

Η πολυδιάστατη κανονική κατανομή

Ορίζουμε την τυπική πολυδιάστατη κανονική, σαν την κατανομή του τυχαίου διανύσματος $X = (X_1, \dots, X_n)^T$, όπου $X_i \sim N(0,1)$ και όλα τα X_i μεταξύ τους ανεξάρτητα. Τότε

$$\begin{aligned} f_X(x) &= f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = N(x_1 | 0, 1) \cdots N(x_n | 0, 1) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n x_i^2\right) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} x^T x\right). \end{aligned}$$

Εμφανώς οι περιθώριες είναι όλες τυπικές κανονικές εφόσον

$$\begin{aligned} f_{X_i}(x_i) &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} f_X(x) \prod_{j \neq i} dx_j = N(x_i | 0, 1) \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \prod_{j \neq i} N(x_j | 0, 1) dx_j \\ &= N(x_i | 0, 1) \prod_{j \neq i} \int_{\mathbb{R}} N(x_j | 0, 1) dx_j = N(x_i | 0, 1). \end{aligned}$$

Η μέση τιμή του X είναι το μηδενικό διάνυσμα $\mathcal{O}^T = (0, \dots, 0)$

$$\mu_X = \mathbb{E}(X) = \mathbb{E}\left((X_1, \dots, X_n)^T\right) = (\mathbb{E}(X_1), \dots, \mathbb{E}(X_n))^T = (0, \dots, 0)^T = \mathcal{O}.$$

Ορίζουμε τον πίνακα συνδιασποράς του τυχαίου διανύσματος X , σαν τον πίνακα $\mathbb{V}(X)$ (εναλλακτικός συμβολισμός Σ_X είτε Σ) με ij -στοιχείο

$$(\mathbb{V}(X))_{ij} = \text{Cov}(X_i, X_j) = \sigma_{ij}.$$

Επειδή $(X - \mu) \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ και $(X - \mu)^T \in \mathbb{R}^{1 \times n}$, το γινόμενο (outer product) του διανύσματος $(X - \mu)$ με το διάνυσμα $(X - \mu)^T$, θα έχει διάσταση $n \times n$

$$(X - \mu)(X - \mu)^T = ((X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)) \in \mathbb{R}^{n \times n}.$$

Παίρνοντας μέση τιμή έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(X) &= \mathbb{E}\left[\left((X_i - \mu_{X_i})(X_j - \mu_{X_j})\right)\right] \\ &= \left(\mathbb{E}\left[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)\right]\right) = (\text{Cov}(X_i, X_j)) = (\sigma_{ij}). \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας $\mathbb{V}(X)$ είναι συμμετρικός, με διαγώνια στοιχεία τις περιθώριες διασπορές $\sigma_{ii} = \sigma_i^2$.

Πιο συγκεκριμένα, για την τυπική πολυδιάστατη κανονική έχουμε

$$\mathbb{V}(X) = \mathbb{E}[(X - \mathcal{O})(X - \mathcal{O})^T] = \mathbb{E}[X X^T] = \mathbb{E}[(X_i X_j)] = (\mathbb{E}[X_i X_j]) = (\delta_{ij}) = \mathbb{I}_n$$

Συμβολίζουμε την τυπική πολυδιάστατη κανονική ως

$$N_n(x | \mathcal{O}_n, \mathbb{I}_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} x^T x\right) \Leftrightarrow X \sim N_n(\mathcal{O}_n, \mathbb{I}_n).$$

Θέτοντας για $A = (a_{ij})$ με $\det(A) \neq 0$ και $A^{-1} = (b_{ij})$

$$Y = T(X) = \mu + AX \Leftrightarrow X = T^{-1}(Y) = A^{-1}(Y - \mu),$$

ή ισοδύναμα σε συντεταγμένες, για $i = 1, \dots, n$

$$Y_i = T(X_1, \dots, X_n) = \mu_i + \sum_{k=1}^n a_{ik} X_k \Leftrightarrow X_i = T^{-1}(Y_1, \dots, Y_n) = \sum_{k=1}^n b_{ik} (Y_k - \mu_k).$$

Η ιακωβιανή ορίζουσα του αντίστροφου μετασχηματισμού

$$Jac(T^{-1}) = \frac{\partial(x_1, \dots, x_n)}{\partial(y_1, \dots, y_n)} = \frac{\partial x}{\partial y},$$

είναι η ορίζουσα των μερικών παραγώγων

$$\frac{\partial x_i}{\partial y_j} = \frac{\partial}{\partial y_j} \left[\sum_{k=1}^n b_{ik} (y_k - \mu_k) \right] = b_{ij} \Rightarrow Jac(T^{-1}) = \det(A^{-1}) = \det(A)^{-1}.$$

Έτσι η πυκνότητα του Y τυχαίου διανύσματος είναι

$$\begin{aligned} f_Y(y) &= f_X(T^{-1}(y)) |Jac(T^{-1})| = \frac{1}{|\det(A)|} f_X(A^{-1}(y - \mu)) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\det(A)|} \exp\left(-\frac{1}{2} (A^{-1}(y - \mu))^T (A^{-1}(y - \mu))\right). \end{aligned}$$

Επειδή

$$|\det(A)| = \sqrt{\det(A)^2} = \sqrt{\det(A)\det(A^T)} = \sqrt{\det(AA^T)},$$

και

$$\begin{aligned} (A^{-1}(y-\mu))^T (A^{-1}(y-\mu)) &= (y-\mu)^T A^{-T} A^{-1}(y-\mu) \\ &= (y-\mu)^T (AA^T)^{-1}(y-\mu), \end{aligned}$$

παίρνουμε

$$f_Y(y) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{\det(AA^T)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y-\mu)^T (AA^T)^{-1}(y-\mu)\right).$$

Συμβολίζοντας με $\Sigma = \Sigma_Y = AA^T$ τον πίνακα συνδιασποράς του τυχαίου διανύσματος Y , η πυκνότητα γίνεται

$$f_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\Sigma)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(y-\mu)^T \Sigma^{-1}(y-\mu)\right) = N_n(y | \mu, \Sigma)$$

ή ότι $Y \sim N_n(\mu, \Sigma)$. Ο πίνακας συνδιασποράς Σ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, το τελευταίο σημαίνει ότι εάν $Q(y | \mu, \Sigma) = (y-\mu)^T \Sigma^{-1}(y-\mu)$ τότε $\min_{y \in \mathbb{R}^n} (y-\mu)^T \Sigma^{-1}(y-\mu) = Q(\mu | \mu, \Sigma) = 0$.

Εφαρμογή

Εάν $Y \sim N_n(\mu, \Sigma)$, και τα Y_i είναι μεταξύ τους ορθογώνια (γραμμικά ασυσχέτιστα),

δηλαδή $Cov(Y_i, Y_j) = \begin{cases} \sigma_i^2, & j=i \\ 0, & j \neq i \end{cases}$ τότε τα Y_i είναι μεταξύ τους ανεξάρτητα

Ο πίνακας συνδιασποράς είναι:

$$\Sigma = (\sigma_i^2 \delta_{ij}) = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2) \Leftrightarrow \Sigma^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \dots, \frac{1}{\sigma_n^2}\right)$$

$$Q(y) = (y-\mu)^T \Sigma^{-1}(y-\mu) = (y-\mu)^T \text{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1^2}, \dots, \frac{1}{\sigma_n^2}\right)(y-\mu)$$

$$= \left(\frac{y_1 - \mu_1}{\sigma_1^2}, \dots, \frac{y_n - \mu_n}{\sigma_n^2} \right) (y - \mu) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \mu_i}{\sigma_i} \right)^2$$

Έτσι έχουμε

$$\begin{aligned} f_Y(y) &= \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\Sigma)}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \mu_i}{\sigma_i}\right)^2\right) \\ &= \frac{1}{(\sigma_1 \sqrt{2\pi}) \cdots (\sigma_n \sqrt{2\pi})} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - \mu_i}{\sigma_i}\right)^2\right) \\ &= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - \mu_i}{\sigma_i}\right)^2\right) = \prod_{i=1}^n N(y_i | \mu_i, \sigma_i^2) = \prod_{i=1}^n f_{Y_i}(y_i), \end{aligned}$$

που σημαίνει ότι τα Y_i είναι μεταξύ τους ανεξάρτητα.

Ορισμός: Ένας πίνακας $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ λέμε ότι είναι **θετικά ορισμένος** εάν είναι συμμετρικός και η τετραγωνική μορφή¹ $Q(x|\Sigma) = x^T \Sigma x$, όπου $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, είναι θετική για κάθε $x \in \mathbb{R}_*^{n \times 1} = \mathbb{R}^{n \times 1} \setminus \{\mathcal{O}_n\}$, δηλαδή:

1. $\Sigma = \Sigma^T$.
2. $Q(x|\Sigma) = x^T \Sigma x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sigma_{ij} x_i x_j > 0, \forall x \in \mathbb{R}_*^{n \times 1}$.

Στην περίπτωση θετικά ημιορισμένου πίνακα ζητάμε $Q(x|\Sigma) \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$.

Στον πιο πάνω ορισμό το 2 είναι ισοδύναμο με το να ζητήσουμε η συνάρτηση $Q(x_1, \dots, x_n | \Sigma)$ να έχει ολικό ελάχιστο στο \mathcal{O}_n , ή ότι,

$$0 = Q(\mathcal{O}_n | \Sigma) < Q(x_1, \dots, x_n | \Sigma), \forall x \in \mathbb{R}_*^{n \times 1} \text{ (να είναι δηλαδή γνησίως κυρτή)}.$$

Οι θετικά ορισμένοι και ημιορισμένοι πίνακες είναι πολύ σημαντικοί στην στατιστική εφόσον αντιστοιχούν σε **πίνακες συνδιασποράς**.

Από την γραμμική άλγεβρα γνωρίζουμε ότι **εάν ο πίνακας M είναι συμμετρικός, τότε όλες οι ιδιοτιμές του είναι πραγματικές**, δηλαδή² $\text{spec}(M) \subset \mathbb{R}$, με $\text{spec}(M) = \{\lambda \in \mathbb{C} : \det(M - \lambda \mathbb{I}) = 0\}$. Έστω $\lambda \in \text{spec}(M)$ με

¹ The purely quadratic form associated with M

² Με spec συμβολίζουμε το spectrum – φάσμα, δηλαδή το σύνολο ιδιοτιμών ενός πίνακα.

αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα v , τότε $M v = \lambda v$ που σημαίνει ότι εάν ο M είναι θετικά ορισμένος $Q(v|M) > 0$ θα έχουμε και

$$Q(v|M) = v^T M v = \lambda v^T v = \lambda \|v\|^2 > 0 \Rightarrow \lambda > 0.$$

Έτσι όλες οι ιδιοτιμές ενός συμμετρικού και θετικά ορισμένου πίνακα M είναι θετικές, δηλαδή $spec(M) \subset \mathbb{R}^+$, με αποτέλεσμα ο M να είναι και αντιστρέψιμος εφόσον $\det(M) = \prod_{\lambda \in spec(M)} \lambda > 0$.

Έστω ότι ο M είναι συμμετρικός. Εάν υπάρχουν n διαφορετικά ζεύγη (λ_i, v_i) τέτοια ώστε $M v_i = \lambda_i v_i$, τότε $M [v_1, \dots, v_n] = [v_1, \dots, v_n] D$ όπου $D = (\lambda_i \delta_{ij})$. Ο πίνακας $P = [v_1, \dots, v_n]$ είναι **ορθογώνιος**, δηλαδή $P^{-1} = P^T \Leftrightarrow P = P^{-T}$ και

$$D = P^T M P.$$

Επειδή $PP^T = \mathbb{I}_n$ θα έχουμε και $\det(P)^2 = 1 \Leftrightarrow |\det(P)| = 1$. Εάν επιπροσθέτως ο M είναι και θετικά ορισμένος, θα έχουμε $\det(P) = 1$.

Άσκηση

Να βρεθούν οι ελάχιστες συνθήκες κάτω από τις οποίες ο 2×2 συμμετρικός πίνακας $M = (m_{ij})$ είναι θετικά ορισμένος.

$$\begin{aligned} Q(x, y|M) &= (x, y) \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{12} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = m_{11}x^2 + 2m_{12}xy + m_{22}y^2 \\ &= m_{11} \left\{ \left(x + \frac{m_{12}}{m_{11}} y \right)^2 + \frac{m_{22}}{m_{11}} y^2 - \left(\frac{m_{12}}{m_{11}} y \right)^2 \right\} = m_{11} \left(x + \frac{m_{12}}{m_{11}} y \right)^2 + \left(m_{22} - \frac{m_{12}^2}{m_{11}} \right) y^2 \end{aligned}$$

$$Q(x, y|M) > 0, \forall (x, y) \in \mathbb{R}_*^2 \Leftrightarrow \left\{ \begin{matrix} m_{11} > 0 \\ m_{22} - \frac{m_{12}^2}{m_{11}} > 0 \end{matrix} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{matrix} m_{11} > 0 \\ \det(M) > 0 \end{matrix} \right\}.$$

Άσκηση

Δίνεται δ.τ.μ. $X = (X_1, \dots, X_n)^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$. Εάν $M = (m_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ορίζουμε την δ.τ.μ. $Y = M X$. Δείξτε ότι $\mathbb{E}[Y] = M \mathbb{E}[X]$

$$\mathbb{E}[Y] = \mathbb{E}[M X] = \mathbb{E}\left[\left(\sum_j m_{ij} X_j\right)\right] = \left(\sum_j m_{ij} \mathbb{E}[X_j]\right) = M \mathbb{E}[X].$$

Εάν ο M είναι θετικά ορισμένος τότε μπορεί να παραγοντοποιηθεί σαν $M = LL^T$ όπου L είναι πίνακας κάτω τριγωνικός, με θετικά διαγώνια στοιχεία. Ο πίνακας L καλείται **Cholesky παράγοντας του M** είτε τετραγωνική ρίζα του M . Τότε ο M^{-1} έχει Cholesky παράγοντα L^{-1} , εφόσον $M^{-1} = (L^{-1})^T L^{-1}$, και για αυτό το λόγο είναι και αυτός θετικά ορισμένος.

Είναι προφανές ότι εάν $M = LL^T$ τότε ο M είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, πράγματι:

$$M^T = (LL^T)^T = LL^T = M,$$

$$Q(x|M) = x^T LL^T x = (L^T x)^T L^T x = \|L^T x\|^2 > 0, \forall x \in \mathbb{R}^{n \times 1*}.$$

Επίσης $M^{-1} = (LL^T)^{-1} = L^{-T} L^{-1}$ διότι $MM^{-1} = (LL^T)(L^{-T} L^{-1}) = L(L^T L^{-T}) L^{-1} = LL^{-1} = \mathbb{I}$.

Παρόμοια και $M^{-1}M = \mathbb{I}$.

Παράδειγμα

Να αποδειχθεί ότι ο πίνακας

$$M = \begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{bmatrix},$$

είναι θετικά ορισμένος.

Αρκεί να δείξουμε ότι $M = LL^T$ με $L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix}$ και $l_{ii} > 0$ για $i = 1, 2, 3$.

$$LL^T = \begin{bmatrix} (l_{11}^2) & (l_{11}l_{21}) & (l_{11}l_{31}) \\ l_{21}l_{11} & (l_{21}^2 + l_{22}^2) & (l_{21}l_{31} + l_{22}l_{32}) \\ l_{31}l_{11} & l_{31}l_{21} + l_{32}l_{22} & (l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

Λύνοντας τις εξισώσεις στις παρενθέσεις παίρνουμε: $L = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$.

Άσκηση

Να βρεθεί ο αντίστροφος του πίνακα $L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix}$ με $l_{ii} > 0$ για $i = 1, 2, 3$. Στη

συνέχεια να αντιστραφεί ο πίνακας L του προηγούμενου παραδείγματος.

Ο L είναι αντιστρέψιμος εφόσον $\det(L) = l_{11}l_{22}l_{33} > 0$ ³. Έστω $L^{-1} = (r_{ij})$, τότε από την εξίσωση $(l_{ij})(r_{ij}) = \mathbb{I}$ έχουμε

$$L^{-1} = (r_{ij}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{l_{11}} & 0 & 0 \\ -\frac{l_{21}}{l_{11}l_{22}} & \frac{1}{l_{22}} & 0 \\ \frac{l_{32}l_{21}}{l_{11}l_{22}l_{33}} - \frac{l_{31}}{l_{11}l_{33}} & -\frac{l_{32}}{l_{22}l_{33}} & \frac{1}{l_{33}} \end{bmatrix}$$

Αντικαθιστώντας $L = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$ παίρνουμε $L^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{5} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{5} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{15} & -\frac{1}{9} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$.

Η πολυδιάστατες student και normal – gamma πυκνότητες

Δίνεται τυχαίο διάνυσμα $X = (X_1, \dots, X_n)^T$, και τ.μ. Z έτσι ώστε

$$[X | Z = z] \sim N_n(\mathcal{O}_n, z^{-1}\mathbb{I}_n).$$

δηλαδή ο πίνακας συνδιασποράς είναι $\mathbb{V}(X | Z = z) = z^{-1}\mathbb{I}_n = \lambda_n^{-1}$, όπου $\lambda_n = z\mathbb{I}_n$ ο πίνακας των precisions.

Τότε

$$\begin{aligned} f_{X|Z}(x|z) &= N_n(x | \mathcal{O}_n, z^{-1}\mathbb{I}_n) = N_n(x | \mathcal{O}_n, \lambda_n^{-1}) \\ &= \sqrt{\frac{\det(\lambda_n)}{(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^T \lambda_n x\right) = \left(\frac{z}{2\pi}\right)^{n/2} \exp\left(-\frac{z}{2}x^T x\right), \end{aligned}$$

³ Είναι πολύ εύκολο να δείξουμε ότι οι ιδιοτιμές του L είναι τα διαγώνια στοιχεία του.

και θέτουμε

$$f_{x|z}(x|z) = C_1 z^{n/2} \exp\left(-\frac{z}{2} x^T x\right), \quad C_1 = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{n/2}.$$

Εάν $Z \sim Ga\left(\frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right)$ τότε

$$f_Z(z) = Ga\left(z \mid \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right) = C_2 z^{\nu/2-1} \exp\left(-\frac{\nu}{2} z\right), \quad C_2 = \frac{(\nu/2)^{\nu/2}}{\Gamma(\nu/2)},$$

και η από κοινού των X και Z γίνεται

$$\begin{aligned} f_{X,Z}(x,z) &= f_{X|Z}(x|z) f_Z(z) = C_1 C_2 z^{n/2} \exp\left(-\frac{z}{2} x^T x\right) z^{\nu/2-1} \exp\left(-\frac{\nu}{2} z\right) \\ &= C_1 C_2 z^{\frac{\nu+n}{2}-1} \exp\left(-\frac{z}{2} (\nu + x^T x)\right) \propto Ga\left(z \mid \frac{\nu+n}{2}, \frac{\nu + x^T x}{2}\right), \end{aligned}$$

και έτσι

$$f_{X,Z}(x,z) = \frac{C_1 C_2}{C_3} Ga\left(z \mid \frac{\nu+n}{2}, \frac{\nu + x^T x}{2}\right), \quad C_3 = \frac{\left(\frac{\nu + x^T x}{2}\right)^{\frac{\nu+n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right)}.$$

Ολοκληρώνοντας στο \mathbb{R}^+ την προηγούμενη πυκνότητα, ως προς z , παίρνουμε:

$$\begin{aligned} f_{X,Z}(x,z) &= \frac{C_1 C_2}{C_3} = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right) (\nu/2)^{\nu/2}}{(2\pi)^{n/2} \Gamma(\nu/2)} \left(\frac{\nu + x^T x}{2}\right)^{-\frac{\nu+n}{2}} \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right) (\nu/2)^{\nu/2}}{\Gamma(\nu/2) (2\pi)^{n/2}} \left(\frac{\nu}{2}\right)^{-\frac{\nu+n}{2}} \left(1 + \frac{1}{\nu} x^T x\right)^{-\frac{\nu+n}{2}} \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right)}{\Gamma(\nu/2)} \frac{1}{(\nu\pi)^{n/2}} \left(1 + \frac{1}{\nu} x^T x\right)^{-\frac{\nu+n}{2}} = St_n(x \mid \mathcal{O}_n, \mathbb{I}_n, \nu). \end{aligned}$$

Η πυκνότητα $St_n(x|\mathcal{O}_n, \mathbb{I}_n, \nu)$ είναι η τυπική n -διάστατη student με ν βαθμούς ελευθερίας.

Για τις περιθώριες κατανομές έχουμε για $dx_{-i} = \prod_{j \neq i} dx_j$

$$\begin{aligned} f_{X_i}(x_i) &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} f_X(x) dx_{-i} = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left\{ \int_{z>0} f_{X,Z}(x, z) dz \right\} dx_{-i} \\ &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left\{ \int_{z>0} f_{X|Z}(x|z) f_Z(z) dz \right\} dx_{-i} = \int_{z>0} f_Z(z) \left\{ \int_{\mathbb{R}^{n-1}} f_{X|Z}(x|z) dx_{-i} \right\} dz. \end{aligned}$$

Επειδή

$$\int_{\mathbb{R}^{n-1}} f_{X|Z}(x|z) dx_{-i} = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} N_n(x|\mathcal{O}_n, z^{-1}\mathbb{I}_n) dx_{-i} = N(x_i|0, z^{-1}),$$

η περιθώρια τ.μ. X_i θα έχει κατανομή

$$f_{X_i}(x_i) = \int_{z>0} N(x_i|0, z^{-1}) Ga\left(z|\frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right) dz = St(x_i|0, 1, \nu)$$

Εμφανώς

$$\mathbb{E}(X) = \mathbb{E}\left((X_1, \dots, X_n)^T\right) = (\mathbb{E}(X_1), \dots, \mathbb{E}(X_n))^T = (0, \dots, 0)^T = \mathcal{O}$$

ενώ

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(X) &= \mathbb{E}[X X^T] = \mathbb{E}\left[\mathbb{E}(X X^T | Z)\right] = \mathbb{E}\left[\mathbb{E}\left((X_i, X_j) | Z\right)\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\left(\mathbb{E}(X_i, X_j | Z)\right)\right] \end{aligned}$$

όμως $[X | Z = z] \sim N_n(\mathcal{O}_n, z^{-1}\mathbb{I}_n)$ και έτσι $\mathbb{E}(X_i, X_j | Z = z) = z^{-1}\delta_{ij}$, που δίνει

$$\mathbb{V}(X) = \mathbb{E}\left[(Z^{-1}\delta_{ij})\right] = \mathbb{E}[Z^{-1}](\delta_{ij}) = \frac{\nu}{\nu-2}\mathbb{I}_n.$$

Για την γενική μορφή της πολυδιάστατης student, θέτουμε

$$A = (a_{ij}) \text{ με } \det(A) \neq 0 \text{ και } A^{-1} = (b_{ij})$$

$$Y = T(X) = \mu + AX \Leftrightarrow X = T^{-1}(Y) = A^{-1}(Y - \mu),$$

ή ισοδύναμα σε συντεταγμένες, για $i = 1, \dots, n$

$$Y_i = T(X_1, \dots, X_n) = \mu_i + \sum_{k=1}^n a_{ik} X_k \Leftrightarrow X_i = T^{-1}(Y_1, \dots, Y_n) = \sum_{k=1}^n b_{ik} (Y_k - \mu_k).$$

Η ιακωβιανή ορίζουσα του αντίστροφου μετασχηματισμού είναι

$$Jac(T^{-1}) = \frac{\partial(x_1, \dots, x_n)}{\partial(y_1, \dots, y_n)} = \frac{\partial x}{\partial y}$$

και

$$\frac{\partial x_i}{\partial y_j} = \frac{\partial}{\partial y_j} \left[\sum_{k=1}^n b_{ik} (y_k - \mu_k) \right] = b_{ij} \Rightarrow Jac(T^{-1}) = \det(A^{-1}) = \det(A)^{-1}.$$

Έτσι

$$\begin{aligned} f_Y(y) &= St_n(T^{-1}(y) | \mathcal{O}_n, \mathbb{I}_n, \nu) |Jac(T^{-1})| \\ &= \frac{1}{|\det(A)|} St_n(A^{-1}(y - \mu) | \mathcal{O}_n, \mathbb{I}_n, \nu) \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \frac{1}{(\nu\pi)^{n/2}} \frac{1}{|\det(A)|} \left(1 + \frac{1}{\nu} (A^{-1}(y - \mu))^T (A^{-1}(y - \mu))\right)^{-\frac{\nu+n}{2}}. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι

$$|\det(A)| = \sqrt{\det(A)^2} = \sqrt{\det(A)\det(A^T)} = \sqrt{\det(AA^T)},$$

και ότι

$$\begin{aligned} (A^{-1}(y - \mu))^T (A^{-1}(y - \mu)) &= (y - \mu)^T A^{-T} A^{-1} (y - \mu) \\ &= (y - \mu)^T (AA^T)^{-1} (y - \mu), \end{aligned}$$

που δίνουν

$$f_Y(y) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \frac{1}{\sqrt{(\nu\pi)^n \det(AA^T)}} \left(1 + \frac{1}{\nu}(y-\mu)^T (AA^T)^{-1} (y-\mu)\right)^{-\frac{\nu+n}{2}}$$

Συμβολίζοντας με $\Sigma = \Sigma_Y = AA^T$ τον πίνακα συνδιασποράς, έχουμε

$$f_Y(y) = St_n(y | \mu, \Sigma, \nu) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \frac{1}{\sqrt{\det(\nu\pi\Sigma)}} \left(1 + \frac{1}{\nu}(y-\mu)^T \Sigma^{-1} (y-\mu)\right)^{-\frac{\nu+n}{2}}$$

Για τις περιθώριες Y_i έχουμε

$$\begin{aligned} f_{Y_i}(x_i) &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} St_n(y | \mu, \Sigma, \nu) dy_{-i} \\ &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left\{ \int_{z>0} N_n(x | \mu, z^{-1}\Sigma) Ga\left(z | \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right) dz \right\} dx_{-i} \\ &= \int_{z>0} \left\{ \int_{\mathbb{R}^{n-1}} N_n(x | \mu, z^{-1}\Sigma) dx_{-i} \right\} Ga\left(z | \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right) dz \\ &= \int_{z>0} N(x_i | \mu_i, z^{-1}\sigma_i^2) Ga\left(z | \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right) dz = St(x_i | \mu_i, \sigma_i^2, \nu) \end{aligned}$$

Εμφανώς

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbb{E}\left((Y_1, \dots, Y_n)^T\right) = \left(\mathbb{E}(Y_1), \dots, \mathbb{E}(Y_n)\right)^T = (\mu_1, \dots, \mu_n)^T = \mu$$

ενώ

$$\mathbb{V}(Y) = \mathbb{V}(\mu + AX) = A \mathbb{V}(X) A^T = A \frac{\nu}{\nu-2} (\delta_{ij}) A^T = \frac{\nu}{\nu-2} A A^T = \frac{\nu}{\nu-2} \Sigma.$$

Η $(n+1)$ -διάστατη κατανομή

$$Ng_n\left(x, z | \mu, \Sigma, \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right) = N_n\left(x | \mu, z^{-1}\Sigma\right) Ga\left(z | \frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2}\right)$$

είναι ειδική περίπτωση της $(n+1)$ -διάστατης normal – gamma κατανομής:

$$Ng_n(x, z | \mu, \Sigma, a, b) = N_n(x | \mu, z^{-1}\Sigma)Ga(z | a, b).$$

Για το x -marginal της $Ng_n(x, z | \mu, \Sigma, a, b)$ έχουμε

$$f_X(x) = \int_{z>0} Ng_n(x, z | \mu, \Sigma, a, b) = \int_{z>0} N_n(x | \mu, z^{-1}\Sigma)Ga(z | a, b) dz$$

και θέτοντας, $u = sz$ παίρνουμε

$$f_X(x) = \int_{u>0} N_n\left(x | \mu, \left(\frac{u}{s}\right)^{-1}\Sigma\right)Ga\left(u | a, \frac{b}{s}\right) du,$$

για $s = \frac{b}{a}$ η περιθώρια $f_X(x)$ τελικά γίνεται

$$f_X(x) = \int_{u>0} N_n\left(x | \mu, u^{-1}\frac{b}{a}\Sigma\right)Ga(u | a, a) du = St_n\left(x | \mu, \frac{b}{a}\Sigma, 2a\right).$$

Normal πολυδιάστατο μοντέλο με γνωστό πίνακα συνδιασποράς, και άγνωστο διάνυσμα μέσων. Εδώ έχουμε να εκτιμήσουμε τη location παράμετρο του normal μοντέλου για γνωστό πίνακα συνδιασποράς $\Sigma = \lambda^{-1}$ δηλαδή η κατανομή δειγματοληψίας είναι

$$x_j^T = (x_{1j}, \dots, x_{dj}), 1 \leq j \leq n,$$

$$x_j | \mathcal{G} \stackrel{iid}{\sim} N_d(\cdot | \mathcal{G}, \Sigma), \mathcal{G}^T = (\mathcal{G}_1, \dots, \mathcal{G}_d) \in \Theta = \mathbb{R}^d$$

$$\pi(x_i | \mathcal{G}) = N_d(x_i | \mathcal{G}, \lambda^{-1}) = \sqrt{\det\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)} \exp\left(-\frac{1}{2}(x_i - \mathcal{G})^T \lambda (x_i - \mathcal{G})\right),$$

$$\text{όπου } \sqrt{\det\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)} = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\lambda^{-1})}} = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\Sigma)}}.$$

Η πιθανοφάνεια θα είναι

$$\begin{aligned}\pi(x_1, \dots, x_n | \vartheta) &= \prod_{i=1}^n N_d(x_i | \vartheta, \lambda^{-1}) = \prod_{i=1}^n \sqrt{\det\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)} \exp\left(-\frac{1}{2}(x_i - \vartheta)^T \lambda (x_i - \vartheta)\right) \\ &= \det\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{n/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - \vartheta)^T \Sigma^{-1} (x_i - \vartheta)\right)\end{aligned}$$

Για την κλασσική εκτίμηση έχουμε για $x = (x_1, \dots, x_n)$

$$\log \pi(x | \vartheta) \underset{\infty}{\vartheta} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n Q(x_i | \vartheta, \lambda),$$

$$\text{όπου } Q(x_i | \vartheta, \lambda) = (x_i - \vartheta)^T \lambda (x_i - \vartheta),$$

$$\sum_{i=1}^n Q(x_i | \vartheta, \lambda) = \sum_{i=1}^n x_i^T \lambda x_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i^T\right) \lambda \vartheta - \vartheta^T \lambda \sum_{i=1}^n x_i + n \vartheta^T \lambda \vartheta.$$

Τότε για $\left(\frac{\partial}{\partial \vartheta}\right)^T = \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial \vartheta_d}\right)$ έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \sum_{i=1}^n Q(x_i | \vartheta, \lambda) = -\frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sum_{i=1}^n x_i^T\right) \lambda \vartheta - \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vartheta^T \lambda \sum_{i=1}^n x_i + n \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vartheta^T \lambda \vartheta.$$

Θέτοντας

$$n\bar{x}^T = \sum_{i=1}^n x_i^T = \sum_{i=1}^n (x_{i1}, \dots, x_{id}) = \left(\sum_{i=1}^n x_{i1}, \dots, \sum_{i=1}^n x_{id}\right) = (n\bar{x}_1, \dots, n\bar{x}_d)$$

Παίρνουμε

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \sum_{i=1}^n Q(x_i | \vartheta, \lambda) = -n \frac{\partial}{\partial \vartheta} \bar{x}^T \lambda \vartheta - n \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vartheta^T \lambda \bar{x} + n \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vartheta^T \lambda \vartheta$$

Επειδή ο λ είναι συμμετρικός πίνακας, θα έχουμε

1. $\frac{\partial}{\partial \vartheta} \bar{x}^T \lambda \vartheta = \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sum_{i=1}^n (\bar{x}^T \lambda)_i \vartheta_i = \left(\sum_{i=1}^n (\bar{x}^T \lambda)_i\right) = (\bar{x}^T \lambda)^T = \lambda^T \bar{x} = \lambda \bar{x}$
2. $\frac{\partial}{\partial \vartheta} \vartheta^T \lambda \bar{x} = \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sum_{i=1}^n \vartheta_i (\lambda \bar{x})_i = ((\lambda \bar{x})_i) = \lambda \bar{x}$

$$3. \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vartheta^T \lambda \vartheta = \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left[\sum_{i=1}^n \lambda_{ii} \vartheta_i^2 + 2 \sum_{i < j} \lambda_{ij} \vartheta_i \vartheta_j \right] = \left(2 \sum_{k=1}^n \lambda_{ik} \vartheta_k \right) = 2 \lambda \vartheta$$

Επίσης παρατηρούμε ότι από τις παραγωγίσεις 1. και 2., η παραγωγή 3. έχει τον κανόνα:

$$(\vartheta^T \lambda \vartheta)' = (\vartheta^T)' (\lambda \vartheta) + (\vartheta^T \lambda) (\vartheta)' = \lambda \vartheta + (\vartheta^T \lambda)^T = 2 \lambda \vartheta$$

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \sum_{i=1}^n Q(x_i | \vartheta, \lambda) = -2n\lambda \bar{x} + 2n\lambda \vartheta = -2n\lambda (\bar{x} - \vartheta)$$

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \log \pi(x | \vartheta) = n\lambda (\bar{x} - \vartheta) = \mathcal{O}_d \Rightarrow \hat{\vartheta}_{MLE} = \bar{x} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_d)^T$$

Η posterior για prior

$$\pi(\vartheta) = N_d(\vartheta | \mu_0, \lambda_0^{-1}) = \sqrt{\det\left(\frac{\lambda_0}{2\pi}\right)} \exp\left(-\frac{1}{2}(\vartheta - \mu_0)^T \lambda_0 (\vartheta - \mu_0)\right)$$

γίνεται

$$\begin{aligned} \pi(\vartheta | x) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left((\vartheta - \mu_0)^T \lambda_0 (\vartheta - \mu_0) + \sum_{i=1}^n (x_i - \vartheta)^T \lambda (x_i - \vartheta)\right)\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\vartheta^T \lambda_0 \vartheta - \vartheta^T \lambda_0 \mu_0 - \mu_0^T \lambda_0 \vartheta - n\bar{x}^T \lambda \vartheta - n\vartheta^T \lambda \bar{x} + n\vartheta^T \lambda \vartheta\right)\right) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\vartheta^T (\lambda_0 + n\lambda) \vartheta - \vartheta^T (\lambda_0 \mu_0 + n\lambda \bar{x}) - (\mu_0^T \lambda_0 + n\bar{x}^T \lambda) \vartheta\right)\right) \end{aligned}$$

Εάν $\pi(\vartheta | x) = N_d(\vartheta | \mu_n, \lambda_n^{-1})$ θα έχουμε και

$$\pi(\vartheta | x) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\vartheta^T \lambda_n \vartheta - \vartheta^T \lambda_n \mu_n - \mu_n^T \lambda_n \vartheta\right)\right).$$

Έτσι βρίσκουμε ότι:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \lambda_0 + n\lambda \\ \lambda_n \mu_n = \lambda_0 \mu_0 + n\lambda \bar{x} \\ \mu_n^T \lambda_n = \mu_0^T \lambda_0 + n\bar{x}^T \lambda \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \lambda_n = \lambda_0 + n\lambda \\ \mu_n = (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} (\lambda_0 \mu_0 + n\lambda \bar{x}) \end{array} \right\}$$

ή ότι

$$\pi(\mathcal{G} | x) = N_d(\mathcal{G} | (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} (\lambda_0 \mu_0 + n\lambda \bar{x}), (\lambda_0 + n\lambda)^{-1})$$

$$\mathbb{E}(\mathcal{G} | x) = (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} (\lambda_0 \mu_0 + n\lambda \bar{x}) = (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} \lambda_0 \mathbb{E}(\mathcal{G} | x) + (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} n\lambda \bar{x}$$

Θέτοντας $\gamma_n = (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} \lambda_0$ και επειδή

$$(\lambda_0 + n\lambda)^{-1} \lambda_0 + (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} n\lambda = (\lambda_0 + n\lambda)^{-1} (\lambda_0 + n\lambda) = \mathbb{I}_n,$$

η posterior μέση τιμή θα είναι

$$\mathbb{E}(\mathcal{G} | x) = \gamma_n \mathbb{E}(\mathcal{G} | x) + (\mathbb{I}_n - \gamma_n) \hat{\mathcal{G}}_{MLE}.$$

Για την prior predictive έχουμε

$$\mathbb{E}(x) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(x | \mathcal{G})) = \mathbb{E}(\mathcal{G}) = \mu_0$$

$$\mathbb{V}(x) = \mathbb{V}(\mathbb{E}(x | \mathcal{G})) + \mathbb{E}(\mathbb{V}(x | \mathcal{G})) = \mathbb{V}(\mathcal{G}) + \mathbb{E}(\lambda^{-1}) = \lambda_0^{-1} + \lambda^{-1}$$

Είναι εύκολο να δούμε ότι για μια παρατήρηση $x \in \mathbb{R}^d$ έχουμε

$$\pi(x) = \int_{\mathbb{R}^d} N_d(x | \mathcal{G}, \lambda^{-1}) N_d(\mathcal{G} | \mu_0, \lambda_0^{-1}) d\mathcal{G} = N_d(x | \mathcal{G}, \lambda^{-1} + \lambda_0^{-1}).$$