13 条件高斯分布

Conditional Gaussian Distributions

假设随机变量服从高斯分布，讨论条件期望、条件方差

> 生命就像一个永恒的春天，穿着崭新而绚丽的衣服站在我面前。
>
> ***Life stands before me like an eternal spring with new and brilliant clothes.***
>
> —— 卡尔·弗里德里希·高斯 (Carl Friedrich Gauss) | 德国数学家、物理学家、天文学家 | 1777 ~ 1855

- ◄ `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- ◄ `matplotlib.pyplot.contour3D()` 绘制三维等高线图
- ◄ `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制填充等高线图
- ◄ `matplotlib.pyplot.fill_between()` 区域填充颜色
- ◄ `matplotlib.pyplot.plot_wireframe()` 绘制线框图
- ◄ `scipy.stats.multivariate_normal()` 多元正态分布对象
- ◄ `scipy.stats.norm()` 一元正态分布对象

13.1 联合概率和条件概率关系

本章是本书第 8 章的延续。本书第 8 章专门介绍了离散、连续随机变量的条件**期望** (conditional expectation)、条件**方差** (conditional variance)。本章将这些数学工具用在高斯分布上。

本节首先回顾条件概率 (conditional probability)。

条件概率

本章第 3 章介绍过，条件概率是指某事件在另外一个事件已经发生条件下的概率。

以图 1 为例，X 和 Y 为连续随机变量，(X, Y) 服从二元高斯分布。(X, Y) 的联合概率密度函数 PDF $f_{X,Y}(x,y)$ 为图 1 所示曲面。

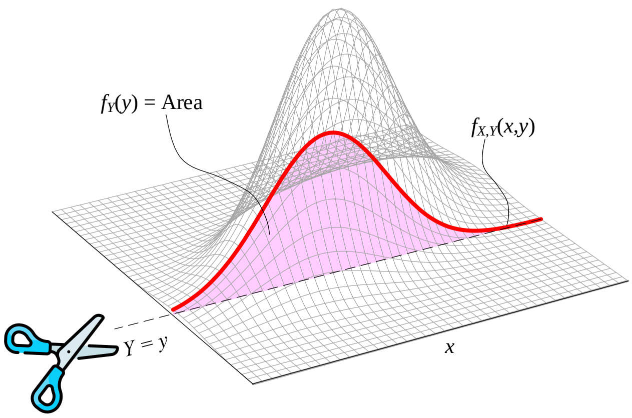

图 1. 高斯二元分布 PDF 曲面沿着 $Y = y$ 切一刀

给定 $Y = y$ 条件下，相当于在图 1 上沿着 $Y = y$ 切一刀，得到的红色曲线便是 $f_{X,Y}(x, y)$。

几何视角来看，给定 $Y = y$ 的条件下 ($f_Y(y) > 0$)，利用贝叶斯定理，X 的条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 相当于对 $f_{X,Y}(x, y)$ 图形面积用边缘 PDF $f_Y(y)$ 归一化：

Area = 1

$$\overbrace{f_{X|Y}\left(x|y\right)}^{\text{Conditional}} = \frac{\overbrace{f_{X,Y}\left(x,y\right)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{f_Y\left(y\right)}_{\text{Marginal}}} \tag{1}$$

Given $Y = y$　　Area = $f_Y(y)$

注意，此时 $f_Y(y)$ 代表一个具体的值，但是这个值仍然是概率密度，而不是概率。

分解来看，$Y = y$ 时，联合 PDF $f_{X,Y}(x, y)$ 这条曲线和横轴围成的面积为边缘 PDF $f_Y(y)$，即：

$$\underbrace{f_Y(y)}_{\text{Marginal}} = \int_x \underbrace{f_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} \mathrm{d}x \tag{2}$$

Area = $f_Y(y)$

Given $Y = y$

归一化后的 $f_{X|Y}(x|y)$ 曲线和横轴围成的面积为 1，即：

$$\int_x \underbrace{f_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}} \mathrm{d}x = 1 \tag{3}$$

Area = 1

Given $Y = y$

沿着这个思路，让我们观察一组当 Y 取不同值时，高斯二元分布联合概率和条件概率的关系。

Y 取特定值

如图 2 所示，当 $y = -2$ 时，在联合 PDF 曲面在 $y = -2$ 处切一刀，得到 $f_{X,Y}(x, y = -2)$ 对应图 2 中红色曲线。

$f_{X,Y}(x, y = -2)$ 和横轴围成的面积便是边缘 PDF $f_Y(y = -2)$，经过计算得知面积约为 0.05，即 $f_Y(y = -2) = 0.05$。再次强调，0.05 不是概率值，虽然它的大小某种程度上也代表"可能性"。

在给定 $y = -2$ 条件下，条件 PDF $f_{X|Y}(x| y = -2)$ 可以通过下式计算得到：

$$f_{X|Y}(x|y=-2) = \frac{f_{X,Y}(x, y=-2)}{f_Y(y=-2)} \tag{4}$$

图 2 同时比较联合 PDF $f_{X,Y}(x, y = -2)$、边缘 PDF $f_X(x)$、条件 PDF $f_{X|Y}(x| y = -2)$ 三条曲线之间的关系。

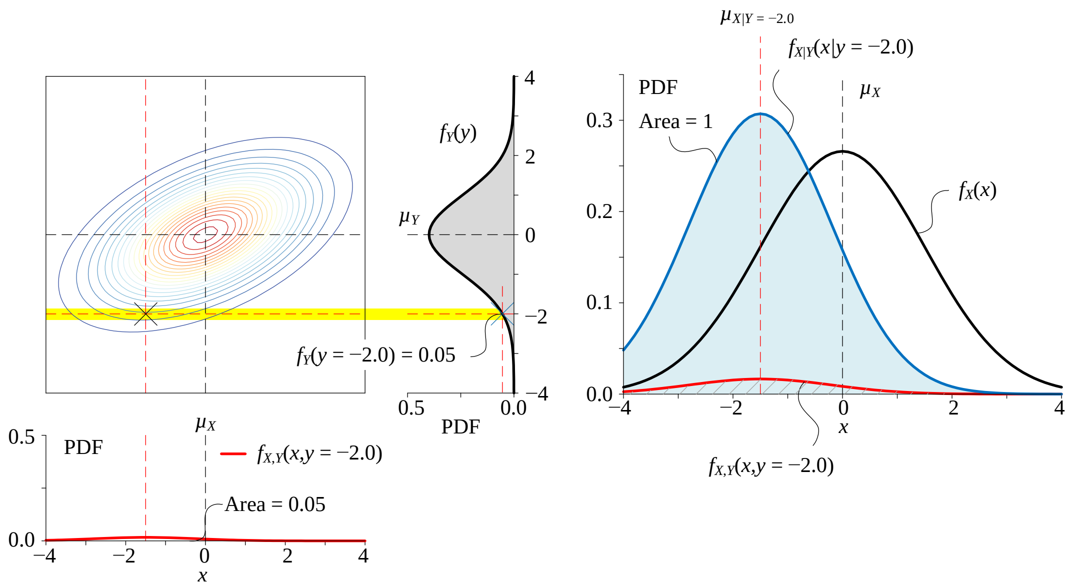

图 2. $y = -2$ 时，联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

从图像上可以清楚看到，条件 PDF $f_{X|Y}(x|y=-2)$ 相当于联合 PDF $f_{X,Y}(x, y=-2)$ 在高度上放大约 20 倍 (= 1/0.05)。

值得反复强调的是，联合 PDF $f_{X,Y}(x, y=-2)$ 曲线和横轴围成的面积约为 0.05，然而条件 PDF $f_{X|Y}(x|y=-2)$ 曲线和横轴围成的面积为 1。

Y 取不同值

图 2 到图 6 五幅图分别展示当 y 取值分别为−2、−1、0、1、2 时，联合 PDF 和条件 PDF 关系。

有几点值得注意。五幅图像上概率曲线形状都是类似高斯一元分布曲线。

$Y=y$ 直线和联合 PDF 等高线某一个椭圆椭圆相切，而当 y 变化时，切点似乎沿着直线运动。

切点的横轴取值对应条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 曲线的对称轴，而这个对称轴又是条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 曲线的**期望**。这个**期望**值就是本书第 8 章介绍的条件**期望** (conditional expectation) $\mathrm{E}(X|Y=y)$。

图 2 到图 6 五幅图条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 对应的蓝色曲线，似乎在形状上没有任何变化，仅仅是对称轴发生移动。这一点说明，y 取值变化时，条件 PDF 曲线对应分布的**方差**似乎没有变化；这个**方差**就是本书第 8 章介绍的条件**方差** (conditional variance) $\mathrm{var}(X|Y=y)$。

这一节先给大家一个直观印象，本章之后将会利用高斯二元分布对条件概率、条件**期望**、条件**方差**等概念进行定量研究。

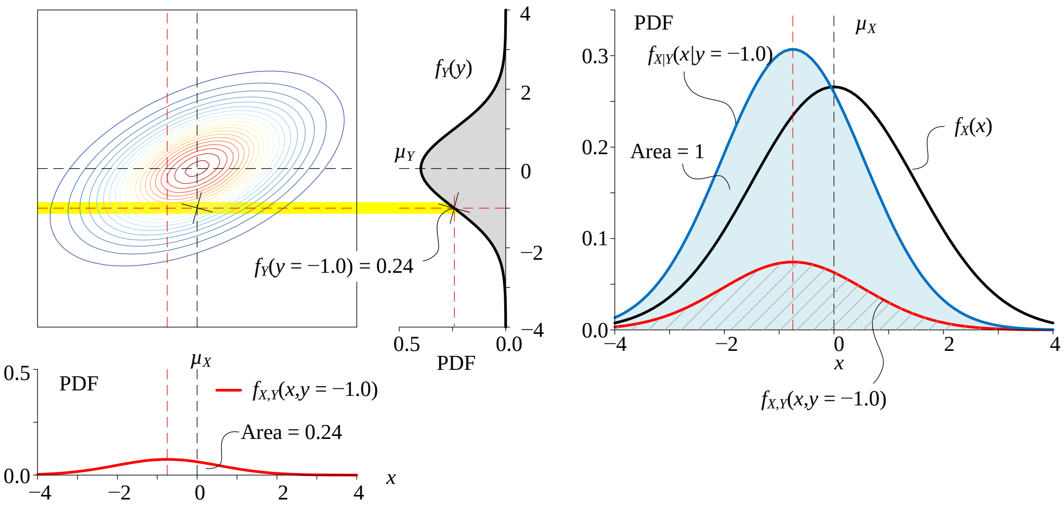

图 3. $y=-1$ 时，联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

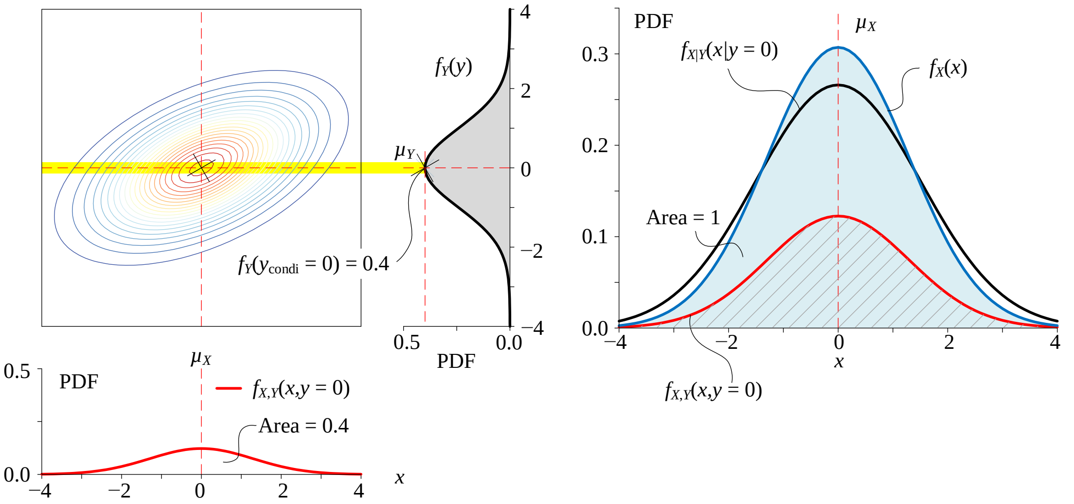

图 4. $y = 0$ 时，联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

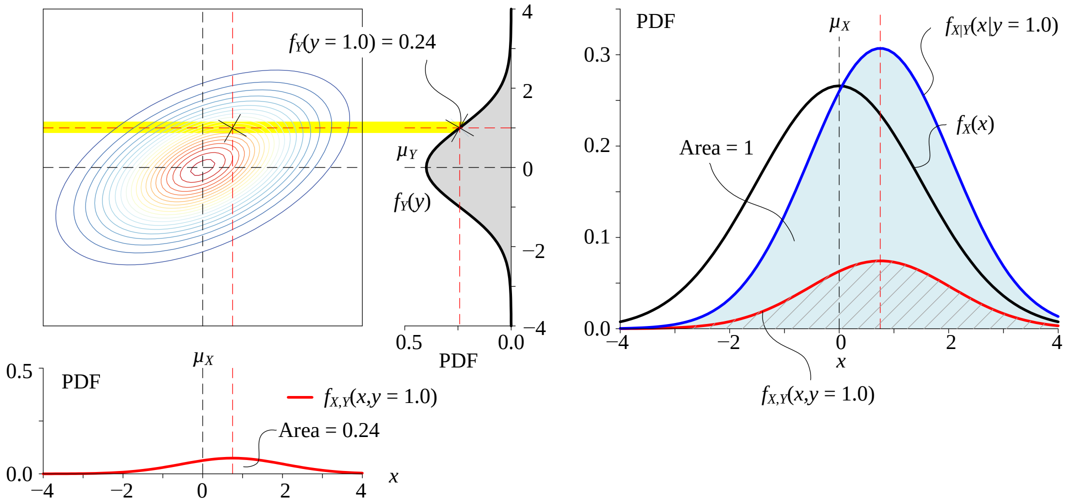

图 5. $y = 1$ 时，联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

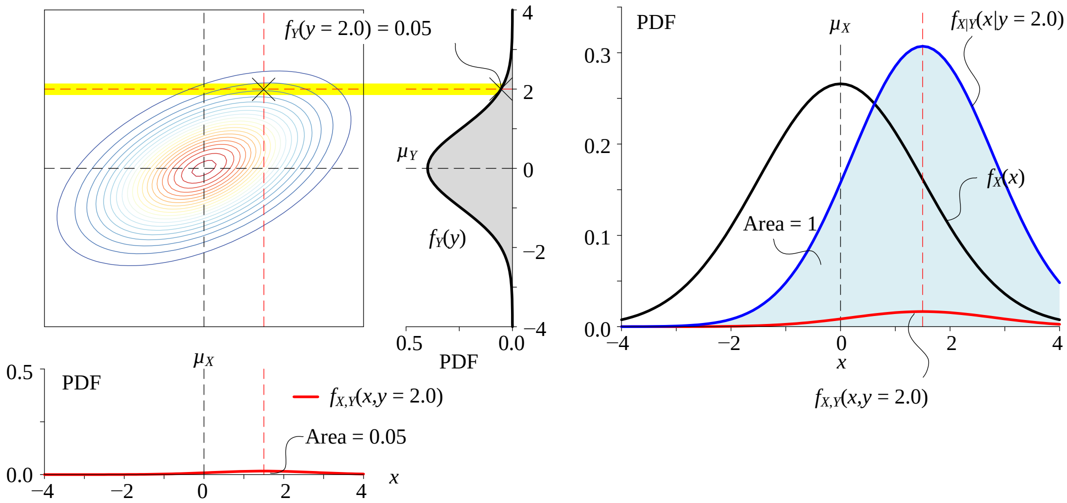

图 6. $y = 2$ 时，联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

Bk5_Ch12_01.py 绘制图 2 ~ 图 6。

13.2 给定 X 条件下，Y 的条件概率：以二元高斯为例

如果 (X, Y) 服从二元高斯分布，联合 PDF $f_{X,Y}(x,y)$ 解析式如下：

$$f_{X,Y}(x,y)=\frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y\sqrt{1-\rho_{X,Y}^2}}\times\exp\left(\underbrace{\frac{-1}{2}\frac{1}{\left(1-\rho_{X,Y}^2\right)}\left(\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)^2-2\rho_{X,Y}\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)\left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right)+\left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right)^2\right)}_{\text{Ellipse}}\right) \tag{5}$$

利用条件 PDF、联合 PDF、边缘 PDF 三者关系，我们可以求得在给定 $X = x$ 条件下，条件 PDF $f_{Y|X}(y|x)$ 解析式为：

$$f_{Y|X}(y|x)=\frac{1}{\sigma_Y\sqrt{1-\rho_{X,Y}^2}\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\left(\mu_Y+\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}(x-\mu_X)\right)}{\sigma_Y\sqrt{1-\rho_{X,Y}^2}}\right)^2\right) \tag{6}$$

图 7 所示为 $f_{Y|X}(y|x)$ 曲面网格线。$f_{Y|X}(y|x)$ 这个曲线的**期望**和**方差**对应条件**期望** $\mathrm{E}(Y|X = x)$ 和条件**方差** $\mathrm{var}(Y|X = x)$。

可以发现当 $X = x$ 取一定值时，(6) 解析式对应高斯正态分布，这印证了本书第 10 章的猜测。将 $f_{Y|X}(y|x)$ 曲面不同位置曲线投影在 yz 平面得到图 8，容易发现这些曲线的形状完全相同 (也就是条件**标准差**不变)，但是曲线的中心位置变化 (也就是条件**期望**值变化)。

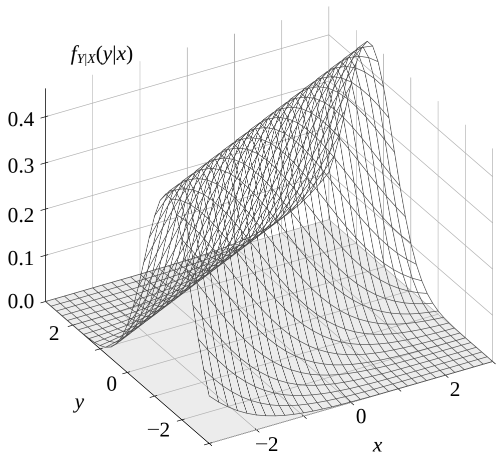

图 7. $f_{Y|X}(y|x)$ 曲面网格线

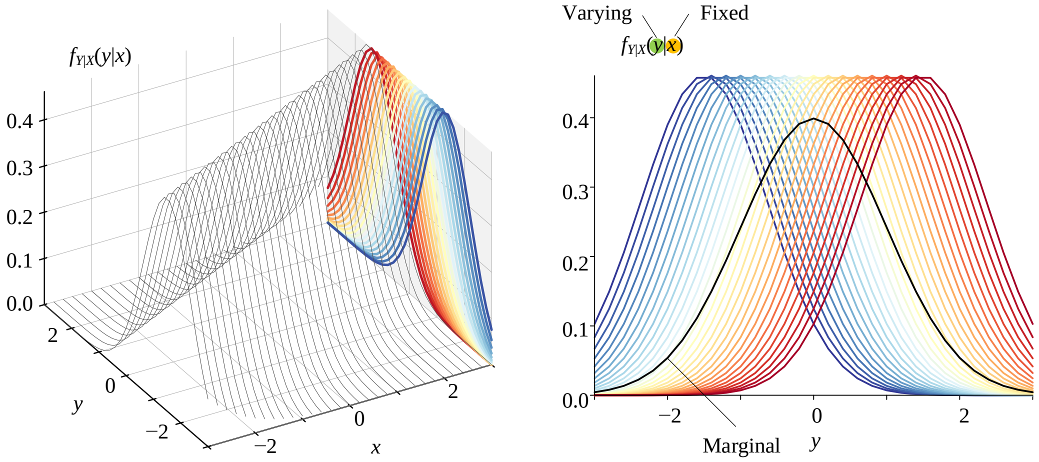

图 8. $f_{Y|X}(y|x)$ 曲面在 yz 平面上投影

条件期望 $\mathrm{E}(Y|X = x)$

如果 (X, Y) 满足二元高斯分布，给定 $X = x$ 条件下，Y 的条件 PDF $f_{Y|X}(y|x)$ 如图 9 所示。图 10 所示为 $f_{Y|X}(y|x)$ 平面等高线。条件期望 $\mathrm{E}(Y|X = x)$ 解析式为：

$$\mathrm{E}\left(Y \mid X=x\right)=\mu_Y+\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}\left(x-\mu_X\right) \tag{7}$$

如图 10 所示，$\mathrm{E}(Y|X = x)$ 随着 $X = x$ 取值线性变化；也就是说，$\mathrm{E}(Y|X = x)$ 和 x 的关系是一条直线。这条直线的一般式可以写成：

$$y=\mu_Y+\rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}\left(x-\mu_X\right) \tag{8}$$

可以发现它的斜率为 $\rho_{X,Y}\sigma_Y/\sigma_X$，且通过点 (μ_X, μ_Y)。眼尖的读者一眼就会发现，这条曲线是 x 自变量、y 为因变量的线性回归曲线解析式。本章最后一节将深入探讨这一话题，此外本书第 24 章也会展开讲解线性回归。

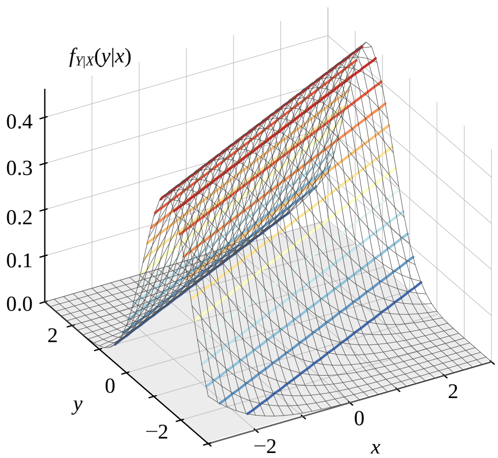

图 9. $f_{Y|X}(y|x)$ 曲面等高线

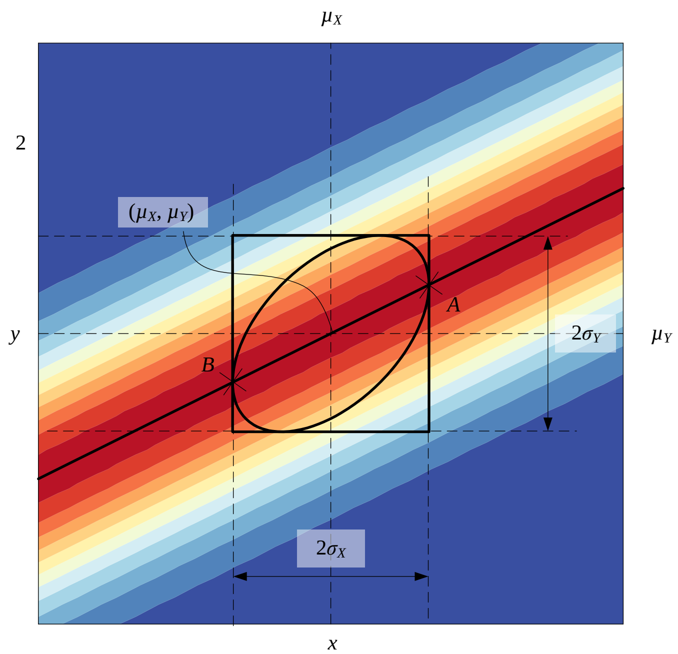

图 10. $f_{Y|X}(y|x)$ 平面等高线

条件方差 var(Y|X = x)

给定 $X = x$ 条件下，Y 的条件方差 $\mathrm{var}(Y|X = x)$ 解析式为：

$$\mathrm{var}\left(Y\middle|X = x\right) = \left(1-\rho_{X,Y}^2\right)\sigma_Y^2 \tag{9}$$

给定 $X = x$ 条件下，Y 的条件标准差 $\sigma_{Y|X=x}$ 解析式为定值：

$$\sigma_{Y|X=x} = \sqrt{1-\rho_{X,Y}^2} \cdot \sigma_Y \tag{10}$$

这解释了为什么图 10 中的等高线为平行线。

Bk5_Ch12_02.py 绘制图 7 ~ 图 10。

以鸢尾花为例：条件期望 E(X2 | X1 = x1)、条件方差 var(X2 | X1 = x1)

以鸢尾花花萼长度 (X_1)、花萼宽度 (X_2) 数据为例，假设 (X_1, X_2) 服从二元高斯分布。条件 PDF $f_{X2 | X1}(x_2 | x_1)$ 三维等高线和平面等高线如图 11 所示。

在给定 $X_1 = x_1$ 条件下，X_2 的条件**期望** $\mathrm{E}(X_2 \mid X_1 = x_1)$ 解析式为：

$$\begin{aligned}\mathrm{E}\left(X_2 \mid X_1 = x_1\right) &= \mu_2 + \rho_{1,2}\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\left(x_1 - \mu_1\right) \\ &= 3.057 - 0.117 \times \frac{0.434}{0.825}\left(x_1 - 5.843\right) \\ &= -0.615x_1 + 3.417\end{aligned} \tag{11}$$

条件**方差** $\mathrm{var}(X_2 \mid X_1 = x_1)$ 为：

$$\mathrm{var}\left(X_2 \mid X_1 = x_1\right) = \left(1 - \rho_{1,2}^2\right)\sigma_2^2 \approx 0.186 \tag{12}$$

条件**标准差** $\sigma_{X_2 \mid X_1 = x_1}$ 为：

$$\sigma_{X_2 \mid X_1 = x_1} = \sqrt{1 - \rho_{1,2}^2}\,\sigma_2 = 0.431 \tag{13}$$

如图 11 所示，不管 x_1 怎么变，这个条件**标准差**为定值。请大家对比第 8 章的类似图片。

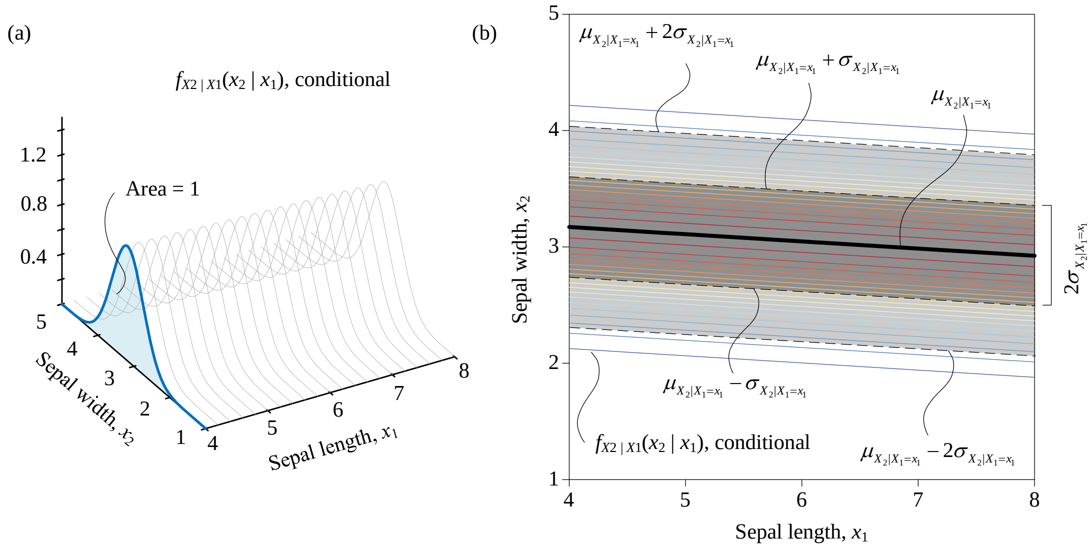

图 11. 条件 PDF $f_{X2 \mid X1}(x_2 \mid x_1)$ 三维等高线和平面等高线，不考虑分类

以鸢尾花为例，考虑标签

换个条件来看，如图 12 所示，给定鸢尾花分类条件，假设花萼长度服从高斯分布。请大家自行计算给定鸢尾花分类为条件，花萼长度的条件**期望** $\mathrm{E}(X_1 \mid Y = C_k)$、条件**方差** $\mathrm{var}(X_1 \mid Y = C_k)$。

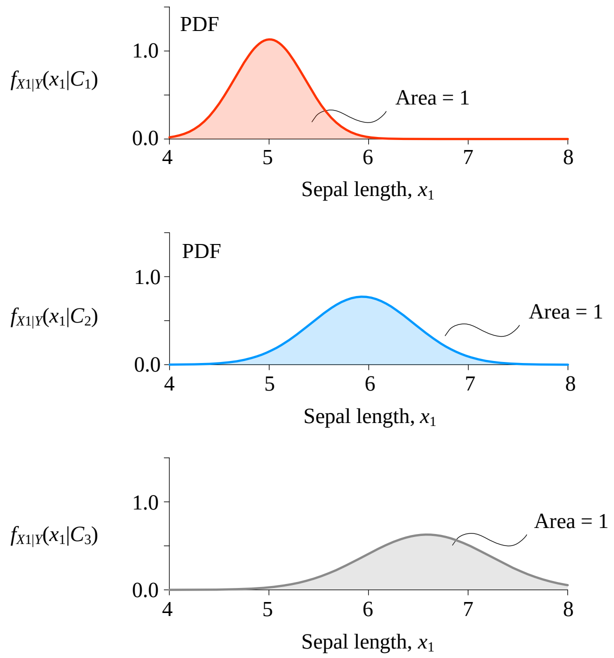

图 12. 给定鸢尾花标签 Y，花萼长度的条件**期望** $\mathrm{E}(X_1 \mid Y = C_k)$、条件**方差** $\mathrm{var}(X_1 \mid Y = C_k)$，离散随机变量

13.3 给定 Y 条件下，X 的条件概率：以二元高斯为例

如果 (X, Y) 服从二元高斯分布，给定 $Y = y$ 条件下，X 的条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 解析式为：

$$f_{X|Y}\left(x|y\right)=\frac{1}{\sigma_X\sqrt{1-\rho_{X,Y}^2}\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\left(\mu_X+\rho_{X,Y}\frac{\sigma_X}{\sigma_Y}\left(y-\mu_Y\right)\right)}{\sigma_X\sqrt{1-\rho_{X,Y}^2}}\right)^2\right) \tag{14}$$

图 13 所示为 $f_{X|Y}(x|y)$ 网格线。给定 $Y = y$ 的条件下，条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 投影到 xz 平面上得到图 14。

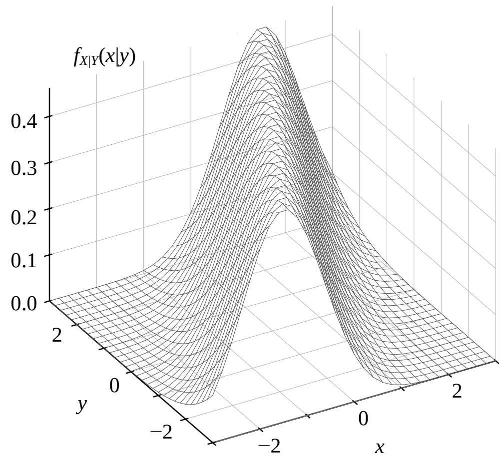

图 13. $f_{X|Y}(x|y)$ 曲面网格线

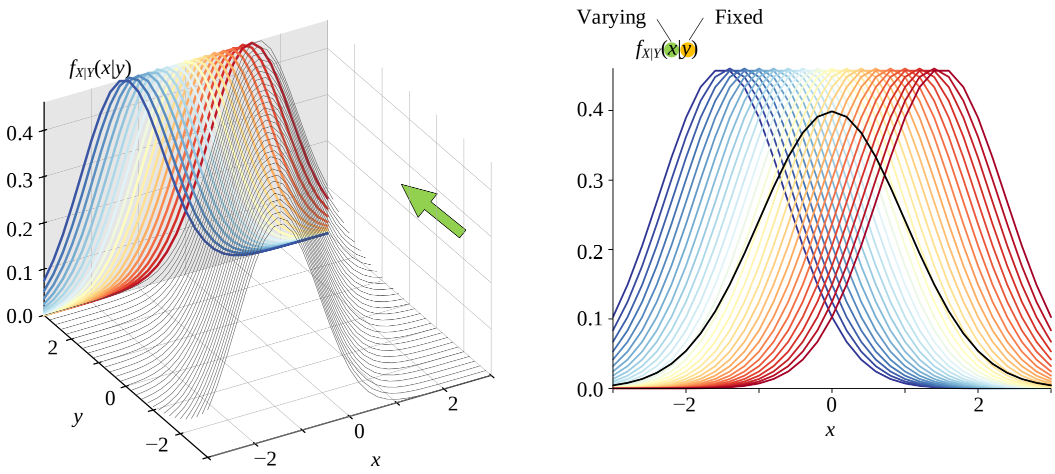

图 14. $f_{X|Y}(x|y)$ 曲面在 xz 平面上投影

条件**期望** $\mathrm{E}(X|Y = y)$

图 15 所示为 $f_{X|Y}(x|y)$ 的平面等高线。图中的等高线都平行于给定 $Y = y$ 条件下，X 的条件**期望** $\mathrm{E}(X|Y = y)$，具体解析式为：

$$\mathrm{E}\left(X\left|Y = y\right.\right) = \mu_X + \rho_{X,Y}\frac{\sigma_X}{\sigma_Y}\left(y - \mu_Y\right) \tag{15}$$

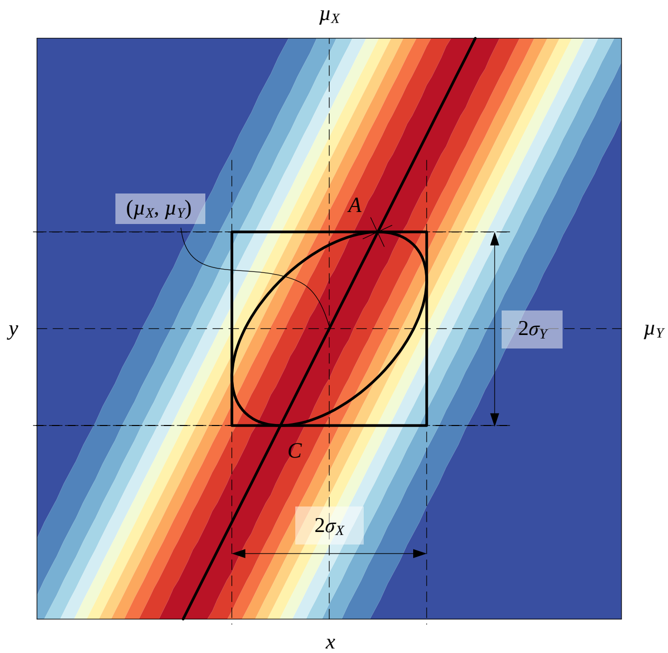

图 15. $f_{X|Y}(x|y)$ 平面等高线

条件方差 $\text{var}(X|Y=y)$

给定 $Y=y$ 条件下，Y 的条件方差 $\text{var}(X|Y=y)$ 解析式为：

$$\text{var}\left(X\,|Y=y\right)=\left(1-\rho_{X,Y}^2\right)\sigma_X^2 \tag{16}$$

给定 $Y=y$ 条件下，Y 的条件标准差 $\sigma_{X|Y=y}$ 解析式也是定值：

$$\text{std}\left(X\,|Y=y\right)=\sqrt{\left(1-\rho_{X,Y}^2\right)}\cdot\sigma_X \tag{17}$$

图 16 所示为条件标准差 $\sigma_{X|Y}$ 的几何含义。

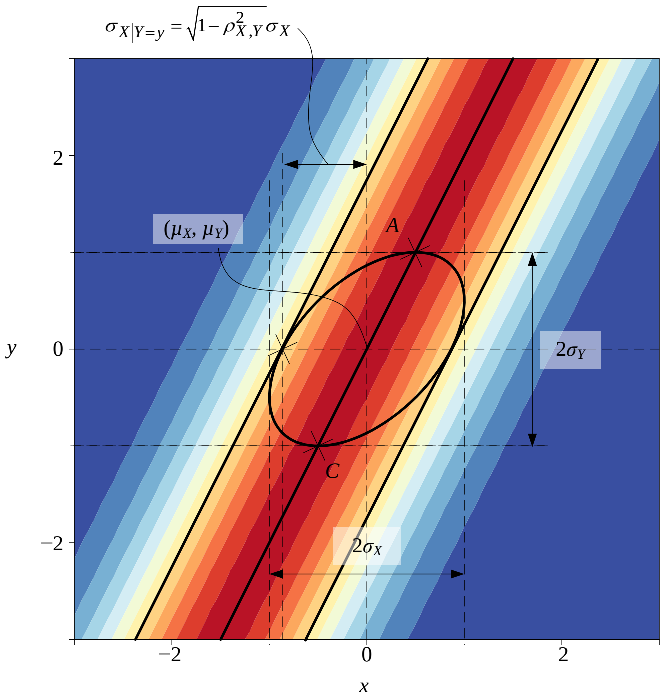

图 16. 条件标准差 $\sigma_{X|Y}$ 的几何含义

以鸢尾花为例：条件期望 $\text{E}(X_1 \mid X_2=x_2)$、条件方差 $\text{var}(X_1 \mid X_2=x_2)$

以鸢尾花花萼长度 (X_1)、花萼宽度 (X_2) 数据为例，假设 (X_1, X_2) 服从二元高斯分布。给定 $X_2 = x_2$ 条件下，X_1 的条件期望 $\text{E}(X_1 \mid X_2=x_2)$ 解析式为：

$$\begin{aligned}\mathrm{E}\left(X_1 \middle| X_2 = x_2\right) &= \mu_1 + \rho_{1,2}\frac{\sigma_1}{\sigma_2}\left(x_2 - \mu_2\right) \\ &= 5.843 - 0.117 \times \frac{0.825}{0.434}\left(x_2 - 3.057\right) \\ &= -0.222 x_2 + 6.523\end{aligned} \tag{18}$$

条件**方差** $\mathrm{var}(X_1 \mid X_2 = x_2)$ 解析式为：

$$\mathrm{var}\left(X_1 \middle| X_2 = x_2\right) = \left(1 - \rho_{1,2}^2\right)\sigma_1^2 \approx 0.671 \tag{19}$$

条件**标准差** $\sigma_{X_1|X_2=x_2}$ 解析式为定值：

$$\sigma_{X_1|X_2=x_2} = \sqrt{1-\rho_{1,2}^2}\,\sigma_1 \approx 0.819 \tag{20}$$

类似地，如图 17 所示不管 x_2 怎么变，这个条件**标准差**为定值。

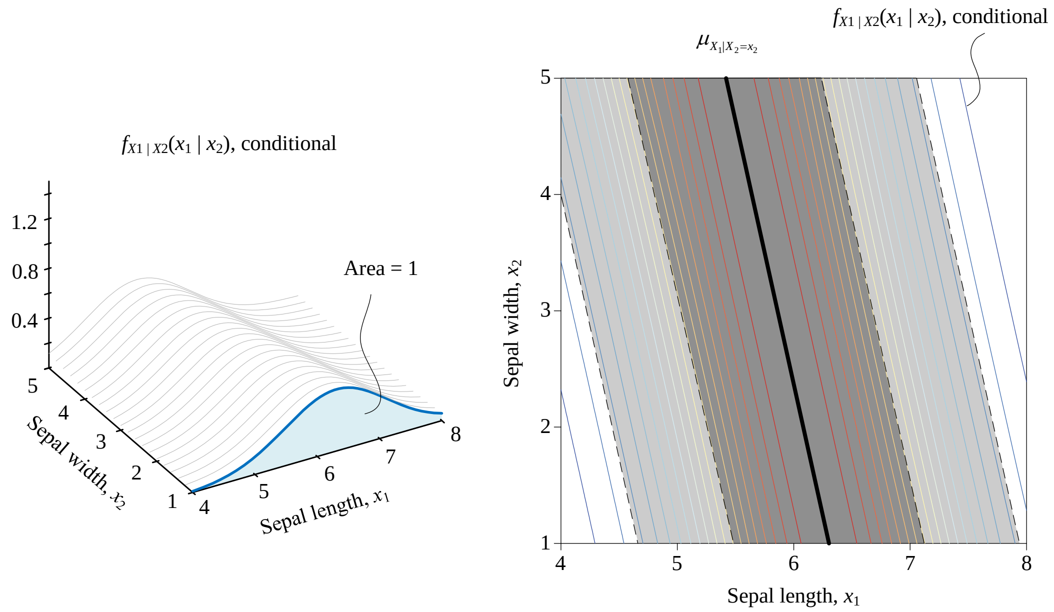

图 17. $f_{X1|X2}(x_1 | x_2)$ 条件 PDF 密度三维等高线和平面等高线，不考虑分类

以鸢尾花为例

换个条件来看，如图 18 所示，给定鸢尾花分类条件，假设花萼宽度服从高斯分布。请大家自行计算给定鸢尾花分类为条件，花萼宽度的条件**期望** $\mathrm{E}(X_2 \mid Y = C_k)$、条件**方差** $\mathrm{var}(X_2 \mid Y = C_k)$。

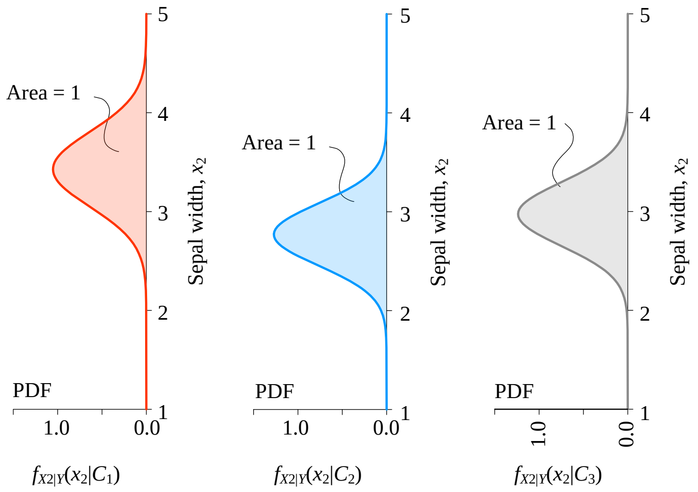

图 18. 给定鸢尾花标签 Y，花萼宽度的条件**期望** $\mathrm{E}(X_2 \mid Y = C_k)$、条件**方差** $\mathrm{var}(X_2 \mid Y = C_k)$，离散随机变量

13.4 多元正态条件分布：引入矩阵运算

本节利用矩阵运算讨论多元正态条件分布。

多元高斯分布

如果随机变量向量 χ 和 γ 服从多维高斯分布：

$$\begin{bmatrix} \chi \\ \gamma \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_\chi \\ \boldsymbol{\mu}_\gamma \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi} & \boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\chi} & \boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\gamma} \end{bmatrix}\right) \tag{21}$$

其中，χ 为随机变量 X_i 构成的列向量，γ 为随机变量 Y_j 构成的列向量：

$$\chi = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_D \end{bmatrix}, \quad \gamma = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_M \end{bmatrix} \tag{22}$$

图 19 所示为多元高斯分布的均值向量、协**方差**矩阵形状。

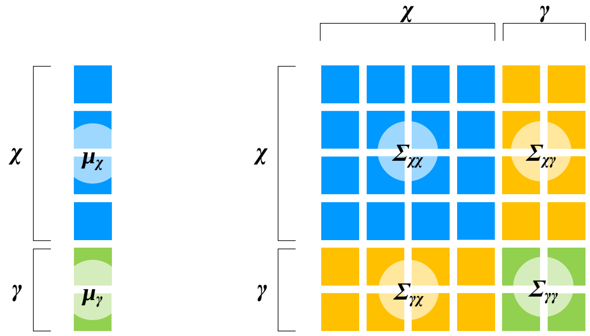

图 19. 均值向量、协方差矩阵形状

互协方差矩阵

注意，$\Sigma_{\gamma\chi}$ 的转置为 $\Sigma_{\chi\gamma}$：

$$\left(\Sigma_{\gamma\chi}\right)^{\mathrm{T}} = \Sigma_{\chi\gamma} \tag{23}$$

$\Sigma_{\chi\gamma}$ 就是本书第 12 章提到的互协方差矩阵 (cross-covariance matrix)。

给定 $\chi = x$ 的条件

给定 $\chi = x$ 的条件下，γ 服从如下多维高斯分布：

$$\{\gamma \mid \chi = x\} \sim N\left(\underbrace{\Sigma_{\gamma\chi}\Sigma_{\chi\chi}^{-1}\left(x - \mu_\chi\right) + \mu_\gamma}_{\text{Expectation}}, \underbrace{\Sigma_{\gamma\gamma} - \Sigma_{\gamma\chi}\Sigma_{\chi\chi}^{-1}\Sigma_{\chi\gamma}}_{\text{Variance}}\right) \tag{24}$$

也就是说，如图 20 所示，给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的期望值为：

$$\mu_{\gamma|\chi=x} = \Sigma_{\gamma\chi}\Sigma_{\chi\chi}^{-1}\left(x - \mu_\chi\right) + \mu_\gamma \tag{25}$$

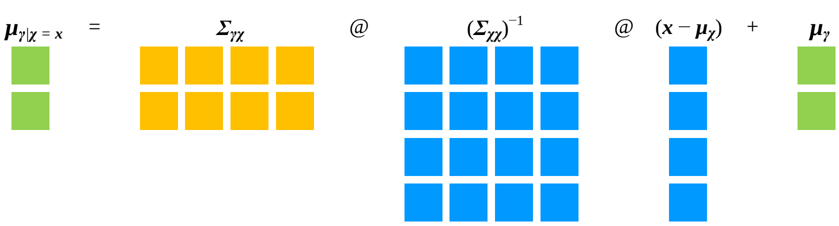

图 20. 给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的期望值的矩阵运算

如图 21 所示，给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的方差为：

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma|\chi=x}=\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\gamma}-\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\chi}\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma} \tag{26}$$

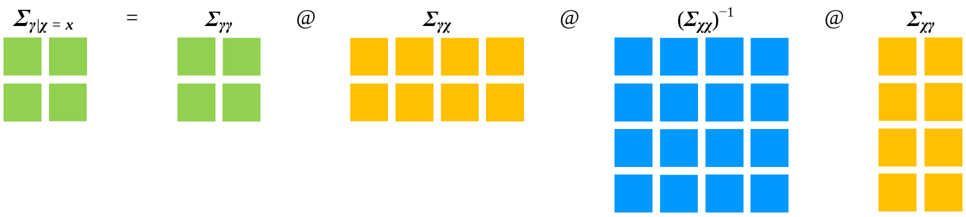

图 21. 给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的**方差**的矩阵运算

给定 $\gamma = y$ 的条件

同理，给定 $\gamma = y$ 的条件下 χ 服从如下多维高斯分布：

$$\{\chi|\gamma=y\}\sim N\left(\underbrace{\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma}\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\gamma}^{-1}\left(y-\boldsymbol{\mu}_{\gamma}\right)+\boldsymbol{\mu}_{\chi}}_{\text{Expectation}},\ \underbrace{\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}-\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma}\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\gamma}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\chi}}_{\text{Variance}}\right) \tag{27}$$

即给定 $\gamma = y$ 的条件下 χ 的**期望**值为：

$$\boldsymbol{\mu}_{\chi|\gamma=y}=\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma}\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\gamma}^{-1}\left(y-\boldsymbol{\mu}_{\gamma}\right)+\boldsymbol{\mu}_{\chi} \tag{28}$$

给定 $\gamma = y$ 的条件下 χ 的**方差**为：

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\chi|\gamma=y}=\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}-\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma}\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\gamma}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\chi} \tag{29}$$

单一因变量

特别地，γ 只有一个随机变量 Y 时，这对应线性回归中有多个自变量，只有一个因变量，如图 22 所示。

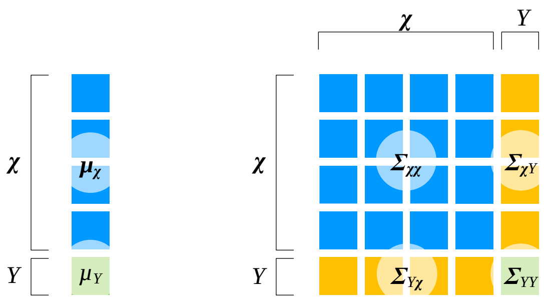

图 22. 均值向量、协**方差**矩阵形状，γ 只有一个随机变量

这种情况下，给定 $\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{x}$ 条件下 Y 的条件**期望**为：

$$\mu_{Y|\boldsymbol{\chi}=\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\Sigma}_{Y\chi}\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}^{-1}\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_{\chi}\right)+\mu_Y \tag{30}$$

(30) 对应多元线性回归。图 23 对应矩阵运算示意图。

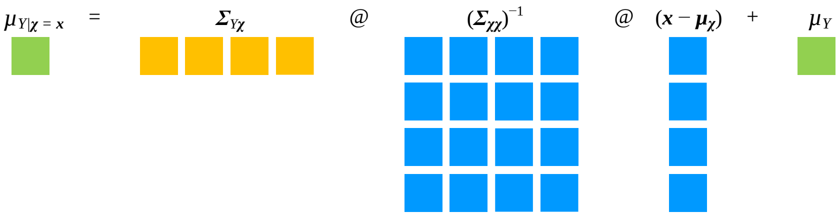

图 23. 给定 $\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{x}$ 条件下 Y 的条件**期望**

多元线性回归

不考虑常数项系数，如果是行向量表达的话，多元线性回归的系数 $\boldsymbol{b}$ 为：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_D \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}_{Y\chi}\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}^{-1} \tag{31}$$

图 24 所示为 $\boldsymbol{b}$ 的矩阵运算。

常数项 b_0 为：

$$b_0 = -\boldsymbol{\Sigma}_{Y\chi}\boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}^{-1}\boldsymbol{\mu}_{\chi} + \mu_Y \tag{32}$$

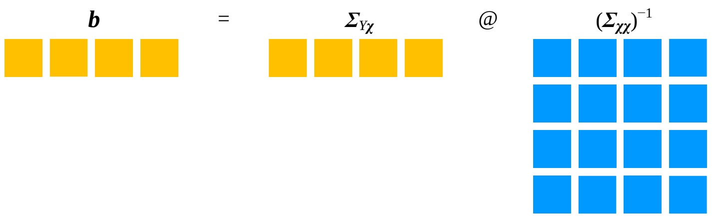

图 24. 计算多元回归的系数 $\boldsymbol{b}$

简单线性回归

更特殊地，当 χ 和 γ 都只有一个随机变量时，即单一自变量 X、单一因变量 Y：

$$\mu_{Y|X=x} = \operatorname{cov}\left(X,Y\right)\left(\sigma_X^2\right)^{-1}\left(x-\mu_X\right)+\mu_Y = \rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}\left(x-\mu_X\right)+\mu_Y \tag{33}$$

这和本书之前的 (8) 完全一致。本书第 24 章将接续讨论这一话题。