sum_{n=0}^{+\infty} E(X^n) \frac{t^n}{n!}$, 得到结论。 \square

例 4.8. 若 $X \sim N(0, 1)$, 则 $M_X(t) = e^{\frac{t^2}{2}} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\frac{t^2}{2})^n}{n!} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(2n)!}{2^n n!} \frac{t^{2n}}{(2n)!}$, 因此 $E(X^{2n}) = \frac{(2n)!}{2^n n!}$, $E(X^{2n+1}) \equiv 0$ ($n = 0, 1, \dots$)。

由此可以计算 $\text{Var}(X) = E(X^2) = 1$, $\text{Kurt}(X) = E(X^4) = \frac{4!}{2^2 \cdot 2!} = 3$ 。

矩母函数还可以用于确定分布。

定理 4.3. 若存在 $a > 0$, 使得 $M_X(t) = M_Y(t), \forall t \in (-a, a)$, 则 X, Y 同分布。

例 4.9. 若随机变量 X 的矩母函数 $M_X(t) = \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8}e^{4t} + \frac{1}{8}e^{5t}$, 则 X 为离散型随机变量, 分布表为

| | | | | |
|-----|-----|-----|-----|-----|
| X | -1 | 0 | 4 | 5 |
| P | 1/2 | 1/4 | 1/8 | 1/8 |

一般地, 若离散型随机变量 X 有 PMF $P(X = k) = p_k$ ($\sum_k p_k \equiv 1$), 则其 MGF 为 $M_X(t) = E(e^{tX}) = \sum_k e^{tk} p_k$ 。

注意, 各阶矩均相同的随机变量未必同分布。

例 4.10. 设连续型随机变量 X_1 和 X_2 的 PDF 分别为 $f_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}x} e^{-\frac{(\log x)^2}{2}}, x > 0$ 和 $f_2(x) = f_1(x)(1 + \sin(2\pi \log x)), x > 0$ (X_1 服从对数正态分布), 则 $E(X_2^n) = E(X_1^n) + \int_0^{+\infty} x^n f_1(x) \sin(2\pi \log x) dx$, 其中后一项通过换元 $y = \log x - n$ 可以证明为 0, 即 X_1 和 X_2 同矩但不同分布。

下面运用矩母函数, 研究独立随机变量和的分布。

定理 4.4. 若随机变量 X, Y 独立, $Z = X + Y$, 则 $M_Z(t) = M_X(t)M_Y(t)$ 。

证明. $M_Z(t) = E(e^{tZ}) = E(e^{t(X+Y)}) = E(e^{tX}e^{tY}) = M_X(t)M_Y(t)$, 其中最后一个等号利用了独立性。□

推而广之, 若 $\{X_i\}_{i=1}^n$ 相互独立, $Z = X_1 + \dots + X_n$, 则 $M_Z(t) = \prod_{i=1}^n M_{X_i}(t)$ 。

例 4.11. 若 $\{X_i\}_{i=1}^n$ 相互独立且服从正态分布, 则 $X_1 + \dots + X_n$ 也服从正态分布。

以 $n = 2$ 为例说明。设 $X_i \sim N(\mu_i, \sigma_i^2)$ ($i = 1, 2$), 则 $M_{X_1+X_2}(t) = M_{X_1}(t)M_{X_2}(t) = e^{\frac{\sigma_1^2 t^2}{2} + \mu_1 t} e^{\frac{\sigma_2^2 t^2}{2} + \mu_2 t} = e^{\frac{1}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) + (\mu_1 + \mu_2)t}$, 对应 $N(\mu_1 + \mu_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$ 的 MGF, 再由 MGF 确定分布可得结论。

定义随机向量 (X_1, \dots, X_n) 的 MGF 为 $M_{X_1, \dots, X_n}(t_1, \dots, t_n) = E(e^{t_1 X_1 + \dots + t_n X_n})$ 。

以下简介类似 MGF 的其他函数:

1. 概率母函数 (Probability Generating Function, PGF), 仅针对非负整数取值的离散型随机变量 X , 设其 PMF 为 $P(X = k) = p_k$, 则其 PGF 定义为 $E(t^X) = \sum_{k=0}^{+\infty} p_k t^k, t \in [-1, 1]$, 或对于 $t \in (0, 1]$, 等于 $E(e^{X \log t}) = M_X(\log t)$ 。
2. 特征函数, 定义为 $E(e^{itX})$, 其中 $i^2 = -1$ 。

4.7 条件期望

$$\text{定义条件期望 } E(Y|X \in A) = \begin{cases} \sum_i y_i P(Y = y_i | X \in A), \\ \int_{-\infty}^{+\infty} y f_{Y|X}(y|X \in A) dy, \end{cases} \quad \text{两种定义分别针对 } Y \text{ 为离散型和连续型随机变量。}$$

$$\text{进而, 定义 } E(Y|x) = E(Y|X = x) = \begin{cases} \sum_i y_i P(Y = y_i | X = x), \\ \int_{-\infty}^{+\infty} y f_{Y|X}(y|x) dy, \end{cases} \quad \text{注意到这是一个 } x \text{ 的函数, 记作 } h(x)。$$

将其作用在 X 上, 得到 $h(X) = E(Y|X)$, 这是一个 X 的函数 (称为 Y 对 X 的回归函数), 因此是一个新的随机变量。

例 4.12. $(X, Y) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$, 则 $E(Y|x) = \mu_2 + \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1}(x - \mu_1)$ 。

例 4.13. 甲、乙两种同类产品, 平均使用寿命分别为 10 年和 15 年, 市场占有率分别为 60% 和 40%, 随机买一个, 则期望寿命是 $10 \times 60\% + 15 \times 40\% = 12$ 年, 我们发现这个计算过程可以表示为 $E(Y) = E(Y|X=1)P(X=1) + E(Y|X=2)P(X=2) = h(1)P(X=1) + h(2)P(X=2) = E(h(X)) = E(E(Y|X))$, 其中 $X=1$ 表示抽到甲产品, $X=0$ 表示抽到乙产品, Y 表示抽到的产品的寿命。

一般地, 有以下定理:

定理 4.5. (全期望公式)

对于随机向量 (X, Y) , 有 $E(Y) = E(E(Y|X))$ 。

证明. 以连续型为例。设 (X, Y) 的联合 PDF 为 $f(x, y)$, 有 $E(Y|x) = \int_{-\infty}^{+\infty} y f_{Y|X}(y|x) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} y \frac{f(x, y)}{f_X(x)} dy$, 故 $E(Y) = \int_{-\infty}^{+\infty} y f_Y(y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} y f(x, y) dx dy = \int_{-\infty}^{+\infty} E(Y|x) f_X(x) dx = E(E(Y|X))$ 。□

一般地, 对于可测函数 g , 有 $E(g(X, Y)) = E(E(g(X, Y)|X))$ 。

定理 4.6. 对于随机向量 (X, Y) 和任意可测函数 $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 都有 $E((Y - g(X))^2) \geq E((Y - E(Y|X))^2)$, 即条件期望是均方误差意义下的最优预测。

证明. 类比期望的性质 $E((Y - c)^2) \geq E((Y - E(Y))^2), \forall c \in \mathbb{R}$, 有 $E((Y - g(X))^2|X) \geq E((Y - E(Y|X))^2|X), \forall g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 可测, 两边对 X 求期望即得。 \square

我们经常用到最优线性预测, 即 $\min_{a,b} E((Y - (aX + b))^2)$, 这种“均方意义上的最优”称之为最小二乘 (least square)。

命题 4.5. 记 $\hat{Y} = E(Y|X)$ 为已知 X 的条件下对 Y 的最优估计, \tilde{Y} 为估计误差 $\hat{Y} - Y$, 则 $E(\tilde{Y}) = 0, E(\tilde{Y}\hat{Y}) = 0$, 进而有 $\text{Cov}(\hat{Y}, \tilde{Y}) = 0, \text{Var}(Y) = \text{Var}(\hat{Y}) + \text{Var}(\tilde{Y})$ 。

第五章 不等式与极限定理

5.1 概率不等式

定理 5.1. (Markov 不等式)

若随机变量 $Y \geq 0$, 则 $\forall a > 0$, 有 $P(Y \geq a) \leq \frac{E(Y)}{a}$ 。

证明. 取示性变量 $I = \begin{cases} 1, & Y \geq a, \\ 0, & Y < a, \end{cases}$ 则 $I \leq Y/a$, 故 $P(Y \geq a) = E(I) \leq E(Y/a) = E(Y)/a$ 。

□

定理 5.2. (Chebyshev 不等式)

若随机变量 Y 的方差 $\text{Var}(Y)$ 存在, 则 $\forall a > 0$ 有 $P(|Y - E(Y)| \geq a) \leq \frac{\text{Var}(Y)}{a^2}$ 。

证明. $P(|Y - E(Y)| \geq a) = P((Y - E(Y))^2 \geq a^2) \leq \frac{E((Y - E(Y))^2)}{a^2} = \frac{\text{Var}(Y)}{a^2}$ 。

□

这告诉我们, 如果 $\text{Var}(Y) = 0$, 则 $P(Y = E(Y)) = 1$ (即 a.s.)。

定理 5.3. (Chernoff 不等式)

对于任意随机变量 Y , $\forall a > 0, t > 0$, 有 $P(Y \geq a) \leq \frac{E(e^{tY})}{e^{ta}}$ 。

证明. $\forall t > 0, P(Y \geq a) = P(e^{tY} \geq e^{ta}) \leq \frac{E(e^{tY})}{e^{ta}}$ 。

□

例 5.1. 若 $X \sim N(0, 1)$, 则

1. 根据 Markov 不等式, $P(|X| \geq 3) \leq \frac{E(|X|)}{3} = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx 0.27$;
2. 根据 Chebyshev 不等式, $P(|X| \geq 3) \leq \frac{\text{Var}(X)}{3^2} = \frac{1}{9} \approx 0.11$;
3. 根据 Chernoff 不等式, $\forall t > 0, P(|X| \geq 3) = 2P(X \geq 3) \leq 2\frac{E(e^{tX})}{e^{3t}} = 2e^{\frac{t^2}{2}-3t}$, 取最小值点 $t = 3$, 得 $P(|X| \geq 3) \leq 2e^{-\frac{9}{2}} \approx 0.022$;
4. 根据经验法则, $P(|X| \geq 3) \approx 0.003$ 。

5.2 大数定律

设随机变量 X_1, \dots, X_n 独立同分布, 均值 $E(X_i) = \mu$, 方差 $\text{Var}(X_i) = \sigma^2 > 0$, 则样本均值 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$, 其均值 $E(\bar{X}) = \mu$, 方差 $\text{Var}(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n} \rightarrow 0 (n \rightarrow +\infty)$ 。

定理 5.4. (Khinchin 弱大数定律)

设随机变量 X_1, \dots, X_n 独立同分布, 均值 $E(X_i) = \mu$, 方差 $\text{Var}(X_i) = \sigma^2 > 0$, 则 $\forall \epsilon > 0$, 有 $\lim_{n \rightarrow +\infty} P(|\bar{X} - \mu| \geq \epsilon) = 0$, 或等价地, $\lim_{n \rightarrow +\infty} P(|\bar{X} - \mu| < \epsilon) = 1$ 。

证明. 由 Chebyshev 不等式, $P(|\bar{X} - \mu| \geq \epsilon) \leq \frac{\text{Var}(\bar{X})}{\epsilon^2} = \frac{\sigma^2}{n} \frac{1}{\epsilon^2} \rightarrow 0 (n \rightarrow +\infty)$. \square

$\forall \epsilon > 0, \forall \alpha > 0$, 如果将 ϵ 和 $(1 - \alpha)$ 分别称为精度和置信度, 则根据 Khinchin 弱大数定律, $\exists N \in \mathbb{N}^+$, 当 $n \geq N$ 时, $P(|\bar{X} - \mu| < \epsilon) \geq 1 - \alpha$, 即 \bar{X} 至少以概率 $(1 - \alpha)$ 落在区间 $(\mu - \epsilon, \mu + \epsilon)$ 内。

换句话说, 当样本量足够大时, 有很大的概率 $\bar{X} \approx \mu$, 其中 μ 为未知的总体均值。

我们将 $X_i \sim B(p)$ 这一特例称之为 Bernoulli 大数定律。

通过更进一步的讨论可以证明, 上述定理中关于方差的条件可以去掉, 结论仍正确。

此外, 还有对 Khinchin 弱大数定律的若干推广, 如

1. 要求 X_i 两两不相关, $\text{Var}(X_i)$ 一致有界, 我们就得到了 Chebyshev 大数定律;
2. 要求 $\text{Var}(\bar{X}) \rightarrow 0 (n \rightarrow +\infty)$, 我们就得到了 Markov 大数定律。

定义 5.1. 称 Y_n 依概率收敛于 Y , 记作 $Y_n \xrightarrow{P} Y$, 如果 $\forall \epsilon > 0$, 有 $\lim_{n \rightarrow +\infty} P(|Y_n - Y| \geq \epsilon) = 0$ 。

用上述定义, 弱大数定律可以表述为 $\bar{X} \xrightarrow{P} \mu$ 。

定理 5.5. (Kolmogorov 强大数定律)

设随机变量 X_1, \dots, X_n 独立同分布, 均值 $E(X_i) = \mu$, 则 $P(\lim_{n \rightarrow +\infty} \bar{X} = \mu) = 1$ 。

考虑 $X_i \sim B(p)$ 的特殊情形, 则 \bar{X} 称之为频率, 由强大数定律, $P(\lim_{n \rightarrow +\infty} \bar{X} = p) = 1$, 这说明概率的频率解释是合理的。

定义 5.2. 称 Y_n 以概率 1 收敛于 Y , 又称几乎必然收敛于 Y , 记作 $Y_n \xrightarrow{\text{a.s.}} Y$, 如果 $P(\lim_{n \rightarrow +\infty} Y_n = Y) = 1$ 。

用上述定义, 强大数定律可以表述为 $\bar{X} \xrightarrow{\text{a.s.}} \mu$ 。

例 5.2. (Monte Carlo 积分)

设要计算 $g(x) > 0$ 在区间 $[a, b]$ 上的定积分, 首先取一个适当的 $c > \sup\{g(x) | x \in [a, b]\}$, 设

(X_i, Y_i) 独立且服从区域 $[a, b] \times [0, c]$ 上的均匀分布, 记 $I_i = \begin{cases} 1, & Y_i \leq g(X_i), \\ 0, & Y_i > g(X_i), \end{cases}$ 则 $I_i \sim B(p)$,

其中 $p = \frac{\int_a^b g(x)dx}{c(b-a)}$, 于是 $\bar{I} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n I_i \approx p$, 从而 $\int_a^b g(x)dx \approx c(b-a)\bar{I}$.

例 5.3. 我们通过一个例子来考察一下上面介绍的两种收敛性的区别。

设概率空间 (Ω, \mathcal{F}, P) , 其中 $\Omega = [0, 1]$, ω 在 Ω 上均匀分布。定义随机变量序列 $\forall \omega \in \Omega, Y_1(\omega) = \omega + I_{[0,1]}(\omega), Y_2(\omega) = \omega + I_{[0,1/2]}(\omega), Y_3(\omega) = \omega + I_{[1/2,1]}(\omega), Y_4(\omega) = \omega + I_{[0,1/3]}(\omega), Y_5(\omega) = \omega + I_{[1/3,2/3]}(\omega), Y_6(\omega) = \omega + I_{[2/3,1]}(\omega), \dots$, 则 $Y_n(\omega)$ 依概率收敛于 $Y(\omega) = \omega$, 但不以概率 1 收敛于 $Y(\omega)$, 因为 $\forall \omega_0 \in \Omega, Y_n(\omega_0)$ 无极限。

5.3 中心极限定理

定理 5.6. 设随机变量 X_1, \dots, X_n 独立同分布, 均值 $E(X_i) = \mu$, 方差 $\text{Var}(X_i) = \sigma^2 > 0$, 则 $\forall x \in \mathbb{R}, \lim_{n \rightarrow +\infty} P\left(\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \leq x\right) = \Phi(x)$, 其中 $\Phi(x)$ 为标准正态分布的 CDF。或等价地, $\lim_{n \rightarrow +\infty} P\left(\frac{X_1 + \dots + X_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \leq x\right) = \Phi(x)$ 。

证明. 只对 X_i 的 MGF 存在的情形给出证明。

不失一般性, 假设 $\mu = 0, \sigma^2 = 1$, 令 $M(t) = E(e^{tX_i})$, 则 $M(0) = 1, M'(0) = 0, M''(0) = 1$, 于是 $E(e^{\frac{X_1 + \dots + X_n}{\sqrt{n}}}) = M^n\left(\frac{t}{\sqrt{n}}\right)$, 而根据 Taylor 展开, $M\left(\frac{t}{\sqrt{n}}\right) = 1 + 0 + \frac{1}{2}\left(\frac{t}{\sqrt{n}}\right)^2 + o\left(\frac{t^2}{n}\right)$, 故 $E(e^{\frac{X_1 + \dots + X_n}{\sqrt{n}}}) = (1 + \frac{t^2}{2n} + o(\frac{t^2}{n}))^n \rightarrow e^{t^2/2} (n \rightarrow +\infty)$, 此为 $N(0, 1)$ 的 MGF, 这说明 $\frac{X_1 + \dots + X_n}{\sqrt{n}}$ 的分布趋近于 $N(0, 1)$ 。□

上述定理通常称为 Lindeberg-Lévy CLT, 可推广至不同分布的情形。

如果将定理中的 $\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}}$ 理解为标准化的过程, 则不难得出 \bar{X} 近似服从 $N(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$, $X_1 + \dots + X_n$ 近似服从 $N(n\mu, n\sigma^2)$ 。

例 5.4. (De Moivre-Laplace CLT)

设 $X_i \sim B(p)$, 则 $\sum_{i=1}^n X_i \sim B(n, p)$, 当 n 充分大时, 可以近似地认为 $\sum_{i=1}^n X_i \sim N(np, np(1-p))$, 于是可近似计算 $P(t_1 \leq \sum_{i=1}^n X_i \leq t_2) = P\left(\frac{t_1 - np}{\sqrt{np(1-p)}} \leq \frac{\sum_{i=1}^n X_i - np}{\sqrt{np(1-p)}} \leq \frac{t_2 - np}{\sqrt{np(1-p)}}\right) \approx \Phi(y_2) - \Phi(y_1)$, 其中 $y_1 = \frac{t_1 - np - \frac{1}{2}}{\sqrt{np(1-p)}}, y_2 = \frac{t_2 - np + \frac{1}{2}}{\sqrt{np(1-p)}}$, 其中 $\frac{1}{2}$ 是连续性修正项。

定义 5.3. (依分布收敛)

称 Y_n 依分布收敛于 Y , 记作 $Y_n \xrightarrow{d} Y$, 如果 $\lim_{n \rightarrow +\infty} F_{Y_n}(x) = F_Y(x), \forall x \in \mathbb{R}$ 。

用上述定义, CLT 可以表述为 $\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \xrightarrow{d} Z$, 其中 $Z \sim N(0, 1)$, 或简记为 $\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \rightarrow N(0, 1)$ 。

例 5.5. (选举问题)

设 p 为选民真实支持度 (未知), 随机抽样调查 n 人 (假设 n 远远小于总人数 N , 可以近似有放回抽样), 样本支持比例 $P_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = \bar{X}$, 其中 $X_i \sim B(p)$ 且独立, 表示第 i 个人是否支持。

设置精度 $\epsilon = 0.03$, 置信度 $1-\alpha = 95\%$, 则至少需要 n 为多少, 才能保证 $P(|P_n - p| < \epsilon) \geq 1-\alpha$? 根据 CLT 有 $P(|P_n - p| \geq \epsilon) \approx 2 \left(1 - \Phi\left(\frac{\epsilon}{\sqrt{p(1-p)/n}}\right) \right) \leq \alpha$, 于是 $n \geq \frac{z_{\alpha/2}^2 p(1-p)}{\epsilon^2}$, 其中 $z_{\alpha/2}$ 为标准正态分布的上 $\alpha/2$ 分位数, 代入最大值点 $p = \frac{1}{2}$, 得到 $n \geq \frac{z_{\alpha/2}^2}{4} \epsilon^2$, 代入 $\epsilon = 0.03, \alpha = 0.05$, 得到 $n \geq 1068$ 。这一结果与 N 无关!

第二部分

统计推断

统计引言

统计学是一门从数据中获得信息的学问。根据 Claude Shannon 的信息论，所谓的信息就是不确定性的分解。

数理统计通常包括数据收集、数据分析和统计推断三部分。

例. 检测某厂的一大批电子元件产品的寿命，我们关注的问题是“判断产品是否合格”。这个问题的“总体”就是所需检测的这批元件的寿命，更具体地说，是元件寿命这一随机变量 X 的分布。

统计学上所谓总体，就是指一个概率分布。而统计分析问题就是研究对象全体所服从的分布的某个数字特征，来了解总体变量 X 的分布。

总体可以分为有限总体、无限总体等，其中有限总体在个体数量很多时可以近似看作无限总体。

所谓的“虚拟总体”是一种无限总体，并无实际存在的个体集合，而是一个假想的、潜在的无限个体集合，如测量讲桌的长度所得到的测量值，可以视为来自一个虚拟总体。

将一族概率分布称为一个统计模型。

例. 正态分布族 $\{N(\mu, \sigma^2) : \mu \in \mathbb{R}, \sigma^2 > 0\}$ 就是一个统计模型。

模型可以分为参数模型和非参数模型，正态分布族就是一个参数模型。非参数模型是指不能用少数几个参数决定的模型，例如对某总体 X ，限定 X 连续， $E(X)$ 存在或属于某个取值范围等条件，但不用具体的若干参数去精确描述 X 的分布，这就是一个非参数模型。

样本是指从总体中抽取的一组观测值 X_1, \dots, X_n ，其中每个 X_i 来自总体 X ，而 n 称为样本容量。

抽样方式分为试验与观测，后者又可以分为完全观测和不完全观测。

若 X_1, \dots, X_n 独立同分布，且 $X_i \sim X$ ，则称 X_1, \dots, X_n 为来自总体 X 的一个随机样本。对于有限总体，这需要有放回地抽样。

简单随机抽样是指当总体个数 N 有限，从中无放回地抽取 n 个个体，每个个体被抽取的概率相同。这种情况下，任意容量为 n 的样本都有相同的出现概率，为 $\frac{1}{\binom{N}{n}}$ 。

抽样方式的选择有很多需要注意的地方，否则可能属于不当抽样。

定义. 统计量定义为样本的函数，即 $T(X_1, \dots, X_n)$ 。

统计量是完全由样本决定的量，因此也是随机变量。统计量可以看作一种对数据进行简化的方式。

例. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布，均值 $E(X_i) = \mu$ ，则以下是一些常用的统计量：

1. 样本均值 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$;
2. 样本方差 $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$;
3. 当 μ 已知时， $\bar{X} - \mu$ 是统计量；当 μ 未知时， $\bar{X} - \mu$ 不是统计量。

总体决定样本，故可以通过样本来推断总体的性质，这就是统计推断。统计推断又可以分为经典方法（频率学派的）以及 Bayes 方法。

例. 设总体满足 $Y = aX + \epsilon$ ，其中 X 为自变量， Y 为因变量， ϵ 为误差。这是一个参数模型。假设抽取的样本为 $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)$ ，则：

- 若 a 未知，可通过观测各 (X_i, Y_i) 来估计 a ，这属于模型推断、参数估计的范畴；
- 若 a 已知，可通过观测 Y_i 来估计 X_i ，这属于变量推断、模型应用的范畴。

例. 假设元件寿命 $X \sim \text{Exp}(\lambda)$ ，如何通过样本估计 λ 的值？这是一个参数估计问题。

假设元件的合格标准是 $E(X) \geq L$ ，但 $E(X)$ 未知。考虑制定一种可操作的检验标准，当 $\bar{X} \geq l$ 时，就认为元件合格。这种标准如何制定？这是一个假设检验问题。

第六章 参数估计

6.1 矩估计

设 X_1, \dots, X_n 为独立同分布的样本，定义样本矩如下：

1. k 阶样本原点矩 $\mu_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^k$
2. k 阶样本中心矩 $m_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^k$

根据大数定律， $\mu_k \rightarrow E(X^k)$ 。

矩估计就是用样本矩去估计参数。

例 6.1. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布， $X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ ，则 $\mu = E(X) \approx \mu_1 = \bar{X}$ ， $\sigma^2 = \text{Var}(X) \approx m_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ 。

例 6.2. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布， $X_i \sim \text{Exp}(\lambda)$ ，则 $\lambda = E(X)^{-1} \approx \mu_1^{-1} = \frac{1}{\bar{X}}$ ，或 $\lambda = \text{Var}(X)^{-1/2} \approx m_2^{-1/2}$ 。

我们发现上例中 λ 可以有两种不同的矩估计，一个基本原则是尽量用低阶矩。

6.2 极大似然估计

设 (X_1, \dots, X_n) 的联合分布 (PMF 或 PDF) 为 $f(x_1, \dots, x_n; \theta)$ ，其中 θ 为未知参数。

对于观测 (X_1, \dots, X_n) ，定义似然函数 (likelihood function) 为 $L(\theta) = f(X_1, \dots, X_n; \theta)$ 。

对于离散情形， $L(\theta)$ 就是当参数为 θ 时出现观测 (X_1, \dots, X_n) 的概率。

随机变量 X_1, \dots, X_n 的一个实现是指一次观测到的具体数据，记为 x_1, \dots, x_n 。

若 X_1, \dots, X_n 独立同分布，来自总体 $f_1(x; \theta)$ (PMF 或 PDF)，则 $f(x_1, \dots, x_n; \theta) = \prod_{i=1}^n f_1(x_i; \theta)$ ，似然函数 $L(\theta) = \prod_{i=1}^n f_1(X_i; \theta)$ 。

例 6.3. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布， $X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$ ， μ 和 σ^2 未知，则 $f_1(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ ，似然函数 $L(\theta) = L(\mu, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(X_i-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ 。

定义 6.1. $\theta^* = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} L(\theta)$ 称为 θ 的极大似然估计 (MLE)。

注意 $\theta^* = \theta^*(X_1, \dots, X_n)$ 是一个随机变量, 因为它是 X_1, \dots, X_n 的函数。

例 6.4. 上例中, 解方程 $\frac{\partial \log L}{\partial \mu} = 0$ 和 $\frac{\partial \log L}{\partial (\sigma^2)} = 0$ (称它们为似然方程), 得 $\mu^* = \bar{X}$ 和 $(\sigma^2)^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ 。

此处 MLE 的结果与矩估计一致, 这是偶然现象, 对于一般分布不总成立。

命题 6.1. MLE 有重要的所谓不变性: 设 θ^* 是 θ 的 MLE, $g(\theta)$ 是 θ 的可测函数, 则 $g(\theta^*)$ 是 $g(\theta)$ 的 MLE。例如, 如果上例中选择 $\theta = (\mu, \sigma)$, 则 $\sigma^* = \sqrt{(\sigma^2)^*}$ 是 σ 的 MLE。

例 6.5. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布, $X_i \sim U(0, \theta), \theta > 0$ 未知, $L(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{\theta^n}, & X_i \in (0, \theta), \forall i, \\ 0, & \text{其他,} \end{cases}$ 则 $\theta^* = \max\{X_1, \dots, X_n\}$ 。

例 6.6. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布, X_i 的 PDF 为 $f_1(x; \theta) = \frac{1}{\pi(1+(x-\theta)^2)} (x \in \mathbb{R})$, θ 未知, 即 X_1, \dots, X_n 服从 Cauchy 分布。

- 由于 Cauchy 分布的任意阶矩都不存在, 故不能用矩估计。
- 若采用 MLE 方法, 似然方程为 $\sum_{i=1}^n \frac{X_i - \theta}{1 + (X_i - \theta)^2} = 0$, 当 n 较大时, 此方程有很多的根且无显式解, 故 MLE 方法也不理想。
- 一种可能的对 θ 的估计: 由于 θ 为中位数, 因此用样本中位数作为 θ 的估计。

这个例子告诉我们, 统计方法不是唯一的, 也没有绝对的优劣。

需要指出, MLE 不一定是唯一的。

MLE 的另一局限性是它需要分布的具体函数形式, 而矩估计不需要。

此外, 如果似然函数在最大值点附近变化过于平缓, 则可能不利于通过迭代等方法有效计算。

6.3 优良性准则

无论是矩估计还是极大似然估计, 都是用样本的函数来估计总体的参数, 对每个参数给出一个估计值, 这样的估计称为点估计。

用于估计参数的函数 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, \dots, X_n)$ 称为估计量, 其分布 (依赖于 θ) 称为抽样分布, 其标准差 $\sqrt{\operatorname{Var}(\hat{\theta})}$ 称为标准误 (差) (Standard error), 记为 $\operatorname{Se} = \operatorname{Se}(\hat{\theta})$ 。

在选择估计量时, 有若干准则。首先介绍所谓无偏性。

称 $E(\hat{\theta} - \theta) = E(\hat{\theta}) - \theta$ 为 $\hat{\theta}$ 的偏差 (bias)。

定义 6.2. 设 $\hat{\theta}$ 是 θ 的估计量, 若 $\forall \theta, E(\hat{\theta} - \theta) = 0$, 则称 $\hat{\theta}$ 为 θ 的一个无偏估计 (量)。

由上述定义可知, 无偏性指的是无系统偏差。

一般地, 若 $\hat{g}(X_1, \dots, X_n)$ 是对 θ 的函数 $g(\theta)$ 的估计, 且满足 $\forall \theta, E(\hat{g}(X_1, \dots, X_n)) = g(\theta)$, 则称 $\hat{g}(X_1, \dots, X_n)$ 是 $g(\theta)$ 的一个无偏估计。

对于无偏估计 $\hat{g}(X_1, \dots, X_n)$, 若进行 N 组抽样, 第 m 组样本记作 $X_1^{(m)}, \dots, X_n^{(m)}$, 则由大数定律, $\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \hat{g}(X_1^{(m)}, \dots, X_n^{(m)})$ 会收敛到 $E(\hat{g}(\theta)) = g(\theta)$ 。

在实际应用中, 无偏的重要性视情况而定。

例 6.7. 若随机变量 X 的均值 μ 和方差 σ^2 均未知, 则由 $E(\bar{X}) = \mu$ 知 \bar{X} 是 μ 的无偏估计。而二阶矩 $m_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2 - (\bar{X} - \mu)^2$, 有 $E(m_2) = \frac{n-1}{n} \sigma^2 \neq \sigma^2$, 故 m_2 不是 σ^2 的无偏估计 (系统偏小)。

样本方差 $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ 中的 $(n-1)$ 是所谓的无偏修正, 满足 $E(S^2) = \sigma^2$, 故 S^2 是 σ^2 的无偏估计。

例 6.8. 若随机变量 $X \sim U(0, \theta)$, 则矩估计 $\hat{\theta} = 2\bar{X}$ 为 θ 的无偏估计, 而 MLE $\theta^* = \max\{X_1, \dots, X_n\}$, 有 $E(\theta^*) = \frac{n}{n+1}\theta$, 故 θ^* 不是 θ 的无偏估计。

这个例子说明, MLE 不一定是无偏的。

下面介绍均方误差准则。

定义均方误差 (MSE) 为 $E((\hat{\theta} - \theta)^2) = \text{Var}(\hat{\theta}) + E^2(\hat{\theta} - \theta)$, 其中等号右边的两项分别反映了精确度 (precision) 和准确度 (accuracy)。

定义 6.3. 若 $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2$ 为 θ 的无偏估计, 且 $\forall \theta, \text{Var}(\hat{\theta}_1) \leq \text{Var}(\hat{\theta}_2)$, 且存在一个 θ 的值使得不等号严格成立, 则称 $\hat{\theta}_1$ 在均方误差意义下优于 $\hat{\theta}_2$ 。

例 6.9. 若随机变量 X 的均值 μ 未知, 方差为 σ^2 , 则 $\bar{X}, \frac{1}{2}(X_1 + X_2), X_1$ 都是 μ 的无偏估计, 它们各自的方差为 $\frac{\sigma^2}{n}, \frac{\sigma^2}{2}, \sigma^2$, 故若 $n > 2$, 则 \bar{X} 在均方误差意义下优于 $\frac{1}{2}(X_1 + X_2)$, 而 $\frac{1}{2}(X_1 + X_2)$ 在均方误差意义下优于 X_1 。

定义 6.4. 若 $\hat{\theta}_0$ 是 θ 的无偏估计, 且 $\forall \hat{\theta}$ 为 θ 的无偏估计, 都有 $\forall \theta, \text{Var}(\hat{\theta}_0) \leq \text{Var}(\hat{\theta})$, 则称 $\hat{\theta}_0$ 是 θ 的最小方差无偏估计 (MVUE)。

例 6.10. 若 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 则 $E(m_2) = \frac{n-1}{n} \sigma^2, E(S^2) = \sigma^2$, 但 $E((m_2 - \sigma^2)^2) < E((S^2 - \sigma^2)^2)$, 故 m_2 在均方误差意义下优于 S^2 。尽管 m_2 是有偏的, 但它有更小的方差, 总的来说其 MSE 更小。

接下来介绍一些大样本性质。所谓大样本性质,是指样本容量 n 趋于无穷时 $\hat{\theta}$ 的性质。

首先是渐进无偏性。若 $\lim_{n \rightarrow +\infty} E(\hat{\theta} - \theta) = 0$, 则称 $\hat{\theta}$ 具有渐进无偏性。

然后是相合性。若 $\forall \epsilon > 0, \lim_{n \rightarrow +\infty} P(|\hat{\theta} - \theta| \geq \epsilon) = 0$, 则称 $\hat{\theta}$ 是 θ 的相合估计。

$\hat{\theta}$ 是 θ 的相合估计, 当且仅当 $\hat{\theta} \xrightarrow{P} \theta$ 。例如, 根据弱大数定律, \bar{X} 是 μ 的相合估计。

相合性是良好点估计的自然要求。

例 6.11. 若随机变量 X 的均值为 μ , 方差为 σ^2 , 考虑 $m_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2 - (\bar{X} - \mu)^2$, 由大数定律, $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2 \xrightarrow{P} E((X_i - \mu)^2) = \sigma^2$, 而 $(\bar{X} - \mu)^2 \xrightarrow{P} 0$, 故 $m_2 \xrightarrow{P} \sigma^2$, 即 m_2 是 σ^2 的相合估计。同时, $S^2 = \frac{n}{n-1} m_2 \xrightarrow{P} \sigma^2$, 故 S^2 也是 σ^2 的相合估计。

最后是渐进正态性。若 $\frac{\hat{\theta} - \theta}{\text{Se}(\hat{\theta})} \xrightarrow{d} Z \sim N(0, 1)$, 则称 $\hat{\theta}$ 是 θ 的渐进正态估计。

例如, 根据 CLT, \bar{X} 是 μ 的渐进正态估计, 且 $\text{Se}(\bar{X}) = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 。

若 $\hat{\theta}$ 是 θ 的渐进正态估计, 则当 n 充分大时, 近似有 $\hat{\theta} \sim N(\theta, \text{Se}^2(\hat{\theta}))$ 。

6.4 置信区间

定义 6.5. $\forall \alpha \in (0, 1)$, $\hat{\theta}_i = \hat{\theta}_i(X_1, \dots, X_n) (i = 1, 2)$ 为统计量, 若 $P(\hat{\theta}_1 < \theta < \hat{\theta}_2) \geq 1 - \alpha$, 则称 $(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)$ 为 θ 的一个 $(1 - \alpha)$ -置信的 (双侧) 区间估计。

$(1 - \alpha)$ 称为置信水平, 置信系数或置信度是指置信水平中的最大者, 这三个术语都是针对方法而言的。 α 通常取 0.05, 0.01, 0.1 等。

通常用 $E(\hat{\theta}_2 - \hat{\theta}_1)$ 来刻画区间估计的精度。我们遵循可靠度优先原则, 即先保证置信水平, 然后再提升精度。

例 6.12. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布, $X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$, μ 未知, σ^2 已知, 则由 $\bar{X} \sim N(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$, 有 $\bar{X} - \mu \sim N(0, \frac{\sigma^2}{n})$ 。为给出 μ 的区间估计, 目标是寻找 c_1, c_2 使得 $P(\bar{X} - c_1 < \mu < \bar{X} + c_2) \geq 1 - \alpha$, 这等价于 $P(-c_2 < \bar{X} - \mu < c_1) \geq 1 - \alpha$ 。设 $\alpha_1 = P(\bar{X} - \mu \leq -c_2)$, $\alpha_2 = P(\bar{X} - \mu \geq c_1)$, 一个自然的选择是令 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha/2$ (事实上这也是能够使精度最高的选择)。记 $z_{\frac{\alpha}{2}}$ 为 $N(0, 1)$ 的上 $\frac{\alpha}{2}$ -分位数, 即 $\Phi(z_{\frac{\alpha}{2}}) = 1 - \frac{\alpha}{2}$, 则 $P\left(\left|\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}}\right| \leq z_{\frac{\alpha}{2}}\right) = 1 - \alpha$, 从而 $P(\bar{X} - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} < \mu < \bar{X} + z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}) = 1 - \alpha$, 故 $(\bar{X} - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{X} + z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}})$ 是 μ 的一个 $(1 - \alpha)$ -置信的区间估计。

若 $\alpha = 0.05$, 则 $z_{\frac{\alpha}{2}} \approx 1.96 \approx 2$ 。

上述区间估计的一种理解是: 若用 \bar{X} 来估计 μ , 则绝对误差 $|\bar{X} - \mu|$ 在 $(1 - \alpha)$ -置信下不超过 $z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 。

区间的半长度为 $z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, 如果给定精度, 例如取 $\epsilon > 0$, 要求 $z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq \epsilon$, 则 $n \geq (\frac{z_{\frac{\alpha}{2}} \sigma}{\epsilon})^2$, 即样本容量至少为 $(\frac{z_{\frac{\alpha}{2}} \sigma}{\epsilon})^2$ 时有 $(1 - \alpha)$ -置信使绝对误差不超过 ϵ 。这一推理可以理解为 (α, ϵ, n) 三个变量之间存在的关系。

例 6.13. 设 X_1, \dots, X_n 独立同分布, $X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$, μ, σ^2 未知, 首先估计 σ^2 。注意到, $\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - \bar{X}}{\sigma}\right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - \mu}{\sigma}\right)^2 - \left(\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}\right)^2 \sim \chi^2(n-1)$, 同样令 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha/2$, 有 $(\frac{(n-1)S^2}{\chi_{\frac{\alpha}{2}}^2(n-1)}, \frac{(n-1)S^2}{\chi_{1-\frac{\alpha}{2}}^2(n-1)})$ 是 σ^2 的一个 $(1 - \alpha)$ -置信的区间估计, 其中 $\chi_{\frac{\alpha}{2}}^2(n-1)$ 和 $\chi_{1-\frac{\alpha}{2}}^2(n-1)$ 分别为 $\chi^2(n-1)$ 的上 $\frac{\alpha}{2}$ -分位数和下 $\frac{\alpha}{2}$ -分位数。

接下来估计 μ , 可以证明, $\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \sim N(0, 1)$ 且与 $\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2}$ 独立, 从而 $\frac{\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}}{\sqrt{\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2} \frac{\sigma^2}{n-1}}} = \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{S}{\sqrt{n}}} \sim t(n-1)$, 故 $(\bar{X} - t_{\frac{\alpha}{2}}(n-1) \frac{S}{\sqrt{n}}, \bar{X} + t_{\frac{\alpha}{2}}(n-1) \frac{S}{\sqrt{n}})$ 是 μ 的一个 $(1 - \alpha)$ -置信的区间估计, 其中 $t_{\frac{\alpha}{2}}(n-1)$ 为 $t(n-1)$ 的上 $\frac{\alpha}{2}$ -分位数。

例 6.14. 若 $X \sim N(\mu_1, \sigma^2), Y \sim N(\mu_2, \sigma^2)$, 且 X, Y 独立, 下面估计均值差 $\mu_1 - \mu_2$ 。设随机样本为 X_1, \dots, X_n 和 Y_1, \dots, Y_m , 则 $\bar{X} - \bar{Y} \sim N(\mu_1 - \mu_2, \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\sigma^2}{m})$, 有 $\frac{(\bar{X} - \bar{Y}) - (\mu_1 - \mu_2)}{\sigma \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{m}}} \sim N(0, 1)$ 。同时, 由 $\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{\sigma^2} = \frac{(n-1)S_1^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1)$ 和 $\frac{\sum_{i=1}^m (Y_i - \bar{Y})^2}{\sigma^2} = \frac{(m-1)S_2^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(m-1)$, 且 $\frac{(n-1)S_1^2}{\sigma^2}$ 与 $\frac{(m-1)S_2^2}{\sigma^2}$ 独立, 有 $\frac{(n-1)S_1^2}{\sigma^2} + \frac{(m-1)S_2^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n+m-2)$, 故 $\frac{\frac{(\bar{X} - \bar{Y}) - (\mu_1 - \mu_2)}{\sigma \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{m}}}}{\sqrt{\frac{(n-1)S_1^2 + (m-1)S_2^2}{\sigma^2} \frac{\sigma^2}{n+m-2}}} = \frac{(\bar{X} - \bar{Y}) - (\mu_1 - \mu_2)}{S \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{m}}} \sim t(n+m-2)$, 其中 $S^2 = \frac{(n-1)S_1^2 + (m-1)S_2^2}{n+m-2}$, 于是 $(\bar{X} - \bar{Y} - t_{\frac{\alpha}{2}}(n+m-2) S \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{m}}, \bar{X} - \bar{Y} + t_{\frac{\alpha}{2}}(n+m-2) S \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{1}{m}})$ 是 $\mu_1 - \mu_2$ 的一个 $(1 - \alpha)$ -置信的区间估计。

类似点估计, 区间估计也有对应的大样本方法, 即所谓渐近置信区间。

例 6.15. (选举问题)

设 p 为未知的真实支持率, 样本容量 $n = 1200$, 其中有 684 人支持, 即观测比例为 $\frac{684}{1200} = 0.57$, 下面给出 p 的一个 $1 - \alpha = 95\%$ 置信的区间估计。

记 X_i 为第 i 个人的态度, 1 表示支持, 0 表示不支持, $X_i \sim B(p) (i = 1, 2, \dots, n)$ 且独立, 记观测比例 $P_n = P_n(X_1, \dots, X_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = \bar{X}$, 有 $E(P_n) = p, \text{Var}(P_n) = \frac{p(1-p)}{n}$, 由 CLT, 近似有 $\frac{P_n - p}{\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}} \sim N(0, 1)$ 。但是, 由于 p 未知, 则分母上的标准误未知, 故无法直接利用这一分布给出置信区间。记 $\sigma^2 = p(1-p)$, 下面采用几种不同方法给出其估计 $\hat{\sigma}^2$ 。

1. 用 $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ 估计 σ^2 , 于是近似有 $\frac{P_n - p}{\sqrt{\frac{S^2}{n}}} \sim N(0, 1)$, 对应的置信区间为

$$(P_n - z_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{S^2}{n}}, P_n + z_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{S^2}{n}}) \approx (0.542, 0.598).$$

2. 用 $m_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 = P_n(1 - P_n)$ 估计 σ^2 , 于是近似有 $\frac{P_n - p}{\sqrt{\frac{P_n(1-P_n)}{n}}} \sim N(0, 1)$, 对

$$\text{应的置信区间为 } (P_n - z_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{P_n(1-P_n)}{n}}, P_n + z_{\frac{\alpha}{2}} \sqrt{\frac{P_n(1-P_n)}{n}}) \approx (0.542, 0.598).$$

3. 用 $p(1-p)$ 的最大值 $\frac{1}{4}$ 来估计 σ^2 , 于是近似有 $\frac{P_n - p}{\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{n}}} \sim N(0, 1)$, 对应的置信区间为 $(P_n - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{1}{2\sqrt{n}}, P_n + z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{1}{2\sqrt{n}}) \approx (0.542, 0.598)$ 。

注意这里采用了近似分布, 因此只能说置信水平近似是 $(1-\alpha)$, 且近似的程度取决于总体分布和样本容量 n 的大小。

下面介绍利用 MLE 构建置信区间的方法。

设总体分布的 PDF 或 PMF 为 $f(x; \theta)$, 有随机样本 X_1, \dots, X_n , 则似然函数 $L(\theta) = \prod_{i=1}^n f(X_i; \theta)$, 对数似然函数 $\ell(\theta) = \log L(\theta) = \sum_{i=1}^n \log f(X_i; \theta)$ 。

定理 6.1. 若 f 满足一定的光滑性条件, θ^* 为 θ 的 MLE, 则存在 $\sigma_n > 0$, 使得 $\frac{\theta^* - \theta}{\sigma_n} \rightarrow N(0, 1)$ 。

根据 Taylor 展开, 对于 θ^* 附近的 θ , 有 $0 = \ell'(\theta^*) = \ell'(\theta) + \ell''(\theta)(\theta^* - \theta) + o(\theta^* - \theta)$, 从而 $\theta^* - \theta \approx -\frac{\ell'(\theta)}{\ell''(\theta)}$, 即 $\sqrt{n}(\theta^* - \theta) \approx \frac{\frac{1}{\sqrt{n}}\ell'(\theta)}{-\frac{1}{n}\ell''(\theta)}$ 。

由 $\frac{1}{\sqrt{n}}\ell'(\theta) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n \frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}$, 其中 f_θ 表示 f 对 θ 的偏导数, 记 $Y_i = \frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}$, 则 Y_1, \dots, Y_n 独立同分布, 且 $E(Y_i) = E\left(\frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_\theta(x; \theta)}{f(x; \theta)} f(x; \theta) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f_\theta(x; \theta) dx = \frac{\partial}{\partial \theta} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x; \theta) dx = \frac{\partial}{\partial \theta} 1 = 0$, $\text{Var}(Y_i) = E(Y_i^2) = E\left(\left(\frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta}\right)^2\right)$ 记作 $I(\theta)$ 。根据 CLT 有 $\frac{1}{\sqrt{n}}\ell'(\theta) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n Y_i \rightarrow N(0, I(\theta))$ 。

一般地, 称 $I_n(\theta) = E((\ell'(\theta))^2) = E\left(\left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta}\right)^2\right)$ 为 Fisher 信息量, 展开得 $I_n(\theta) = \sum_{i=1}^n E\left(\left(\frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta}\right)^2\right) + \sum_{i \neq j} E\left(\frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \log f(X_j; \theta)}{\partial \theta}\right)$, 由于 X_1, \dots, X_n 独立同分布, 有 $E\left(\frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \log f(X_j; \theta)}{\partial \theta}\right) = E\left(\frac{\partial \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta}\right) E\left(\frac{\partial \log f(X_j; \theta)}{\partial \theta}\right) = 0$, 从而 $I_n(\theta) = nI(\theta)$ 。

注意到 $\frac{\partial^2 \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta^2} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}\right) = \frac{f_{\theta\theta}(X_i; \theta)f(X_i; \theta) - f_\theta(X_i; \theta)f_\theta(X_i; \theta)}{f^2(X_i; \theta)} = \frac{f_{\theta\theta}(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)} - \left(\frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}\right)^2$, 故 $E\left(\frac{\partial^2 \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta^2}\right) = E\left(\frac{f_{\theta\theta}(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)} - \left(\frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}\right)^2\right)$, 其中 $E\left(\frac{f_{\theta\theta}(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_{\theta\theta}(x; \theta)}{f(x; \theta)} f(x; \theta) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{\theta\theta}(x; \theta) dx = \frac{\partial}{\partial \theta} \int_{-\infty}^{+\infty} f_\theta(x; \theta) dx = \frac{\partial}{\partial \theta} 0 = 0$, 即 $E\left(\frac{\partial^2 \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta^2}\right) = -E\left(\left(\frac{f_\theta(X_i; \theta)}{f(X_i; \theta)}\right)^2\right) = -I(\theta)$ 。则根据弱大数定律有 $-\frac{1}{n}\ell''(\theta) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \log f(X_i; \theta)}{\partial \theta^2} \xrightarrow{P} I(\theta)$ 。

至此, 有结论 $\sqrt{n}(\theta^* - \theta) \approx \frac{\frac{1}{\sqrt{n}}\ell'(\theta)}{-\frac{1}{n}\ell''(\theta)} \rightarrow N(0, \frac{1}{I(\theta)})$, 即 $\frac{\theta^* - \theta}{\sqrt{\frac{1}{nI(\theta)}}} \rightarrow N(0, 1)$, 即定理 6.1 中的 $\sigma_n = \sqrt{\frac{1}{nI(\theta)}}$ 。 θ 是未知的, 但构造置信区间时 $I(\theta)$ 可以用 $I(\theta^*)$ 估计, 即 $\frac{\theta^* - \theta}{\sqrt{\frac{1}{nI(\theta^*)}}} \rightarrow N(0, 1)$ 。

对选举问题, $f(x; p) = p^x(1-p)^{1-x}$, $I(p) = E\left(\left(\frac{\partial \log f(X_i; p)}{\partial p}\right)^2\right) = E\left(\left(\frac{X_i - p}{p(1-p)}\right)^2\right) = \frac{1}{p(1-p)}$, 于是 $\frac{P_n - p}{\sqrt{\frac{1}{nI(P_n)}}} = \frac{P_n - p}{\sqrt{\frac{P_n(1-P_n)}{n}}} \rightarrow N(0, 1)$, 据此构造的置信区间与前面的第二种方法相同。

最后介绍一个近似估计两正态总体的均值差的例子。

例 6.16. 设总体分布为 $X \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$, $Y \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$, X, Y 独立, $\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2$ 均未知, 随机样本 $X_1, \dots, X_n; Y_1, \dots, Y_m$, 则 $\frac{(\bar{X} - \bar{Y}) - (\mu_1 - \mu_2)}{\sqrt{\frac{\sigma_1^2}{n} + \frac{\sigma_2^2}{m}}} \sim N(0, 1)$ 。由于 σ_1^2, σ_2^2 未知, 用 S_1^2, S_2^2 分别估计

之, 于是近似有 $\frac{(\bar{X}-\bar{Y})-(\mu_1-\mu_2)}{\sqrt{\frac{S_1^2}{n}+\frac{S_2^2}{m}}} \sim N(0, 1)$, 对应 $\mu_1-\mu_2$ 的置信区间为 $(\bar{X}-\bar{Y}-z_{\frac{\alpha}{2}}\sqrt{\frac{S_1^2}{n}+\frac{S_2^2}{m}}, \bar{X}-\bar{Y}+z_{\frac{\alpha}{2}}\sqrt{\frac{S_1^2}{n}+\frac{S_2^2}{m}})$ 。

6.5 Bayes 估计

Bayes 学派看待世界的视角与频率学派不同。简单来说, 在 Bayes 方法中, 对未知参数 θ 的认知可以由概率分布来刻画, 设对应的随机变量为 Θ , 则 θ 为 Θ 的实现值。在搜集数据前对 Θ 的分布的认知 $f_{\Theta}(\theta)$ 称为先验分布。将试验观测抽象为随机变量 X , 当参数为 θ 时, 观测数据的分布为 $f_{X|\Theta}(x|\theta)$, 称为样本分布。当观测到数据 x 后, 可以利用 Bayes 公式来更新对 Θ 的认知, 得到后验分布 $f_{\Theta|X}(\theta|x) = \frac{f_{X|\Theta}(x|\theta)f_{\Theta}(\theta)}{f_X(x)}$ 。这样, 就可以利用后验分布来对 Θ 进行推断。

例 6.17. 某枚硬币正面向上的概率为未知参数 θ , 设先验分布为 $f_{\Theta}(\theta) = 1$ ($\theta \in (0, 1)$) (无信息先验, 体现了所谓的同等无知原则, 是 Bayes 统计常用假设)。现抛硬币 n 次, 观测到正面向上的次数为 x 。

记 X 为 n 次中正面向上的次数, 则给定 θ 时, $X \sim B(n, \theta)$, 即样本分布 $f_{X|\Theta}(x|\theta) = \binom{n}{x}\theta^x(1-\theta)^{n-x}$ ($x = 1, \dots, n$)。于是 X 与 Θ 的联合分布为 $f(x, \theta) = f_{X|\Theta}(x|\theta)f_{\Theta}(\theta) = \binom{n}{x}\theta^x(1-\theta)^{n-x}$, X 的边缘 PMF 为 $f_X(x) = \int_0^1 f(x, \theta)d\theta = \binom{n}{x} \int_0^1 \theta^x(1-\theta)^{n-x}d\theta = \binom{n}{x} \frac{\Gamma(x+1)\Gamma(n-x+1)}{\Gamma(n+2)} = \frac{1}{n+1}$, 则后验分布为 $f_{\Theta|X}(\theta|x) = \frac{f_{X|\Theta}(x|\theta)f_{\Theta}(\theta)}{f_X(x)} = \frac{\Gamma(n+2)}{\Gamma(x+1)\Gamma(n-x+1)}\theta^x(1-\theta)^{n-x}$, 即 $\Theta|X = x \sim \beta(x+1, n-x+1)$ 。

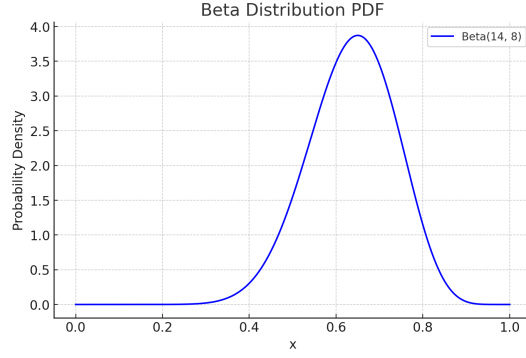
其中, $\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} t^{x-1}e^{-t}dt$ 为 Gamma 函数, 满足 $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$, $\Gamma(1) = 1$, 对于正整数 n , $\Gamma(n+1) = n!$ 。而 $\beta(a, b)$ 表示 Beta 分布, 其 PDF 为 $f(x) = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}x^{a-1}(1-x)^{b-1}$ ($x \in (0, 1)$)。若 $X \sim \beta(a, b)$, 则 $E(X) = \frac{a}{a+b}$, $\text{Var}(X) = \frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)}$ 。均匀分布 $U(0, 1)$ 即 $\beta(1, 1)$ 分布。

上例中, 若 $n = 20, x = 13$, 则后验分布为 $\beta(14, 8)$, 其 PDF 图象如 6.1。计算可知, $P(\Theta > \frac{1}{2}) \approx 0.91$, 而 $\Theta < \frac{1}{4}$ 的可能性很小。

已知了后验分布后, 如何给出参数 θ 的合理估计呢? 常用方法如:

1. 后验众数 $\hat{\theta}_1$, 即 $\beta(x+1, n-x+1)$ 的 PDF 最大值点 $\frac{x}{n}$ (恰与 MLE 一致, 这是因为我们选取了无信息先验, 后验分布正比于样本分布作为参数的函数, 即似然函数)
2. 后验均值 $\hat{\theta}_2 = E(\Theta|X = x) = \frac{x+1}{n+2}$
3. 后验中位数 $\hat{\theta}_3$

上例中还可以进一步证明, 若选取先验为 $\beta(a, b)$, 则后验分布为 $\beta(x+a, n-x+b)$, 此时后验均值为 $\frac{x+a}{n+a+b} = \frac{a+b}{n+a+b} \frac{a}{a+b} + \frac{n}{n+a+b} \frac{x}{n}$, 即后验均值是先验均值 $\frac{a}{a+b}$ 与样本均值 $\frac{x}{n}$ 的加权平均, 权重分别为 $\frac{a+b}{n+a+b}$ 和 $\frac{n}{n+a+b}$ 。

图 6.1: $\beta(14, 8)$ 的 PDF 图象

Bayes 方法根据后验分布给出区间估计, 称之为 可信区间。具体来说, 就是要找到 $a, b \in \mathbb{R}$, 使 $P(a < \Theta < b | X = x) \geq 1 - \alpha$ 。具体的选取方式如:

1. 最大后验区间 (通常用于单峰情形), 可以直观理解为用一条平行于横轴的线自上而下扫描, 直到截取后验 PDF 的面积为 $(1 - \alpha)$
2. 等尾区间, 即令 $P(\Theta < a | X = x) = P(\Theta > b | X = x) = \frac{\alpha}{2}$

例 6.18. 设总体分布为 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 其中 σ^2 已知, 有随机样本 X_1, \dots, X_n , 取 μ 的先验分布 $f(\mu) \propto 1$ (无信息先验, 这不是一个合理的分布, 理解为一种广义 PDF), 则样本分布为 $f(x_1, \dots, x_n | \mu) \propto \prod_{i=1}^n e^{-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}}$, 后验分布为 $f(\mu | x_1, \dots, x_n) \propto f(x_1, \dots, x_n | \mu) f(\mu) \propto \prod_{i=1}^n e^{-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}} \propto e^{-\frac{n\mu^2 - 2\mu \sum_{i=1}^n x_i}{2\sigma^2}} \propto e^{-\frac{n(\mu - \bar{x})^2}{2\sigma^2}}$, 即 μ 的后验分布为 $N(\bar{x}, \frac{\sigma^2}{n})$ 。

第七章 假设检验

7.1 基本概念

例 7.1. 某女士声称自己可以区分奶茶的制作方法是先加奶还是先加茶。为检验她的话是否为真，Ronald Fisher 设计了如下实验：分别用两种方法制作各 4 杯奶茶，以随机顺序让女士品尝并鉴别（女士知道两种奶茶各有 4 杯），发现她全部说对了。用 H 表示“该女士无鉴别能力”这一假设，则在 H 成立的前提下，该女士只能随机猜测哪 4 杯是先加奶的，能全猜对的概率为 $\frac{1}{\binom{8}{4}} = \frac{1}{70}$ 。根据小概率事件原理，即小概率的事件不易发生，于是我们相信 H 不成立，即该女士有鉴别能力。

那么一个自然而然的问题是：概率要多小才算小呢？通常结合实际情况选取阈值 $\alpha = 0.05, 0.01, 0.1$ 等，称之为显著性水平。

上例中，若女士只说对了 3 杯，那么 H 成立的前提下，能猜对至少 3 杯的概率为 $\frac{17}{70} \approx 0.243$ 。形象地说，这一概率即“出现与观测结果一样或更极端的结果的概率”，称为 p 值，参见定义 7.1。由于 $p > \alpha$ ，因此不能轻易否定 H ，即不能轻易认为女士有鉴别能力。

这种方法称为 Fisher 显著性检验。注意到，若我们认可某组观测（样本）的效力，则用它来证实和证伪某个理论（断言）具有天然的不对等，因为即使 p 值不小，也不能断言该理论（断言）成立，只能说该理论（断言）在这组观测下没有被证伪。因此，用 Fisher 显著性检验证伪比证实更容易。

通过这个例子我们看到，可以将假设 H 模型化，计算出 H 成立的前提下的各种情况的概率，如记女士猜对的杯数为随机变量 X ，则 $P(X = k) = \frac{\binom{4}{k}\binom{4}{4-k}}{\binom{8}{4}} (k \in \{0, 1, 2, 3, 4\})$ 。

历史上，先后提出了 Fisher 显著性检验、Neyman-Pearson 检验和零假设显著性检验 (NHST)。其中 Neyman-Pearson 检验强调了两类错误，而 Fisher 显著性检验和 NHST 都仅强调 $\alpha(R) \leq \alpha$ 条件（参见 7.2 节）。

统计假设是对一个或多个总体的某种断言或猜测，分为 H_0 和 H_1 ，分别称之为原假设或零假设 (Null Hypothesis) 和备择假设 (Alternative Hypothesis)。原假设 H_0 是被检验的假设，而备择假设 H_1 是拒绝 H_0 后可供选择的假设。

一种常见情形是假设可表示为参数形式, 即 $H_0: \theta \in \Theta_0, H_1: \theta \in \Theta_1, \Theta_0 \cap \Theta_1 = \emptyset$, 且 $\Theta_0 \cup \Theta_1$ 为 θ 的所有可能取值之集合。

例 7.2.

设总体分布为 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 其中 σ^2 已知, 以下是一些原假设与备择假设的例子:

1. $H_0: \mu = \mu_0, H_1: \mu \neq \mu_0$
2. $H_0: \mu = \mu_0, H_1: \mu > \mu_0$
3. $H_0: \mu \leq \mu_0, H_1: \mu > \mu_0$

设总体分布为 $X \sim N(\mu_1, \sigma^2), Y \sim N(\mu_2, \sigma^2)$, X, Y 独立, σ^2 已知, 则一组可能的原假设与备择假设为: $H_0: \mu_1 = \mu_2, H_1: \mu_1 \neq \mu_2$ 。

称只对应一个总体的假设为简单假设, 对应多个总体的假设为复合假设。例如上例中的 $H_0: \mu = \mu_0$ 为简单假设, $H_0: \mu \leq \mu_0$ 为复合假设。注意, 若上例中的 σ^2 未知, 则 $H_0: \mu = \mu_0$ 等价于 $H_0: \mu = \mu_0, \sigma^2 > 0$, 这是一个复合假设。

依据样本 (观测) 对假设进行决策 (拒绝 H_0 或不拒绝 H_0) 的过程, 称为假设检验。一个具体的检验 (准则), 就是做出决策的一个具体法则, 即在何种情况下拒绝 H_0 。根据小概率事件原理, 若在原假设 H_0 为真的前提下, 所观测的样本出现的概率很小, 则意味着样本提供了拒绝 H_0 的证据。

考虑所有可能出现的观测之集合 $\{(X_1(\omega), \dots, X_n(\omega)) | \omega \in \Omega\}$, 其中样本量 n 固定, 则可以按照检验准则将之分为两部分 R 和 R^c , 其中 R 称为拒绝域或临界域, 当样本落在 R 中时, 拒绝原假设 H_0 。一种常见的拒绝域形式为 $R = \{(X_1, \dots, X_n) | T(X_1, \dots, X_n) \geq c\}$, 其中 $T(X_1, \dots, X_n)$ 称为检验统计量, c 称为临界值。若对于某个 $\alpha \in (0, 1)$, 有 $\forall \theta \in \Theta_0, P_\theta(T(X_1, \dots, X_n) \geq c) \leq \alpha$, 则称 (R 对应的) 检验是 (显著性) 水平为 α 的检验。

例 7.3.

设总体分布为 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 其中 σ^2 已知。考虑以下两个假设检验。

1. $H_0: \mu = \mu_0, H_1: \mu \neq \mu_0$, 这是一个双侧检验。对于给定的 $\alpha \in (0, 1)$, 设检验准则为当 $|\bar{X} - \mu_0| \geq c$ 时拒绝 H_0 。这要求当 H_0 为真时, $P_{H_0}(|\bar{X} - \mu_0| \geq c) \leq \alpha$ 。由于 $\bar{X} - \mu \sim N(0, \frac{\sigma^2}{n})$, 即 H_0 为真时 $\frac{\bar{X} - \mu_0}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \sim N(0, 1)$, 要求为 $P_{H_0}(\frac{|\bar{X} - \mu_0|}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \geq \frac{c}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}) \leq \alpha$, 因此取 $\frac{c}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} = z_{\frac{\alpha}{2}}$, 即 $c = z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 。据此确定检验准则: 若 $|\bar{X} - \mu_0| \geq z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, 则拒绝 H_0 。
2. $H_0: \mu \geq \mu_0, H_1: \mu < \mu_0$, 这是一个单侧检验。对于给定的 $\alpha \in (0, 1)$, 设检验准则为当 $\bar{X} \leq c$ 时拒绝 H_0 。这要求当 H_0 为真时, $P_{H_0}(\bar{X} \leq c) \leq \alpha$ 。当 H_0 为真时 $\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \sim N(0, 1)$, 要求为 $P_{\mu \geq \mu_0}(\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \leq \frac{c - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}) \leq \alpha$, 因此 $\frac{c - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \leq -z_\alpha$, 由于要对所有 $\mu \geq \mu_0$ 成立, 取 $c = \mu_0 - z_\alpha \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 。据此确定检验准则: 若 $\bar{X} \leq \mu_0 - z_\alpha \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, 则拒绝 H_0 。

本例有时也称为 Z -检验。

上例中, 若 σ^2 未知, 则要根据 $\frac{\bar{X}-\mu}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \sim t(n-1)$ 来构造检验准则, 称为 t -检验。

7.2 Neyman-Pearson 假设检验

首先讨论假设检验中的两类错误。若原假设为真, 但拒绝了原假设, 则犯了第 I 类错误, 又称弃真错误。若原假设为假, 但不拒绝原假设, 则犯了第 II 类错误, 又称取伪错误。两类错误发生的概率分别记作 $P_\theta(\text{I})(\theta \in \Theta_0)$ 和 $P_\theta(\text{II})(\theta \in \Theta_1)$ 。一次决策不会同时犯两种错误。

根据样本作决策, 错误不可能根本避免。对于固定的 n , 调整检验准则时, 两种错误发生的概率此消彼长。

例 7.4. 检验元件是否合格, H_0 和 H_1 分别表示合格与不合格。

1. 若从不拒绝 H_0 , 即总认为元件合格, 则 $P_\theta(\text{I}) = 0$, 但 $P_\theta(\text{II}) = 1$ 。
2. 一般地, 当 $P_\theta(\text{I})$ 变小, 就意味着更不容易拒绝原假设 (更谨慎地判断元件不合格), 此时不合格元件就更不容易检出, 因此 $P_\theta(\text{II})$ 变大。

进一步讨论两种错误的概率。对于 $\theta \in \Theta_0$, 我们有 $P_\theta(\text{I}) = P_\theta((X_1, \dots, X_n) \in R)$, 将其记为 $\alpha(R)$, 即调整拒绝域时, 犯第 I 类错误的概率相应变化。对于 $\theta \in \Theta_1$, 我们有 $P_\theta(\text{II}) = P_\theta((X_1, \dots, X_n) \in R^c)$, 将其记为 $\beta(R)$, 即调整拒绝域时, 犯第 II 类错误的概率相应变化。若固定 R , 则 $\alpha(R)$ 和 $\beta(R)$ 都是 θ 的函数。对于 $\theta \in \Theta_1$, 将 $(1 - \beta(R))$ 称为功效 (Power)。

利用上述概念, 我们之前所做的假设检验 “当 $T(X_1, \dots, X_n) \geq c$ 时拒绝 H_0 ” 需要满足的条件 $P_{H_0}(T(X_1, \dots, X_n) \geq c) \leq \alpha$ 实际上就是犯第 I 类错误的概率不超过 α 。

在假设检验中, 有所谓 *Neyman-Pearson* 范式: 固定 n , 对于预先给定的检验水平 $\alpha \in (0, 1)$, 首先保证犯第 I 类错误的概率不超过 α , 再在此限制之下使 $P_\theta(\text{II})(\theta \in \Theta_1)$ 尽可能小。若 $\exists \alpha, \beta > 0, \forall \theta \in \Theta_0, \alpha(R) \leq \alpha; \forall \theta \in \Theta_1, \beta(R) \leq \beta$, 则 α, β 是检验程序的属性, 即预先给定的可接受的长期错误率。

此种范式下, H_0 与 H_1 一般来说地位不对等。原假设 H_0 通常是受保护的, 若证据不充分则不能予以拒绝; 备择假设 H_1 往往是我们真正感兴趣的, 又称研究假设。

在 7.1 节中, 我们强调过 Fisher 显著性检验中, “不拒绝” 不等于 “接受”。但在 Neyman-Pearson 检验中, 由于强调了两类错误, 并量化了其概率, 故若 $\beta(R)$ 足够小 (即功效 $(1 - \beta(R))$ 足够大), 则可以接受 H_0 。

7.3 假设检验与置信区间

例 7.5. 设总体分布为 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, 其中 σ^2 已知。给定 $\alpha \in (0, 1)$, 有 $(1-\alpha)$ -置信的 (双侧) 置信区间 $\mu \in (\bar{X} - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{X} + z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}})$ 。而在进行 (双侧) 假设检验时, $\forall \mu_0$, 若 $H_0: \mu = \mu_0, H_1: \mu \neq \mu_0$, 检验准则为若 $|\bar{X} - \mu_0| \geq z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 则拒绝 H_0 , 即所谓的 接受域 $R^c = \{(X_1, \dots, X_n) \mid |\bar{X} - \mu_0| < z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}\}$, 或接受条件为 $\bar{X} - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}} < \mu_0 < \bar{X} + z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 。由此可见, μ_0 落在置信区间 $(\bar{X} - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{X} + z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\sigma}{\sqrt{n}})$ 等价于用 \bar{X} 作为检验统计量检验上述 H_0, H_1 时的结果为不拒绝 H_0 , 这体现出区间估计与假设检验存在对偶关系。

7.4 检验的 p 值

定义 7.1. 当原假设为真时, 称“出现观测值以及更极端的观测的概率”为该检验的 p 值。

其中, 所谓“更极端”的具体含义是由 H_1 决定的, 这也进一步决定了拒绝域的形状。

例 7.6. (选举问题)

设 p 为未知的真实支持率, 样本容量 $n = 1200$, 其中有 684 人支持, 即观测比例为 $p_n = \frac{684}{1200} = 0.57$ 。给定 $p_0 \in (0, 1)$, 检验 $H_0: p = p_0, H_1: p > p_0$, 取检验统计量为 $P_n = \bar{X}$, 其中 $\{X_i\}_{i=1}^n$ 独立同分布, $X_i \sim B(p)$ 。由 CLT, 近似有 $\frac{P_n - p}{\text{Se}(P_n)} \sim N(0, 1)$, 其中 $\text{Se}(P_n) = \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}$ 。当 H_0 为真时, $\text{Se}(P_n) = \sqrt{\frac{p_0(1-p_0)}{n}}$, 故 p 值为 $P(P_n \geq p_n | H_0) = P(\frac{P_n - p_0}{\text{Se}(P_n)} \geq \frac{p_n - p_0}{\text{Se}(P_n)} | H_0) \approx P(Z \geq \frac{p_n - p_0}{\text{Se}(P_n)})$, 其中 $Z \sim N(0, 1)$ 。代入 $p_0 = 0.5$, 得 $\text{Se}(P_n) \approx 0.014$, p 值 $\ll 0.001$; 代入 $p_0 = 0.55$, 得 $\text{Se}(P_n) \approx 0.014$, p 值 ≈ 0.082 。

根据 p 值的定义, 容易发现设计检验准则时, 拒绝 H_0 的条件为 p 值 $\leq \alpha$ 。非正式地, p 值通常作为拒绝 H_0 的证据强弱的度量。但需要强调, p 值与 $P(H_0 | \text{观测值})$ 完全是两回事。若 p 值不小, 则不拒绝 H_0 , 这可能有多种原因, 既可能是 H_0 为真, 也可能是 H_0 不真, 但检验的功效不够大。 p 值也不等于“错误拒绝 H_0 的概率”。

上例中, 若 H_0 改为 $p \leq p_0$, 则 p 值应当修正为 $\sup_{p \leq p_0} P(P_n \geq p_n)$ 。此时当 H_0 为真时, 对 $\text{Se}(P_n)$ 的估计 $\hat{\text{Se}}(P_n) = \sqrt{\frac{P_n(1-P_n)}{n}}$, p 值的计算公式也相应修正为 $P(P_n \geq p_n | H_0) = P(\frac{P_n - p}{\hat{\text{Se}}(P_n)} \geq \frac{p_n - p}{\hat{\text{Se}}(P_n)} | H_0) \approx P(Z \geq \frac{p_n - p}{\hat{\text{Se}}(P_n)})$, 其中 $Z \sim N(0, 1)$ 。

对 p 值的定义给出一更具体的修订。

定义 7.2. 若检验准则为拒绝 $H_0: \theta \in \Theta_0$ 当且仅当 $T(X_1, \dots, X_n) \geq C$, 则检验的 p 值为 $\sup_{\theta \in \Theta_0} P(T(X_1, \dots, X_n) \geq T(x_1, \dots, x_n))$ 。其中 $T(x_1, \dots, x_n)$ 为检验统计量的观测值。

7.5 拟合优度检验

例 7.7. 设连续掷一个六面骰 60 次, 得到结果如下:

| 点数 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 总计 |
|------|----|----|----|----|----|----|----|
| 观测频数 | 4 | 6 | 17 | 16 | 8 | 9 | 60 |
| 期望频数 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 60 |

检验 H_0 : 骰子是均匀的, H_1 : 骰子不均匀。下面介绍 *Pearson* 拟合优度检验。取检验统计量 $\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}$, 其中 $k = 6$, O_i 为观测频数, E_i 为期望频数。

有如下一般性的定理: 设 k 为单元数, 检验 $H_0: P(X \in \text{第 } i \text{ 单元}) = p_i^0 (i = 1, \dots, k)$, 若 H_0 为真, 则当 $n \rightarrow \infty$ 时, 上述检验统计量 χ^2 的分布收敛于 $\chi^2(k-1)$ 。

代入表中数据, 得检验统计量的观测值为 $\frac{(4-10)^2}{10} + \frac{(6-10)^2}{10} + \dots = 14.2$, 故 p 值为 $P(\chi^2 \geq 14.2) \approx 0.014$, 其中近似有 $\chi^2 \sim \chi^2(5)$ 。

应用中, 需期望频数 $E_i = np_i^0 \geq 5$, 才可以保证应用上述定理的效果较好。

例 7.8. 对于 $k = 2$ 的简单情形, 即检验 $H_0: p_1 = p_1^0, p_2 = 1 - p_1^0$, 取检验统计量 $\chi^2 = \frac{(O_1 - np_1^0)^2}{np_1^0} + \frac{(O_2 - n(1-p_1^0))^2}{n(1-p_1^0)} = \frac{(O_1 - np_1^0)^2}{np_1^0(1-p_1^0)}$, 近似有 $\chi^2 \sim \chi^2(1)$ 。可以从中发现与 CLT 的联系: $E(O_1) = np_1^0$, $\text{Var}(O_1) = np_1^0(1-p_1^0)$, 而 $\chi^2(1)$ 分布正是标准正态分布的平方。

需要强调, 统计显著不一定实际显著, 如下例。

例 7.9. 设连续掷一个六面骰 6×10^{10} 次, 得到结果如下:

| 点数 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|-----------------|---------|-------------------|------------------|-----------------|------------------|-------------------|
| $O_i - 10^{10}$ | -10^6 | 1.5×10^6 | -2×10^6 | 4×10^6 | -3×10^6 | 0.5×10^6 |

检验 H_0 : 骰子是均匀的, H_1 : 骰子不均匀。则 χ^2 统计量的观测值为 $\frac{(-10^6)^2}{10^{10}} + \dots = 3250$, 故 p 值为 $P(\chi^2 \geq 3250) \ll 0.00001$, 其中近似有 $\chi^2 \sim \chi^2(5)$ 。 p 值非常小, 拒绝 H_0 。但实际上, 观测值给出的 MLE 为 $p_1^* = \frac{10^{10}-10^6}{6 \times 10^{10}} = \frac{1}{6} - \frac{1}{6} \times 10^{-4}$, 与 $\frac{1}{6}$ 相差非常小。

下面介绍列联表 (独立性) 检验。

例 7.10. 设希望研究对某项议题的态度于年龄段是否相互独立, 调查结果如下:

| | 青 | 中 | 老 | 总计 |
|----|----|----|----|-----|
| 支持 | 20 | 40 | 20 | 80 |
| 反对 | 30 | 30 | 10 | 70 |
| 总计 | 50 | 70 | 30 | 150 |

检验 H_0 : 年龄段与态度相互独立, H_1 : 年龄段与态度不相互独立。设 p_{ij} 表示样本属于 (i, j) 单元的概率, 用 p_{i+}, p_{+j} 分别表示第 i 行和第 j 列的边际概率, 则 H_0 下, $p_{ij} = p_{i+}p_{+j}$ 。取检验统计量 $\chi^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{(O_{ij} - E_{ij})^2}{E_{ij}}$, 其中 a, b 分别为行数和列数, O_{ij} 为观测频数, E_{ij} 为期望频数。在 H_0 为真时, 可给出 p_{ij} 的估计 $p_{ij}^* = (p_{i+}p_{+j})^* = p_{i+}^*p_{+j}^*$, 其中 $p_{i+}^* = \frac{O_{i+}}{n}, p_{+j}^* = \frac{O_{+j}}{n}$, O_{i+} 为第 i 行的观测频数之和, O_{+j} 为第 j 列的观测频数之和, 此时 $E_{ij} = np_{ij} \approx np_{ij}^*$ 。当 $n \rightarrow \infty$ 时, 上述统计量 χ^2 的分布收敛于 $\chi^2((a-1)(b-1))$ 。代入表中数据, 得检验统计量的观测值为 $\frac{(20-26.67)^2}{26.67} + \dots \approx 6.12$, 故 p 值为 $P(\chi^2 \geq 6.12) \approx 0.0469$, 其中近似有 $\chi^2 \sim \chi^2(2)$ 。

7.6 似然比检验

例 7.11. 设有两种硬币, 正面朝上的概率分别为 $p = 0.5, 0.7$ 。现有一硬币, 掷之 $n = 10$ 次, 观测到 $X = x$ 次正面向上。检验 $H_0: p = 0.5, H_1: p = 0.7$ 。选取似然比统计量 $\frac{P(X=x|H_0)}{P(X=x|H_1)} = \frac{\binom{n}{x} 0.5^x (1-0.5)^{n-x}}{\binom{n}{x} 0.7^x (1-0.7)^{n-x}}$, 检验准则为若似然比 $\leq C$ 则拒绝 H_0 , 则需满足 $P(\text{似然比} \leq C | H_0) \leq \alpha$, 可据此确定 C 。

当 H_0, H_1 均为简单假设时, Neyman 与 Pearson 证明了似然比检验的最优性 (即功效最大)。当 H_0, H_1 不全为简单假设时, 似然比检验一般来说不是最优的, 但通常表现不错。

一般地, 若检验 $H_0: \theta \in \Theta_0, H_1: \theta \in \Theta_1$, 随机样本 X_1, \dots, X_n , 则广义似然比为 $\Lambda^* = \frac{\sup_{\theta \in \Theta_0} L(\theta)}{\sup_{\theta \in \Theta_1} L(\theta)}$, 其中 $L(\theta)$ 为似然函数。实际应用中, 通常采用其修正形式 $\Lambda = \frac{\sup_{\theta \in \Theta_0} L(\theta)}{\sup_{\theta \in \Theta_0 \cup \Theta_1} L(\theta)} = \min\{\Lambda^*, 1\}$, 其分母 $\sup_{\theta \in \Theta_0 \cup \Theta_1} L(\theta)$ 等于 $L(\theta^*)$, 其中 θ^* 表示 MLE。显然 $\Lambda = \Lambda(X_1, \dots, X_n)$ 越小越反对 H_0 , 故应根据 $P(\Lambda \leq \lambda_0 | H_0) \leq \alpha$ 确定拒绝域。

定理 7.1. 在一定的光滑性条件下, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 在 H_0 为真的前提下, $-2 \log \Lambda \xrightarrow{d} \chi^2(d)$, 其中自由度 $d = \dim(\Theta_0 \cup \Theta_1) - \dim(\Theta_0)$, \dim 表示自由参数个数。

例 7.12. (多项分布检验)

设 $X = (X_1, \dots, X_k)$ 服从多项分布, 参数为 n, p_1, \dots, p_k , 检验 $H_0: p_1 = p_1^0, \dots, p_k = p_k^0$ 。观测频数为 n_1, \dots, n_k , 满足 $n_1 + \dots + n_k = n$ 。此时似然函数为 $L(p_1, \dots, p_k) = \binom{n}{n_1, \dots, n_k} p_1^{n_1} \dots p_k^{n_k}$, 故似然比为 $\Lambda = \frac{L(p_1^0, \dots, p_k^0)}{L(p_1^*, \dots, p_k^*)} = \frac{p_1^{0n_1} \dots p_k^{0n_k}}{p_1^{*n_1} \dots p_k^{*n_k}}$, 其中 $p_i^* = \frac{n_i}{n}$ 。仍记 $O_i = np_i^* = n_i, E_i = np_i^0$, 则 $-2 \log \Lambda = -2 \sum_{i=1}^k n_i \log \frac{p_i^0}{p_i^*} = 2 \sum_{i=1}^k O_i \log \frac{O_i}{E_i}$ 。利用 Taylor 展开 $x \log \frac{x}{x_0} = 0 + (x - x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2x_0} + \dots$, 有 $-2 \log \Lambda = 2 \sum_{i=1}^k (O_i - E_i) + \sum_{i=1}^k \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i} + \dots = \sum_{i=1}^k \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i} + \dots$ 。由定理 7.1, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, $-2 \log \Lambda \xrightarrow{d} \chi^2(d)$, 其中 $d = (k-1) - 0 = k-1$ 。可以从中发现与 Pearson 拟合优度检验的联系。

7.7 两总体比较

设有两独立总体如下。

| 总体 | 均值 | 方差 | 随机样本 |
|-----|---------|--------------|-------------------|
| X | μ_1 | σ_1^2 | X_1, \dots, X_n |
| Y | μ_2 | σ_2^2 | Y_1, \dots, Y_m |

若要比两总体均值, 取检验统计量 $\bar{X} - \bar{Y}$, 有 $E(\bar{X} - \bar{Y}) = \mu_1 - \mu_2$, $\text{Var}(\bar{X} - \bar{Y}) = \frac{\sigma_1^2}{n} + \frac{\sigma_2^2}{m} = \text{Se}^2(\bar{X} - \bar{Y})$, 其中 $\text{Se}(\bar{X} - \bar{Y})$ 为标准误, 若未知则需要估计。

还有一种常见情形是比较两总体方差。以下以 X, Y 均服从正态分布为例。(双侧) 检验 $H_0: \sigma_1^2 = \sigma_2^2, H_1: \sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$ 。利用 $\frac{(n-1)S_1^2}{\sigma_1^2} \sim \chi^2(n-1), \frac{(m-1)S_2^2}{\sigma_2^2} \sim \chi^2(m-1)$ 且独立, 有 $\frac{S_1^2/\sigma_1^2}{S_2^2/\sigma_2^2} \sim F(n-1, m-1)$ 。检验统计量为 $\frac{S_1^2}{S_2^2}$, 若 H_0 为真, 则 $\frac{S_1^2}{S_2^2} \sim F(n-1, m-1)$ 。检验准则为若 $\frac{S_1^2}{S_2^2} \geq F_{\frac{\alpha}{2}}(n-1, m-1)$ 或 $\frac{S_1^2}{S_2^2} \leq F_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-1, m-1)$ 则拒绝 H_0 。其中 $F_{1-\frac{\alpha}{2}}(n-1, m-1) = \frac{1}{F_{\frac{\alpha}{2}}(m-1, n-1)}$ 。

例 7.13. 研究阿司匹林对于降低心脏病发病率的有效性, 样本数据如下。

| | 心脏病发作 | 未发作 | 总计 | 发作率 |
|------|-------------|-------|---------------|-------|
| 阿司匹林 | $k_1 = 139$ | 10898 | $n_1 = 11037$ | 1.26% |
| 安慰剂 | $k_2 = 239$ | 10795 | $n_2 = 11034$ | 2.17% |

检验 $H_0: p_1 = p_2, H_1: p_1 < p_2$, 其中 p_1, p_2 为总体发作率, 原假设和备择假设分别表示“有效”和“无效”。检验统计量为 $P_1 - P_2$, 其中 P_1, P_2 为样本发作率(随机变量), 有 $E(P_1 - P_2) = p_1 - p_2, \text{Var}(P_1 - P_2) = \frac{p_1(1-p_1)}{n_1} + \frac{p_2(1-p_2)}{n_2} = \text{Se}^2$, 由 CLT 有 $\frac{(P_1 - P_2) - (p_1 - p_2)}{\text{Se}}$ 近似服从 $N(0, 1)$ 。在 H_0 为真前提下有 $p_1 = p_2 = p$, 根据观测值给出 p 的估计 $p^* = \frac{k_1 + k_2}{n_1 + n_2} = \frac{139 + 239}{11037 + 11034}$, 故 $\text{Se}^2 = p(1-p)(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}) \approx p^*(1-p^*)(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}) \approx 0.00176^2 = \hat{\text{Se}}^2$ 。此时近似有 $\frac{P_1 - P_2}{\hat{\text{Se}}} \sim N(0, 1)$, 故 p 值为 $P(P_1 - P_2 \leq 1.26\% - 2.17\%) \approx P(Z \leq \frac{1.26\% - 2.17\%}{0.00176}) \approx 10^{-7}$, 其中 $Z \sim N(0, 1)$ 。故拒绝 H_0 。

上例的实验设计中需注意的几点:

1. 随机分组
2. 双盲试验
3. 样本容量 n 要充分大

例 7.14. 某大型出租车公司比较两种油 A 和 B 的行驶里程, 实验为将 100 辆车随机平分为两组, 样本数据如下。

| | 样本容量 | 平均里程 | 标准差 |
|-----|------|------|------|
| 油 A | 50 | 25 | 5.00 |
| 油 B | 50 | 26 | 4.00 |

直观来看, 两组数据的标准差均较大, 因此可能会统计不显著。进行(双边)检验 $H_0: \mu_A = \mu_B, H_1: \mu_A \neq \mu_B$, 其中 μ_A, μ_B 分别为油 A 和 B 的总体均值。检验统计量为 $\bar{X}_A - \bar{X}_B$, 当 H_0 为真时, 近似有 $\frac{\bar{X}_A - \bar{X}_B}{\hat{S}_e} \sim N(0, 1)$, 其中 \hat{S}_e 为标准误的估计 $\sqrt{\frac{S_A^2}{n_1} + \frac{S_B^2}{n_2}}$ 。p 值为 $P\left(\left|\frac{\bar{X}_A - \bar{X}_B}{\hat{S}_e}\right| \geq \left|\frac{25-26}{\sqrt{\frac{5^2}{50} + \frac{4^2}{50}}}\right|\right) \approx P(|Z| \geq 1.1) \approx 0.1357 \times 2$, 其中 $Z \sim N(0, 1)$ 。故不拒绝 H_0 。

如果是两相关总体比较, 有更好的方法, 如下例。

例 7.15. 仍研究上例中的问题, 但改进实验设计为: 同一辆车(固定司机)在不同的日子加不同的油, 即每辆车都测试两种油。样本数据如下。

| 车号 | 油 A | 油 B | 差异 d_i |
|----------|----------|----------|----------|
| 1 | 27.01 | 26.95 | 0.06 |
| 2 | 20.00 | 20.44 | -0.44 |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 10 | 25.22 | 26.01 | -0.79 |
| 均值 | 25.00 | 25.60 | -0.60 |
| 标准差 | 4.27 | 4.10 | 0.61 |

可以看出 d_i 的标准差明显较小。检验 $H_0: \mu_d = 0, H_1: \mu_d \neq 0$, 假设近似有 $d_i \sim N(\mu, \sigma^2)$, 则 $\frac{\bar{d} - \mu_d}{\frac{s_d}{\sqrt{n}}} \sim t(n-1)$, p 值为 $P(|t_9| \geq \left|\frac{-0.60}{\frac{0.61}{\sqrt{10}}}\right|) \approx 0.006 \times 2$, 其中 $t_9 \sim t(9)$ 。故拒绝 H_0 。

7.8 Bayes 假设检验

例 7.16. 设有两种硬币, 正面朝上的概率分别为 $p = 0.5, 0.7$ 。现有一硬币, 掷之 n 次, 观测到 $X = x$ 次正面向上。检验 $H_0: p = 0.5, H_1: p = 0.7$ 。与之前不同, 此时我们假定有先验概率 $P(H_0), P(H_1)$ (如掌握一些硬币来源的信息), 则 Bayes 检验准则为若后验概率比 $\frac{P(H_0|X=x)}{P(H_1|X=x)} < 1$ 则拒绝 H_0 。 $\frac{P(H_0|X=x)}{P(H_1|X=x)} = \frac{P(H_0)P(X=x|H_0)}{P(H_1)P(X=x|H_1)}$, 即先验比与似然比的乘积。

第八章 线性回归

8.1 回归问题

回归问题可以表述为：已知存在变量关系 $Y = f(X_1, \dots, X_n) + \epsilon$ ，其中 Y 称为因变量或响应变量， X_1, \dots, X_n 称为自变量、回归变量或预测变量，而 ϵ 为随机误差，可能无法测量或不重要，或在建模时尚不清楚。

如果假定 $E(\epsilon|X_1, \dots, X_n) = 0$ ，则 $E(Y|X_1, \dots, X_n) = f(X_1, \dots, X_n)$ ，称为 Y 对 X_1, \dots, X_n 的（均值）回归函数。如果有 (X_1, \dots, X_n, Y) 的样本数据，则可以通过有监督的学习，推断出 f 的信息。

模型中的 X_1, \dots, X_n 可以是随机的，也可以是非随机的所谓控制变量。以下一律约定 X_1, \dots, X_n 为非随机的。

最后，假设 $E(\epsilon) = 0, \text{Var}(\epsilon) = \sigma^2$ ，其中 σ^2 未知。影响 σ^2 大小的因素包括：

1. 模型中的重要因素是否完全
2. f 的形式是否准确

8.2 简单线性回归

本节开始讨论简单线性回归，其具体形式为 $Y = \beta_0 + \beta_1 X + \epsilon$ ，该式称为理论模型，起到背景作用。其中 β_0 为截距或常数项， β_1 为斜率或回归系数，二者统称回归参数，均未知且待定。

这里的“简单”指的是只有一个自变量 X ，“线性”指的是 f 关于参数 β_0, β_1 是线性的。

设对 (X, Y) 进行 n 次独立观测，得到样本 $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ ，即

$$\begin{cases} y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i (i = 1, 2, \dots, n) \\ \epsilon_i \text{ 独立同分布, } E(\epsilon_i) = 0, \text{Var}(\epsilon_i) = \sigma^2 \end{cases}$$

称之为简单线性回归（一元线性回归）模型。由此， $E(y_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i, \text{Var}(y_i) = \sigma^2$ 。

8.3 最小二乘法估计参数

为估计参数 β_0, β_1 , 定义损失函数 $s(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2$, 目标是最小化 $s(\beta_0, \beta_1)$ 。直接求导可得最小值点为 $\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})y_i}{S_{xx}}$, $\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x} = \sum_{i=1}^n (\frac{1}{n} - \frac{(x_i - \bar{x})\bar{x}}{S_{xx}})y_i$, 其中 $S_{xx} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$, 另记 $S_{xy} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$ 。记 $\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$ 。

拟合直线的方程为 $y = \hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$, 过 (\bar{x}, \bar{y}) 点。

命题 8.1. $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_0$ 分别是 β_1, β_0 的无偏估计。

证明. 计算有 $E(\hat{\beta}_1) = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})E(y_i)}{S_{xx}} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(\beta_0 + \beta_1 x_i)}{S_{xx}} = \frac{\beta_1 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})x_i}{S_{xx}} = \frac{\beta_1 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}} = \beta_1$, 以及 $E(\hat{\beta}_0) = E(\bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E(y_i) - \bar{x}E(\hat{\beta}_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\beta_0 + \beta_1 x_i) - \bar{x}\beta_1 = \beta_0$ 。□

进一步计算可以得出 $\text{Var}(\hat{\beta}_1) = \text{Var}\left(\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})y_i}{S_{xx}}\right) = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \bar{x})^2}{S_{xx}^2} \text{Var}(y_i) = \frac{1}{S_{xx}^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$, 以及 $\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \text{Var}\left(\sum_{i=1}^n (\frac{1}{n} - \frac{(x_i - \bar{x})\bar{x}}{S_{xx}})y_i\right) = \sum_{i=1}^n (\frac{1}{n} - \frac{(x_i - \bar{x})\bar{x}}{S_{xx}})^2 \sigma^2 = (n \cdot \frac{1}{n^2} - \frac{\sum_{i=1}^n 2(x_i - \bar{x})\bar{x}}{nS_{xx}} + \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \bar{x}^2}{S_{xx}^2})\sigma^2 = (\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}})\sigma^2 = \frac{\sigma^2}{S_{xx}} \sum_{i=1}^n x_i^2$ 。

可对 y_i 进行中心化处理: $y_i = \beta_0 + \beta_1 \bar{x} + \beta_1(x_i - \bar{x}) + \epsilon_i = \tilde{\beta}_0 + \beta_1(x_i - \bar{x}) + \epsilon_i$, 则其中的常数项 $\tilde{\beta}_0 = \beta_0 + \beta_1 \bar{x}$ 的估计为 $\hat{\tilde{\beta}}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \bar{x} = \bar{y}$ 。

当 $x = x_i$ 时, 拟合直线上相应点为 $(x_i, \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i)$ 。记 $\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$ 为在 $x = x_i$ 处 y 的拟合值, $y_i - \hat{y}_i$ 称之为残差 (Residual) 或误差。误差平方和 (Sum of Squared Errors, SSE) 或残差平方和 (Residual Sum of Squares, RSS) 为 $SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i))^2$ 。

命题 8.2. $\hat{\sigma}^2 = \frac{SSE}{n-2}$ 是 σ^2 的无偏估计。

还可以据此给出 $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_0$ 的标准差的估计 $\widehat{\text{Se}}(\hat{\beta}_1) = \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{S_{xx}}}$, $\widehat{\text{Se}}(\hat{\beta}_0) = \hat{\sigma} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}}$ 。

8.4 回归参数推断

本节中追加假设 $\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2) (i = 1, \dots, n)$, 则有 $y_i \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$ 且独立。对于此模型, 似然函数 $L(\beta_0, \beta_1) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2}{2\sigma^2}}$, 可以证明 β_0, β_1 的 MLE 为 $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1$ 。

考虑假设检验: $H_0: \beta_1 = 0, H_1: \beta_1 \neq 0$ 。注意到 $\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{S_{xx}}}} \sim N(0, 1)$, 以及可以证明 $\frac{SSE}{\sigma^2} = \frac{(n-2)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2)$, 且二者独立, 故 $\frac{\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{S_{xx}}}}}{\sqrt{\frac{SSE}{\sigma^2}/(n-2)}} = \frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}} \sim t(n-2)$ 。取检验统计量 $T = \frac{\hat{\beta}_1}{\hat{\sigma}/\sqrt{S_{xx}}}$, 当 H_0 为真时, $T \sim t(n-2)$ 。检验准则为若 $|T| \geq t_{\frac{\alpha}{2}}(n-2)$ 则拒绝 H_0 。

8.5 预测

沿用 8.4 节的假设, 当 $x = x_0$ 时, $y_0 = \beta_0 + \beta_1 x_0 + \epsilon_0$, 其中 $\epsilon_0 \sim N(0, \sigma^2)$ 。记 $\mu_0 = E(y_0) = \beta_0 + \beta_1 x_0$, 则 μ_0 的预测正是拟合直线上 x_0 处的取值 $\hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0 = \bar{y} + \hat{\beta}_1(x_0 - \bar{x}) = \sum_{i=1}^n (\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_0 - \bar{x})}{S_{xx}}) y_i$ 。计算得 $E(\hat{y}_0) = E(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0) = \beta_0 + \beta_1 x_0 = \mu_0$, $Se^2(\hat{y}_0) = Var(\hat{y}_0) = \sum_{i=1}^n (\frac{1}{n} + \frac{(x_i - \bar{x})(x_0 - \bar{x})}{S_{xx}})^2 \sigma^2 = \sigma^2 (\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}})$ 。

利用 $\frac{\hat{y}_0 - \mu_0}{Se(\hat{y}_0)} \sim N(0, 1)$, 以及标准误的估计为 $\hat{Se}(\hat{y}_0) = \hat{\sigma} \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$, 又 $\frac{(n-2)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2)$ 且与 $\frac{\hat{y}_0 - \mu_0}{Se(\hat{y}_0)}$ 独立, 有 $\frac{\hat{y}_0 - \mu_0}{\hat{Se}(\hat{y}_0)} \sim t(n-2)$, 可以据此给出 μ_0 的 $(1-\alpha)$ -置信的 (双侧) 区间估计为 $(\hat{y}_0 - t_{\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{Se}(\hat{y}_0), \hat{y}_0 + t_{\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{Se}(\hat{y}_0))$ 。

由于 $y_0 \sim N(\mu_0, \sigma^2)$, μ_0 (若已知) 是 y_0 的均方意义下的最优估计。由于 μ_0 未知, 用 $\hat{y}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_0$ 代替, 也是 y_0 的一个良好估计。可以证明 y_0 与 \hat{y}_0 相互独立, 且 $\hat{y}_0 - y_0$ 服从正态分布, 有 $E(\hat{y}_0 - y_0) = 0$, $Var(\hat{y}_0 - y_0) = Var(\hat{y}_0) + Var(y_0) = \sigma^2(1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}})$, 即 $\frac{\hat{y}_0 - y_0}{\sigma \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}} \sim N(0, 1)$, 分母的估计为 $\hat{\sigma} \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}$, 又 $\frac{(n-2)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-2)$ 且与 $\frac{\hat{y}_0 - y_0}{\sigma \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}}$ 独立, 有 $\frac{\hat{y}_0 - y_0}{\hat{\sigma} \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}} \sim t(n-2)$, 可以据此给出 y_0 的 $(1-\alpha)$ -置信的 (双侧) 区间估计为 $(\hat{y}_0 - t_{\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{\sigma} \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}}, \hat{y}_0 + t_{\frac{\alpha}{2}}(n-2)\hat{\sigma} \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_0 - \bar{x})^2}{S_{xx}}})$, 称之为 预测区间。

还需注意, 由于模型中 X 与 Y 不是对等的, 故不能将回归方程逆转使用。例如, 若 $(X, Y) \sim N(\mu_1, \mu_2, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$, 则 $E(Y|X = x) = \mu_2 + \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1}(x - \mu_1)$, $E(X|Y = y) = \mu_1 + \rho \frac{\sigma_1}{\sigma_2}(y - \mu_2)$, 从前一式形式上解出的 x 与后一式并不一致。