

第一章：随机向量与随机矩阵的数字特征、多元正态分布及其性质和参数估计

主要介绍了概率统计中关于随机向量和随机矩阵的数字特征，特别是数学期望、协方差矩阵、相关矩阵，以及多元正态分布及其相关性质和参数估计。

第一部分：数字特征 (幻灯片 1-19)

幻灯片 1: 数字特征

本页是标题页，列出了本部分将要介绍的主要内容：

- 数学期望 (均值)
- 协方差矩阵 (协差阵)
- 相关矩阵

幻灯片 2: 数学期望 (均值)

这一页定义了随机向量和随机矩阵的数学期望。

- 随机向量 $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)'$ 的数学期望
定义为：
 $E(X) = [E(X_1), E(X_2), \dots, E(X_p)]'$
- 这个期望向量也记为 $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p)'$ ，其中 $\mu_i = E(X_i)$ 。
简单来说，随机向量的期望就是其各个分量期望所组成的向量。

- 随机矩阵 $X = (X_{ij})$ 的数学期望
定义为：
 $E(X) = (E(X_{ij}))$

- 具体地，如果 X 是一个 $n \times p$ 的随机矩阵：

$$E(X) = E \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E(X_{11}) & E(X_{12}) & \cdots & E(X_{1p}) \\ E(X_{21}) & E(X_{22}) & \cdots & E(X_{2p}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E(X_{n1}) & E(X_{n2}) & \cdots & E(X_{np}) \end{pmatrix}$$

即随机矩阵的期望是其各个元素期望所组成的矩阵。

幻灯片 3: 随机矩阵的数学期望的性质

这里列出了随机矩阵数学期望的一些重要性质：

- 设 a 为常数，则：

$$E(aX) = aE(X)$$

常数因子可以提到期望符号外面。

- 设 A, B, C 为常数矩阵，则：

$$E(AXB + C) = AE(X)B + C$$

常数矩阵可以提到期望符号外面，常数矩阵 C 的期望是其自身。

- 特别地, 对于随机向量 X , 有:

$E(AX) = AE(X)$ (这里可以看作 $B = I, C = 0$ 的情况, 或者 X 是列向量, B 是标量 1)

3. 设 X_1, X_2, \dots, X_n 为 n 个同阶的随机矩阵, 则:

$$E(X_1 + X_2 + \dots + X_n) = E(X_1) + E(X_2) + \dots + E(X_n)$$

和的期望等于期望的和。

幻灯片 4: 协方差矩阵 (初步)

这页引入了两个随机变量协方差的概念。

- 两个随机变量的协方差定义为:

$$\text{Cov}(X, Y) = E[(X - E(X))(Y - E(Y))]$$

协方差衡量了两个随机变量之间的线性相关程度。

- 若 $\text{Cov}(X, Y) = 0$, 则称 X 和 Y 不相关。

不相关意味着两者之间没有线性关系。

- 两个独立的随机变量必然不相关, 但两个不相关的随机变量未必独立。

这是一个非常重要的概念。独立性是比不相关性更强的条件。不相关只排除了线性依赖关系, 但可能存在非线性依赖关系。

- 当 $X = Y$ 时, 协方差即为方差, 也就是:

$$\text{Cov}(X, X) = E[(X - E(X))(X - E(X))] = E[(X - E(X))^2] = D(X) \text{ (或 } \text{Var}(X))$$

幻灯片 5: 协方差矩阵 (向量间)

这页定义了两个随机向量之间的协方差矩阵。

- 设 $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)'$ 和 $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_q)'$ 为两个随机向量, 它们的协方差矩阵 (简称协差阵) 定义为:

$$\text{Cov}(X, Y) = E[(X - E(X))(Y - E(Y))']$$

这是一个 $p \times q$ 的矩阵, 其 (i, j) 元为 $\text{Cov}(X_i, Y_j)$ 。

$$\text{Cov}(X, Y) = \begin{pmatrix} \text{Cov}(X_1, Y_1) & \text{Cov}(X_1, Y_2) & \cdots & \text{Cov}(X_1, Y_q) \\ \text{Cov}(X_2, Y_1) & \text{Cov}(X_2, Y_2) & \cdots & \text{Cov}(X_2, Y_q) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(X_p, Y_1) & \text{Cov}(X_p, Y_2) & \cdots & \text{Cov}(X_p, Y_q) \end{pmatrix}$$

展开形式为:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(X, Y) &= E \left[\begin{pmatrix} X_1 - E(X_1) \\ \vdots \\ X_p - E(X_p) \end{pmatrix} (Y_1 - E(Y_1), \dots, Y_q - E(Y_q)) \right] \\ &= \begin{pmatrix} E[(X_1 - E(X_1))(Y_1 - E(Y_1))] & \cdots & E[(X_1 - E(X_1))(Y_q - E(Y_q))] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E[(X_p - E(X_p))(Y_1 - E(Y_1))] & \cdots & E[(X_p - E(X_p))(Y_q - E(Y_q))] \end{pmatrix} \end{aligned}$$

幻灯片 6: 协方差矩阵 (单个向量)

这页讨论了单个随机向量自身的协方差矩阵以及相关概念。

- X 和 Y 的协方差矩阵与 Y 和 X 的协差阵互为转置关系, 即有:

$$\text{Cov}(X, Y) = [\text{Cov}(Y, X)]'$$

- 若 $\text{Cov}(X, Y) = 0$ (零矩阵), 则称 X 和 Y 不相关。

- 两个独立的随机向量必然不相关, 但两个不相关的随机向量未必独立。 (与标量情况类似)

- 当 $X = Y$ 时的协方差阵 $\text{Cov}(X, X)$ 称为 X 的协方差矩阵, 记作 $D(X)$ (或 Σ), 即:

$$D(X) = \text{Cov}(X, X) = E[(X - E(X))(X - E(X))']$$

这是一个 $p \times p$ 的对称矩阵。其对角线元素是 X 各分量的方差, 非对角线元素是 X 各分量之间的协方差。

$$D(X) = \begin{pmatrix} D(X_1) & \text{Cov}(X_1, X_2) & \cdots & \text{Cov}(X_1, X_p) \\ \text{Cov}(X_2, X_1) & D(X_2) & \cdots & \text{Cov}(X_2, X_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(X_p, X_1) & \text{Cov}(X_p, X_2) & \cdots & D(X_p) \end{pmatrix}$$

- $D(X)$ 亦记作 $\Sigma = (\sigma_{ij})$, 其中 $\sigma_{ij} = \text{Cov}(X_i, X_j)$ 。因此 $\sigma_{ii} = D(X_i)$ 。

幻灯片 7: 协方差矩阵的分块

- 协方差阵 Σ 既包含了 X 各分量的方差, 也包含了每两个分量之间的协方差。

- 随机向量一分为二后, 其协方差阵分为四块:

如果随机向量 X 可以分块为 $X = \begin{pmatrix} X^{(1)} \\ X^{(2)} \end{pmatrix}$, 其中 $X^{(1)}$ 是 q 维的, $X^{(2)}$ 是 $(p - q)$ 维的。

那么其协方差矩阵 $D(X)$ 可以分块为:

$$D \begin{pmatrix} X^{(1)} \\ X^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(X^{(1)}) & \text{Cov}(X^{(1)}, X^{(2)}) \\ \text{Cov}(X^{(2)}, X^{(1)}) & D(X^{(2)}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}$$

其中,

- $D(X^{(1)}) = \Sigma_{11}$ 是 $X^{(1)}$ 自身的协方差矩阵。
- $D(X^{(2)}) = \Sigma_{22}$ 是 $X^{(2)}$ 自身的协方差矩阵。
- $\text{Cov}(X^{(1)}, X^{(2)}) = \Sigma_{12}$ 是 $X^{(1)}$ 和 $X^{(2)}$ 之间的协方差矩阵。
- $\text{Cov}(X^{(2)}, X^{(1)}) = \Sigma_{21}$ 是 $X^{(2)}$ 和 $X^{(1)}$ 之间的协方差矩阵, 且 $\Sigma_{21} = \Sigma'_{12}$ 。

- 熟悉这四块子矩阵的含义很有益处。

幻灯片 8: 协方差阵的性质 (1)

- (1) 协方差阵是非负定阵, 即 $\Sigma \geq 0$ 。

- 这意味着对于任意非零常数向量 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p)'$, 都有 $\alpha' \Sigma \alpha \geq 0$ 。

证明:

$$\begin{aligned} \alpha' \Sigma \alpha &= \alpha' E[(X - E(X))(X - E(X))'] \alpha \\ &= E[\alpha'(X - E(X))(X - E(X))' \alpha] \end{aligned}$$

令 $Y = \alpha'(X - E(X))$, 这是一个标量随机变量。则上式变为:

$$= E[Y \cdot Y'] = E[Y^2]$$

因为 Y 是实数, $Y^2 \geq 0$, 所以 $E[Y^2] \geq 0$ 。

即 $E[(\alpha'(X - E(X)))^2] \geq 0$ 。

- 注1: 若 $|\Sigma| \neq 0$ (即 Σ 可逆或满秩), 则 $\Sigma > 0$ (正定阵)。
这意味着 $\alpha' \Sigma \alpha > 0$ 对于所有非零向量 α 成立。

幻灯片 9: 协方差阵的性质 (注2)

- 注2: $|\Sigma| = 0 \iff X$ 的分量之间存在线性关系 (以概率1)。

- **含义：**在实际问题中，有时 $|\Sigma| = 0$ 或 $|\Sigma|$ 近似为0，此时指标之间存在着线性相关关系 (共线性)。
- 通常需要删去“多余”的指标 (变量选择)。
- 不失一般性，总假定 $\Sigma > 0$ ，保证 Σ^{-1} 存在，从而使得数学问题简化。这在后续的多元正态分布中尤其重要。

幻灯片 10: 协差阵的性质 (2) (3)

- (2) 设 A 为常数矩阵, b 为常数向量, 则:

$$D(AX + b) = AD(X)A'$$

- 证明概要:

$$\begin{aligned} E(AX + b) &= AE(X) + b \\ D(AX + b) &= E[(AX + b - E(AX + b))(AX + b - E(AX + b))'] \\ &= E[(AX + b - (AE(X) + b))(AX + b - (AE(X) + b))'] \\ &= E[(A(X - E(X)))(A(X - E(X)))'] \\ &= E[A(X - E(X))(X - E(X))'A'] \\ &= AE[(X - E(X))(X - E(X))']A' \\ &= AD(X)A' \end{aligned}$$

- (3) 设 A 和 B 为常数矩阵, 则:

$$\text{Cov}(AX, BY) = A\text{Cov}(X, Y)B'$$

- 证明概要:

$$\begin{aligned} E(AX) &= AE(X), E(BY) = BE(Y) \\ \text{Cov}(AX, BY) &= E[(AX - E(AX))(BY - E(BY))'] \\ &= E[(A(X - E(X)))(B(Y - E(Y)))'] \\ &= E[A(X - E(X))(Y - E(Y))'B'] \\ &= AE[(X - E(X))(Y - E(Y))']B' \\ &= A\text{Cov}(X, Y)B' \end{aligned}$$

幻灯片 11: 协差阵的性质 (4)

- (4) 设 A_1, A_2, \dots, A_n 和 B_1, B_2, \dots, B_m 为常数矩阵, 则:

$$\text{Cov}\left(\sum_{i=1}^n A_i X_i, \sum_{j=1}^m B_j Y_j\right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_i \text{Cov}(X_i, Y_j) B_j'$$

- 这个性质表明协方差算子对于线性组合具有双线性性。

- **推论:** (当 $A_i = I, B_j = I$ 时, 或者 X_i, Y_j 是标量, A_i, B_j 是标量常数)

$$\text{Cov}\left(\sum_{i=1}^n X_i, \sum_{j=1}^m Y_j\right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \text{Cov}(X_i, Y_j)$$

幻灯片 12: 证明 (性质4的推论及性质4)

这里先证明推论, 再利用推论和性质 (3) 证明性质 (4)。

- 先证推论:

$$\begin{aligned} &\text{Cov}\left(\sum_{i=1}^n X_i, \sum_{j=1}^m Y_j\right) \\ &= E\left[\left(\sum_{i=1}^n X_i - E\left(\sum_{i=1}^n X_i\right)\right)\left(\sum_{j=1}^m Y_j - E\left(\sum_{j=1}^m Y_j\right)\right)'\right] \\ &= E\left[\left(\sum_{i=1}^n (X_i - E(X_i))\right)\left(\sum_{j=1}^m (Y_j - E(Y_j))\right)'\right] \\ &= E\left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (X_i - E(X_i))(Y_j - E(Y_j))'\right] \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m E[(X_i - E(X_i))(Y_j - E(Y_j))']$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \text{Cov}(X_i, Y_j)$$

• 再证性质 (4):

令 $U_i = A_i X_i$ 和 $V_j = B_j Y_j$ 。

$$\text{Cov}\left(\sum_{i=1}^n A_i X_i, \sum_{j=1}^m B_j Y_j\right) = \text{Cov}\left(\sum_{i=1}^n U_i, \sum_{j=1}^m V_j\right)$$

根据推论:

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \text{Cov}(U_i, V_j)$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \text{Cov}(A_i X_i, B_j Y_j)$$

根据性质 (3) $\text{Cov}(AX, BY) = A\text{Cov}(X, Y)B'$:

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_i \text{Cov}(X_i, Y_j) B_j'$$

幻灯片 13: 协差阵的性质 (5) (6)

- (5) 设 k_1, k_2, \dots, k_n 是 n 个常数, X_1, X_2, \dots, X_n 是 n 个相互独立的 p 维随机向量, 则:

$$D\left(\sum_{i=1}^n k_i X_i\right) = \sum_{i=1}^n k_i^2 D(X_i)$$

- 证明思路: 利用 $D(\sum k_i X_i) = \text{Cov}(\sum k_i X_i, \sum k_j X_j) = \sum_i \sum_j k_i k_j \text{Cov}(X_i, X_j)$ 。由于 X_i, X_j 相互独立 (当 $i \neq j$ 时), $\text{Cov}(X_i, X_j) = 0$ 。当 $i = j$ 时, $\text{Cov}(X_i, X_i) = D(X_i)$ 。

- (6) $D(X) = E(XX') - (EX)(EX)'$

- 这是计算协方差矩阵的常用公式, 类似于二维方差 $D(X) = E(X^2) - (E(X))^2$ 。

证明:

$$D(X) = E[(X - EX)(X - EX)']$$

$$= E[XX' - X(EX)' - (EX)X' + (EX)(EX)']$$

由于 EX 是常数向量, 可以提出期望:

$$= E(XX') - E(X)(EX)' - (EX)E(X)' + (EX)(EX)'$$

$$= E(XX') - (EX)(EX)' - (EX)(EX)' + (EX)(EX)'$$

$$= E(XX') - (EX)(EX)'$$

幻灯片 14: 协差阵的性质 (7)

- (7) 设 X 为 p 维随机向量, 期望 $E(X) = \mu$ 和协方差矩阵 $D(X) = \Sigma$ 存在, A 为 $p \times p$ 常数阵, 则:

$$E(X'AX) = \text{tr}(A\Sigma) + \mu' A \mu$$

- 这里 $X'AX$ 是一个标量 (二次型)。 $\text{tr}(\cdot)$ 表示矩阵的迹 (主对角线元素之和)。

证明方法 (1) (元素法):

$$X'AX = \sum_i \sum_j a_{ij} X_i X_j$$

$$E(X'AX) = E\left(\sum_i \sum_j a_{ij} X_i X_j\right) = \sum_i \sum_j a_{ij} E(X_i X_j)$$

我们知道 $\text{Cov}(X_i, X_j) = E(X_i X_j) - E(X_i)E(X_j) = E(X_i X_j) - \mu_i \mu_j$ 。

所以 $E(X_i X_j) = \text{Cov}(X_i, X_j) + \mu_i \mu_j = \sigma_{ij} + \mu_i \mu_j$ 。

$$E(X'AX) = \sum_i \sum_j a_{ij} (\sigma_{ij} + \mu_i \mu_j) = \sum_i \sum_j a_{ij} \sigma_{ij} + \sum_i \sum_j a_{ij} \mu_i \mu_j$$

注意到 $\sum_i \sum_j a_{ij} \sigma_{ij} = \text{tr}(A\Sigma)$ 。因为 Σ 是对称的, $\Sigma' = \Sigma$, 所以是 $\text{tr}(A\Sigma)$ 。

(更准确地说, $\sum_j a_{ij} \sigma_{ji}$ 是 $(A\Sigma)_{ii}$, 所以 $\sum_i \sum_j a_{ij} \sigma_{ji} = \text{tr}(A\Sigma)$ 。而 $\sum_i \sum_j a_{ij} \mu_i \mu_j = \mu' A \mu$ (可以写成 $(\mu' A) \mu$ 或 $\mu' (A \mu)$)。

所以 $E(X'AX) = \text{tr}(A\Sigma) + \mu' A \mu$ 。

证明方法 (2) (迹的性质):

$X'AX$ 是一个标量, 所以 $X'AX = \text{tr}(X'AX)$ 。

$$E(X'AX) = E(\text{tr}(X'AX))$$

利用迹的性质 $\text{tr}(BCD) = \text{tr}(DBC) = \text{tr}(CDB)$, 这里 $\text{tr}(X'AX) = \text{tr}(AXX')$ 。

$$= E(\text{tr}(AXX')) = \text{tr}(E(AXX')) = \text{tr}(AE(XX'))$$

由性质 (6), $E(XX') = D(X) + (EX)(EX)' = \Sigma + \mu\mu'$ 。

$$= \text{tr}(A(\Sigma + \mu\mu')) = \text{tr}(A\Sigma + A\mu\mu')$$

$$= \text{tr}(A\Sigma) + \text{tr}(A\mu\mu')$$

再次利用迹的性质 $\text{tr}(A\mu\mu') = \text{tr}(\mu'A\mu)$ 。因为 $\mu'A\mu$ 是一个标量, 其迹就是其自身。

$$= \text{tr}(A\Sigma) + \mu'A\mu$$

幻灯片 15: 相关矩阵 (定义)

- 随机变量 X 和 Y 的相关系数定义为:

$$\rho = \rho(X, Y) = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{D(X)D(Y)}}$$

相关系数是标准化的协方差, 其值在 $[-1, 1]$ 之间。

- 随机向量 $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)'$ 和 $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_q)'$ 的相关阵定义为:

(幻灯片这里似乎只写了 X 内部各分量的相关系数, 但标题是 X 和 Y 。通常相关阵是指一个随机向量内部各分量间的相关系数矩阵。如果指 X 和 Y 之间, 则是 $(p \times q)$ 矩阵, 元素为 $\rho(X_i, Y_j)$ 。)

如果指的是 X 内部的相关阵 R_X , 其 (i, j) 元素为:

$$\rho_{ij} = \rho(X_i, X_j) = \frac{\text{Cov}(X_i, X_j)}{\sqrt{D(X_i)D(X_j)}}$$

幻灯片 16: 相关矩阵 (性质)

- 若 $\rho(X, Y) = 0$, 则表明 X 和 Y 不相关。(这与 $\text{Cov}(X, Y) = 0$ 等价, 只要方差不为0)

- $X = Y$ 时的相关阵 $\rho(X, X)$ 称为 X 的相关阵, 记作 $R = (\rho_{ij})$, 这里 $\rho_{ij} = \rho(X_i, X_j)$, $\rho_{ii} = 1$ 。即:

$$R = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1p} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{p1} & \rho_{p2} & \cdots & \rho_{pp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1p} \\ \rho_{21} & 1 & \cdots & \rho_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{p1} & \rho_{p2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

相关阵是一个对称矩阵, 对角线元素全为1。

- $R = (\rho_{ij})$ 和 $\Sigma = (\sigma_{ij})$ 之间有关系式:

$$R = D^{-1/2} \Sigma D^{-1/2}$$

其中 D 是一个对角矩阵, 其对角线元素是 Σ 的对角线元素 (即各分量的方差):

$$D = \text{diag}(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \dots, \sigma_{pp}) = \text{diag}(D(X_1), D(X_2), \dots, D(X_p))$$

$D^{-1/2}$ 是一个对角矩阵, 其对角线元素是 $1/\sqrt{\sigma_{ii}}$:

$$D^{-1/2} = \text{diag}\left(\frac{1}{\sqrt{\sigma_{11}}}, \frac{1}{\sqrt{\sigma_{22}}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{\sigma_{pp}}}\right)$$

- (幻灯片中写的是 $D = \text{diag}(\sqrt{\sigma_{11}}, \dots, \sqrt{\sigma_{pp}})$, 然后关系式是 $R = D^{-1} \Sigma D^{-1}$ 。这两种表达是等价的, 只是 D 的定义不同。如果按幻灯片 $D = \text{diag}(\sqrt{\sigma_{11}}, \dots, \sqrt{\sigma_{pp}})$, 那么 $D^{-1} = \text{diag}(1/\sqrt{\sigma_{11}}, \dots, 1/\sqrt{\sigma_{pp}})$ 。则 $(D^{-1} \Sigma D^{-1})_{ij} = (1/\sqrt{\sigma_{ii}}) \sigma_{ij} (1/\sqrt{\sigma_{jj}}) = \sigma_{ij} / \sqrt{\sigma_{ii} \sigma_{jj}} = \rho_{ij}$ 。

幻灯片 17: R 和 Σ 的相应元素之间的关系式

这一页用矩阵形式明确显示了 $R = D^{-1}\Sigma D^{-1}$ 的关系 (采用幻灯片16中 $D = \text{diag}(\sqrt{\sigma_{11}}, \dots, \sqrt{\sigma_{pp}})$ 的定义)。

- 元素关系:

$$\rho_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}}\sqrt{\sigma_{jj}}}$$

- 矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} 1 & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1p} \\ \rho_{21} & 1 & \cdots & \rho_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{p1} & \rho_{p2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{11}}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\sigma_{22}}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\sqrt{\sigma_{pp}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1p} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p1} & \sigma_{p2} & \cdots & \sigma_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\sigma_{11}}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\sigma_{22}}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\sqrt{\sigma_{pp}}} \end{pmatrix}$$

这与 $R = D^{-1}\Sigma D^{-1}$ 一致。

幻灯片 18: 标准化变换 (定义)

- **在数据处理时, 为克服各指标的量纲不同对统计分析结果带来的影响, 需要对每个指标作标准化变换, 最常用的标准化变换是令:

- $X_i^* = \frac{X_i - \mu_i}{\sqrt{\sigma_{ii}}}$, $i = 1, 2, \dots, p$
其中 $\mu_i = E(X_i)$, $\sigma_{ii} = D(X_i)$ 。
标准化后的变量 X_i^* 均值为0, 方差为1。

- 记 $X^* = (X_1^*, X_2^*, \dots, X_p^*)'$, 则:

$$E(X^*) = \mathbf{0} \text{ (零向量)}$$

$$D(X^*) = R \text{ (原变量 } X \text{ 的相关矩阵)}$$

幻灯片 19: 标准化变换 (性质)

- 令 $D_\sigma = \text{diag}(\sqrt{\sigma_{11}}, \sqrt{\sigma_{22}}, \dots, \sqrt{\sigma_{pp}})$ (注意这里 D_σ 就是幻灯片16中的 D)。

则标准化变换可以写成向量形式: $X^* = D_\sigma^{-1}(X - E(X))$ 。

于是有:

$$E(X^*) = E[D_\sigma^{-1}(X - E(X))] = D_\sigma^{-1}E(X - E(X)) = D_\sigma^{-1}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$$

$$D(X^*) = D[D_\sigma^{-1}(X - E(X))]$$

利用 $D(AY + b) = AD(Y)A'$ 的性质 (这里 $A = D_\sigma^{-1}$, $Y = X$, $b = -D_\sigma^{-1}E(X)$), 但更简单的是

$$D(A(X - \mu)) = AD(X - \mu)A' = AD(X)A':$$

$$D(X^*) = D_\sigma^{-1}D(X)(D_\sigma^{-1})'$$

因为 D_σ^{-1} 是对角阵, 所以 $(D_\sigma^{-1})' = D_\sigma^{-1}$ 。

$$D(X^*) = D_\sigma^{-1}\Sigma D_\sigma^{-1} = R$$

- 标准化数据的协方差阵正好是原指标的相关阵。

- 相关阵 R 也是一个非负定阵。 (因为它是标准化向量的协方差矩阵, 协方差矩阵是非负定矩阵)

第二部分：多元正态分布 (幻灯片 20-38)

幻灯片 20: 多元正态分布的定义

- 一元正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$ 的概率密度函数为：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

也可以写成：

$$f(x) = (2\pi)^{-1/2} (\sigma^2)^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (x - \mu) (\sigma^2)^{-1} (x - \mu) \right], \quad -\infty < x < \infty$$

- 若随机向量 $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)'$ 的概率密度函数为：

$$f(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-p/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu) \right]$$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)'$, μ 是 p 维均值向量, Σ 是 $p \times p$ 正定协方差矩阵。

则称 X 服从 p 元正态分布, 记作 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$ 。

- 可以证明：参数 μ 和 Σ 分别为 X 的均值和协方差阵。

幻灯片 21: 多元正态分布的等价定义 (线性变换)

- 随机向量 $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_q)'$, $Y_i \sim N(0, 1)$ i.i.d. (独立同分布)。

这意味着 $E(Y) = \mathbf{0}$ 且 $D(Y) = I_q$ (q 阶单位矩阵)。

- 令 $X = \mu_{p \times 1} + A_{p \times q} Y$, 则称 X 服从多元正态分布。

这里 μ 是一个 p 维常数向量, A 是一个 $p \times q$ 常数矩阵。

此时, $E(X) = \mu + AE(Y) = \mu$ 。

$$D(X) = AD(Y)A' = AI_qA' = AA'。$$

记为: $X \sim N_p(\mu, AA')$ 或 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$, 其中 $\Sigma = AA'$ 。

(注意: 要使得 Σ 是 $p \times p$ 正定矩阵从而有密度函数, 通常要求 A 是 $p \times p$ 的满秩矩阵, 即 $q = p$ 且 A 可逆。如果 $q < p$ 或者 A 不是满秩, $\Sigma = AA'$ 将是奇异的, 此时 X 服从退化的多元正态分布, 没有通常意义下的密度函数。)

- 定理2.1: $X \sim N_p(\mu, \Sigma) \implies E(X) = \mu, D(X) = \Sigma$ 。

这个定义方法直接给出了均值和协方差矩阵。

- 证明 (基于此定义):

$$E(Y) = \mathbf{0}, D(Y) = I$$

$$E(X) = E(\mu + AY) = \mu + AE(Y) = \mu + A\mathbf{0} = \mu$$

$$D(X) = D(\mu + AY) = D(AY) = AD(Y)A' = AIA' = AA' = \Sigma$$

幻灯片 22: 多元正态分布的等价定义 (从PDF推导线性变换)

这一页和下一页展示了如何从 $Y_i \sim N(0, 1)$ i.i.d. 通过变换得到 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$ 的密度函数。

- $X \sim N_p(\mu, \Sigma), \Sigma > 0$, X 的概率密度函数为：

$$f(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-p/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu) \right]$$

- 因为 $\Sigma > 0$ (正定), 可以进行 Cholesky 分解或特征值分解, 使得 $\Sigma = TT'$, 其中 T 是一个 $p \times p$ 的可逆矩阵。

(例如, 如果 $\Sigma = PDP'$ 是谱分解, P 是正交阵, D 是对角阵, 则 $T = PD^{1/2}$ 。)

- 令 $X = TY + \mu$, 其中 $Y_i \sim N(0, 1)$ i.i.d., $i = 1, 2, \dots, p$ 。

则 $Y = T^{-1}(X - \mu)$ 。

$$Y \text{ 的联合密度函数为 } f_Y(\mathbf{y}) = \prod_{i=1}^p \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_i^2/2} = (2\pi)^{-p/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{y} \right)。$$

- 利用多维随机变量的密度函数变换公式: $f_X(\mathbf{x}) = f_Y(\mathbf{y}(\mathbf{x})) |J(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x})|$ 或者 $f_X(\mathbf{x}) = f_Y(\mathbf{y}(\mathbf{x})) / |J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})|$ 。

其中 $J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})$ 是从 \mathbf{x} 到 \mathbf{y} 变换的雅可比行列式, 即 $J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}) = \left| \det \left(\frac{\partial y_i}{\partial x_j} \right) \right|$ 。

$$f_X(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-p/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}' \mathbf{y} \right) \frac{1}{|J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})|}$$

幻灯片 23: 多元正态分布的等价定义 (雅可比行列式)

- 雅可比行列式 $J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})$ 的计算:

$$\mathbf{y} = T^{-1}(\mathbf{x} - \mu).$$

$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}'} = T^{-1}$ (这是一个矩阵, 其 (i, j) 元为 $\partial y_i / \partial x_j$).

所以 $|J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})| = |\det(T^{-1})| = |\det(T)|^{-1}$.

因为 $\Sigma = TT'$, 则 $|\Sigma| = |\det(T) \det(T')| = (\det(T))^2$.

所以 $|\det(T)| = |\Sigma|^{1/2}$.

因此 $|J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})| = |\Sigma|^{-1/2}$.

幻灯片上的 $|J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})| = \left| \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{y}} \right|_+ = |T'|_+ = |TT'|^{1/2} = |\Sigma|^{1/2}$ 似乎是 $J(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x})$ 的行列式, 即 $\mathbf{x} = T\mathbf{y} + \mu \implies \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{y}} = T$.

所以 $|J(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x})| = |\det(T)| = |\Sigma|^{1/2}$.

那么 $f_X(\mathbf{x}) = f_Y(\mathbf{y}(\mathbf{x}))|J(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x})|^{-1} = f_Y(\mathbf{y}(\mathbf{x}))|J(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})|$.

- 代入 $f_X(\mathbf{x})$ 的表达式:

$$\mathbf{y}'\mathbf{y} = (T^{-1}(\mathbf{x} - \mu))'(T^{-1}(\mathbf{x} - \mu)) = (\mathbf{x} - \mu)'(T^{-1})'T^{-1}(\mathbf{x} - \mu)$$

由于 $\Sigma = TT'$, $\Sigma^{-1} = (TT')^{-1} = (T')^{-1}T^{-1} = (T^{-1})'T^{-1}$.

所以 $\mathbf{y}'\mathbf{y} = (\mathbf{x} - \mu)'\Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \mu)$.

$$f_X(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-p/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu)'\Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \mu)\right) |\Sigma|^{-1/2}$$

这与幻灯片20的定义一致。

幻灯片 24: 多元正态分布 (补充说明)

- 需要明确的是, 更广泛的多元正态分布的定义可以借助特征函数来定义。

一个 p 维随机向量 X 服从多元正态分布, 如果对任意 p 维常数向量 t , $t'X$ 服从一元正态分布 (或为常数)。其特征函数为 $\phi_X(t) = E(e^{it'X}) = \exp(it'\mu - \frac{1}{2}t'\Sigma t)$ 。

- 可以证明, 这三类定义是等价的 (PDF 定义, 线性变换定义, 特征函数定义)。

- 另外, 在密度函数定义中, 如果 $|\Sigma| = 0$, 则 Σ^{-1} 不存在, X 不存在通常意义下的密度函数。这种情况称为退化 (singular) 正态分布, 随机向量 X 的分量间存在线性关系, 其分布集中在一个低维的超平面上。

幻灯片 25: 二元正态分布

这里详细给出了 $p = 2$ 的情况, 即二元正态分布。

- 设 $X \sim N_2(\mu, \Sigma)$, 这里:

$$X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}, \quad \mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1\sigma_2\rho \\ \sigma_1\sigma_2\rho & \sigma_2^2 \end{pmatrix}$$

其中 $\sigma_1^2 = D(X_1)$, $\sigma_2^2 = D(X_2)$, $\rho = \rho(X_1, X_2)$ 是 X_1 和 X_2 的相关系数。

- 易见, ρ 是 X_1 和 X_2 的相关系数。

- 当 $|\rho| < 1$ 时 (即 Σ 正定, 行列式 $|\Sigma| = \sigma_1^2\sigma_2^2(1 - \rho^2) > 0$), 可得 X 的概率密度函数为:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left[\left(\frac{x_1 - \mu_1}{\sigma_1} \right)^2 - 2\rho \left(\frac{x_1 - \mu_1}{\sigma_1} \right) \left(\frac{x_2 - \mu_2}{\sigma_2} \right) + \left(\frac{x_2 - \mu_2}{\sigma_2} \right)^2 \right] \right\}$$

幻灯片 26: 二元正态分布的密度曲面图

- 下图是当 $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 1, \rho = 0.75$ 时二元正态分布的钟形密度曲面图。

图中展示了典型的钟形曲面, 峰值在 (μ_1, μ_2) 处。 $\rho = 0.75$ 表明 X_1, X_2 正相关, 密度函数的等高线 (投影到 $x_1 - x_2$ 平面) 会是沿 $y = x$ 方向拉长的椭圆。

幻灯片 27: 二元正态分布等高线

- 等高(椭圆)线:

密度函数 $f(x_1, x_2)$ 为常数的点构成的曲线。即指数部分为常数:

$$\left(\frac{x_1 - \mu_1}{\sigma_1}\right)^2 - 2\rho\left(\frac{x_1 - \mu_1}{\sigma_1}\right)\left(\frac{x_2 - \mu_2}{\sigma_2}\right) + \left(\frac{x_2 - \mu_2}{\sigma_2}\right)^2 = c^2$$

这是一个二次型, 表示中心在 (μ_1, μ_2) 的椭圆。椭圆的形状和方向由 ρ, σ_1, σ_2 决定。

- 上述等高线上的密度值:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left[-\frac{c^2}{2(1-\rho^2)}\right]$$

对于给定的 c^2 , 密度值是恒定的。

幻灯片 28: 二元正态分布的密度等高线族

- 图中展示了两种情况下的等高线族:

- $\rho > 0$: 椭圆的长轴大致沿 $y = x$ 方向 (或 $x_2 = kx_1, k > 0$), 表示 X_1, X_2 正相关。
 - $\rho < 0$: 椭圆的长轴大致沿 $y = -x$ 方向 (或 $x_2 = kx_1, k < 0$), 表示 X_1, X_2 负相关。
- 等高线越往外, 对应的 c^2 越大, 密度值越小。

幻灯片 29: 多元正态分布的性质 (1) 线性变换

- (1) 设 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$, $Y = CX + b$, 其中 C 为 $r \times p$ 常数矩阵, b 为 r 维常数向量, 则:

$$Y \sim N_r(C\mu + b, C\Sigma C')$$

这是多元正态分布一个非常重要的性质: **正态变量的线性变换仍为正态变量。**

如果 $C\Sigma C'$ 是奇异的, 则 Y 服从退化的 r 元正态分布。

- 特别地: 设 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$, a 为 p 维常数向量, 则 $a'X$ (一个标量) 服从一元正态分布:

$$a'X \sim N(a'\mu, a'\Sigma a)$$

(这里 $C = a', b = 0$)。如果 $a'\Sigma a = 0$, 则 $a'X$ 是一个常数 $a'\mu$ (以概率1)。

幻灯片 30: 多元正态分布的性质 (2) 边缘分布

- (2) 设 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$, 则 X 的任何子向量也服从 (多元) 正态分布, 其均值为 μ 的相应子向量, 协方差矩阵为 Σ 的相应子矩阵。

对 $X, \mu, \Sigma (> 0)$ 作如下的剖分:

$$X = \begin{pmatrix} X^{(1)} \\ X^{(2)} \end{pmatrix} \begin{matrix} q \\ p-q \end{matrix}, \quad \mu = \begin{pmatrix} \mu^{(1)} \\ \mu^{(2)} \end{pmatrix} \begin{matrix} q \\ p-q \end{matrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \begin{matrix} q \\ p-q \end{matrix}$$

则:

$$X^{(1)} \sim N_q(\mu^{(1)}, \Sigma_{11})$$

$$X^{(2)} \sim N_{p-q}(\mu^{(2)}, \Sigma_{22})$$

这个性质说明: **多元正态分布的任何边缘分布仍为 (多元) 正态分布。**

例如, $X^{(1)}$ 可以通过令 $C = [I_q, \mathbf{0}_{q \times (p-q)}]$ 得到, $Y = X^{(1)} = CX$ 。

幻灯片 31: 多元正态分布的性质 (3) 独立性

- (3) 子向量 $X^{(1)}$ 和 $X^{(2)}$ 相互独立, 当且仅当 $\Sigma_{12} = 0$ 。

回顾幻灯片7, $\Sigma_{12} = \text{Cov}(X^{(1)}, X^{(2)})$ 。

所以, 对于多元正态分布, **不相关 ($\Sigma_{12} = 0$) 等价于相互独立**。这是正态分布特有的重要性质。

一般情况下, 不相关并不意味着独立, 但对于正态分布, 它们是等价的。

← 箭头表示 $\Sigma_{12} = 0 \implies$ 独立。

如果 $\Sigma_{12} = 0$ (从而 $\Sigma_{21} = 0'$), 则协方差矩阵 $\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & 0 \\ 0 & \Sigma_{22} \end{pmatrix}$ 。

$$|\Sigma| = |\Sigma_{11}| |\Sigma_{22}|。$$

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \Sigma_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & \Sigma_{22}^{-1} \end{pmatrix}。$$

指数项 $(\mathbf{x} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu)$ 可以分解为两部分之和:

$$(\mathbf{x}^{(1)} - \mu^{(1)})' \Sigma_{11}^{-1} (\mathbf{x}^{(1)} - \mu^{(1)}) + (\mathbf{x}^{(2)} - \mu^{(2)})' \Sigma_{22}^{-1} (\mathbf{x}^{(2)} - \mu^{(2)}).$$

因此, 联合密度函数 $f(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)})$ 可以分解为 $f_1(\mathbf{x}^{(1)})f_2(\mathbf{x}^{(2)})$ 的形式, 表明 $X^{(1)}$ 和 $X^{(2)}$ 独立。

$$f(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}) = (2\pi)^{-p/2} |\Sigma_{11}|^{-1/2} |\Sigma_{22}|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\dots) \right]$$

$$= \left\{ (2\pi)^{-q/2} |\Sigma_{11}|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}^{(1)} - \mu^{(1)})' \Sigma_{11}^{-1} (\mathbf{x}^{(1)} - \mu^{(1)}) \right] \right\} \times \left\{ (2\pi)^{-(p-q)/2} |\Sigma_{22}|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}^{(2)} - \mu^{(2)})' \Sigma_{22}^{-1} (\mathbf{x}^{(2)} - \mu^{(2)}) \right] \right\}$$

幻灯片 32: 多元正态分布的性质 (推广与注意)

- 若 $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)' \sim N_p(\mu, \Sigma)$, 则 X_1, X_2, \dots, X_p 相互独立当且仅当 $\Sigma_{ij} = 0$ 对一切 $i \neq j$ 成立 (即 Σ 为对角矩阵)。

- 即多元正态变量, 其子向量之间互不相关和相互独立是等价的。

例: 设 $X \sim N_3(\mu, \Sigma)$, 其中

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

- $\text{Cov}(X_2, X_3) = \Sigma_{23} = -1 \neq 0$, 所以 X_2 和 X_3 不独立 (也不相关)。

- X_1 和 $(X_2, X_3)'$ 对应的协方差子矩阵 $\Sigma_{1,(23)} = \begin{pmatrix} \Sigma_{12} \\ \Sigma_{13} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 。所以 X_1 和 $(X_2, X_3)'$ 相互独立。

- 需注意: 随机向量的任何边缘分布皆为 (多元) 正态分布未必表明该随机向量就服从多元正态分布。

即, 所有分量 X_i 都是正态的, 甚至所有子向量 $X^{(k)}$ 都是多元正态的, 也不能保证 X 本身是多元正态的。PPT中提到 "[补充例 P15] 就是这样的一个反例"。

幻灯片 33: 例子 (边缘分布)

设 $X \sim N_4(\mu, \Sigma)$, 这里

$$X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix}, \mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \sigma_{14} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} & \sigma_{24} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} & \sigma_{34} \\ \sigma_{41} & \sigma_{42} & \sigma_{43} & \sigma_{44} \end{pmatrix}$$

则:

- 一维边缘分布: $X_i \sim N(\mu_i, \sigma_{ii}), \quad i = 1, 2, 3, 4$

- 二维边缘分布: 例如, 向量 $\begin{pmatrix} X_1 \\ X_4 \end{pmatrix}$ 服从

$$N_2 \left(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{14} \\ \sigma_{41} & \sigma_{44} \end{pmatrix} \right)$$

- 三维边缘分布: 例如, 向量 $\begin{pmatrix} X_4 \\ X_1 \\ X_3 \end{pmatrix}$ (注意顺序) 服从

$$N_3 \left(\begin{pmatrix} \mu_4 \\ \mu_1 \\ \mu_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_{44} & \sigma_{41} & \sigma_{43} \\ \sigma_{14} & \sigma_{11} & \sigma_{13} \\ \sigma_{34} & \sigma_{31} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \right)$$

幻灯片 34-37: 例子 (线性变换和分块)

【例 2.4】若 $X = (X_1, X_2, X_3)' \sim N_3(\mu, \Sigma)$

其中,

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

$$\text{设 } a = (0, 1, 0)', A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(1) (幻灯片 35) $a'X$ 的分布

$$a'X = (0, 1, 0) \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = X_2$$

根据性质 (1) 特例: $a'X \sim N(a'\mu, a'\Sigma a)$ 。

$$a'\mu = (0, 1, 0) \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} = \mu_2$$

$$a' \Sigma a = (0, 1, 0) \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (0, 1, 0) \begin{pmatrix} \sigma_{12} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{32} \end{pmatrix} = \sigma_{22}$$

所以 $X_2 \sim N(\mu_2, \sigma_{22})$, 这与边缘分布的结论一致。

(2) (幻灯片 36) AX 的分布

$$AX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 \\ -X_3 \end{pmatrix}$$

根据性质 (1): $AX \sim N_2(A\mu, A\Sigma A')$ 。

$$A\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ -\mu_3 \end{pmatrix}$$

$$A\Sigma A' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ -\sigma_{31} & -\sigma_{32} & -\sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & -\sigma_{13} \\ -\sigma_{31} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

所以 $\begin{pmatrix} X_1 \\ -X_3 \end{pmatrix} \sim N_2\left(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ -\mu_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_{11} & -\sigma_{13} \\ -\sigma_{31} & \sigma_{33} \end{pmatrix}\right)$ 。

(3) (幻灯片 37) 子向量的分布

记 $X = \begin{pmatrix} X^{(1)} \\ X^{(2)} \end{pmatrix}$, 其中 $X^{(1)} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}$ (2维), $X^{(2)} = \begin{pmatrix} X_3 \end{pmatrix}$ (1维)。

$\mu = \begin{pmatrix} \mu^{(1)} \\ \mu^{(2)} \end{pmatrix}$, 其中 $\mu^{(1)} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}$, $\mu^{(2)} = \begin{pmatrix} \mu_3 \end{pmatrix}$ 。

$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}$, 其中

$\Sigma_{11} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$, $\Sigma_{12} = \begin{pmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{pmatrix}$, $\Sigma_{21} = (\sigma_{31}, \sigma_{32})$, $\Sigma_{22} = (\sigma_{33})$ 。

则 $X^{(1)} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \sim N_2(\mu^{(1)}, \Sigma_{11}) = N_2\left(\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}\right)$ 。

幻灯片 38: 边缘分布的应用与提醒

- 注意到: 如果随机向量服从多元正态分布, 则它的每个分量必服从一元正态分布。
- 把某个分量的 n 个样本值作频率直方图, 如果断定不呈正态分布, 则就可以断定随机向量也不可能服从多元正态分布。
这是检验多元正态性的一个必要条件, 但不是充分条件。即所有分量都服从一元正态分布, 并不能保证整体服从多元正态分布。
- 后续的探索性数据分析中再详加讨论!

第三部分: 多元正态分布的参数估计 (幻灯片 39-59)

幻灯片 39: 多元正态分布的参数估计 (概述)

本部分将讨论以下内容:

- 多元样本 $X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)}$ 的联合概率密度
- μ 和 Σ 的极大似然估计
- 相关系数的极大似然估计
- 估计量的性质
- Wishart 分布

幻灯片 40: 简单随机样本和数据矩阵

- 设 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$, $\Sigma > 0$ 。 $X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)}$ 是从总体 X 中抽取的一个简单随机样本, 即满足:
 1. $X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)}$ 相互独立。
 2. 每个 $X_{(a)}$ ($a = 1, \dots, n$) 都与总体 X 同分布, 即 $X_{(a)} \sim N_p(\mu, \Sigma)$ 。

- 令数据矩阵 (样本资料阵) 为:

$$\mathbf{X}_{n \times p} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X'_{(1)} \\ X'_{(2)} \\ \vdots \\ X'_{(n)} \end{pmatrix}$$

这里 $X_{(a)} = (X_{a1}, X_{a2}, \dots, X_{ap})'$ 是第 a 个观测向量。

(幻灯片中 $X_{(1)}, \dots, X_p$ 作为列向量, 这似乎是把数据矩阵的列向量表示成 $X_j = (X_{1j}, \dots, X_{nj})'$ 。但通常 (X_1, \dots, X_p) 表示一个 p 维随机向量的 p 个分量, 而 $X_{(a)}$ 表示第 a 个样本观测。从 $X'_{(a)}$ 的表示来看, 行是样本, 列是变量/维度。)

幻灯片右侧的 (X_1, X_2, \dots, X_p) 应该是指数据矩阵的 p 个列向量, 每个列向量 X_j 包含该变量的 n 次观测。

而等号后的 $\begin{pmatrix} X'_{(1)} \\ \vdots \\ X'_{(n)} \end{pmatrix}$ 是标准的样本数据矩阵表示, 每一行是一个 p 维观测。

幻灯片 41: 样本数据数字特征 (样本均值向量)

- 设 $X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)}$ 为来自 p 元总体的样本, 其中 $X_{(a)} = (X_{a1}, X_{a2}, \dots, X_{ap})'$, $a = 1, 2, \dots, n$ 。
- 样本均值向量定义为:

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n X_{(a)} = (\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_p)'$$

其中 $\bar{X}_j = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n X_{aj}$ 是第 j 个分量的样本均值。

矩阵表示:

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} \sum X_{a1} \\ \sum X_{a2} \\ \vdots \\ \sum X_{ap} \end{pmatrix} = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} X_{11} + X_{21} + \cdots + X_{n1} \\ X_{12} + X_{22} + \cdots + X_{n2} \\ \vdots \\ X_{1p} + X_{2p} + \cdots + X_{np} \end{pmatrix}$$

如果用数据矩阵 $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X'_{(1)} \\ \vdots \\ X'_{(n)} \end{pmatrix}$, 则 $\bar{X} = \frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n$, 其中 $\mathbf{1}_n$ 是 n 维全1列向量。

幻灯片 42: 样本数据数字特征 (样本离差阵)

- 样本离差阵 (Sum of Squares and Cross-products matrix, SSCP) 定义为:

$$S_{p \times p} (\text{或 } A_{p \times p}) = \sum_{a=1}^n (X_{(a)} - \bar{X})(X_{(a)} - \bar{X})' = (s_{ij})_{p \times p}$$

其中 $s_{ij} = \sum_{a=1}^n (X_{ai} - \bar{X}_i)(X_{aj} - \bar{X}_j)$ 。

这是一个 $p \times p$ 的对称矩阵。

对角线元素 $s_{ii} = \sum_{a=1}^n (X_{ai} - \bar{X}_i)^2$ 是第 i 个分量的离差平方和。

非对角线元素 $s_{ij} = \sum_{a=1}^n (X_{ai} - \bar{X}_i)(X_{aj} - \bar{X}_j)$ 是第 i 和第 j 分量的离差乘积之和。

幻灯片 43: 样本数据数字特征 (样本协差阵)

- 样本协差阵定义为:

$$V_{p \times p} = \frac{1}{n-1} S = \frac{1}{n-1} \sum_{a=1}^n (X_{(a)} - \bar{X})(X_{(a)} - \bar{X})' = (v_{ij})_{p \times p}$$

其中 $v_{ij} = \frac{1}{n-1} \sum_{a=1}^n (X_{ai} - \bar{X}_i)(X_{aj} - \bar{X}_j)$ 。

V 是总体协方差矩阵 Σ 的无偏估计 (如果样本来自同一总体)。

(有时也会用 $1/n$ 作为分母, 称为 Σ 的极大似然估计, 记为 $\hat{\Sigma}_{MLE}$ 或 \tilde{S} 。)

幻灯片 44: 样本数据数字特征 (样本相关阵)

- 样本相关阵定义为:

$$R_{p \times p} = (r_{ij})_{p \times p}$$

其中 r_{ij} 是第 i 个分量和第 j 个分量的样本相关系数:

$$r_{ij} = \frac{v_{ij}}{\sqrt{v_{ii}}\sqrt{v_{jj}}} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}}\sqrt{s_{jj}}}$$

R 是总体相关矩阵的估计。对角线元素 $r_{ii} = 1$ 。

幻灯片 45: 样本均值向量用样本资料阵表示

- 令 $\mathbf{1}_n = (1, 1, \dots, 1)'$ 为 n 维全1列向量。

$$\text{数据矩阵 } \mathbf{X}_{n \times p} = \begin{pmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X'_{(1)} \\ \vdots \\ X'_{(n)} \end{pmatrix}。$$

则样本均值向量 $\bar{X}_{p \times 1}$:

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} \sum X_{a1} \\ \vdots \\ \sum X_{ap} \end{pmatrix} = \frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n$$

幻灯片上的展开形式:

$$\bar{X}_{p \times 1} = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} X_{11} & X_{21} & \cdots & X_{n1} \\ X_{12} & X_{22} & \cdots & X_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{1p} & X_{2p} & \cdots & X_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{n} \mathbf{X}'_{\text{cols as vars}} \mathbf{1}_n \text{ (这里 } \mathbf{X}_{\text{cols as vars}} \text{ 是 } n \times p \text{ 数据矩阵, 列是变量, 行是样本)}$$

或者 $\bar{X}_{p \times 1} = \frac{1}{n} [X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)}] \mathbf{1}_n$ (这里 $X_{(a)}$ 是列向量)

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum X_{(a)}$$

幻灯片最后 $\frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n$ 是正确的, 如果 \mathbf{X} 定义为行是样本, 列是变量的 $n \times p$ 矩阵。

幻灯片 46: 样本离差阵用样本资料阵表示

- 样本离差阵 $S = \sum_{a=1}^n (X_{(a)} - \bar{X})(X_{(a)} - \bar{X})'$

可以展开为:

$$S = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X'_{(a)} - \sum_{a=1}^n X_{(a)} \bar{X}' - \sum_{a=1}^n \bar{X} X'_{(a)} + \sum_{a=1}^n \bar{X} \bar{X}'$$

$$S = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X'_{(a)} - (\sum_{a=1}^n X_{(a)}) \bar{X}' - \bar{X} (\sum_{a=1}^n X_{(a)})' + n \bar{X} \bar{X}'$$

由于 $\sum X_{(a)} = n \bar{X}$:

$$S = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X'_{(a)} - n \bar{X} \bar{X}' - n \bar{X} \bar{X}' + n \bar{X} \bar{X}'$$

$$S = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X'_{(a)} - n \bar{X} \bar{X}'$$

如果 \mathbf{X} 是 $n \times p$ 数据矩阵 (行是样本 $X'_{(a)}$, 列是变量), 则 $\sum X_{(a)} X'_{(a)} = \mathbf{X}' \mathbf{X}$ (这里需要 $X_{(a)}$ 是列向量, \mathbf{X} 的列是 $X_{(a)}$, 即 $p \times n$ 矩阵)。

$$\text{如果 } \mathbf{X}_{n \times p} = \begin{pmatrix} X'_{(1)} \\ \vdots \\ X'_{(n)} \end{pmatrix}, \text{ 那么 } \mathbf{X}' \mathbf{X} = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X'_{(a)}。$$

并且 $\bar{X} = \frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n$ 。

$$n \bar{X} \bar{X}' = n \left(\frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n \right) \left(\frac{1}{n} \mathbf{1}_n' \mathbf{X} \right) = \frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' \mathbf{X}$$

$$\text{所以 } S = \mathbf{X}' \mathbf{X} - \frac{1}{n} \mathbf{X}' \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' \mathbf{X} = \mathbf{X}' \left(I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' \right) \mathbf{X}$$

$I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n'$ 是一个中心化矩阵。

(幻灯片中的 $X'X - n\bar{X}\bar{X}'$ 是正确的, 如果 X 是 $p \times n$ 矩阵, 列为样本 $X_{(a)}$ 。如果 X 是 $n \times p$ 矩阵, 行为样本 $X'_{(a)}$, 则

$S = X'X - n\bar{X}\bar{X}'$ 也是对的, 但 \bar{X} 的定义要匹配。)

更清晰的写法是 $S = \sum X_{(a)} X'_{(a)} - n \bar{X} \bar{X}'$ 。

幻灯片 47: 均值向量与协差阵的极大似然估计 (概述)

- 多元正态分布有两组参数: 均值 μ 和协差阵 Σ 。
- 在许多问题中它们是未知的, 需要通过样本数据来估计。
- 参数估计方法: 极大似然估计法 (MLE)。

幻灯片 48: 多元样本的似然函数

- 极大似然估计 是通过似然函数来求得的。
- 似然函数 可以是样本联合概率密度 $f(\mathbf{x}_{(1)}, \mathbf{x}_{(2)}, \dots, \mathbf{x}_{(n)})$ 的任意正常数倍, 记为 $L(\mu, \Sigma)$ 。

• 多元正态假定下:

由于样本 $X_{(1)}, \dots, X_{(n)}$ 独立同分布于 $N_p(\mu, \Sigma)$, 联合密度函数 (即似然函数) 为:

$$\begin{aligned} L(\mu, \Sigma) &= f(\mathbf{x}_{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{(n)}) = \prod_{a=1}^n f(\mathbf{x}_{(a)}) \\ &= \prod_{a=1}^n (2\pi)^{-p/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu) \right] \\ &= (2\pi)^{-np/2} |\Sigma|^{-n/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{a=1}^n (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu) \right] \end{aligned}$$

幻灯片 49: 极大似然估计 (对数似然和矩阵导数)

• 对数似然函数:

$$\ln L(\mu, \Sigma) = -\frac{np}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln |\Sigma| - \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)$$

• 根据矩阵代数有关运算 (矩阵求导法则):

- $\frac{\partial(x'Ax)}{\partial x} = 2Ax$ (如果 A 对称) 或 $(A + A')x$ (一般情况)。对于 $(\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)$ 对 μ 求导, 这里 $A = \Sigma^{-1}$ (对称), $x = (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)$, 对 μ 求导会多一个负号。
- $\frac{\partial \text{tr}(AB)}{\partial A} = B'$ 。
- $\frac{\partial \ln |A|}{\partial A} = (A^{-1})'$ (如果 A 对称, 则是 A^{-1})。
- 幻灯片上的 $\frac{\partial(X'AX)}{\partial X} = 2AX$ (假设 A 对称)。
- $\frac{\partial \text{tr}(X'AX)}{\partial A} = XX'$ (这里 X 被看作常数)。实际上是 $\frac{\partial \mathbf{x}' A \mathbf{x}}{\partial A} = \mathbf{x} \mathbf{x}'$ 。
- $\frac{\partial \ln |A|}{\partial A} = A^{-1}$ (如果 A 对称且可逆)。

指数项可以写成迹的形式: $(\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu) = \text{tr}((\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)) = \text{tr}(\Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)(\mathbf{x}_{(a)} - \mu)')$ 。

幻灯片 50: 极大似然估计 (结果)

对 $\ln L(\mu, \Sigma)$ 分别对 μ 和 Σ^{-1} (或 Σ) 求导, 并令导数为0。

• 对 μ 求导并令其为0:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln L(\mu, \Sigma)}{\partial \mu} &= -\frac{1}{2} \sum_{a=1}^n [-2 \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)] = \sum_{a=1}^n \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_{(a)} - \mu) = 0 \\ \text{由于 } \Sigma^{-1} \text{ 可逆, 所以 } \sum_{a=1}^n (\mathbf{x}_{(a)} - \mu) &= 0 \implies n\bar{X} - n\mu = 0 \implies \hat{\mu} = \bar{X}. \\ \hat{\mu}_{MLE} &= \bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n X_{(a)} \end{aligned}$$

• 对 Σ^{-1} 求导并令其为0 (或用更复杂的对 Σ 求导):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln L(\mu, \Sigma)}{\partial \Sigma} &= -\frac{n}{2} \Sigma^{-1} + \frac{1}{2} \Sigma^{-1} \left(\sum_{a=1}^n (\mathbf{x}_{(a)} - \mu)(\mathbf{x}_{(a)} - \mu)' \right) \Sigma^{-1} = 0 \\ \text{(这里使用了 } \frac{\partial \ln |\Sigma|}{\partial \Sigma} &= \Sigma^{-1} \text{ 和 } \frac{\partial \text{tr}(A \Sigma^{-1} B)}{\partial \Sigma} = -(\Sigma^{-1} B A \Sigma^{-1})' \text{。)} \\ \text{这会导致 } \hat{\Sigma}_{MLE} &= \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n (X_{(a)} - \hat{\mu})(X_{(a)} - \hat{\mu})' = \frac{1}{n} S \text{ (其中 } S \text{ 是样本离差阵)。} \\ \hat{\Sigma}_{MLE} &= \frac{1}{n} S = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n (X_{(a)} - \bar{X})(X_{(a)} - \bar{X})' \end{aligned}$$

- 多元正态总体的均值向量的极大似然估计量就是样本均值向量。
- 协差阵的极大似然估计就是样本离差阵 S/n 。(这是一个有偏估计, 但具有一致性)

幻灯片 51: 估计量的性质

μ 和 Σ 的估计量有如下基本性质:

1. $E(\bar{X}) = \mu$, 即 \bar{X} 是 μ 的无偏估计。
 $E(\frac{1}{n} S) = \frac{n-1}{n} \Sigma$, 即 $\frac{1}{n} S$ 不是 Σ 的无偏估计 (是有偏的)。
 而 $E(\frac{1}{n-1} S) = \Sigma$, 即样本协方差矩阵 $V = \frac{1}{n-1} S$ 是 Σ 的无偏估计。
2. $\bar{X}, \frac{1}{n-1} S$ 分别是 μ, Σ 的有效估计 (最小方差无偏估计, MVUE, 在某些条件下)。
3. $\bar{X}, \frac{1}{n} S$ (或 $\frac{1}{n-1} S$) 分别是 μ, Σ 的一致估计 (强相合估计)。
 一致性意味着当样本量 $n \rightarrow \infty$ 时, 估计量收敛到真值。

幻灯片 52: 估计量性质的证明 (部分)

- $E(\bar{X}) = E\left[\frac{1}{n} \sum_a X_{(a)}\right] = \frac{1}{n} \sum_a E[X_{(a)}] = \frac{1}{n} \sum_a \mu = \frac{1}{n} n\mu = \mu$

- $E(\frac{1}{n}S) = \frac{1}{n}E\left[\sum_a (X_{(a)} - \bar{X})(X_{(a)} - \bar{X})'\right]$

这里用了一个技巧:

$$S = \sum_a (X_{(a)} - \mu - (\bar{X} - \mu))(X_{(a)} - \mu - (\bar{X} - \mu))'$$

$$= \sum_a (X_{(a)} - \mu)(X_{(a)} - \mu)' - n(\bar{X} - \mu)(\bar{X} - \mu)'$$

$$E(S) = \sum_a E[(X_{(a)} - \mu)(X_{(a)} - \mu)'] - nE[(\bar{X} - \mu)(\bar{X} - \mu)']$$

$$E[(X_{(a)} - \mu)(X_{(a)} - \mu)'] = D(X_{(a)}) = \Sigma$$

$$E[(\bar{X} - \mu)(\bar{X} - \mu)'] = D(\bar{X}) = D(\frac{1}{n}\sum X_{(a)}) = \frac{1}{n^2}\sum D(X_{(a)}) \text{ (因为独立)} = \frac{1}{n^2}n\Sigma = \frac{1}{n}\Sigma$$

$$\text{所以 } E(S) = n\Sigma - n(\frac{1}{n}\Sigma) = n\Sigma - \Sigma = (n-1)\Sigma.$$

$$\text{因此 } E(\frac{1}{n}S) = \frac{n-1}{n}\Sigma.$$

幻灯片中的推导步骤:

$$E(\frac{1}{n}S) = \frac{1}{n}E[\sum_a (X_{(a)} - \mu)(X_{(a)} - \mu)' - n(\bar{X} - \mu)(\bar{X} - \mu)']$$

$$= \frac{1}{n}[\sum_a D(X_{(a)}) - nD(\bar{X})]$$

$$= \frac{1}{n}[n\Sigma - n(\frac{1}{n}\Sigma)] = \frac{1}{n}[n\Sigma - \Sigma] = \frac{n-1}{n}\Sigma.$$

这个推导是正确的。

幻灯片 53: 估计量的性质 (定理 2.2)

定理 2.2 设 \bar{X} 和 S 分别是正态总体 $N_p(\mu, \Sigma)$ 的样本均值向量和离差阵, 则:

1. $\bar{X} \sim N_p(\mu, \frac{1}{n}\Sigma)$

(因为 \bar{X} 是独立同正态分布随机向量的线性组合, 所以仍服从正态分布。其均值和协方差矩阵如上页计算)。

2. 离差阵 S 可以写为 $S = \sum_{a=1}^{n-1} Z_a Z_a'$

其中, Z_1, \dots, Z_{n-1} 独立同分布于 $N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$ 。

这表明 S 服从 Wishart 分布 $W_p(n-1, \Sigma)$ (见后续幻灯片)。

3. \bar{X} 和 S 相互独立。

这是正态样本的一个非常重要的性质, 类似于一元情况下样本均值和样本方差的独立性。

4. S 为正定阵的充要条件是 $n > p$ (或 $n-1 \geq p$ 使得 Wishart 分布非退化)。

如果 $n \leq p$, 则 S 几乎必然是奇异的。

幻灯片 54: 相关系数的极大似然估计

- 相关系数 $\rho_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}$ 的极大似然估计为:

利用极大似然估计的不变性, 将 Σ 的 MLE $\hat{\Sigma}_{MLE} = \frac{1}{n}S = (\frac{s_{ij}}{n})$ 代入。

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\hat{\sigma}_{ij}}{\sqrt{\hat{\sigma}_{ii}\hat{\sigma}_{jj}}} = \frac{s_{ij}/n}{\sqrt{s_{ii}/n \sqrt{s_{jj}/n}}} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}s_{jj}}}$$

这与样本相关系数 r_{ij} 的定义一致。

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^n (X_{ki} - \bar{X}_i)(X_{kj} - \bar{X}_j)}{\sqrt{\sum_{k=1}^n (X_{ki} - \bar{X}_i)^2} \sqrt{\sum_{k=1}^n (X_{kj} - \bar{X}_j)^2}}$$

- 其中 $\hat{\Sigma} = (\hat{\sigma}_{ij})$ 是 Σ 的 MLE, $\bar{X} = (\bar{X}_1, \dots, \bar{X}_p)'$, $S = (s_{ij})$ 。

- S 为样本离差矩阵, r_{ij} 为样本相关系数, $R = (r_{ij})$ 为样本相关矩阵。

幻灯片 55: \bar{X} 的抽样分布

• 正态总体:

设 $X \sim N_p(\mu, \Sigma)$, $\Sigma > 0$ 。 $X_{(1)}, \dots, X_{(n)}$ 是来自该总体的样本, 则

$$\bar{X} \sim N_p(\mu, \frac{1}{n}\Sigma)$$

(已在定理 2.2 中给出)

• 非正态总体 (中心极限定理):

设 $X_{(1)}, \dots, X_{(n)}$ 是来自某总体 X (不一定是正态的, 但有均值 μ 和协方差矩阵 Σ) 的一个样本。

则当 n 很大且相对于 p 也很大时, 上述 $\bar{X} \sim N_p(\mu, \frac{1}{n}\Sigma)$ 近似地成立。

这是多元中心极限定理。

幻灯片 56: S 的分布——Wishart分布 (定义)

- 维希特 (Wishart) 分布是 Wishart 在1928年推导出来的。
- 是一元 χ^2 (卡方) 分布的推广, 也是构成其它重要分布 (如 Hotelling's T^2) 的基础。
- **定义2.10:** 设 $X_{(a)} = (X_{a1}, \dots, X_{ap})' \sim N_p(\mu_a, \Sigma)$, $a = 1, 2, \dots, n$, 且相互独立。
则由 $X_{(a)}$ 组成的随机矩阵:
$$W_{p \times p} = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X_{(a)}'$$

的分布称为 **非中心Wishart分布**, 记为 $W_p(n, \Sigma, Z)$ (这里的 Z 是非中心参数矩阵, 与 μ_a 有关)。
非中心参数矩阵 $Z = (\sum_{a=1}^n \mu_{a,i} \mu_{a,j})$ 或更通常地通过 $\mathbf{M}'\mathbf{M}$ 定义, 其中 $\mathbf{M}_{n \times p} = (\mu_1, \dots, \mu_n)'$ 。
幻灯片中 $Z = (\mu_{a1}, \dots, \mu_{ap})(\mu_{a1}, \dots, \mu_{ap})'$ 应该是 $Z = \sum_{a=1}^n \mu_a \mu_a'$ 。

幻灯片 57: Wishart分布 (中心Wishart)

- 当 $\mu_a = \mathbf{0}$ 对所有 a 成立时 (即 $X_{(a)} \sim N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$), 称为 **中心Wishart分布**, 记为 $W_p(n, \Sigma)$ 。
此时 $W = \sum_{a=1}^n X_{(a)} X_{(a)}'$ 。
这里的 n 称为自由度。
- 当 $n \geq p, \Sigma > 0$, $W_p(n, \Sigma)$ 有密度存在, 其表达式为:
$$f(w) = \frac{|w|^{(n-p-1)/2} \exp(-\frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1}w))}{2^{np/2} \pi^{p(p-1)/4} |\Sigma|^{n/2} \prod_{i=1}^p \Gamma(\frac{n-i+1}{2})}$$

当 w 为正定阵时。其它情况 $f(w) = 0$ 。
 $\Gamma(\cdot)$ 是伽马函数。
- 显然, 当 $p = 1, \Sigma = \sigma^2$ 时, $X_{(a)}$ 是一维正态 $N(0, \sigma^2)$ 。
 $W = \sum_{a=1}^n X_{(a)}^2$ 。
 $\frac{W}{\sigma^2} = \sum_{a=1}^n (X_{(a)}/\sigma)^2$ 。由于 $X_{(a)}/\sigma \sim N(0, 1)$, 所以 $\frac{W}{\sigma^2} \sim \chi^2(n)$ 。
 $f(w)$ 就是 $\sigma^2 \chi^2(n)$ 的分布密度 (经过变量变换 $w \rightarrow w/\sigma^2$)。
- 因此, **Wishart分布是 χ^2 分布在 p 维正态情况下的推广**。
样本离差阵 $S = \sum_{a=1}^{n-1} Z_a Z_a'$ (定理2.2), 其中 $Z_a \sim N_p(\mathbf{0}, \Sigma)$ i.i.d., 所以 $S \sim W_p(n-1, \Sigma)$ 。

幻灯片 58: Wishart分布的基本性质

1. 若 $X_{(a)} \sim N_p(\mu, \Sigma)$, $a = 1, \dots, n$ 且相互独立, 则样本离差阵
 $S = \sum_{a=1}^n (X_{(a)} - \bar{X})(X_{(a)} - \bar{X})' \sim W_p(n-1, \Sigma)$ 。
其中 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum X_{(a)}$ 。
自由度为 $n-1$ 而不是 n 是因为减去了样本均值 \bar{X} , 损失了一个自由度。
2. 若 $S_i \sim W_p(n_i, \Sigma)$, $i = 1, \dots, k$, 且相互独立, 则
 $\sum_{i=1}^k S_i \sim W_p(\sum_{i=1}^k n_i, \Sigma)$
Wishart 分布具有可加性 (对于相同的 Σ)。
3. 若 $X_{p \times p} \sim W_p(n, \Sigma)$, $C_{p \times p}$ 为非奇异阵 (可逆矩阵), 则
 $CXC' \sim W_p(n, C\Sigma C')$
这是 Wishart 分布的线性变换性质。

幻灯片 59: 随机向量 \rightarrow 随机矩阵的分布

- 可以利用已知向量分布的定义给出矩阵分布的定义。
- 设随机矩阵:
$$X_{n \times p} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{np} \end{pmatrix}$$
- 将该矩阵的列向量 (或行向量) 一个接一个地连接起来, 组成一个长的向量, 即拉直向量 (vectorization, vec operator):
 $\text{vec}(X) = (X_{11}, X_{21}, \dots, X_{n1}, X_{12}, X_{22}, \dots, X_{n2}, \dots, X_{1p}, X_{2p}, \dots, X_{np})'$ (按列拉直)
这个 $np \times 1$ 维的拉直向量的分布, 定义为该阵的分布。
例如, 如果 $\text{vec}(X)$ 服从 np 元正态分布, 则称矩阵 X 服从矩阵正态分布。

幻灯片 60: 多元正态分布参数估计的计算机实现

这页只是一个标题页，表明后续可能涉及：

- (一) 均值向量的估计
 - (二) 协差阵的估计
- 在实际软件 (如 R, Python, SAS, SPSS) 中如何计算这些估计量。

学习这些内容时，关键在于理解每个概念的定义、几何意义 (如协方差和相关性如何影响数据点的散布形状) 以及它们之间的联系 (如协方差阵与相关阵的关系，正态分布中独立与不相关的等价性等)。

祝您学习顺利！