课程主页：http://staff.ustc.edu.cn/~ynyang/2022

第三讲 随机向量及去相关化

2022.9.16

去相关化: $\mathbf{y} \to \mathbf{y} - \Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\mathbf{x}$ 与$\mathbf{x}$不相关

随机向量的协方差矩阵/相关系数矩阵

多个随机变量之间的相关性如何度量？我们一般通过两两之间的相关性，即协方差矩阵或相关系数矩阵进行刻画。

均值

定义：随机向量 $\mathbf{x}=(x_1,\ldots,x_n)^{\top}$ 的均值定义为

$$E(\mathbf{x})=(Ex_1,\ldots,Ex_n)^{\top}$$

协方差矩阵

定义：随机向量 $\mathbf{x}_{n\times 1},\mathbf{y}_{m\times 1}$ 的协方差矩阵定义为

$$\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{y})=\left(\operatorname{cov}(x_i,y_j),_{1\le i\le n,1\le j\le m}\right)=E(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_x)(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}_y)^{\top}$$

其中 $\boldsymbol{\mu}_x=E(\mathbf{x}),\boldsymbol{\mu}_y=E(\mathbf{y})$，特别地，随机向量 $\mathbf{x}$ 的方差-协方差矩阵

$$\operatorname{var}(\mathbf{x})=\operatorname{cov}(\mathbf{x})=\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{x})=E(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_x)(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_x)^{\top}=E\mathbf{x}\mathbf{x}^{\top}-\boldsymbol{\mu}_x\boldsymbol{\mu}_x^{\top}.$$

记号：随机向量 $\mathbf{x}\sim(\boldsymbol{\mu},\Sigma)\Leftrightarrow E(\mathbf{x})=\boldsymbol{\mu},\quad \operatorname{var}(\mathbf{x})=\Sigma$

性质

命题1. 设$\mathbf{x},\mathbf{y}$分别为$n\times 1$的随机向量，$\mathbf{z},\mathbf{w}$是$m\times 1$随机向量，则

(1) $E(\mathbf{x}+\mathbf{y})=E(\mathbf{x})+E(\mathbf{y})$，

$E(A\mathbf{x}+\mathbf{b})=AE(\mathbf{x})+\mathbf{b}$，任意常数矩阵$A$和向量$\mathbf{b}$.

(2) $\operatorname{cov}(\mathbf{x}+\mathbf{y},\mathbf{z}+\mathbf{w})=\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{z})+\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{w})+\operatorname{cov}(\mathbf{y},\mathbf{z})+\operatorname{cov}(\mathbf{y},\mathbf{w})$

$\operatorname{var}(\mathbf{x}+\mathbf{y})=\operatorname{var}(\mathbf{x})+\operatorname{var}(\mathbf{y})+\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{y})+\operatorname{cov}(\mathbf{y},\mathbf{x})$

(3) $\operatorname{cov}(A\mathbf{x}+\mathbf{b},B\mathbf{y}+\mathbf{c})=A\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{y})B^{\top}$, 其中$A,B$为常数矩阵,$\mathbf{b},\mathbf{c}$为常数向量. 特别地，$\operatorname{var}(A\mathbf{x}+\mathbf{b})=A\operatorname{var}(\mathbf{x})A^{\top}$

(4) 记$\boldsymbol{\mu}=E(\mathbf{x})$, $\Sigma=\operatorname{var}(\mathbf{x})$, 对任何$n\times n$常数方阵$C$,

$E(\mathbf{x}^{\top}C\mathbf{x})=\boldsymbol{\mu}^{\top}C\boldsymbol{\mu}+tr(\Sigma C)$,

证明:(3) $\operatorname{cov}(A\mathbf{x}+\mathbf{b},B\mathbf{y}+\mathbf{c})\overset{\text{定义}}{=}\mathrm{E}(A\mathbf{x}+\mathbf{b}-A\boldsymbol{\mu}_x-\mathbf{b})(B\mathbf{y}+\mathbf{c}-B\boldsymbol{\mu}_y-\mathbf{c})^{\top}$

$=A\left[E(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_x)(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu}_y)^{\top}\right]B^{\top}=A\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{y})B^{\top}$

(4) $E(\mathbf{x}^{\top}C\mathbf{x})=Etr(\mathbf{x}^{\top}C\mathbf{x})=Etr(C\mathbf{x}\mathbf{x}^{\top})=trCE(\mathbf{x}\mathbf{x}^{\top})$，由$\Sigma=\operatorname{var}(\mathbf{x})=E(\mathbf{x}\mathbf{x}^{\top})-\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^{\top}$

$\Rightarrow E(\mathbf{x}\mathbf{x}^{\top})=\Sigma+\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^{\top}$,两边求trace，$E(\mathbf{x}^{\top}\mathbf{x})=trE(\mathbf{x}\mathbf{x}^{\top})=tr\Sigma+\boldsymbol{\mu}^{\top}\boldsymbol{\mu}$,

所以$E(\mathbf{x}^{\top}C\mathbf{x})=trC(\Sigma+\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^{\top})=trC\Sigma+trC\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}^{\top}=trC\Sigma+\boldsymbol{\mu}^{\top}C\boldsymbol{\mu}$.

相关系数矩阵

随机向量 $\mathbf{x}$的相关系数矩阵 $R=(\rho_{ij})$，其中 ρ_{ij}为x_i, x_j的相关系数。

若$\Sigma=(\sigma_{ij})$为随机向量$\mathbf{x}$的协方差矩阵，则$\rho_{ij}=\dfrac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}$，且

$$R=\left(\frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}\right)=D^{-1/2}\Sigma D^{-1/2}$$

其中$D=diag(\Sigma)=diag(\sigma_{11},\ldots,\sigma_{nn})$.

若随机向量$\mathbf{x}_{n\times1}\sim(\boldsymbol{\mu},\Sigma)$，即$E(\mathbf{x})=\boldsymbol{\mu}, \mathrm{var}(\boldsymbol{\mu})=\Sigma$，设$D=diag(\Sigma)$，$R$为$\mathbf{x}$的相关系数矩阵。

(1) 中心化：$\mathbf{y}=\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}\sim(\mathbf{0},\Sigma)$

(2) 归一化：$\mathbf{y}=D^{-1/2}\mathbf{x}=(x_1/\sqrt{\sigma_{11}},\ldots.,x_n/\sqrt{\sigma_{nn}})\sim(D^{-1/2}\boldsymbol{\mu},R)$,

(3) 标准化：$\mathbf{y}=\Sigma^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\sim(\mathbf{0},I_n)$

$$\mathbf{y}=D^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\sim(\mathbf{0},R)$$

下面，我们从去相关化(Corr-0)技术开始，依次考虑

- ❑ Corr-0：去相关化
- ❑ Corr-1：两个随机变量的偏相关系数 $\rho_{xy\cdot\mathbf{z}}$
- ❑ Corr-2：两个随机向量之间的相关性度量：典则相关系数、决定系数
- ❑ Corr-3：两个随机向量之间的偏相关性度量

Corr-0. 随机向量的去相关化 (正交化)

假设任意$q\times 1$随机向量$\mathbf{y}$，$p\times 1$随机向量$\mathbf{x}$,方差-协方差矩阵：

$$\Sigma=\operatorname{cov}\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\operatorname{var}(\mathbf{y}) & \operatorname{cov}(\mathbf{y},\mathbf{x})\\ \operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) & \operatorname{var}(\mathbf{x})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{yy}} & \Sigma_{\mathbf{yx}}\\ \Sigma_{\mathbf{xy}} & \Sigma_{\mathbf{xx}}\end{pmatrix}$$

去相关化

$\mathbf{y}$与$\mathbf{x}$相关，协方差为$\Sigma_{\mathbf{yx}}$。我们希望从$\mathbf{y}$中消去与$\mathbf{x}$有关的线性成分：

求$A_{q\times p}$,使得$\mathbf{y}-A\mathbf{x}$与$\mathbf{x}$不相关.

解：$0=\operatorname{cov}(\mathbf{y}-A\mathbf{x},\mathbf{x})=\operatorname{cov}(\mathbf{y},\mathbf{x})-A\operatorname{cov}(\mathbf{x},\mathbf{x})=\Sigma_{\mathbf{yx}}-A\Sigma_{\mathbf{xx}}$

$\Rightarrow A=\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\Rightarrow \mathbf{y}-A\mathbf{x}=\mathbf{y}-\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\mathbf{x}$与$\mathbf{x}$不相关。

我们称$\mathbf{y}^{\perp}=\mathbf{y}-\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\mathbf{x}$为$\mathbf{y}$的去相关化（与$\mathbf{x}$不相关）。
$\mathbf{y}^{\perp}$为$\mathbf{y}$消除了与$\mathbf{x}$有关的成分之后的剩余。

去相关化$\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}\mathbf{y}^{\perp}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}\Leftrightarrow$ 协方差矩阵相合（或合同）分块对角化：

$$\begin{pmatrix}I_q & -\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\\ 0 & I_p\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{yy}} & \Sigma_{\mathbf{yx}}\\ \Sigma_{\mathbf{xy}} & \Sigma_{\mathbf{xx}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I_q & 0\\ -\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{xy}} & I_p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{yy}\bullet\mathbf{x}} & 0\\ 0 & \Sigma_{\mathbf{xx}}\end{pmatrix}$$

验证：$\begin{pmatrix}\mathbf{y}^{\perp}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{y}-\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\mathbf{x}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}I_q & -\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\\ 0 & I_p\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}$

两边同时求方差，

$$\text{右边}=\begin{pmatrix}I_q & -\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\\ 0 & I_p\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{yy}} & \Sigma_{\mathbf{yx}}\\ \Sigma_{\mathbf{xy}} & \Sigma_{\mathbf{xx}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I_q & 0\\ -\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{xy}} & I_p\end{pmatrix}$$

$$\text{左边}=\mathrm{cov}\begin{pmatrix}\mathbf{y}^{\perp}\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{var}(\mathbf{y}^{\perp}) & 0\\ 0 & \mathrm{var}(\mathbf{x})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{yy}\bullet\mathbf{x}} & 0\\ 0 & \Sigma_{\mathbf{xx}}\end{pmatrix}$$

其中$\mathrm{var}(\mathbf{y}^{\perp})=\Sigma_{\mathbf{yy}\bullet\mathbf{x}}=\Sigma_{\mathbf{yy}}-\Sigma_{\mathbf{yx}}\Sigma_{\mathbf{xx}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{xy}}$。

Corr-1. 偏相关系数 (partial correlation)

设y, x为1维随机变量，干扰因素$\mathbf{z}$为随机向量或变量，
我们希望在控制$\mathbf{z}$的条件下计算x, y之间的相关性，即偏相关系数。

偏相关系数

定义：令 $y^{\perp} = y - \Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\mathbf{z}$， $x^{\perp} = x - \Sigma_{x\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\mathbf{z}$（它们都与$\mathbf{z}$不相关，即消除了$\mathbf{z}$的干扰)，偏相关系数定义为$y^{\perp}$与$x^{\perp}$的相关系数：

$$\rho_{yx\bullet\mathbf{z}} = \rho_{y^{\perp}x^{\perp}} = \frac{\operatorname{cov}(y^{\perp}, x^{\perp})}{\sqrt{\operatorname{var}(x^{\perp})\operatorname{var}(y^{\perp})}}。$$

- 由定义，$|\rho_{yx\bullet\mathbf{z}}| \le 1$。
- $\rho_{yx\bullet\mathbf{z}} = 0$理解为控制$\mathbf{z}$的条件下，$x, y$不相关。
- 在联合正态假设下，$\rho_{yx\bullet\mathbf{z}} = 0 \Leftrightarrow$ 在给定$\mathbf{z}$的条件下，x, y不相关（第四讲）。

命题2. 记$\Sigma_{ab\bullet c}=\Sigma_{ab}-\Sigma_{ac}\Sigma_{cc}^{-1}\Sigma_{cb}$，其中$\Sigma_{ab}=\mathrm{cov(a,b)}$等等，则

$$\rho_{yx\bullet\mathbf{z}}=\frac{\Sigma_{xy\bullet\mathbf{z}}}{\sqrt{\Sigma_{xx\bullet\mathbf{z}}}\sqrt{\Sigma_{yy\bullet\mathbf{z}}}}.$$

注：$\rho_{yx\bullet\mathbf{z}}=0\Leftrightarrow\Sigma_{ab\bullet c}=0\Leftrightarrow\Sigma_{yx}=\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}$

证：$\mathrm{cov}(x^{\perp},y^{\perp})=\mathrm{cov}(y-\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\mathbf{z},\quad x-\Sigma_{x\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\mathbf{z})$

$=\mathrm{cov}(y,x)-\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\mathrm{cov}(\mathbf{z},\quad x)-\mathrm{cov}(y,\mathbf{z})\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}+\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\mathrm{cov}(\mathbf{z},\mathbf{z})\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}$

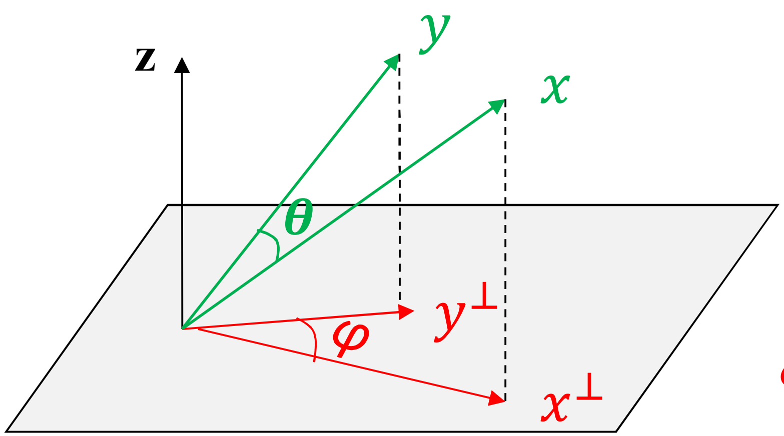
$=\Sigma_{yx}-\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}-\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}+\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}$

$=\Sigma_{yx}-\Sigma_{y\mathbf{z}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{z}x}=\Sigma_{xy\bullet\mathbf{z}}$

类似地，$\mathrm{var}(x^{\perp})=\Sigma_{xx\bullet\mathbf{z}},\mathrm{var}(y^{\perp})=\Sigma_{yy\bullet\mathbf{z}},$

所以$\rho_{yx\bullet\mathbf{z}}=\dfrac{\mathrm{cov}(y^{\perp},x^{\perp})}{\sqrt{\mathrm{var}(x^{\perp})\,\mathrm{var}(y^{\perp})}}=\dfrac{\Sigma_{xy\bullet\mathbf{z}}}{\sqrt{\Sigma_{xx\bullet\mathbf{z}}}\sqrt{\Sigma_{yy\bullet\mathbf{z}}}}$

图示：相关系数与偏相关系数



θ代表了相关系数ρ_{xy}

φ 代表了偏相关系数$\rho_{xy\bullet z}$

$$\rho_{yx\bullet\mathbf{z}} = \frac{\text{cov}(y^{\perp}, x^{\perp})}{\sqrt{\text{var}(x^{\perp})\,\text{var}(y^{\perp})}} = \frac{\Sigma_{xy\bullet\mathbf{z}}}{\sqrt{\Sigma_{xx\bullet\mathbf{z}}}\sqrt{\Sigma_{yy\bullet\mathbf{z}}}}$$，除了记号"$\bullet z$"外，

偏相关系数与相关系数表达式相同

三元情形

当z也是一维随机变量时,相关系数矩阵

$$R=\begin{pmatrix} 1 & \rho_{xy} & \rho_{xz} \\ \rho_{xy} & 1 & \rho_{yz} \\ \rho_{xz} & \rho_{yz} & 1 \end{pmatrix}$$,则偏相关系数$\rho_{xy\bullet z}$具有如下形式

$$\rho_{xy\bullet z}=\frac{\rho_{xy}-\rho_{xz}\rho_{yz}}{\sqrt{1-\rho_{xz}^2}\sqrt{1-\rho_{yz}^2}}$$

其中ρ_{ab}代表随机变量a,b的Pearson相关系数.

验证：x,y,z都是随机变量，Σ_{xx},Σ_{xy}等等都是实数/标量,

$$\Sigma_{xy\bullet z}=\Sigma_{xy}-\Sigma_{xz}\Sigma_{zy}/\Sigma_{zz}=\sqrt{\Sigma_{xx}}\sqrt{\Sigma_{yy}}\left(\rho_{xy}-\rho_{xz}\rho_{yz}\right),$$

$$\Sigma_{xx\bullet z}=\Sigma_{xx}-\Sigma_{xz}^2/\Sigma_{zz}=\Sigma_{xx}(1-\rho_{xz}^2),\Sigma_{yy\bullet z}=\Sigma_{yy}(1-\rho_{yz}^2).$$

问题：$\rho_{xy\bullet z}=0\Leftrightarrow\rho_{xy}=\rho_{xz}\rho_{yz}\Leftrightarrow\sigma_{xy}\sigma_{zz}=\sigma_{xz}\sigma_{yz}$,几何意义？

偏相关系数的检验

等价于多重回归模型中回归系数的检验

$$H_0 : \rho_{xy\bullet\mathbf{z}} = 0$$

精确检验

数据$(x_i, y_i, \mathbf{z}_i), i = 1,\ldots,n.$　$H_0 : \rho_{xy\bullet\mathbf{z}} = 0$

假设$y_i \mid x_i, \mathbf{z}_i, i = 1,\ldots,n$ iid服从正态分布，记样本 偏相关系数为$r_{xy\bullet z}$，设变量总个数为p。检验统计量在原假设 下

$$T = \sqrt{n-p}\,\frac{r_{xy\bullet\mathbf{z}}}{\sqrt{1-r_{xy\bullet\mathbf{z}}^2}} \sim t_{n-p}$$

大样本检验

检验统计量z在原假设下近似地

$$z = \sqrt{n-p} \times r_{xy\bullet\mathbf{z}} \sim N(0,1),\quad n \to \infty$$

注：没有z时(p=2)，即为相关系数的检验

分块矩阵的逆

命题3（分块矩阵的逆）． $\Sigma=\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{pmatrix}>0$ (正定)

则$\Sigma^{-1}=\begin{pmatrix}\Sigma_{11\bullet 2}^{-1} & -\Sigma_{11\bullet 2}^{-1}\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\\ -\Sigma_{22\bullet 1}^{-1}\Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1} & \Sigma_{22\bullet 1}^{-1}\end{pmatrix}$

其中$\Sigma_{11\bullet 2}=\Sigma_{11}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}$, $\Sigma_{22\bullet 1}=\Sigma_{22}-\Sigma_{21}\Sigma_{11}^{-1}\Sigma_{12}$,

证明1：记$\Omega=\Sigma^{-1}=\begin{pmatrix}\Omega_{11} & \Omega_{12}\\ \Omega_{21} & \Omega_{22}\end{pmatrix}$, 由$\Sigma\Omega=I$,

$$\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Omega_{11} & \Omega_{12}\\ \Omega_{21} & \Omega_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}I_q & 0\\ 0 & I_p\end{pmatrix}$$ （对角子矩阵阶数分别为q,p)

$\Rightarrow$

(1)$\Sigma_{11}\Omega_{11}+\Sigma_{12}\Omega_{21}=I_q$

(2)$\Sigma_{21}\Omega_{11}+\Sigma_{22}\Omega_{21}=0\Rightarrow\Omega_{21}=-\Sigma_{22}{}^{-1}\Sigma_{21}\Omega_{11}$代入(1)

$\Rightarrow\Sigma_{11}\Omega_{11}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}{}^{-1}\Sigma_{21}\Omega_{11}=I_q\Rightarrow\Omega_{11}=\left(\Sigma_{11}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}{}^{-1}\Sigma_{21}\right)^{-1}$.

证明2：由P7对角化公式

$$\begin{pmatrix} I_p & -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1} \\ 0 & I_q \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_p & 0 \\ -\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} & I_q \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \Sigma_{11\bullet 2} & 0 \\ 0 & \Sigma_{22} \end{pmatrix}$$

两边求逆: $\begin{pmatrix} I_q & 0 \\ -\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} & I_p \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} I_q & -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1} \\ 0 & I_p \end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix} {\Sigma_{11\bullet 2}}^{-1} & 0 \\ 0 & {\Sigma_{22}}^{-1} \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix} I_q & 0 \\ -\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} & I_p \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Sigma_{11\bullet 2}^{-1} & 0 \\ 0 & \Sigma_{22}^{-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_q & -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1} \\ 0 & I_p \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} {\Sigma_{11\bullet 2}}^{-1} & -\Sigma_{11\bullet 2}^{-1}\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1} \\ -\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\Sigma_{11\bullet 2}^{-1} & \Sigma_{22}^{-1}+\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21}\Sigma_{11\bullet 2}^{-1}\Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1} \end{pmatrix}$$

由对称性知右下角等于$\Sigma_{22\bullet 1}^{-1}$.

偏相关系数矩阵

给定$\mathbf{x}$的协方差矩阵Σ，则x_i, x_j的相关系数

$$\rho_{ij} = \sigma_{ij} / \sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}},$$

且相关系数矩阵

$$R = (\rho_{ij}) = D^{-1/2}\Sigma D^{-1/2},\quad D = diag(\Sigma)。$$

如何计算偏相关系数矩阵$R_{\text{partial}} = (\rho_{ij\bullet\text{其它}})$?

偏相关系数矩阵

命题4：随机向量 $\mathbf{x}_{p\times 1}$的协方差矩阵为 $\Sigma = (\sigma_{ij})$, $\Omega = \Sigma^{-1} = (\omega_{ij})$称为精度矩阵(precision matrix)，记$C = diag(\Omega)$，则 x_i, x_j的偏相关系数

$$\rho_{ij\bullet\text{其它}} = \begin{cases} -\omega_{ij} / \sqrt{\omega_{ii}\omega_{jj}} & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases},$$

且偏相关系数矩阵

$$R_{\text{partial}} = (\rho_{ij\bullet\text{其它}}) = 2I_p - C^{-1/2}\Omega C^{-1/2}.$$

注1：基于Σ^{-1}的偏相关系数计算法则类似于基于Σ的相关系数计算法则，但相差一个符号。

注2：$\rho_{ij\bullet\text{其它}} = 0 \Leftrightarrow \Sigma^{-1}$的$(i,j)$元$=0$，即$\omega_{ij} = 0$。图模型。

注2：Σ元素包含了相关性信息；Σ^{-1}元素包含了偏相关性信息。

证明：证明主要基于两点事实 ⑴ 偏相关系数中出现的量$\Sigma_{ab\bullet\mathbf{z}}$在$\Sigma^{-1}$中也出现了
⑵ 二阶方阵的逆的四个元素与原矩阵除了一个常数因子之外基本相同（位置不同）。

随机向量$\mathbf{x}=(x_1,\ldots,x_p)^{\mathsf{T}}$. 下面对$i=1, j=2$计算。

因为$\rho_{x_1x_2\bullet\mathbf{z}}=\dfrac{\Sigma_{x_1x_2\bullet\mathbf{z}}}{\sqrt{\Sigma_{x_1x_1\bullet\mathbf{z}}}\sqrt{\Sigma_{x_2x_2\bullet\mathbf{z}}}}\overset{\text{简写为}}{=}\rho_{12\bullet\mathbf{z}}=\dfrac{\Sigma_{12\bullet\mathbf{z}}}{\sqrt{\Sigma_{11\bullet\mathbf{z}}}\sqrt{\Sigma_{22\bullet\mathbf{z}}}}$,

我们记$\mathbf{w}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}$, $\mathbf{z}=(x_3,\ldots,x_p)^{\mathsf{T}}$, 即$\mathbf{x}=\begin{pmatrix}\mathbf{w}\\\mathbf{z}\end{pmatrix}$

$$\Sigma=\operatorname{cov}\begin{pmatrix}\mathbf{w}\\\mathbf{z}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{ww}} & \Sigma_{\mathbf{wz}}\\\Sigma_{\mathbf{zw}} & \Sigma_{\mathbf{zz}}\end{pmatrix}c=\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12} & \Sigma_{1\mathbf{z}}\\\Sigma_{21} & \Sigma_{22} & \Sigma_{2\mathbf{z}}\\\Sigma_{\mathbf{z}1} & \Sigma_{\mathbf{z}1} & \Sigma_{\mathbf{zz}}\end{pmatrix},$$

$$\text{而}\Sigma_{\mathbf{ww}\bullet\mathbf{z}}=\Sigma_{\mathbf{ww}}-\Sigma_{\mathbf{wz}}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\Sigma_{\mathbf{zw}}=\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\\Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\Sigma_{1\mathbf{z}}\\\Sigma_{2\mathbf{z}}\end{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{zz}}^{-1}\left(\Sigma_{\mathbf{z}1},\ \Sigma_{\mathbf{z}2}\right)$$

$$=\begin{pmatrix}\Sigma_{11\bullet\mathbf{z}} & \Sigma_{12\bullet\mathbf{z}}\\\Sigma_{21\bullet\mathbf{z}} & \Sigma_{22\bullet\mathbf{z}}\end{pmatrix}\overset{\text{记为}}{=}\begin{pmatrix}a & b\\b & c\end{pmatrix},\ \text{所以}\rho_{12\bullet\mathbf{z}}=\frac{b}{\sqrt{ac}}$$

记$\Omega=\Sigma^{-1}$,注意到分块求逆公式（特别地，左上角与$\Sigma_{\mathbf{ww\bullet z}}$有关）：

$$\Omega=\Sigma^{-1}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{ww}} & \Sigma_{\mathbf{wz}}\\ \Sigma_{\mathbf{zw}} & \Sigma_{\mathbf{zz}}\end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{ww\bullet z}}^{-1} & *\\ * & *\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ b & c\end{pmatrix}^{-1} & *\\ * & *\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{1}{ac-b^2}\begin{pmatrix}c & -b\\ -b & a\end{pmatrix} & *\\ * & *\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\begin{pmatrix}\omega_{11} & \omega_{12}\\ \omega_{21} & \omega_{22}\end{pmatrix} & *\\ * & *\end{pmatrix}$$

关键：2×2矩阵的逆除了公共因子$\frac{1}{ac-b^2}$之外，其元素是原矩阵元素的置换或相反数：

$$\begin{pmatrix}a & b\\ b & c\end{pmatrix}^{-1}=\frac{1}{ac-b^2}\begin{pmatrix}c & -b\\ -b & a\end{pmatrix}$$

所以$\rho_{12\bullet\mathbf{z}}=\frac{b}{\sqrt{ac}}=-\frac{\omega_{12}}{\sqrt{\omega_{11}\omega_{22}}}$