Lab-1: 相关分析 **2025** 年 **9** 月 **22** 日

内容: 1. 安装 R 包 2. 相关分析 3. 蒙特卡洛
任务: 阅读下面的材料, 重复代码命令（手工输入!），并做练习 1-3，提交结果。

1 安装程序包 (packages)

我们需要如下 R 包：corrplot (相关系数可视化)；在 R 环境中，安装命令如下：

```
> install.packages( c("corrplot" ) ) # 安装
> library(corrplot) # 载入 corrplot
```

2 相关系数

下面我们学习与相关系数有关的几个函数，包括计算相关系数的函数 cor, 相关检验函数 cor.test, 相关系数矩阵可视化函数 corrplot。

cor, cor.test, corrplot (package:corrplot)

我们以 R 自带数据集 state.x77 为例演示 R 函数。state.x77 给出了美国 50 个州 1977 年的如下信息:

Population(人口), Income(人均收入), Illiteracy(文盲率), Life Exp(平均寿命),
Murder(凶杀案数目, 每 10 万人), HS Grad(高中学历比率), Frost(寒冷天气数), Area (面积)

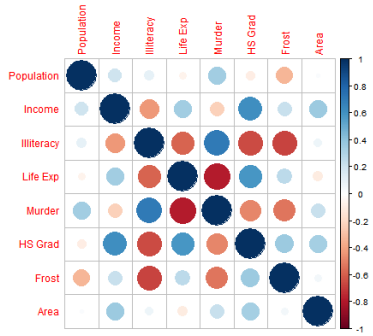
2.1 相关系数及其可视化

相关系数矩阵如下

```
> cor(state.x77)
           Population Income Illiteracy Life Exp Murder HS Grad Frost  Area
Population       1.00   0.21       0.11    -0.07   0.34   -0.10 -0.33  0.02
Income           0.21   1.00      -0.44     0.34  -0.23    0.62  0.23  0.36
Illiteracy       0.11  -0.44       1.00    -0.59   0.70   -0.66 -0.67  0.08
Life Exp        -0.07   0.34      -0.59     1.00  -0.78    0.58  0.26 -0.11
Murder           0.34  -0.23       0.70    -0.78   1.00   -0.49 -0.54  0.23
HS Grad         -0.10   0.62      -0.66     0.58  -0.49    1.00  0.37  0.33
Frost           -0.33   0.23      -0.67     0.26  -0.54    0.37  1.00  0.06
Area             0.02   0.36       0.08    -0.11   0.23    0.33  0.06  1.00
```

使用程序包 corrplot 中的函数 corrplot 将上述相关系数矩阵画图表示（相关系数绝对值越大，圆圈的越大，红色代表正数，蓝色代表负数）:

```
> (R=cor(state.x77))     #Pearson correlation coefficients
> corrplot(R, diag=F)  # plot correlation coefficients
```



2.2 相关性检验

t-检验

通常认为温度越高的地区，犯罪率越高。Murder 与 Frost 的相关系数等于 −0.5388834, 下面我们检验 Murder 与 Frost 是否显著相关：

```
> r=R["Murder","Frost"]
 [1] -0.5388834
> cor.test(state.x77[, "Murder"], state.x77[, "Frost"]) # or
> cor.test(~ Murder+Frost,data=state.x77)

        Pearson's product-moment correlation

data:  state.x77[, "Murder"] and state.x77[, "Frost"]
t = -4.4321, df = 48, p-value = 5.405e-05
alternative hypothesis: true correlation is not equal to 0
95 percent confidence interval:
-0.7106377 -0.3065115
sample estimates:
cor
-0.5388834
```

上述检验用 Pearson 相关系数度量相关程度并假设数据来自于正态总体，检验统计量为

$$t = \sqrt{n-2}\frac{r}{\sqrt{1-r^2}}$$

原假设下 $t \sim t_{n-2}$，该检验称为 t-检验。输出结果给出了 t 检验的值 $t = -4.4321$, 自由度 $df = 48$, p 值 =5e-5. 最后还给出了相关系数值 −0.5389, 95% 置信区间 $[-0.7106, -0.3065]$

z-检验

如果不假设正态总体，那么可采用大样本检验（z-检验）

$$z = \sqrt{n-2}r \text{ 或 } \sqrt{n}r, \quad \text{原假设下近似 } z \sim N(0,1)$$

函数 cor.test 并没提供该检验，手工计算如下

```
r=R["Murder","Frost"]
#r=cor(state.x77[, "Murder"], state.x77[, "Frost"])
# r= -0.5388834
z= sqrt(50-2)*r
pvalue=2*(1-pnorm(abs(z)))
pvalue
[1]  0.0001888419
```

置换检验（随机置换函数：sample）

t 检验中总体的正态假设无法验证，而大样本 z 检验需要较大的样本量。所以上述两个检验都不一定适用于当前数据。为了给出一个更为合理的结论，我们使用置换检验方法计算检验统计量在原假设下的（精确）分布，计算精确的 p 值。原假设为 x, y 独立。数据为 $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$。取检验统计量 $T = T(r)$ 为 r 的某个函数, 比如 $T = r$ (或 t, 或 z，不影响下面得到的 p 值），

$$r = \frac{\sum(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum(x_i - \bar{x})^2}\sqrt{\sum(y_i - \bar{y})^2}}$$

这是基于原始数据计算得到的相关系数。原假设成立时，x, y 独立，置换数据 $(x_{\sigma(i)}, y_i), i = 1, ..., n$ 与原始数据出现的可能性相同，其中 $(\sigma(1), ..., \sigma(n))$ 是 $(1, 2, ..., n)$ 的一个置换。基于置换数据计算相关系数

$$r_{per} = \frac{\sum_{i=1}^n(x_{\sigma(i)} - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n(x_{\sigma(i)} - \bar{x})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^n(y_i - \bar{y})^2}}$$

假设 N 次随机置换得到 N 个检验统计量 $r_{per}^{(1)}, ..., r_{per}^{(N)}$, 我们认为这些是原假设成立的时候从总体 T 得到的一批随机样本，因而可以用来估计 T 在原假设下的分布。特别地

$$p = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\{|r_{per}^{(k)}| \geq |r|\}. \tag{1}$$

是原假设下随机置换计算得到的相关系数绝对值超过原始数据相关系数的概率 (N 很大）。

由于置换数据相关性系数公式中的分母不依赖于置换 $\sum_{i=1}^n(x_{\sigma(i)}^{(k)} - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^n(x_i - \bar{x})^2$, 从 p 值计算公式 (1) 来看，不等式 $|r_{per}^{(k)}| \geq |r^{(0)}|$ 两边的分母相同，故检验统计量可取为

$$T = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}$$

而置换数据的版本为

$$T_{per} = \sum_{i=1}^{n} x_{\sigma(i)} y_i - n\bar{x}\bar{y}$$

例如，我们应用置换检验方法检验 Murder 与 Frost 的相关性：

```
x=state.x77[, "Frost" ]
y=state.x77[, "Murder" ]
n=length(x)
#r0=cor (x,y )
t0=sum(x*y) -n*mean(x)*mean(y)
R_per=NULL
t_per=NULL
```

```
N=1000000
for (i in 1:N){
        x_per=sample(x) # 置换 x
        #R_per[i]=cor(x_per,y) # 置换后的相关系数
        t_per[i]=sum(x_per*y) -n*mean(x)*mean(y) # 置换后的 t
}
#p1=mean(abs(R_per)>= abs(r0) )
p2=mean(abs(t_per)>= abs(t0) )
p2
[1] 6.4e-05
```

我们下面随机产生二元正态数据，检查 t-检验（$t = \sqrt{n-2}r/\sqrt{1-r^2}$），z-test ($z = \sqrt{n-2}r$) 与置换检验的结果（p 值）是否接近。

```
# generate data
set.seed(111)
n=20
x=rnorm(n)
y=rnorm(n)
r=cor (x,y)

# t-test: sqrt(n-2)*r/sqrt(1-r^2)
  cor.test(x,y)->tmp
  pvalue.ttest = tmp$p.value
  print(pvalue.ttest)

 #z-test: sqrt(n)*r
 z=sqrt(n-2)*r
 pvalue.ztest=2*(1-pnorm(abs(z)))
 print(pvalue.ztest)

# permutation test:
 r0=cor (x,y)
 R_per=NULL
 N=100000
 for (i in 1:N){
         x_per=sample(x) # 置换 x
         R_per[i]=cor(x_per,y) # 置换后的相关系数
 }
 pvalue.per=mean(abs(R_per)>= abs(r0) )

 print(pvalue.per)
```

练习 1. **产生二元非正态数据**: $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$ iid, **其中** $x_i \sim B(1, 0.3), y_i \sim B(1, 0.6)$, $x_i \perp\!\!\!\perp y_i$, **此时** $t = \sqrt{n-2}r/\sqrt{1-r^2}$ **分布不再是** t **分布（因为总体不是正态），**z-test $z = \sqrt{n-2}r$ **当样本量较大时是正确的近似检验，而置换检验不依赖于总体分布。试比较三种方法的** p **值。**

2.3 非参数检验

非参数型的相关系数：Kendall's tau, Spearman's rho，在函数 cor, cor.test 中指定 method="kendall" 或"spearman" (缺省为"pearson"). 以 Spearman's rho 为例，假设数据为 $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$, 假设 x_i 在所有 x 中的秩（排名）为 R_i，y_i 在所有 y 中的秩（排名）为 S_i。直观上，若 x_i, y_i 之间的关联性较大，则其排名也应该高度相关，Spearman's rho 定义为 $(R_i, S_i), i = 1, ..., n$ 的 Pearson 相关系数

$$\rho = \frac{\sum(R_i - \bar{R})(S_i - \bar{S})}{\sqrt{\sum(R_i - \bar{R})^2}\sqrt{\sum(S_i - \bar{S})^2}}$$

函数选项 exact 用于选择 p 值的计算方式是精确（缺省）还是近似。

```
> x=c(2 , -2,-11, 3, 4 )
> y=c(0,-1,-3, 99,7)
```

```
> rankx=rank(x)
> ranky=rank(y)
> rankx
[1] 3 2 1 4 5
> ranky
[1] 3 2 1 5 4
> pearson=cor(x,y)
> pearson
[1] 0.407719
> spearman=cor(rankx,ranky)
> spearman
[1] 0.9
> cor.test (x,y,method = "spearman")

Spearman's rank correlation rho

data:  x and y
S = 2, p-value = 0.08333
alternative hypothesis: true rho is not equal to 0
sample estimates:
rho
0.9
```

练习 2. **上述例子中** Spearman **检验的精确** p **值为** 0.08333，**它是基于** spearman **系数的原假设下的精确分布计算得到的，该精确** p **值可用置换检验方法逼近。试分别进行** 1000，10000，100000 **次置换，按照公式** (1) **分别计算置换检验** p **值，这些** p **值应该接近** 0.08333。

3 蒙特卡洛方法

蒙特卡罗方法是一种通过计算机反复生成随机数进行数值计算或模拟仿真的方法, 可用于求解未知的复杂计算，也可用于验证和评估已有理论。前面的置换检验方法也是一种蒙特卡洛方法。

例 1. 假设我们不知道单位圆的面积公式。若随机变量 X 服从边长为 2 的正方形内的均匀分布，则它落在内切单位圆内的概率 p 为单位面积 (S) 与正方形面积 (4) 之比。如果我们知道该比率 p, 那么单位圆面积就是 $4p$。为了计算概率 p, 我们在计算机上产生大量 (比如 $n = 100000$ 个) 正方形内的均匀随机数，统计落在单位圆内的点的个数 m, 由大数定律知 $m/n \to p, n \to \infty$, 即当 n 足够大时我们可用比例 m/n 作为概率 p 的估计。

```
n=100000
x=runif(n,-1,1); y=runif(n,-1,1)
m=sum(x^2+y^2<=1) # 落在单位圆内的点的个数
p=m/n # 落在单位圆内的点数的比例
S=4*p # 单位圆面积 S=4*p
```

例 2. 若 $x \sim N(0,1)$, $E(\sqrt{|x|})$ 和方差 $var(\sqrt{|x|})$ 大概是多少？理论计算比较困难，我们可以从标准正态分布中产生大量随机数（随机样本），计算样本均值和样本方差。

```
x=rnorm(n)
mean(sqrt(abs(x))) #0.822
var(sqrt(abs(x))) #0.122
hist(x) # 近似正态 N(0.822, 0.122)
```

例 3. 假设独立同分布二元数据 $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$ 的样本相关系数为 $r = r_n$, 我们已知，如果 x_i, y_i 不相关，则当 $n \to \infty$ 时，

$$\sqrt{n} r_n \xrightarrow{d} N(0,1), \quad \text{即} F_n(t) = P(r_n \le t) \to \Phi(t), \forall t, as \to \infty \tag{2}$$

即 n 足够大时，近似地 $r_n \sim N(0, 1/n)$。这是一个理论结果，对于有限的样本量 n 该渐近分布的近似效果如何？

下面通过蒙特卡洛模拟研究给定有限样本量 n 的情况下，$\sqrt{n} r_n$ 的分布。由于理论结果中对二元总体没做任何假设，我们需要对一些特定（且常见的）的总体产生 n 对 (x_i, y_i) 数据，比如二元正态总体，二元伯努利总体等（当然我们不可能穷尽所有总体，正因如此，蒙特卡罗模拟只能提供理论结果的部分验证）。以二元正态总体为例，假设我们从二元正态总体反复抽样 N 次，每次抽取 n 对数据，计算它们的相关系数 $r_n(k), k = 1, ..., N$，它们是 r_n 的简单随机样本（与 r_n 同分布），当 $N \to \infty$ 时，由大数定律

$$F_n^{(N)}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} 1_{\{r_n(k) \le t\}} \to F_n(t) = P(r_n \le t), \ \forall t, \ N \to \infty$$

只要 N 足够大，左端的经验分布 $F_n^{(N)}(t)$ 会无限接近右端的真实分布 $F_n(t)$, 所以为了考察 (2) 中的结果 $F_n(t) \approx \Phi(t)$, 我们只需考察 $F_n^{(N)}(t)$ 是否接近标准正态分布 $\Phi(t)$。具体步骤如下：

- 模拟次数 $N = 100000$; 样本量 $n = 20$.
- 对 $k = 1, 2, .., N$
  从二元正态总体产生 $(x_i^{(k)}, y_i^{(k)}), i = 1, ..., n$;
  计算相关系数 $r_n(k)$ (n: 样本量，k: 第 k 次模拟);
- 得到 $r_n(1), ..., r_n(N)$, 画出直方图; 计算 $r_n(1), ..., r_n(N)$ 的样本方差 (它是否接近 $1/n$?)

代码如下：

```
n=20
N=100000
allr=NULL
for (k in 1:N){
 x=rnorm(n)
 y=rnorm(n)
 r.k=cor(x,y)
 allr=c(allr, r.k)
}
hist(allr);   var(allr) # 它是否接近 1/n?
```

练习 3. **假设** $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$ iid **来自于二元正态分布，总体相关系数为** ρ, **样本相关系数为** $r = r(n)$. **已知当** n **较大时，近似地有**

$$r(n) \sim N(\rho, (1 - \rho^2)^2 / n)$$

以及对于 Fisher's z-**变换，近似地有**

$$atanh(r(n)) \sim N(atanh(\rho), 1/n)$$

其中 $atanh(x) = \frac{1}{2} \log\left(\frac{1+x}{1-x}\right), |x| < 1$。**试通过蒙特卡洛随机模拟研究上述两个分布逼近的优劣 (分别考虑较小的** $n = 20$ **和较大的** $n = 100$ **以及较小的** $\rho = 0.2$ **和较大的** $\rho = 0.7$ **)**。

注：产生相关系数为 ρ 的二元正态 $(x, y)^\top \sim N\left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix}\right)$ 的方法如下:

- 产生独立 r.v.'s $u, v \ iid \ \sim N(0, 1)$
- 令 $x = u, \ y = \rho u + \sqrt{1 - \rho^2} v.$