

Stokastiska vektorer och multivariat normalfördelning

Johan Thim (johan.thim@liu.se)

13 november 2018

1 Repetition



Definition. Låt X och Y vara stokastiska variabler med $E(X) = \mu_X$, $V(X) = \sigma_X^2$, $E(Y) = \mu_Y$ samt $V(Y) = \sigma_Y^2$. Kovariansen $C(X, Y)$ definieras enligt

$$C(X, Y) = E((X - \mu_X)(Y - \mu_Y))$$

och korrelationen mellan X och Y enligt

$$\rho(X, Y) = \frac{C(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y}.$$

Både kovarians och korrelation är ett mått på linjärt beroende mellan X och Y där korrelationen är normerad så det går att jämföra olika fall. Vi listar lite kända egenskaper.

- (i) Om $C(X, Y) = 0$ kallas X och Y för okorrelerade.
- (ii) $C(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y)$.
- (iii) Om X och Y är oberoende så är $C(X, Y) = 0$.
- (iv) $C(X, X) = V(X)$.
- (v) $C\left(a_0 + \sum_{i=1}^m a_i X_i, b_0 + \sum_{j=1}^n b_j Y_j\right) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_i b_j C(X_i, Y_j)$.
- (vi) $|\rho(X, Y)| \leq 1$ med likhet om och endast om det finns ett linjärt samband mellan X och Y .



Observera att $C(X, Y) = 0$ *inte* nödvändigtvis innebär oberoende. Låt till exempel X vara rektangelfördelad enligt $X \sim \text{Re}(-1, 1)$ och definiera $Y = X^2$. Uppenbarligen beroende variabler, men

$$C(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y) = E(X^3) - 0 \cdot E(Y) = E(X^3) = \int_{-1}^1 x^3 \cdot \frac{1}{2} dx = 0,$$

så X och Y är okorrelerade.

2 Vektorer av stokastiska variabler

Låt $\mathbf{X} = (X_1 \ X_2 \ \dots \ X_n)^T$ vara en vektor vars komponenter är stokastiska variabler. Vi strävar efter att skriva vektorer som kolonnvektorer. Det faller sig naturligt att definiera väntevärdet av \mathbf{X} genom **väntevärdesvektorn**

$$E(\mathbf{X}) = (E(X_1) \ E(X_2) \ \dots \ E(X_n))^T.$$

På samma sätt definierar vi väntevärdet av en matris av stokastiska variabler. Variansen blir lite konstigare så vi introducerar **kovariansmatrisen** mellan två vektorer (av samma dimension). Låt $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)^T$ och definiera $C(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ enligt

$$C(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \dots & c_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C(X_1, Y_1) & C(X_1, Y_2) & \dots & C(X_1, Y_n) \\ C(X_2, Y_1) & C(X_2, Y_2) & \dots & C(X_2, Y_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C(X_n, Y_1) & C(X_n, Y_2) & \dots & C(X_n, Y_n) \end{pmatrix}$$

där c_{ij} är kovariansen mellan X_i och Y_j .

En stor anledning att blanda in vektorer och matriser är givetvis att få tillgång till maskineriet från linjär algebra. Kovariansen mellan två vektorer \mathbf{X} och \mathbf{Y} kan då lite mer kompakt skrivas

$$C(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = E((\mathbf{X} - E(\mathbf{X}))(\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y}))^T) = E(\mathbf{X}\mathbf{Y}^T) - E(\mathbf{X})E(\mathbf{Y})^T,$$

där $(\cdot)^T$ innebär transponering. En produkt $A = \mathbf{x}\mathbf{y}^T$ brukar kallas för den yttre produkten och består av element $(a)_{ij} = x_i y_j$, $i, j = 1, 2, \dots, n$. Detta är alltså *inte* skalärprodukten ($\mathbf{X}^T \mathbf{Y}$). Låt $A, B \in \mathbf{R}^{n \times n}$ vara matriser. Då är $A\mathbf{X}$ en linjärkombination av X_1, X_2, \dots, X_n och $B\mathbf{Y}$ en linjärkombination av Y_1, Y_2, \dots, Y_n . Dessutom kan *alla* linjärkombinationer skrivas på detta sätt. Vidare gäller nu tack varje linjäriteten att $E(A\mathbf{X}) = AE(\mathbf{X})$ och

$$\begin{aligned} C(A\mathbf{X}, B\mathbf{Y}) &= E(A\mathbf{X}(B\mathbf{Y})^T) - E(A\mathbf{X})E(B\mathbf{Y})^T = AE(\mathbf{X}\mathbf{Y}^T)B^T - AE(\mathbf{X})E(\mathbf{Y})^T B^T \\ &= AC(\mathbf{X}, \mathbf{Y})B^T. \end{aligned}$$

Notationen $\text{cov}(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ är också vanligt förekommande, och i fallet då $\mathbf{Y} = \mathbf{X}$ skriver vi ofta

$$C_{\mathbf{X}} = \text{cov}(\mathbf{X}) = C(\mathbf{X}, \mathbf{X}).$$



Exempel

Låt $\mathbf{X} = (X_1 \ X_2)^T$ vara en stokastisk variabel med $E(\mathbf{X}) = (1 \ 2)^T$ och $C_{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}$.
Hitta en prediktor $\hat{X}_2 = aX_1 + b$ så att $E(\hat{X}_2) = E(X_2)$ och $V(X_2 - \hat{X}_2)$ är minimal.

Lösning. Vi ser direkt att

$$E(aX_1 + b) = aE(X_1) + b = a + b \quad \text{och} \quad E(X_2) = 2,$$

så $a + b = 2$. Vidare gäller att

$$X_2 - (aX_1 + b) = \begin{pmatrix} -a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} - b,$$

så

$$\begin{aligned} V(X_2 - aX_1 - b) &= V\left(\begin{pmatrix} -a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} -a & 1 \end{pmatrix} C_{\mathbf{X}} \begin{pmatrix} -a \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -a \\ 1 \end{pmatrix} = a^2 + 4a + 4 = (a + 2)^2. \end{aligned}$$

Minimum sker uppenbarligen när $a = -2$, vilket ger att $b = 4$.

3 Skattningar för kovarians och korrelation

Om vi har ett stickprov (x_k, y_k) , $k = 1, 2, \dots, n$, där (X_k, Y_k) är stokastiska variabler med samma fördelning, så skattar vi kovariansen C med

$$\hat{c} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})(y_k - \bar{y})$$

och korrelationen med

$$\hat{\rho} = \frac{\hat{c}}{s_x s_y} = \frac{\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})(y_k - \bar{y})}{\left(\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})^2\right)^{1/2} \left(\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})^2\right)^{1/2}}.$$

Av tradition betecknar man ofta $\hat{\rho} = r$. En naturlig fråga i detta skede är om vi kan säga något om fördelningen för den skatta korrelationen under något lämpligt antagande om det slumpmässiga stickprovet. Vi återkommer i fallet med normalfördelning i nästa avsnitt.

4 Multivariat normalfördelning

"Pain has a face. Allow me to show it to you."

–Pinhead

Vi har stött på den flerdimensionella normalfördelningen tidigare, men vi kan formulera det hela lite mer kompakt på följande sätt.



Multivariat normalfördelning

Definition. Vi säger att \mathbf{Y} har en **multivariat normalfördelning** om det finns en konstant vektor $\boldsymbol{\mu} \in \mathbf{R}^n$ och en konstant matris $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times m}$ så att $\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{A}\mathbf{X}$, där \mathbf{X} är en vektor med stokastiska variabler, $\mathbf{X} = (X_1 \ X_2 \ \dots \ X_m)^T$, och $X_i \sim N(0, 1)$ är oberoende.

Är definitionen vettig? Ja, den reducerar åtminstone till det förväntade resultatet om $n = 1$: $Y = \mu + \sigma^2 X$ där $X \sim N(0, 1)$. Vidare gäller så klart att

$$E(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu} + E(\mathbf{A}\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu}$$

och

$$C_{\mathbf{Y}} = \mathbf{A}C_{\mathbf{X}}\mathbf{A}^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$$

eftersom $C_{\mathbf{X}}$ är identitetsmatrisen (variablerna är oberoende om har varians 1).



Exempel

Låt $\mathbf{X} \sim N\left(\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\right)$. Bestäm väntevärde och varians för $Y = X_1 + X_2$.

Lösning. Vi skriver $Y = (1 \ 1)(X_1 \ X_2)^T = \mathbf{A}\mathbf{X}$. Då blir

$$E(Y) = \mathbf{A}E(X) = (1 \ 1)(1 \ -1)^T = 0$$

och

$$C_Y = \mathbf{A}C_X\mathbf{A}^T = (1 \ 1) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} (1 \ 1)^T = 5.$$

Är det klart att $Y \sim N(0, \sqrt{5})$?



Sats. Om \mathbf{Y} har väntevärdesvektorn $\boldsymbol{\mu}$ och en kovariansmatris $\boldsymbol{\Sigma}$ som uppfyller att $\det \boldsymbol{\Sigma} \neq 0$ så gäller att \mathbf{Y} har multivariat normalfördelning om och endast om \mathbf{Y} har den simultana täthetsfunktionen

$$f_{\mathbf{Y}}(y_1, y_2, \dots, y_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det \boldsymbol{\Sigma}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\right), \quad \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n.$$

Bevis. Eftersom kovariansmatrisen $\boldsymbol{\Sigma}$ alltid är positivt semidefinit (varför?) och vi antar att determinanten $|\boldsymbol{\Sigma}| := \det \boldsymbol{\Sigma} \neq 0$, så är $\boldsymbol{\Sigma}$ positivt semidefinit och då finns alltid en inverterbar matris $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ sådan att $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$. Definiera $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \boldsymbol{\mu}$, där $\mathbf{X} = (X_1 \ X_2 \ \dots \ X_n)^T$ och $X_k \sim N(0, 1)$ är oberoende. Täthetsfunktionen för \mathbf{X} ges då av

$$f_{\mathbf{X}}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{x}\right), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n.$$

Enligt transformationssatsen för flerdimensionella stokastiska variabler så kommer

$$f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) = f_{\mathbf{X}}\left(\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\right) \left| \frac{d(x_1, x_2, \dots, x_n)}{d(y_1, y_2, \dots, y_n)} \right|.$$

eftersom $\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu})$. Vi ser att jacobianen ges av

$$\frac{d(x_1, x_2, \dots, x_n)}{d(y_1, y_2, \dots, y_n)} = |\mathbf{A}^{-1}| = |\mathbf{A}|^{-1},$$

så

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} |\mathbf{A}|^{-1} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}))^T (\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}))\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} |\mathbf{A}\mathbf{A}^T|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^T (\mathbf{A}^{-1})^T \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} |\mathbf{A}\mathbf{A}^T|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\right), \end{aligned}$$

där vi utnyttjat att $|\mathbf{A}|^{-1} = |\mathbf{A}|^{-1/2} |\mathbf{A}^T|^{-1/2} = |\mathbf{A}\mathbf{A}^T|^{-1/2}$.

Omvänt, om \mathbf{Y} är normalfördelad så säger definitionen att det finns en matris $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times m}$ och en vektor $\boldsymbol{\mu} \in \mathbf{R}^n$ så att $\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \boldsymbol{\mu}$ för $\mathbf{X} = (X_1 \ X_2 \ \dots \ X_m)^T$ där $X_k \sim N(0, 1)$ är oberoende. Faktum är att $m = n$ är nödvändigt då $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$ antas vara inverterbar, eftersom $n = \text{rank}(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) \leq \min\{\text{rank}(\mathbf{A}), \text{rank}(\mathbf{A}^T)\}$ (ty vid produkter av matriser vinner alltid den med lägst rank) och $\text{rank}(\mathbf{A}^T) = \text{rank}(\mathbf{A})$, så $\text{rank}(\mathbf{A}) = n$ eftersom vi har n kolonner. Argumentet ovan visar nu att täthetsfunktionen ges av uttrycket i satsen. \square



Exempel

Låt $X_1, X_2 \sim N(0, 1)$ vara oberoende och definiera $\mathbf{Y} = (X_1 - X_2, 2X_1 + X_2)$. Bestäm täthetsfunktionen för \mathbf{Y} .

Lösning. Vi skriver

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}, \quad \text{där } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Då blir

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} = E \left(\mathbf{A} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} \right) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{0} = \mathbf{0}$$

och

$$C_{\mathbf{Y}} = \mathbf{A} C_{\mathbf{X}} \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Således blir det $C_{\mathbf{Y}} = 9$ och

$$C_{\mathbf{Y}}^{-1} = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 5 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Alltså blir

$$f_{\mathbf{Y}}(y_1, y_2) = \frac{1}{6\pi} \exp \left(-\frac{1}{18} (5y_1^2 - 2y_1y_2 + 2y_2^2) \right)$$

ty

$$(y_1 \ y_2) \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 5 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{9} (5y_1^2 - 2y_1y_2 + 2y_2^2).$$



Sats. Låt $\mathbf{Z} = \mathbf{d} + \mathbf{B}\mathbf{Y}$, där \mathbf{Y} är multivariat normalfördelat. Då är även \mathbf{Z} multivariat normalfördelat.

Bevis. Följer direkt från definitionen.



Sats. För $\mathbf{Y} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ gäller att komponenterna i \mathbf{Y} är oberoende om och endast om $\boldsymbol{\Sigma}$ är en diagonalmatris (under förutsättning att \mathbf{A} är inverterbar).

Bevis. Kravet på att \mathbf{A} ska vara inverterbar följer av att om så icke är fallet så är fördelningen degenererad eftersom $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ har oändligt många lösningar. Det är alltså självklart i detta läge att komponenterna i \mathbf{Y} inte kan vara oberoende. Så antag nu att $\det \mathbf{A} \neq 0$.

Den ena riktningen är mer eller mindre självklar eftersom om komponenterna i \mathbf{Y} är oberoende kommer $C(Y_i, Y_j) = 0$ för $i \neq j$ och $C(Y_i, Y_i) = \sigma_i^2$, så $C_{\mathbf{Y}}$ blir en diagonalmatris.

Antag nu att $C_{\mathbf{Y}}$ är en diagonalmatris, säg

$$\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}.$$

Eftersom $C_{\mathbf{Y}} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$ kommer $C_{\mathbf{Y}}$ att vara inverterbar, vilket innebär att samtliga $\sigma_i^2 \neq 0$. Inversen $C_{\mathbf{Y}}^{-1}$ är även den en diagonalmatrisen med diagonalelementen σ_i^{-2} . Således blir den simultana täthetsfunktionen

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det C_{\mathbf{Y}}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\right) \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n \sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_n} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (y_j - \mu_j) \sigma_j^{-2} (y_j - \mu_j)\right) \\ &= \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sigma_j \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(y_j - \mu_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) = \prod_{j=1}^n f_{Y_j}(y_j). \end{aligned}$$

Eftersom den simultana täthetsfunktionen ges av produkten av täthetsfunktionerna för Y_j följer det att variablerna är oberoende. \square