

拟合优度检验

● 杨振海 程维虎 张军舰 编著



科学出版社

拟合优度检验

杨振海 程维虎 张军舰 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

拟合优度检验不仅是统计基础的组成部分,而且和实际应用有密切关系,其内容讨论可用已知分布(或分布族)拟合现实数据以及评价拟合优劣的标准等.

本书系统介绍拟合优度检验的理论、方法及其应用,其中包括作图法与回归方法、 χ^2 型检验、EDF型检验、拟合优度检验中的变换方法、常见分布的拟合优度检验、多元分布的拟合优度检验等.

本书可作高等院校概率统计专业研究生教材,亦可供相关专业研究生、教师、科研人员和统计工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

拟合优度检验/杨振海,程维虎,张军舰编著. —北京:科学出版社,2011
ISBN 978-7-03-030264-9

I. ①拟… II. ①杨… ②程… ③张… III. ①拟合优度检验 IV. ①O212.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011) 第 022753 号

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

新 蕾 印 刷 厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2011 年 3 月第 一 版 开本: B5 (720 × 1000)

2011 年 3 月第一次印刷 印张: 20 1/2

印数: 1—2 000 字数: 403 000

定价: 66.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

新版前言

拟合优度检验是统计中的重要研究领域,也是统计应用中必涉及的内容. 1994 年安徽教育出版社出版了本书作者之一编写的《拟合优度检验》一书,至今还没有同领域的其他专著出版. 陈希孺院士曾为作者 1994 年出版书作序,概述了拟合优度检验的重要性和研究简史,指出一个应用工作者也有必要关心和了解这个有高度实用性课题的各个方面和新的发展. 然而,在通常的统计学教本中由于篇幅有限,对这个问题不可能作过多的展开讨论,即使在专著中,尤其在中文专著中,对这个问题的讨论也很少且不系统,这给读者带来了很大的不便. 1994 年的版本出版以后,不少科研工作者和一些应用工作者参考了该书,并指出了该书的不足和修改建议. 尤其是大量印刷错误,给阅读带来很大不便. 本书是对 1994 年版本的修改和补充,在保持原版行文简洁的风格同时,收录一些近期的主要研究成果. 对本书修改编写作以下说明:

(1) 第 1 章引论部分中细化了 EDF 型检验的发展简史,特别是增添了最近的研究成果. 由杨振海和张军舰共同负责修改.

(2) 第 2 章由程维虎负责修改.

(3) 在第 4 章“EDF 型检验”由张军舰负责修改,增写了“上界型 EDF 型幂偏差统计量”和“积分型 EDF 型幂偏差统计量”两节.

(4) 第 5, 6 章由杨振海和程维虎共同修改.

(5) 增加第 7 章多元分布的拟合优度检验,主要是和作者研究有关的问题,不是该领域的概括. 由于作者水平有限,作全面概括实有困难,敬请读者谅解. 由杨振海负责编写,以苏岩为主,共同编写了多元分布的光滑检验一节. 主要内容是将 VDR 理论应用于多元分布拟合优度检验,如在作卡方检验时,如何分组一直是困扰实际应用者的关键问题,作者提出了应用 VDR (vertical density representation) 理论得到了按密度函数值等概分组方法,克服了分组任意性. 这个问题的关键不在于按概率函数值分组,而是如何实现或近似实现大家公认的等概分组,是计算的困难. 就是必须知道随机变量 $V = f(\mathbf{X})$, $\mathbf{X} \sim f(\cdot)$ 的分布, $f(\cdot)$ 是随机向量 $\mathbf{X}$ 的概率密度函数. 恰好 VDR 理论解决了这一问题,可以实现按密度函数值实现等概分组. 对多元分布的光滑检验作者也提出了可行的想法,细节工作尚需完善.

(6) 本书在论述基本问题和理论的同时,尽量突出 R 软件的应用,减少了许多统计用表. 尤其是用模拟得到的分位数表,可用模拟 p 值代替. 删去了附录,有的内容移至正文,有的删去. 问题与补充完全删除,因为修订这部分内容太耗时,短

时间内无法完成,待有机会再做这方面工作.

(7) 杨振海通读全书,修改了一些错误,使之更有可读性,风格尽量统一.但 EDF 型幂偏差统计量两节,按张军舰的原文,只是将公式形式做了统一处理.

本书作者希望这是一本理论严谨又可读的关于拟合优度检验的书,对统计研究学者来说是有益的参考资料,对实际应用者来说也易于找到有用的内容.作者虽做了最大努力,由于水平所限,未必达到目标.望同仁学者、读者批评指正.

作 者

2010 年 5 月于北京

原 版 序

K. Pearson 在 1900 年发表的关于拟合优度 χ^2 检验的论文, 常被学者们认为是近代数理统计学的发端. 这篇论文是统计学应用中一个常见的重要问题, 即一组随机观察数据可否合理地看成来自一个其分布完全已知的总体, 提出了一个判定准则. 自那时以来, 这个问题的研究有了极大的发展, 有的是 Pearson 开辟的方向的拓展和深入, 有的则是基于新的概念. 后者的一个代表性例子是 Kolmogorov 在 20 世纪 30 年代提出的检验, 以及如 Cramér-von Mises 检验等一系列基于经验分布的检验方法.

这些发展不仅以其数学上的深刻而受到学者们的赞赏, 且其中许多结果都有很大的实用价值. 这是因为, 拟和优度检验是一个很复杂的问题, 随着实际背景的不同, 较好的处理方法也有各异, 每一种方法都在特定的条件下有其优越性, 而在另外的条件下又显示其不足, 不可能找到一种一成不变的方法, 使其在各种不同应用的情况下都有良好的表现. 所以, 一个应用工作者也有必要关心和了解这个有高度实用性课题的多方面和新的发展. 然而, 在通常的统计学教本中由于篇幅有限, 对这个问题不可能作过多的展开讨论, 即使在专著中, 尤其在中文专著中, 对这个问题的讨论也很少且不系统, 这给读者带来了很大的不便.

杨振海教授的这本著作, 是国内出版的关于这个课题的第一本系统性专著, 它填补了统计学著作中的上述空缺.

全书包含 6 章和 4 个附录, 第 1 章“引论”是本书论题的一个简要的概括, 作者解释了什么是拟合优度, 并遵循历史发展的顺序简述了各种有关的概念和主要的统计量的构造. 第 2 章“作图法与回归方法”, 粗略地说, 一种分布在特定的概率纸上的图形呈一条直线, 这一现象可用于检验分布, 虽较粗糙但简单易行且具直观性. 作者在本章中, 结合对一些常见分布的应用, 通过数字实例, 对这个方法进行了系统的、有理论深度的介绍. 第 3, 4 两章是本书的主干. 第 3 章“ χ^2 型检验”, 是关于 K. Pearson 的概念和方法及其发挥, 其中包含了一般读者较为熟悉的有关 Pearson χ^2 检验及其变形的基本内容. 另一些内容是一般教本中不常见的, 如 20 世纪 80 年代发展起来的幂偏差统计量, 这种统计量的形式与 Pearson χ^2 统计量相似但更为一般, 也有相似的极限性质, 且因其包含了一个可以自由选择参数而在应用上更为灵活. 另一个是所谓“光滑检验”, 其基本思想是把要检验的分布嵌入一个更大的带参数的分布族内, 而把拟合检验问题转化为通常的参数检验问题. 其目的是将非参数统计问题参数化, 以便构造效率更高的检验统计量. 第 4 章“EDF 型

检验”，其基本概念溯源于 Kolmogorov 的奠基性工作，这一章特别有感兴趣的部分是关于带参数的 Kolmogorov 检验的讨论，这是一个艰深的课题且在通常教本中很少涉及，而应用上又很重要，尽管阅读这一部分仍要求读者具备必要的随机过程知识，但作者已尽很大的努力，使其叙述做到平易近人和具有可读性。第 5 章“拟合优度检验中的变换方法”，其要旨是研究通过适当的变换，把一个复合假设转化为一个简单假设，复合假设中包含若干未知参数，通常的处理方法是通过样本估计它，然后以估计值代替参数值，再按简单假设的方式处理。作者指出，这个方法不仅招致自由度的损失，且使寻求极限分布的问题大为复杂化，作者就几种类型的分布族研究了变换的可行性及其方法，而这些分布族，包括含一、二个参数的指数分布族，正是应用上最常见的。最后一章讨论了几个常见分布，尤其是正态分布的拟合优度检验，它包含了一些在前几章中没有介绍，但在应用上可能有更良好表现的检验法。这些方法所涉及的检验统计量的分布甚为复杂，作者以列表形式给出了其分位点，以便于具体应用。

作者杨振海教授有长期从事统计应用课题的经验，并具有较高的理论素养，反映在本书的写作上，我们发现其内容丰富而不繁，选材注重其应用性但理论上不失其严谨，注重传统的有用的内容但也不忽视新的发展，行文简要而不失其可读性。我有幸在本书出版前阅读了其原稿，感到这是一部值得向广大读者推荐的著作，故乐为之序。

陈希孺

1993 年 12 月 30 日

目 录

新版前言

原版序

第 1 章 引论	1
1.1 什么是拟合优度	1
1.2 拟合优度检验发展概述	4
1.2.1 χ^2 型检验	4
1.2.2 EDF 型检验	8
1.2.3 其他	12
第 2 章 作图法与回归方法	14
2.1 P-P 散点图	14
2.2 Q-Q 散点图	15
2.2.1 位置刻度参数分布族的 Q-Q 散点图	16
2.2.2 Weibull 分布的散点图	18
2.3 离散变量的拟合优度检验作图法	19
2.4 对称性检验的作图法	21
2.5 直方图	23
2.6 回归方法	23
2.6.1 均匀分布的回归检验	24
2.6.2 正态分布的回归检验	25
2.6.3 指数分布的回归检验	28
2.6.4 极值分布的相关系数检验	29
2.6.5 Logistic 分布的相关系数检验	30
2.6.6 人工参数法	30
第 3 章 χ^2 型检验	37
3.1 Pearson χ^2 统计量	37
3.1.1 多项分布	37
3.1.2 Pearson χ^2 统计量	40

3.1.3	Pearson χ^2 统计量的渐近分布	41
3.1.4	复合假设的 Pearson χ^2 检验	45
3.1.5	应用	50
3.2	幂偏差统计量	58
3.2.1	幂偏差统计量的定义	58
3.2.2	幂偏差统计量的渐近分布	61
3.2.3	幂偏差统计量的比较	65
3.3	非有限个值分布的 χ^2 检验	75
3.3.1	分组的一般概念	75
3.3.2	分组方式	76
3.3.3	多元分布的 χ^2 检验的 VDR 分组	78
3.3.4	Chernoff-Lehmann 统计量	79
3.3.5	广义 χ^2 统计量	81
3.4	光滑检验	95
3.4.1	极大似然比检验	97
3.4.2	连续分布的光滑检验	100
3.4.3	离散分布的光滑检验	111
第 4 章	EDF 型检验	123
4.1	经验分布和经验过程	123
4.2	Kolmogorov-Smirnov 统计量	128
4.2.1	K_n^+ 的准确分布	129
4.2.2	K_n 的准确分布	132
4.2.3	Kolmogorov-Smirnov 统计量的极限分布	136
4.3	上界 EDF 型幂偏差统计量	139
4.3.1	上界 EDF 型幂偏差统计量的准确分布	140
4.3.2	上界 EDF 型幂偏差统计量的极限分布	146
4.3.3	一类功效较优的上界型检验	156
4.4	Cramér-von Mises 型统计量	157
4.4.1	Cramér-von Mises 型统计量的极限分布	159
4.4.2	Cramér-von Mises 统计量的分量	165
4.5	积分 EDF 型幂偏差统计量	171
4.5.1	积分 EDF 型幂偏差统计量的计算公式	171

4.5.2	积分 EDF 型幂偏差统计量的极限分布	174
4.5.3	一类功效较优的积分型非参数似然比检验	182
4.6	Kuiper 和 Watson 统计量	187
4.6.1	Kuiper 统计量	187
4.6.2	Watson 统计量	190
4.7	其他统计量	193
4.8	含估计参数的 EDF 型统计量	196
4.8.1	含估计参数的 Kolmogorov 统计量	197
4.8.2	关于常见分布的含估计参数的 EDF 检验	201
第 5 章	拟合优度检验中的变换方法	208
5.1	含参数分布族的变换	208
5.2	条件积分变换	209
5.3	几个重要分布族的变换	214
5.3.1	均匀分布	214
5.3.2	指数分布	217
5.3.3	Pareto 分布	219
5.3.4	正态分布	219
5.3.5	截尾分布	224
5.3.6	样本信息分解及其应用	225
5.3.7	利用分布特性的变换	232
5.4	CPIT 检验的一致概率	236
5.5	最优相似检验	239
5.6	数值例子	248
第 6 章	常见分布的拟合优度检验	251
6.1	关于均匀分布的统计量	251
6.1.1	Greenwood 统计量	252
6.1.2	基于期望差的统计量	255
6.1.3	其他统计量	256
6.2	关于正态分布的检验	258
6.2.1	基于偏峰度的检验	259
6.2.2	Shapiro-Francia 的 W' 检验	263
6.2.3	Agostino Y 检验	264

6.2.4 Geary 检验	264
6.3 关于正态检验的功效比较	265
第 7 章 多元分布的拟合优度检验	269
7.1 多元分布构造	269
7.1.1 VDR 理论	269
7.1.2 II-型垂直密度表示	270
7.2 中心相似分布及其拟合优度检验	273
7.2.1 中心相似分布	273
7.2.2 球对称分布及其拟合优度检验	279
7.2.3 多元正态分布的拟合优度检验	282
7.2.4 球面上均匀分布的拟合优度检验	283
7.3 χ^2 检验的 VDR 分组	285
7.4 多元分布的光滑检验	288
7.4.1 中心相似分布的 Neyman 光滑检验	288
7.4.2 球面上均匀分布的光滑检验	291
7.4.3 球面上非均匀分布的拟合优度检验	294
7.4.4 待研讨问题	299
7.5 有关模拟和统计计算的若干问题	300
7.5.1 几个引理	301
7.5.2 生成随机变量有给定密度的通用算法	302
参考文献	305

第1章 引 论

拟合优度检验在统计理论中有其特殊地位,不仅是统计基础的组成部分,而且和实际应用有密切关系.众所周知,参数估计和参数的假设检验,是总体分布在一定类型的条件下展开其理论的.例如,在总体分布是正态条件下,关于其参数数学期望和方差的估计和假设检验,有严密系统的理论,在实际中广泛地应用正态总体的参数估计和假设检验理论处理实际问题.在总体分布是多元正态分布条件下,参数估计、假设检验问题是构成多元统计分析的主体.在线性模型,或复杂的其他模型,也都是在观察值服从特定分布的前提下展开其统计推断理论的.即使对总体分布要求很少的非参数方法,也是在总体分布满足一定条件下讨论各类问题的.统计理论讨论的问题是相当复杂多样、难以用简短语言概括其具体理论,但无论什么统计模型,总是假设观测误差的分布属于特定分布族,在此前提下讨论各种统计问题.在处理实际问题时,也总是先选定一统计模型,然后按该模型的理论处理这些问题.因此,不管是统计理论还是处理实际问题,我们经常需要回答总体分布或数据是否属于相应统计模型所要求的总体分布族这个问题.换言之,是否可用已知分布(族)拟合现实数据?拟合好坏的标准是什么?这就是拟合优度检验要研究的问题.

本章首先给出拟合优度检验的一般提法,随后遵循历史发展的顺序阐述有关的概念和主要统计量的构造.

1.1 什么是拟合优度

设 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 是一简单样本,即 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 是 i.i.d. (独立、同分布),其共同分布记为 F . 拟合优度检验就是如何检验假设

$$H_0: F \in \mathcal{P}_0, \quad (1.1.1)$$

其中, $\mathcal{P}_0$ 是由具有特定性质的分布组成的分布族. 对立假设可取为

$$H_1: F \notin \mathcal{P}_0 \text{ 或 } H_1: F \in \mathcal{P}_1, \quad \mathcal{P}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \emptyset,$$

$\mathcal{P}_1$ 是某些分布组成的分布族. 为检验 (1.1.1), 典型做法是首先确定两个分布 F_1 和 F_2 之间差异的度量 $m(F_1, F_2)$, 这个度量函数 m 至少满足以下条件:

- (1) $m(F_1, F_2) = 0 \Leftrightarrow F_1 \equiv F_2$;
- (2) $m(F_1, F_2) \geq 0$, 其值愈大, F_1 与 F_2 之间差异愈大.

这里 m 不一定是距离, 距离自然满足上述条件. 以 F_n 记样本 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 的经验分布. 选取 $F^* \in \mathcal{P}_0$, 使其满足

$$m(F_n, F^*) = \min_{F \in \mathcal{P}_0} m(F_n, F). \quad (1.1.2)$$

若样本总体是 F_0 , 则由 Glivenko-Cantelli 定理知 F_n 一致收敛到 F_0 . 因此, $m(F_n, F^*) \leq m(F_n, F_0)$ 较小. 于是当 $m(F_n, F^*)$ 较小时接受 H_0 , 较大时拒绝 H_0 .

为确定临界值, 在零假设 H_0 成立的条件下, 需要求出

$$S(x_1, x_2, \dots, x_n) \equiv m(F_n, F^*)$$

的准确分布或渐近分布. 对给定显著水平 α , 由其准确分布 (或渐近分布) 求出 $1-\alpha$ 准确 (或近似) 分位点 $\zeta(1-\alpha)$, 使得

$$P(S \geq \zeta(1-\alpha) | H_0) \leq \alpha. \quad (1.1.3)$$

当由样本值按式 (1.1.2) 计算得 $S \geq \zeta(1-\alpha)$, 则在显著水平 α 下, 拒绝 H_0 , 这时给出结论是错的概率小于等于 α ; 当由样本值按式 (1.1.2) 计算得 $S < \zeta(1-\alpha)$ 时, 接受 H_0 , 认为用给定分布族中的分布拟合观察数据是可以接受的.

这种用某分布或分布族刻画给定数据是否合适的程度就是拟合优度, 其检验方法就是拟合优度检验.

例 1.1.1 设 X 是一离散变量, 可取值为 $1, 2, \dots, 6$, 记

$$p_i = P(X = i), \quad i = 1, 2, \dots, 6.$$

令 $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_6)'$, 则 $\mathbf{p}$ 为 X 的概率向量, 即 $\mathbf{p}$ 的各分量 $p_i > 0$, $\sum p_i = 1$. 对两个概率向量 $\mathbf{p}$ 和 $\mathbf{q}$ 之间差异度量取为

$$m_1(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^6 \frac{(p_i - q_i)^2}{p_i}. \quad (1.1.4)$$

今对 X 作了 n 次观察, 观察结果为 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_6)'$, 其中 x_i 为在 n 次观察中 X 取值为 i 的次数. 令 $\mathbf{p}'_0 = \left\{ \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \dots, \frac{1}{6} \right) \right\}$, $\mathbf{p}_0$ 是仅由各分量均为 $\frac{1}{6}$ 的概率密度组成的单点集. X 的经验概率 (频率) 函数为 $\left(\frac{x_1}{n}, \frac{x_2}{n}, \dots, \frac{x_6}{n} \right)'$. 于是

$$\begin{aligned} S_1(x_1, x_2, \dots, x_6) &= m_1\left(\frac{\mathbf{x}}{n}, \mathbf{p}_0\right) \\ &= \sum_{i=1}^6 \frac{\left(\frac{x_i}{n} - \frac{1}{6}\right)^2}{\left(\frac{x_i}{n}\right)} \\ &= \sum_{i=1}^6 \frac{1}{n} \frac{\left(x_i - \frac{n}{6}\right)^2}{x_i}. \end{aligned}$$

由第 3 章的结果知, $nS_1(x_1, x_2, \dots, x_6)$ 的极限分布是自由度为 5 的 χ^2 分布. nS_1 正是 Neyman 的修正 χ^2 统计量. 若令

$$m_2(p, q) = \sum_{i=1}^6 \frac{(p_i - q_i)^2}{q_i},$$

则 $nS_2(x_1, x_2, \dots, x_6) = nm_2\left(\frac{x}{n}, p_0\right)$ 正是 Pearson χ^2 统计量.

尽管利用式 (1.1.3), 可给出拟合优度的定量描述, 但实际工作者可能更喜欢用 p 值描述. 何谓此检验的 p 值呢? 对给定观测值, 可计算 S 的值 S_c , 由 S 的分布计算

$$P(S \geq S_c) = \alpha_c, \quad (1.1.5)$$

其中, α_c 常常称为观测数据的显著水平或 p 值. 如果 S 的准确分布很难求出, 也可以用其极限分布近似给出 p 值. S_c 和 α_c 共同描述了用给定分布族拟合观察数据的好坏. 例如, 当 $\alpha_c = 60\%$ 时, 说明当 H_0 成立时, $S \geq S_c$ 的机会有 0.6, 可认为拟合程度是很好的; 当 $\alpha_c = 10\%$ 时, $S \geq S_c$ 的机会有 0.1, 这时就不能认为拟合程度是很好的了; 若 α_c 接近于 1, 有拟合的过分好而对数据的真实性产生怀疑. 因此, 当 α_c 的值在 0.5 左右为好, 如在 0.3 ~ 0.7 之间或在 0.25 ~ 0.75 之间时, 认为拟合得比较好. p 值介于 0.1 与 0.3 间为尚可. p 值越小, 拒绝 H_0 的根据越充分. 一般情况, 若 p 值 α_c 小于给定的显著水平 α (常取 0.1, 对拟合优度检验显著水平不宜取得过小, 如 0.01), 则拒绝零假设 H_0 .

由式 (1.1.3) 做判断和用式 (1.1.5) p 值做判断, 二者结论是一致的. 事实上, 如果 S 的分布已知, p 值越小, S_c 值就越大, 其大于 $\zeta(1-\alpha)$ 的可能性就越大, 拒绝的根据就越充分.

拟合优度检验有许多类型, 本书讨论两类基本假设: 简单零假设和复合零假设.

简单零假设

$$H_0: F = F_0,$$

其中, F_0 是完全已知的分布函数, 就是检验用分布 F_0 拟合现实数是否合适.

复合零假设

$$H_0: F \in \mathcal{P}_0,$$

其中, $\mathcal{P}_0$ 是已知分布族, 往往含有未知参数.

对简单零假设的研究有比较重要的理论意义, 是处理复合零假设的基础. 后者才有实用意义的.

本书不过多涉及基于截尾数据、相依数据等其他的拟合优度检验问题, 有兴趣的读者可查读其他相应文献.

1.2 拟合优度检验发展概述

自 Karl Pearson 于 1900 年提出 χ^2 检验后, 拟合优度检验引起广大学者的兴趣, 发展了各种检验方法及相应理论. 概括起来, 拟合优度检验大体上可分为 χ^2 型、基于经验分布的 EDF 型和积分变换型, 以及针对常用分布 (如正态分布、指数分布、均匀分布等) 体现分布特征的检验统计量. 本节我们按照这些类型分别叙述其研究简史, 重点介绍 χ^2 型检验和 EDF 型检验.

1.2.1 χ^2 型检验

Karl Pearson 在他的讲义 *Mathematical Contributions to the Theory of Evolution* 中, 引进了 Pearson 分布族, 提出了如何检验用分布拟合 (或描述) 试验数据好坏的问题. 1900 年, Pearson 提出了 χ^2 检验. 直到今日, χ^2 检验及与其有关的检验仍是应用最广的检验类型之一.

Pearson χ^2 检验是针对取有限个值的离散分布的. 若 X 是取值 $1, 2, \dots, k$ 的离散分布, $P(X = i) = p_i, 1 \leq i \leq k$. 记 $\mathbf{p}_k = (p_1, p_2, \dots, p_k)'$. 对 X 进行 n 次观测, 观测结果记为 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)'$, 其中 X_i 为在 n 次观察中 X 取 i 的次数, 则 $\mathbf{X} \sim M(n, \mathbf{p}_k)$, $M(n, \mathbf{p}_k)$ 是参数为 $n, \mathbf{p}_k$ 的多项分布. 今欲检验假设

$$H_0: \mathbf{p}_k = \mathbf{p}_0 = (p_{01}, \dots, p_{0k})'.$$

Pearson χ^2 检验的基本思想是比较 X 取各值的期望频数和观察频数的差异, 用统计量

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(X_i - np_{0i})^2}{np_{0i}}$$

来检验 H_0 . 当 $n \rightarrow \infty$ 时, χ^2 的极限分布是自由度为 $k-1$ 的 χ^2 分布, 记作 χ^2_{k-1} .

在实际应用中, $\mathbf{p}_k$ 往往是参数 $\boldsymbol{\theta} \in \Theta$ 的函数 $\mathbf{p}_k = \mathbf{p}(\boldsymbol{\theta})$, 而原假设应为

$$H_0: \mathbf{p}_k \in \mathcal{P}_0 = \{\mathbf{p}_k(\boldsymbol{\theta}) : \mathbf{p}_k(\boldsymbol{\theta}) = (p_1(\boldsymbol{\theta}), \dots, p_k(\boldsymbol{\theta}))', \sum p_i(\boldsymbol{\theta}) = 1, \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}.$$

自然的想法是用 $\boldsymbol{\theta}$ 的估计量 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 代替 $\boldsymbol{\theta}$, 计算 χ^2 , 即用

$$\chi^2(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \sum_{i=1}^k \frac{(X_i - np_i(\hat{\boldsymbol{\theta}}))^2}{np_i(\hat{\boldsymbol{\theta}})}$$

作为检验统计量, Pearson 当时认为若 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 为 $\boldsymbol{\theta}$ 的相合估计, $\chi(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 的极限分布仍是 χ^2_{k-1} . 1924 年, Fisher 证明了 $\chi^2(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 的极限分布是 χ^2_{k-s-1} , s 为参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的维数 (这实际上就是 Fisher 给出的 “估计—参数丢失—自由度的原则”), 同时他指出 $\boldsymbol{\theta}$ 的极小 χ^2 估计 $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 等价, 即 $\chi^2(\bar{\boldsymbol{\theta}})$ 与 $\chi^2(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 有相同的极限分布. 所谓极小 χ^2 估计 (minimum chi squared estimator) 是使 $\chi^2(\boldsymbol{\theta})$ 极小化的 $\bar{\boldsymbol{\theta}}$, 即

$$\chi^2(\tilde{\theta}) = \min\{\chi^2(\theta) : \theta \in \Theta\}. \quad (1.2.1)$$

1946 年, Cramér 给出了著名的似然比检验结果

$$\text{LR} = 2 \sum_{i=1}^k X_i \log \left(\frac{X_i}{n\hat{p}_i} \right) \quad (1.2.2)$$

也是渐近于 χ^2_{k-s-1} , 其中, $\hat{p}_i = p_i(\hat{\theta})$.

1949 年, Neyman 提出了修正 χ^2 统计量

$$\chi_M^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(X_i - n\hat{p}_i)^2}{X_i}. \quad (1.2.3)$$

实际上修正 χ^2 统计量 χ_M^2 将 χ^2 表达式中分母的 np_i 用 X_i 代替, 自然 χ_M^2 与 χ^2 有相同的极限分布. 它的优点在于修正极小 χ^2 估计 $\tilde{\theta}_M$ 的求法简单了;

$$\chi_M^2(\tilde{\theta}_M) = \min_{\theta \in \Theta} \chi_M^2(\theta) = \min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^k \frac{(X_i - np_i(\theta))^2}{X_i},$$

$\tilde{\theta}_M$ 应满足方程

$$\sum_{i=1}^k \frac{X_i - p_i(\theta)}{X_i} \frac{\partial p_i(\theta)}{\partial \theta_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, s. \quad (1.2.4)$$

而极小 χ^2 估计 $\tilde{\theta}$ 满足方程

$$\sum_{i=1}^k \left\{ \frac{X_i - np_i(\theta)}{p_i(\theta)} \right\}^2 \frac{\partial p_i(\theta)}{\partial \theta_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, s. \quad (1.2.5)$$

Neyman 指出式 (1.2.4) 和式 (1.2.5) 相比, 更容易求得解析解.

Freeman-Turkey 统计量定义为

$$FT^2 = 4 \sum_{i=1}^k (\sqrt{X_i} - \sqrt{np_i})^2. \quad (1.2.6)$$

它的极限分布仍是 χ^2_{k-s-1} , 详见 Fienberg (1979), Moore (1986).

还有, 与 Kulback 信息量有关的修正似然比统计量

$$\text{LRM} = 2 \sum_{i=1}^k n\hat{p}_i \frac{\ln(n\hat{p}_i)}{X_i}. \quad (1.2.7)$$

1984 年, Cressie 和 Read (1984) 提出了幂偏差统计量理论, 将上述统计量均纳入幂偏差统计量族 (class of power divergence statistics). 该统计量族是基于两离散分布的幂偏差度量.

设 $p = (p_1, p_2, \dots, p_k)'$ 与 $q = (q_1, q_2, \dots, q_k)'$ 是二概率函数, 那么 q 偏离 p 的 λ 阶偏差定义为

$$I^\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\lambda(\lambda+1)} \sum_{i=1}^k q_i \left(\left(\frac{q_i}{p_i} \right)^\lambda - 1 \right), \quad -\infty < \lambda < \infty, \quad (1.2.8)$$

其中, I^0 和 I^{-1} 分别为式 (1.2.8) 等号右边关于 $\lambda \rightarrow 0$ 和 $\lambda \rightarrow -1$ 取极限得到. 显然, I^λ 仅当 $\lambda = -\frac{1}{2}$ 时才是距离.

设 $\mathbf{X} \sim M(n, \mathbf{p}_k)$, 幂偏差统计量 $R^\lambda(\mathbf{X}, \mathbf{p}_k)$ 定义为

$$R^\lambda(\mathbf{X}, \mathbf{p}_k) = 2nI^\lambda\left(\frac{\mathbf{X}}{n}, \mathbf{p}_k\right), \quad -\infty < \lambda < \infty. \quad (1.2.9)$$

易见, $R^0(\mathbf{X}, \mathbf{p}_k)$ 与 Cramér 的似然比检验统计量等价; $R^1(\mathbf{X}, \mathbf{p}_k)$ 与 χ^2 统计量等价; $R^{-1}(\mathbf{X}, \mathbf{p}_k)$ 与修正似然比检验统计量等价.

含估计参数的幂偏差统计量 $R^\lambda(\tilde{\theta})$ 定义为

$$R^\lambda(\tilde{\theta}) = 2nI^\lambda\left(\frac{\mathbf{X}}{n} : \mathbf{p}(\tilde{\theta})\right),$$

其中, $\tilde{\theta}$ 为极小幂偏差估计

$$R_\lambda(\tilde{\theta}) = \min_{\theta \in \Theta} I^\lambda\left(\frac{\mathbf{X}}{n} : \mathbf{p}(\theta)\right).$$

Cressie 和 Read (1984) 给出, 在正则条件下, 对任意固定 λ , $R^\lambda(\tilde{\theta})$ 的极限分布是 χ^2_{k-s-1} .

χ^2 检验也可应用于连续分布, 首先将其离散化. 设 $X \sim F(\cdot|\theta)$, $F(\cdot|\theta)$ 是分布函数, θ 为参数. 将 X 的值域分成 k 个互不相交的集合 $E_i, 1 \leq i \leq k$, 令

$$p_i(\theta) = \int_{E_i} dF(x|\theta), \quad 1 \leq i \leq k.$$

设 $X_1, \dots, X_n$ 是 X 的简单样本, 令

$$Y_i = \# \{X_j \in E_i, j = 1, 2, \dots, n\},$$

其中, $\#\{\cdot\}$ 表示集合 $\{\cdot\}$ 中元素的个数, 则

$$\mathbf{Y}_n = (Y_1, Y_2, \dots, Y_k)' \sim M(n, \mathbf{p}_k),$$

以及

$$\chi^2(\tilde{\theta}) = \sum_{i=1}^k \frac{(Y_i - np_i(\tilde{\theta}))^2}{np_i(\tilde{\theta})},$$

其中, $\tilde{\theta}$ 是 θ 的相合估计. 若取 $\tilde{\theta}$ 为基于 Y 的极大似然估计 $\hat{\theta}_n$, 则 $\chi^2(\hat{\theta}_n)$ 的极限分布为 χ^2_{k-s-1} . 也可取 $\tilde{\theta}$ 为基于 $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_n)'$ 的极大似然估计 θ_n^* , 但这时的极限分布不再是 χ^2_{k-s-1} . Chernoff 和 Lehmann (1954) 证明了 $\chi^2(\theta_n^*)$ 的渐近分布与变量

$$\chi^2_{k-s-1} + \sum_{i=1}^s \lambda_i \chi^2_{1i}$$