

第四章

隨機樣本及其他

4.4 多變量常態分佈

在實際的問題中，單變數的常態分佈常出現，此因有中央極限定理，故若有許多獨立的隨機變數，則經常態化後，其和往往趨近至常態分佈。若我們有好幾個變數，則多維的中央極限定理便會導致**多維常態分佈**，或說**多變量常態分佈**。雖然我們在3.6節已介紹過二變數常態分佈，但由於多變量常態分佈之重要性，因此本節來討論多變量的情況。

在討論多變量常態分佈之前，我們先複習一些需要的**矩陣代數**(matrix algebra)之知識。至於更詳盡的關於機率及統計中所需之矩陣的知識，Graybill(1983)為一本很好的參考書。在本節中，我們所提到之向量及矩陣，其元素皆為實數。

設有變數 $x_1, \dots, x_n$ ，並考慮下述變換：

$$\begin{aligned} (4.1) \quad y_1 &= a_{11}x_1 + a_{21}x_2 + \cdots + a_{n1}x_n, \\ y_2 &= a_{12}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{n2}x_n, \\ &\vdots \\ y_n &= a_{1n}x_1 + a_{2n}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n, \end{aligned}$$

2 第四章 隨機樣本及其他

其中 $a_{ij}, 1 \leq i, j \leq n$, 爲常數。若 $\sum_{i=1}^n y_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2$, 則稱爲一由 $x_1, \dots, x_n$ 至 $y_1, \dots, y_n$ 之**正交變換**(orthogonal transformation)。現對任一 $m \times n$ 的矩陣 $B = (b_{ij})$, 令 B' 表 B 之**轉置** (transpose), 即 $B' = (b_{ji})$ 。列向量(爲 $1 \times n$ 的矩陣)之轉置, 就成爲一 $n \times 1$ 的行向量。若令

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n),$$

$$\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n),$$

$$\mathbf{A} = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n},$$

則(4.1)式之變換可以下述矩陣及向量來表示:

$$(4.2) \quad \mathbf{y} = \mathbf{x}\mathbf{A}。$$

因此(4.1)式定義出一正交變換, 若且唯若

$$\mathbf{x}\mathbf{x}' = \mathbf{y}\mathbf{y}' = \mathbf{x}\mathbf{A}\mathbf{A}'\mathbf{x}'。$$

即若且唯若 $\mathbf{A}\mathbf{A}' = \mathbf{I}_n$, 其中 $\mathbf{I}_n$ 爲 $n \times n$ 之**單位矩陣**。一 $n \times n$ 之矩陣 $\mathbf{A}$ 稱爲一**正交矩陣**, 若其滿足

$$(4.3) \quad \mathbf{A}'\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}' = \mathbf{I}_n。$$

此時 $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}'$, 且 $\det \mathbf{A} = 1$ 。對一矩陣 $\mathbf{A}$ 我們以 $\det \mathbf{A}$ 或 $|\mathbf{A}|$ 表其**行列式**(determinant)。

設 $\mathbf{A}$ 爲一 $m \times n$ 之矩陣, 以 $r(\mathbf{A})$ 表 $\mathbf{A}$ 之**秩**(rank), 則 $r(\mathbf{A}) \leq \min\{m, n\}$ 。而若 $r(\mathbf{A}) = \min\{m, n\}$, 則稱 $\mathbf{A}$ 爲**非奇異的**(nonsingular)或**全秩**(full rank), 否則 $\mathbf{A}$ 稱爲**奇異的**(singular)。

其次我們介紹**正定**(positive definite)矩陣。首先設 $\mathbf{A}$ 爲一 $n \times n$ 之矩陣, 則下述行列式

$$(4.4) \quad \det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_n) = |\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_n|,$$

其中 λ 爲一**純量**(scalar), 爲一 λ 之 n 次多項式, 稱爲 $\mathbf{A}$ 之**特徵多項式**(characteristic polynomial)。而

$$(4.5) \quad |\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}_n| = 0$$

之 n 個根, 稱為 A 之**特徵根**(characteristic roots)或**固有值**(eigenvalues)。又 λ 為 A 之一**特徵根**, 若且唯若存在一向量 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 使得 $\mathbf{x}A = \lambda\mathbf{x}$, $\mathbf{x}$ 稱為**特徵向量**(characteristic vector)。

定義4.1 $n \times n$ 之對稱矩陣 A (即若 $A = (a_{ij})$, 則 $a_{ij} = a_{ji}$)稱為**正定**、**負定**(negative definite)或**半正定**(positive semidefinite), 若且唯若對每一 n 維向量 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, $\mathbf{x}A\mathbf{x}' > 0$, < 0 或 ≥ 0 。

定理4.1 $n \times n$ 實矩陣為正定、負定或半正定, 若其特徵根 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, 分別滿足 $\lambda_i > 0$, $\lambda_i < 0$, $\lambda_i \geq 0$, $\forall i = 1, \dots, n$ 。

另外, $n \times n$ 之矩陣稱為**幂等**(idempotent), 若 $A^2 = A$ 。

定理4.2 (i) 設有一 $n \times n$ 之對稱矩陣 A , 則存在一正交矩陣 B , 使得 BAB' 為**對角矩陣**, 且對角之元素即為 A 之特徵根。而若加上 A 為正定, 則存在一非奇異矩陣 C , 使得 $CAC' = I_n$ 。

(ii) 設 B 為一 $n \times n$ 之矩陣且 $r(B) = r$ 。若 B 為幂等矩陣, 則 B 有 r 個非零特徵根且皆為1; 若 B 為對稱矩陣, 則 B 為幂等之充要條件為 B 有 r 個非零特徵根, 且皆為1。

定理4.3 設有變數 $x_1, \dots, x_n$ 及常數 $a_{11}, \dots, a_{n1}$, 且

$$(4.6) \quad y_1 = a_{11}x_1 + a_{21}x_2 + \dots + a_{n1}x_n \quad .$$

則只要 $\sum_{i=1}^n a_{i1}^2 = 1$, 必存在 a_{ij} , $i = 1, \dots, n$, $j = 2, \dots, n$, 使得若令 $y_i = \sum_{j=1}^n a_{ji}x_j$, $i = 2, \dots, n$, 則 $x_1, \dots, x_n$ 至 $y_1, \dots, y_n$ 為一正交變換。即 $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ 為一正交矩陣。

現在我們可以定義多變量常態分佈了。

定義4.2 設 $X_1, \dots, X_n$ 為i.i.d.有 $\mathcal{N}(0, 1)$ 分佈之隨機變數, $A = (a_{ij})$ 為

4 第四章 隨機樣本及其他

一 $n \times m$ 之矩陣, $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_m)$ 為一列向量。令 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$, 則

$$(4.7) \quad \mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_m) = \mathbf{X}\mathbf{A} + \boldsymbol{\mu}$$

稱為有 m 維常態分佈, 或 m 變量常態分佈, 通稱多變量常態分佈。

由上述定義知, 若 $Y_1, \dots, Y_m$ 有多變量常態分佈, 則其任一子集仍有多變量常態分佈。 $\mathbf{Y}$ 之期望向量為

$$E(\mathbf{Y}) = (E(Y_1), \dots, E(Y_m)) = E(\mathbf{X}\mathbf{A} + \boldsymbol{\mu}) = E(\mathbf{X})\mathbf{A} + \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}。$$

共變異數矩陣為

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{Y}} &= E((\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y}))'(\mathbf{Y} - E(\mathbf{Y}))) \\ &= E((\mathbf{X}\mathbf{A})'(\mathbf{X}\mathbf{A})) \\ &= \mathbf{A}'E(\mathbf{X}'\mathbf{X})\mathbf{A} \\ &= \mathbf{A}'\mathbf{A}。 \end{aligned}$$

此處因 $X_1, \dots, X_n$ 為 i.i.d. 之 $\mathcal{N}(0, 1)$ 隨機變數, 故若 $i = j$, 則 $E(X_i X_j) = 1$, 若 $i \neq j$, 則 $E(X_i X_j) = 0$ 。因此 $E(\mathbf{X}'\mathbf{X}) = \mathbf{I}_n$ 為一單位矩陣。底下我們求 $\mathbf{Y}$ 之動差母函數 $M_{\mathbf{Y}}(\mathbf{t})$, 其中 $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m) \in R^m$ 。依定義得

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{Y}}(\mathbf{t}) &= E(e^{t\mathbf{Y}'}) \\ &= E(e^{t(\mathbf{A}'\mathbf{X} + \boldsymbol{\mu}')}) \\ &= e^{t\boldsymbol{\mu}'} E(e^{t\mathbf{A}'\mathbf{X}'})。 \end{aligned}$$

但

$$\mathbf{t}\mathbf{A}'\mathbf{X}' = \left(\sum_{j=1}^m t_j a_{1j}\right)X_1 + \cdots + \left(\sum_{j=1}^m t_j a_{nj}\right)X_n ,$$

故(仍利用 $X_1, \dots, X_n$ 為i.i.d.之 $\mathcal{N}(0, 1)$ 隨機變數)

$$\begin{aligned} E(e^{\mathbf{t}\mathbf{A}'\mathbf{X}'}) &= M_{X_1}\left(\sum_{j=1}^m t_j a_{1j}\right) \cdots M_{X_n}\left(\sum_{j=1}^m t_j a_{nj}\right) \\ &= \exp\left\{\frac{1}{2}\left(\sum_{j=1}^m t_j a_{1j}\right)^2 + \cdots + \frac{1}{2}\left(\sum_{j=1}^m t_j a_{nj}\right)^2\right\} \\ &= \exp\left\{\frac{1}{2}\mathbf{t}\mathbf{A}'\mathbf{A}\mathbf{t}'\right\} . \end{aligned}$$

因此

$$(4.8) \quad M_Y(\mathbf{t}) = \exp\{\mathbf{t}\boldsymbol{\mu}' + \frac{1}{2}\mathbf{t}\boldsymbol{\Sigma}_Y\mathbf{t}'\} ,$$

其中如前

$$(4.9) \quad \boldsymbol{\Sigma}_Y = \mathbf{A}'\mathbf{A} .$$

可看出若知 $\mathbf{Y}$ 之動差母函數有(4.8)式的型式, 則 $\mathbf{Y}$ 之分佈可由**期望向量** $\boldsymbol{\mu}$ 及**共變數矩陣** $\boldsymbol{\Sigma}_Y$ 所完全決定, 此性質與單變數常態分佈類似。因此我們便以 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 表此分佈。

當 $\mathbf{A}$ 為一 $n \times n$ 之非奇異矩陣, 即 $|\mathbf{A}| \neq 0$, 底下我們求 $\mathbf{Y}$ 之p.d.f. f_Y 。首先 $\mathbf{X}$ 之p.d.f.可寫成

$$\begin{aligned} f_X(\mathbf{x}) &= (2\pi)^{-n/2} \exp\{-\frac{1}{2}(x_1^2 + \cdots + x_n^2)\} \\ &= (2\pi)^{-n/2} \exp\{-\frac{1}{2}\mathbf{x}\mathbf{x}'\} . \end{aligned}$$

由(4.7)式得

$$\mathbf{X} = (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu})\mathbf{A}^{-1},$$

故

$$\begin{aligned} f_Y(\mathbf{y}) &= f_X((\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\mathbf{A}^{-1})|\mathbf{A}^{-1}| \\ &= (2\pi)^{-n/2} \exp\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A}^{-1})'(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})'\}|\mathbf{A}|^{-1} \\ &= (2\pi)^{-n/2} \exp\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\boldsymbol{\Sigma}_Y^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})'\}|\boldsymbol{\Sigma}_Y|^{-1/2}, \end{aligned}$$

此處用到

$$\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A}^{-1})' = (\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}_Y^{-1}, \quad |\mathbf{A}^{-1}| = |\mathbf{A}|^{-1} = |\boldsymbol{\Sigma}_Y|^{-1/2}.$$

因此 $\mathbf{Y}$ 之p.d.f.爲

$$(4.10) \quad f_Y(\mathbf{y}) = (2\pi)^{-n/2} |\boldsymbol{\Sigma}_Y|^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\boldsymbol{\Sigma}_Y^{-1}(\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})'\right\}, \mathbf{y} \in R^n.$$

一個有 n 維常態分佈之隨機變數，若其p.d.f.型式如(4.10)式，便稱有非奇異之 n 維常態分佈。亦即若 $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)$ 有 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 分佈，且 $|\boldsymbol{\Sigma}| \neq 0$ ，則 $\mathbf{Y}$ 之p.d.f.可寫出如(4.10)式，其中 $\boldsymbol{\mu}$ 及 $\boldsymbol{\Sigma}$ 分別爲 $\mathbf{Y}$ 之期望向量及共變異數矩陣。即若 $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ ， $\boldsymbol{\Sigma} = (\sigma_{ij})$ 爲一 $n \times n$ 矩陣，則

$$E(Y_i) = \mu_i, i = 1, \dots, n,$$

$$\text{Var}(Y_i) = \sigma_{ii}, i = 1, \dots, n,$$

$$\text{Cov}(Y_i, Y_j) = \sigma_{ij}, i, j = 1, \dots, n.$$

我們再寫一較一般的定理如下，證明則留在習題。

定理4.4 設 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ 有 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 分佈， $\mathbf{C}$ 爲一 $n \times m$ 矩陣， $\mathbf{V}$ 爲一 $1 \times m$ 之常數向量，令 $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{C} + \mathbf{V}$ ，則 $\mathbf{Y}$ 亦有 m 維常態分佈，且 $E(\mathbf{Y}) = \boldsymbol{\mu}\mathbf{C} + \mathbf{V}$ ， $\boldsymbol{\Sigma}_Y = \mathbf{C}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{C}$ 。特別地，若 $m = 1$ ，即 $\mathbf{C} = \mathbf{c}'$ 爲一 $n \times 1$ 之行向量，且設 $\mathbf{V} = 0$ ，則 $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{c}'$ （爲一 $X_1, \dots, X_n$ 之線性組合）有 $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}\mathbf{c}', \mathbf{c}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{c}')$ 分佈。

例4.1 設 $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ 有 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 分佈。由定理4.4，此時 X_1, X_2 皆有常態分佈。設 X_1, X_2 分別有 $\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2)$ 及 $\mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2)$ 分佈，且令 ρ 表 X_1 與 X_2 之相關係數，設 $|\rho| \neq 1$ 。則共變異數矩陣爲

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix},$$

且 $|\Sigma| = \sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2)$ 。反之，若先給共變異數矩陣，亦可得 X_1, X_2 之邊際分佈，及相關係數。因此可求出(見習題第1題) X_1, X_2 之聯合p.d.f.為

$$(4.11) f(x_1, x_2) = (2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2})^{-1} \exp\left\{-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left(\left(\frac{x_1-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2 - \frac{2\rho}{\sigma_1\sigma_2}(x_1-\mu_1)(x_2-\mu_2) + \left(\frac{x_2-\mu_2}{\sigma_2}\right)^2\right)\right\},$$

與我們在第三章定義6.1所給相同。

例4.2 設 $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ 有 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 分佈，其中

$$\boldsymbol{\mu} = (1, 2, 0), \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}.$$

試求 $\mathbf{X}$ 之p.d.f.。

解. 首先

$$\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 1/9 \end{pmatrix}, \quad |\Sigma| = 1 \cdot 4 \cdot 9 = 36.$$

又

$$(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\Sigma^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})' = (x_1 - 1)^2 + \frac{1}{4}(x_2 - 2)^2 + \frac{1}{9}x_3^2.$$

因此 $\mathbf{X}$ 之p.d.f.為

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{X}}(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \sqrt{36}} e^{-\frac{1}{2}((x_1-1)^2 + \frac{1}{4}(x_2-2)^2 + \frac{1}{9}x_3^2)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot 1} e^{-\frac{1}{2}(x_1-1)^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot 2} e^{-\frac{1}{2}(x_2-2)^2/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot 3} e^{-\frac{1}{2}x_3^2/9}. \end{aligned}$$

即 X_1, X_2, X_3 為相互獨立，分別有 $\mathcal{N}(1, 1)$ ， $\mathcal{N}(2, 4)$ 及 $\mathcal{N}(0, 9)$ 分佈。事實上，由 Σ 的形式，便已可知 X_1, X_2, X_3 獨立，見稍後的定理4.5。

例4.3 設 X_1, X_2, X_3 為i.i.d.之 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 隨機變數。令 $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)$ ，

$$\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, Y_3) = \mathbf{X}\mathbf{A}.$$

其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1/3 & -1 & 0 \\ 1/3 & 0 & 1 \\ 1/3 & 1 & -1 \end{pmatrix}。$$

試決定 $\mathbf{Y}$ 之分佈。

解. 由定理4.4, $\mathbf{Y} \sim (\boldsymbol{\mu}\mathbf{A}, \mathbf{A}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A})$, 其中

$$\boldsymbol{\mu} = (\mu, \mu, \mu), \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2 \end{pmatrix},$$

而

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}\mathbf{A} &= (\mu, 0, 0), \\ \mathbf{A}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/3 & -1 & 0 \\ 1/3 & 0 & 1 \\ 1/3 & 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma^2/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sigma^2 & -\sigma^2 \\ 0 & -\sigma^2 & 2\sigma^2 \end{pmatrix}。 \end{aligned}$$

附帶一提, 由上述結果知, $Y_1 = (X_1 + X_2 + X_3)/3 = \bar{X}$ 之邊際分佈為 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2/3)$, 此證實定理3.1的結論。又 $Y_2 = -X_1 + X_3$, $Y_3 = X_2 + X_3$ 皆有 $\mathcal{N}(\mu, 2\sigma^2)$ 分佈, 此也與3.5節二變數常態分佈的性質(iii)吻合。又因 $\text{Cov}(Y_1, Y_2) = \text{Cov}(Y_1, Y_3) = 0$, 故由二變數常態分佈的性質(iv)知, Y_1 與 Y_2 , Y_1 與 Y_3 皆獨立。

底下二定理的證明皆留在習題中。

定理4.5 設 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ 有 n 維常態分佈, 則 X_i 與 X_j 獨立, 其中 $1 \leq i \neq j \leq n$, 若且唯若 $\text{Cov}(X_i, X_j) = 0$ 。即若且唯若其共變異數矩陣 $\boldsymbol{\Sigma}$ 之 (i, j) (以及 (j, i))位置的元素為0。又 $X_1, \dots, X_n$ 相互獨立, 若且唯若 $\text{Cov}(X_i, X_j) = 0, \forall 1 \leq i, j \leq n$, 且 $i \neq j$ (見習題第3題)。即若且唯若 $\boldsymbol{\Sigma}$ 為對角矩陣。

定理4.6 設有 k 個 n 維之獨立的隨機向量 $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k$, 分別有 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)$ 分佈, $j = 1, \dots, k$ 。令 $\mathbf{X} = \sum_{j=1}^k c_j \mathbf{X}_j$, 其中 $c_1, \dots, c_k$ 為常數, 且 $\sum_{j=1}^k c_j^2 \neq 0$, 則 $\mathbf{X}$ 有 $\mathcal{MN}(\sum_{j=1}^k c_j \boldsymbol{\mu}_j, \sum_{j=1}^k c_j^2 \boldsymbol{\Sigma}_j)$ 分佈。

設 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$, $\mathbf{C}$ 為 $-n \times n$ 之對稱矩陣, 則 $\mathbf{x} \mathbf{C} \mathbf{x}'$ 稱為 $-\mathbf{x}$ 之二次形式(quadratic form)。關於二次形式, 我們有下述結果。

定理4.7 設 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ 有 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ 分佈, $|\boldsymbol{\Sigma}| \neq 0$, 且令 $Q = (\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})'$, 則 Q 有 χ_n^2 分佈。

證明. 對 $\forall t \in R$,

$$\begin{aligned}
 (4.12) \quad M_Q(t) &= E(e^{tQ}) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{t(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})'\} (2\pi)^{-n/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \\
 &\quad \cdot \exp\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})'\} dx_1 \cdots dx_n \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (2\pi)^{-n/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \\
 &\quad \cdot \exp\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})' (1 - 2t)\} dx_1 \cdots dx_n \\
 &= (1 - 2t)^{-n/2} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (2\pi)^{-n/2} \left| \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{1 - 2t} \right|^{-1/2} \\
 &\quad \cdot \exp\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \left(\frac{\boldsymbol{\Sigma}}{1 - 2t} \right)^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})'\} dx_1 \cdots dx_n,
 \end{aligned}$$

此處用到

$$\left| \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{1 - 2t} \right| = (1 - 2t)^{-n} |\boldsymbol{\Sigma}|.$$

(4.12)式最後一積分算子, 可視為 $-n$ 維 $\mathcal{MN}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}/(1 - 2t))$ 分佈之p.d.f., 故其積分值為1。因此

$$M_Q(t) = (1 - 2t)^{-n/2},$$

但此為 χ_n^2 分佈之動差母函數。得證。

若 X_i 有 $\mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2)$ 分佈, $i = 1, \dots, n$, 且 $X_1, \dots, X_n$ 相互獨立, 則易知此時

$$Q = \sum_{i=1}^n (X_i - \mu_i)^2 / \sigma_i^2$$

有 χ_n^2 分佈，定理4.7 即此結果之推廣。我們再給此結果之另一推廣。

定理4.8 設 $X_1, \dots, X_n$ 為 i.i.d. 之 $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ 隨機變數，且令 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ 。又設 $\mathbf{C}$ 為一 $n \times n$ 之對稱非零矩陣，令 $Q = \mathbf{X} \mathbf{C} \mathbf{X}' / \sigma^2$ ，則 Q 有 χ_r^2 分佈，若且唯若 $\mathbf{C}$ 為一幂等矩陣，且 $r(\mathbf{C}) = r$ 。

註4.1 若 $\mathbf{C} = \mathbf{I}_n$ ，則 $\mathbf{C}$ 為一幂等矩陣且 $r(\mathbf{C}) = n$ 。此時 $Q = \sum_{i=1}^n X_i^2 / \sigma^2$ 有 χ_n^2 分佈為一早已知道的結果。定理4.8 即為此結果之推廣。

證明。 不失一般性可設 $\sigma^2 = 1$ 。我們先求 Q 之動差母函數。對 $\forall t \in R$,

$$\begin{aligned} (4.13) \quad M(t) &= E(e^{t \mathbf{X} \mathbf{C} \mathbf{X}'}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (2\pi)^{-n/2} \exp\{t \mathbf{x} \mathbf{C} \mathbf{x}' - \mathbf{x} \mathbf{x}' / 2\} dx_1 \cdots dx_n \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (2\pi)^{-n/2} \exp\{-\frac{1}{2} \mathbf{x} (\mathbf{I}_n - 2t \mathbf{C}) \mathbf{x}'\} dx_1 \cdots dx_n. \end{aligned}$$

只要 $|t|$ 夠小，譬如說 $|t| < h, h > 0$ ，則 $\mathbf{I}_n - 2t \mathbf{C}$ 為一正定矩陣。又此時

$$(2\pi)^{-n/2} |\Sigma|^{-1/2} \exp\{-\frac{1}{2} \mathbf{x} \Sigma^{-1} \mathbf{x}'\},$$

為一 $\mathcal{MN}(\mathbf{0}, \Sigma)$ 之 p.d.f.，其中 $\Sigma^{-1} = (\mathbf{I}_n - 2t \mathbf{C})$ 。因此

$$(4.14) \quad M(t) = |\Sigma|^{1/2} = |\mathbf{I}_n - 2t \mathbf{C}|^{-1/2}, |t| < h.$$

我們可將 $M(t)$ 以另一形式來表示。設 $a_1, \dots, a_n$ 為 $\mathbf{C}$ 之特徵根，則由定理4.2 知，存在一正交矩陣 $\mathbf{B}$ ，使得

$$\mathbf{B} \mathbf{C} \mathbf{B}' = \begin{pmatrix} a_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & a_n \end{pmatrix}.$$

故

$$\mathbf{B}(\mathbf{I}_n - 2t\mathbf{C})\mathbf{B}' = \begin{pmatrix} 1 - 2ta_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & 1 - 2ta_n \end{pmatrix} \circ$$

因此

$$|\mathbf{I}_n - 2t\mathbf{C}| = |\mathbf{B}(\mathbf{I}_n - 2t\mathbf{C})\mathbf{B}'| = \prod_{i=1}^n (1 - 2ta_i) \circ$$

故得

$$(4.15) \quad M(t) = \left(\prod_{i=1}^n (1 - 2ta_i) \right)^{-1/2}, |t| < h \circ$$

現設 $r(\mathbf{C}) = k$, $1 \leq k \leq n$, 且設 $a_1, \dots, a_k \neq 0$, $a_{k+1} = \dots = a_n = 0$, 則

$$(4.16) \quad M(t) = \left(\prod_{i=1}^k (1 - 2ta_i) \right)^{-1/2}, |t| < h \circ$$

若 $\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{X}'$ 有 χ_r^2 分佈, 則

$$(4.17) \quad M(t) = (1 - 2t)^{-r/2} \circ$$

比較(4.16)及(4.17)式知

$$(4.18) \quad \prod_{i=1}^k (1 - 2ta_i) = (1 - 2t)^r, |t| < h \circ$$

由於(4.18)式左、右二多項式對無限多個 t 相等, 因此 $k = r$ 且 $a_1 = a_2 = \dots = a_r = 1$ 。故矩陣 $\mathbf{C}$ 為冪等矩陣, 且 $r(\mathbf{C}) = r$ 。

反之, 若 $\mathbf{C}$ 為冪等矩陣, 且 $r(\mathbf{C}) = r$, 則 $a_1 = \dots = a_r = 1$, 且 $a_{r+1} = \dots = a_n = 0$, 因此(4.17)式成立, 故 $\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{X}'$ 有 χ_r^2 分佈。本定理證畢。

註4.2 在定理4.8中, 若 X_i 有 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 分佈, 則 Q 有非中心卡方分佈(non-central chi squared distribution), 且自由度為 r , 若且唯若 $\mathbf{C}^2 = \mathbf{C}$ 且 $r(\mathbf{C}) = r$ 。且此時非中心參數(noncentrality parameter)為 $\boldsymbol{\mu}\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}'/\sigma^2$, 其中 $\boldsymbol{\mu} = (\mu, \dots, \mu)$ 。由於 $\boldsymbol{\mu}\mathbf{C}\boldsymbol{\mu}' = \mu^2 \sum_{i,j} c_{ij}$, 其中 $\mathbf{C} = (c_{ij})$, 故若 $\mu \neq 0$, 則 $\mathbf{C}^2 =$

$C, r(C) = r$, 且 $\sum_{i,j} c_{ij} = 0$, 為 Q 有 χ_r^2 之充要條件。

其他尚有許多關於二次形式之有趣的結果, 可參考 Hogg and Craig (1970) Chapter 12, 及 Roussas (1997) Chapter 19。至於有關多變量常態分佈較完整的討論可參考 Anderson (1984) Chapter 2。

最後, 對 $X_1, \dots, X_n$ 為 i.i.d. 之 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ 隨機變數, 我們給樣本平均 $\bar{X}_n$ 與樣本變異數 S_n^2 獨立之另一證明。

由定理 4.3, 可造出一正交矩陣 $C = (c_{ij})$, 滿足 $CC' = I_n$, 且 C 之第一行為 $(\frac{1}{\sqrt{n}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{n}})'$ 。又令 $Y = XC$, 其中 $Y = (Y_1, \dots, Y_n)$, $X = (X_1, \dots, X_n)$ 。由定理 4.4 知 Y 有 $\mathcal{MN}(\mu C, C' \Sigma C)$ 分佈, 其中

$$\mu = (\mu, \dots, \mu),$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma^2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \sigma^2 \end{pmatrix} = \sigma^2 I_n。$$

顯然 $C' \Sigma C = \Sigma = \sigma^2 I_n$, 故 $Y_1, \dots, Y_n$ 仍為相互獨立。因 C 為正交矩陣, 且第一行為 $(\frac{1}{\sqrt{n}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{n}})'$, 故 $\sum_{i=1}^n a_{ij} \frac{1}{\sqrt{n}} = 0, j = 2, \dots, n$ 。因此

$$E(Y_1) = \sqrt{n}\mu, \quad E(Y_j) = \mu \sum_{i=1}^n a_{ij} = 0, \quad j = 2, \dots, n。$$

即 $Y_1, \dots, Y_n$ 不但相互獨立, 且 Y_1 有 $\mathcal{N}(\sqrt{n}\mu, \sigma^2)$ 分佈, Y_j 有 $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ 分佈, $j = 2, \dots, n$ 。由此又得 $\sum_{j=2}^n Y_j^2 / \sigma^2$ 有 χ_{n-1}^2 分佈。又 $\bar{X}_n = Y_1 / \sqrt{n}$, 因此 $\bar{X}_n$ 有 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2/n)$ 分佈, 若能再證出

$$\sum_{j=2}^n Y_j^2 = \sum_{j=1}^n (X_j - \bar{X}_n)^2$$

便得證了。但

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n (X_j - \bar{X}_n)^2 &= \sum_{j=1}^n X_j^2 - n\bar{X}_n^2 = \sum_{j=1}^n X_j^2 - Y_1^2 \\ &= \mathbf{X}\mathbf{X}' - Y_1^2 = \mathbf{X}C C' \mathbf{X}' - Y_1^2 = \mathbf{Y}\mathbf{Y}' - Y_1^2 \end{aligned}$$

$$= \sum_{j=2}^n Y_j^2 \text{。}$$

證畢。