MAT-269: Sesión 2, Estadística descriptiva

Felipe Osorio

fosorios.mat.utfsm.cl

Departamento de Matemática, UTFSM



Datos multivariados

Datos multivariados:

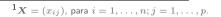
Tenemos una muestra aleatoria x_1,\dots,x_n donde para cada observación se ha medido $p\geq 2$ variables (o características) de interés. Así $x_i=(x_{i1},\dots,x_{ip})^{\top}$ es vector p-dimensional.

Podemos disponer la información en una matriz de datos¹

$$oldsymbol{X} = egin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \ dots & dots & dots \ x_{n} & dots & dots \ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} = egin{pmatrix} oldsymbol{x}_1^{ op} \ oldsymbol{x}_2^{ op} \ dots \ oldsymbol{x}_n^{ op} \end{pmatrix}.$$

Observación:

Por simplicidad asumiremos que x_1, \ldots, x_n son variables aleatorias IID desde $F_p(\mu, \Sigma)$ (con F_p común).





Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)

Iris setosa



Iris versicolor

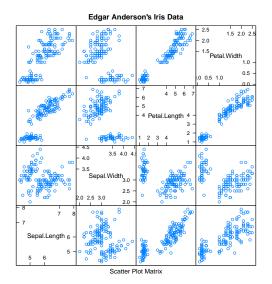


Iris virginica





Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)





Datos de Flores Iris (Anderson, 1935; Fisher, 1936)

Datos observados:

Mediciones (cm) del largo y ancho de los sépalos y el largo y ancho de pétalos para 50 flores desde 3 especies de Iris (setosa, virginica y versicolor).

Objetivo:

- Obtener una función que permita discriminar entre especies.
- Usando las medidas de una flor, clasificarla apropiadamente.

Características del problema:

- ► El análisis exploratorio revela una separación evidente en 2 grupos.
- Técnicas más refinadas permiten identificar las 3 especies, p.ej.:
 - Análisis discriminante.
 - ► Técnicas de clasificación (Reconocimiento de patrones),
 - Aprendizaje de máquina (Máquinas de soporte vectorial, Data mining).



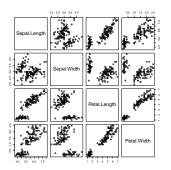
Conjunto de datos

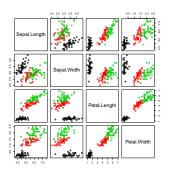
>	iris				
	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width	Species
1	5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
2	4.9	3.0	1.4	0.2	setosa
3	4.7	3.2	1.3	0.2	setosa
4	4.6	3.1	1.5	0.2	setosa
5	5.0	3.6	1.4	0.2	setosa
6	5.4	3.9	1.7	0.4	setosa
7	4.6	3.4	1.4	0.3	setosa
8	5.0	3.4	1.5	0.2	setosa
9	4.4	2.9	1.4	0.2	setosa
10	4.9	3.1	1.5	0.1	setosa
11	1 5.4	3.7	1.5	0.2	setosa
12	2 4.8	3.4	1.6	0.2	setosa
13	3 4.8	3.0	1.4	0.1	setosa
•					
14	18 6.5	3.0	5.2	2.0	virginica
14	19 6.2	3.4	5.4	2.3	virginica
15	50 5.9	3.0	5.1	1.8	virginica
					-



Gráfico del conjunto de datos

```
x <- iris[,1:4]
pairs(x)  # 1er panel
pairs(x, col = iris$Species) # colores representando 'especies'</pre>
```







Análogamente a la media y covarianza \overline{x} y s^2 para el caso unidimensional. Podemos definir sus contrapartes multivariadas como:

$$egin{aligned} \overline{oldsymbol{x}} &= rac{1}{n} \sum_{i=1}^n oldsymbol{x}_i, \ S &= rac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}})^ op. \end{aligned}$$

En efecto, $\overline{\boldsymbol{x}} = (\overline{x}_1, \dots, \overline{x}_p)^{\top}$ y $\boldsymbol{S} = (s_{jk})$, donde

$$\overline{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij},$$

$$s_{jk} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \overline{x}_j)(x_{ik} - \overline{x}_k),$$

 $\mathsf{para}\ j,k=1,\dots,p.$



Observación:

Algunas propiedades del vector de medias y la matriz de covarianza, surgen de escribir formas compactas que dependen de la matriz de datos $X=(x_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times p}$. En efecto,

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i = \frac{1}{n} \boldsymbol{X}^{\top} \boldsymbol{1}_n.$$

Sea

$$egin{aligned} oldsymbol{Q} &= \sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}})^ op = \sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) oldsymbol{x}^ op - \sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) \overline{oldsymbol{x}}^ op \ &= \sum_{i=1}^n oldsymbol{x}_i oldsymbol{x}_i^ op - \overline{oldsymbol{x}} \sum_{i=1}^n oldsymbol{x}_i oldsymbol{x}_i^ op - n \overline{oldsymbol{x}} \overline{oldsymbol{x}}^ op, \end{aligned}$$

pues
$$\sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) \overline{oldsymbol{x}}^ op = \mathbf{0}.^2$$



²No se hará distinción sobre el *orden* de las matrices de ceros.

Notando

$$\sum_{i=1}^n oldsymbol{x}_i oldsymbol{x}_i^ op = oldsymbol{X}^ op oldsymbol{X},$$

sigue que

$$S = \frac{1}{n-1} Q = \frac{1}{n-1} \left\{ X^{\top} X - n \left(\frac{1}{n} X^{\top} \mathbf{1}_n \right) \left(\frac{1}{n} X^{\top} \mathbf{1}_n \right)^{\top} \right\}$$
$$= \frac{1}{n-1} \left(X^{\top} X - \frac{1}{n} X^{\top} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^{\top} X \right) = \frac{1}{n-1} X^{\top} C X$$

con $C = I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^ op$ la matriz de centrado. Es sencillo mostrar que

$$C^{\top} = C, \qquad C^2 = C,$$

es decir C es matriz de proyección. Esto permite mostrar el siguiente resultado.



Resultado:

La matriz de covarianza $oldsymbol{S}$, es semidefinida positiva.

Demostración:

Sea $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^p$, vector no nulo. Tenemos que,

$$egin{aligned} oldsymbol{a}^{ op} oldsymbol{S} oldsymbol{a} &= rac{1}{n-1} oldsymbol{a}^{ op} oldsymbol{X}^{ op} oldsymbol{C} oldsymbol{X} oldsymbol{a} &= rac{1}{n-1} oldsymbol{u}^{ op} oldsymbol{u} \geq 0, \qquad oldsymbol{u} = oldsymbol{C} oldsymbol{X} oldsymbol{a}, \end{aligned}$$

es decir, $oldsymbol{S}$ es matriz semidefinida positiva. 3



 $^{{}^{3}}S$ será definida positiva si $n \geq p+1$.

La matriz de correlación entre las p variables de interés, es dada por:

$$\mathbf{R} = (r_{ij}),$$

donde

$$r_{jk} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \overline{x}_j)(x_{ik} - \overline{x}_k)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \overline{x}_j)^2 \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - \overline{x}_k)^2}}$$
$$= \frac{s_{jk}}{\sqrt{s_{jj} s_{kk}}},$$

para $j, k = 1, \ldots, p$, con $\boldsymbol{S} = (s_{jk})$.

Sea, $D = \operatorname{diag}(s_{11}, s_{22}, \dots, s_{pp})$. Así, podemos escribir

$$R = D^{-1/2}SD^{-1/2}, \qquad S = D^{1/2}RD^{1/2}.$$



Estadísticas de resumen: Datos Iris

```
> x <- iris[,1:4]
 # cálculo de estadísticas de resumen multivariadas
 > xbar <- apply(x, 2, mean)</pre>
 > S <- cov(x)
 > R < - cor(x)
 # salida
 > xbar
Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
     5.8433 3.0573
                            3.7580
                                        1.1993
 > S
           Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length
               0.6857
                         -0.0424
                                        1.27
                                                  0.516
Sepal.Width
             -0.0424 0.1900
                                       -0.33 -0.122
Petal.Length 1.2743 -0.3297
                                       3.12 1.296
Petal.Width 0.5163 -0.1216
                                      1.30
                                                   0.581
 # alternativamente podemos hacer
 > xbar <- colMeans(x)</pre>
 > R < - cov2cor(S)
 > z <- cov.wt(x, cor = TRUE, method = "unbiased")
```



Estadísticas de resumen: Datos Iris

Petal.Length

Petal.Width

```
# 'cov.wt' entrega una 'lista'
  > z <- cov.wt(x, cor = TRUE, method = "unbiased")
  > z
$cov
             Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
Sepal.Length
                0.6856935 -0.0424340
                                         1.2743154
                                                    0.5162707
Sepal.Width
               -0.0424340 0.1899794
                                        -0.3296564
                                                    -0.1216394
Petal.Length
             1.2743154 -0.3296564
                                         3.1162779
                                                    1.2956094
Petal.Width
               0.5162707 -0.1216394
                                        1.2956094
                                                    0.5810063
$center
Sepal.Length
             Sepal.Width Petal.Length
                                       Petal.Width
    5.843333
                3.057333
                              3.758000
                                           1.199333
$n.obs
Γ1] 150
$cor
             Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width
                1.0000000 -0.1175698
                                        0.8717538
Sepal.Length
                                                    0.8179411
Sepal.Width
               -0.1175698 1.0000000
                                        -0.4284401
                                                    -0.3661259
```

0.8717538 -0.4284401

-0.3661259

0.8179411

1.0000000

0.9628654

0.9628654

1.0000000



Transformaciones lineales

Considere:

$$\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{b}, \qquad i = 1, \dots, n,$$

donde $oldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{q imes p}$ y $oldsymbol{b} \in \mathbb{R}^p$. Entonces,

$$\overline{oldsymbol{y}} = rac{1}{n}\sum_{i=1}^n oldsymbol{y}_i = oldsymbol{A}rac{1}{n}\sum_{i=1}^n oldsymbol{x}_i + oldsymbol{b} = oldsymbol{A}\overline{oldsymbol{x}} + oldsymbol{b},$$

mientras que

$$y_i - \overline{y} = Ax_i + b - A\overline{x} - b = A(x_i - \overline{x}).$$

De este modo,

$$egin{aligned} oldsymbol{S}_Y &= rac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (oldsymbol{y}_i - \overline{oldsymbol{y}}) (oldsymbol{y}_i - \overline{oldsymbol{y}})^ op = rac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n oldsymbol{A} (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}})^ op oldsymbol{A}^ op \ &= rac{1}{n-1} oldsymbol{A} \sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}) (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}})^ op oldsymbol{A}^ op &= oldsymbol{A} oldsymbol{S}_X oldsymbol{A}^ op. \end{aligned}$$



Transformación de Mahalanobis

En particular, para la transformación,

$$z_i = S^{-1/2}(x_i - \overline{x}), \qquad i = 1, \dots, n,$$

donde $oldsymbol{S} = oldsymbol{S}^{1/2} oldsymbol{S}^{1/2}$ con $oldsymbol{S}^{1/2}$ un factor raíz cuadrada de $oldsymbol{S}$, sigue que

$$\overline{m{z}}=m{0}, \qquad \mathsf{y} \qquad m{S}_Z=m{I}_p.$$

Observación:

En la práctica podemos considerar los siguientes métodos para obtener $S^{-1/2}$:

- descomposición Cholesky.
- descomposición espectral.⁴



⁴Este procedimiento no es recomendado.

Suponga S>0 y considere la descomposición espectral

$$S = U\Lambda U^{\top}$$
.

donde ${\pmb U}$ es matriz ortogonal y ${\pmb \Lambda}=\operatorname{diag}(\lambda_1,\dots,\lambda_p)$ con $\lambda_1\geq\dots\geq\lambda_p>0$ son los valores propios de ${\pmb S}$. De este modo podemos considerar ${\pmb S}^{-1/2}={\pmb U}{\pmb \Lambda}^{-1/2}{\pmb U}^{\top},^5$ con ${\pmb \Lambda}^{-1/2}=\operatorname{diag}(\lambda_1^{-1/2},\dots,\lambda_p^{-1/2})$. Esto lleva a la transformación

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}^{-1/2} \mathbf{U}^{\top} (\mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}}), \qquad i = 1, \dots, n.$$
 (1)

Usando la descomposición Cholesky tenemos $S = GG^{\top}$, con G matriz triangular inferior. En este caso, $S^{-1} = (GG^{\top})^{-1} = G^{-\top}G^{-1}$ y hacemos

$$\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}}), \qquad i = 1, \dots, n.$$
 (2)



 $^{^{}f 5}$ aún otra alternativa es considerar $m S^{1/2}=Um\Lambda^{1/2}$ de ahí que $m S^{-1/2}=m\Lambda^{-1/2}U^{ op}$.

Observación:

Si consideramos $oldsymbol{S} = oldsymbol{U} oldsymbol{\Lambda} oldsymbol{U}^{ op}$ y hacemos

$$\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{U}^\top (\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}}), \qquad i = 1, \dots, n.$$
 (3)

Entonces, es fácil notar que

$$\overline{y} = 0$$
,

mientras que

$$S_Y = U^\top S U = U^\top U \Lambda U^\top U = \Lambda.$$

Además,

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{S}_Y = \operatorname{tr} \boldsymbol{\Lambda} = \sum_{j=1}^p \lambda_j,$$

$$|S_Y| = |\mathbf{\Lambda}| = \prod_{j=1}^p \lambda_j.$$

La transformación en (3) surge en análisis de componentes principales.



Definición (Distancia de Mahalanobis):

Considere una muestra de n observaciones x_1,\dots,x_n de este modo, la distancia de Mahalanobis es dada por

$$D_i = \{(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^{\top} \boldsymbol{S}^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})\}^{1/2}, \qquad i = 1, \dots, n,$$

como la distancia de la observación i-ésima hacia el "centro" de los datos, \overline{x} ponderada por la matriz de covarianza.

Observación:

Note que las distancias D_i pueden ser calculadas de forma bastante eficiente usando (2), como:

$$D_i = \{(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^\top \boldsymbol{S}^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})\}^{1/2} = (\boldsymbol{z}_i^\top \boldsymbol{z}_i)^{1/2},$$

es más, $m{z}_i$ es obtenido como solución del sistema $m{G}m{z}_i = m{x}_i - \overline{m{x}}$ para $i=1,\dots,n$.



Usando

$$g_{ij} = (\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^{\top} \boldsymbol{S}^{-1} (\boldsymbol{x}_j - \overline{\boldsymbol{x}}), \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Mardia (1970)⁶ definió medidas de sesgo y curtosis multivariadas, dadas por

$$b_{1p} = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n g_{ij}^3, \qquad b_{2p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_{ii}^2,$$

respectivamente.

Bajo normalidad, debemos tener:

$$b_{1p} = 0,$$
 $b_{2p} = p(p+2).$

Observación:

Las estadísticas b_{1p} y b_{2p} son invariantes bajo transformaciones afín:

$$y_i = Ax_i + b.$$



⁶Mardia (1970) *Biometrika* **57**, 519-530.

Distancia de Mahalanobis: Datos Iris

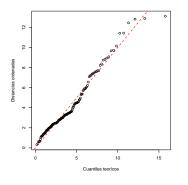
```
# número de obs y variables
> nobs <- nrow(x) # 150 obs
> p <- ncol(x) # 4 variables

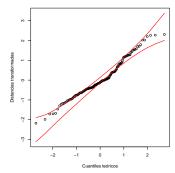
# distancias de Mahalanobis y kurtosis
> D2 <- mahalanobis(x, xbar, S)
> kurtosis <- mean(D2^2)
> kurtosis
[1] 23.42418
> p * (p + 2) # valor de kurtosis bajo normalidad
[1] 24

# QQ-plot de distancias de Mahalanobis
> qqplot(qchisq(ppoints(nobs), df = p), D2,
+ xlab = "Cuantiles teorícos",
+ ylab = "Distancias ordenadas")
> abline(c(0.1), col = "red", lwd = 2, lty = 2)
```



Distancia de Mahalanobis: Datos Iris







Un algoritmo online para calcular \overline{x} y S (Clarke, 1971) 7

Considere

$$\overline{\boldsymbol{x}}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \boldsymbol{x}_i.$$

De este modo,

$$egin{aligned} \overline{oldsymbol{x}}_n &= rac{1}{n} \Big(\sum_{i=1}^{n-1} oldsymbol{x}_i + oldsymbol{x}_n \Big) = rac{1}{n} \Big((n-1) \overline{oldsymbol{x}}_{n-1} + oldsymbol{x}_n \Big) \ &= rac{1}{n} \Big(n \overline{oldsymbol{x}}_{n-1} - \overline{oldsymbol{x}}_{n-1} + oldsymbol{x}_n \Big) \ &= \overline{oldsymbol{x}}_{n-1} + rac{oldsymbol{\delta}_n}{n}, \end{aligned}$$

 $\operatorname{con}\, \boldsymbol{\delta}_n = \boldsymbol{x}_n - \overline{\boldsymbol{x}}_{n-1}.$

Ecuación en (4) corresponde a un algoritmo recursivo para el cálculo del promedio.



(4)

⁷Clarke (1971) Applied Statistics 20, 206-209.

Un algoritmo online para calcular \overline{x} y S (Clarke, 1971)

Sea

$$oldsymbol{Q}_n = \sum_{i=1}^n (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}_n) (oldsymbol{x}_i - \overline{oldsymbol{x}}_n)^ op.$$

Es fácil notar que (Tarea):

$$\mathbf{Q}_n = \mathbf{Q}_{n-1} + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \boldsymbol{\delta}_n \boldsymbol{\delta}_n^{\top}.$$
 (5)

 $\operatorname{con}\, \boldsymbol{\delta}_n = \boldsymbol{x}_n - \overline{\boldsymbol{x}}_{n-1}.$

Ecuaciones (4) y (5) llevan al siguiente algoritmo.



Cálculo de la varianza muestral. Algoritmo online (1-paso)⁸

Algoritmo AS 41: Promedio y matriz de covarianza muestral.

Entrada: Matriz de datos $X^{\top} = (x_1, \dots, x_n)$. **Salida**: Promedio y matriz de covarianza, \overline{x} y S. 1 begin $oldsymbol{M} \leftarrow oldsymbol{x}_1$ $Q \leftarrow 0$ for i=2 to n do $egin{aligned} oldsymbol{\delta} \leftarrow oldsymbol{x}_i - oldsymbol{M} \ oldsymbol{M} \leftarrow oldsymbol{M} + rac{1}{i} oldsymbol{\delta} \ oldsymbol{Q} \leftarrow oldsymbol{Q} + \left(1 - rac{1}{i}
ight) oldsymbol{\delta} oldsymbol{\delta}^ op \end{aligned}$ 5 end $\overline{\boldsymbol{x}} \leftarrow \boldsymbol{M}$ $S \leftarrow \frac{1}{Q}$

10 / A



Propiedades básicas de los momentos muestrales

Suponga que x_1,\dots,x_n son una muestra aleatoria, tal que $\mathsf{E}(x_i)=\mu$ y $\mathsf{Cov}(x_i)=\Sigma.$ De este modo,

$$\mathsf{E}(\overline{m{x}}) = rac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathsf{E}(m{x}_i) = m{\mu},$$

mientras que

$$\mathsf{Cov}(\overline{m{x}}) = rac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \mathsf{Cov}(m{x}_i) = rac{1}{n} \, m{\Sigma}.$$

Sea $m{y}_i = m{x}_i - m{\mu}$, así $\overline{m{y}} = \overline{m{x}} - m{\mu}$ y $\mathsf{E}(m{y}_i) = m{0}$, $\mathsf{Cov}(m{y}_i) = m{\Sigma}$, para $i = 1, \dots, n$.

Además

$$\begin{split} \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{x}_{i} - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_{i} - \overline{\boldsymbol{x}})^{\top} &= \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{y}_{i} - \overline{\boldsymbol{y}})(\boldsymbol{y}_{i} - \overline{\boldsymbol{y}})^{\top} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{y}_{i} \boldsymbol{y}_{i}^{\top} - n \overline{\boldsymbol{y}} \, \overline{\boldsymbol{y}}^{\top} \end{split}$$



Propiedades básicas de los momentos muestrales

Ahora

$$\begin{split} \mathsf{E}(\boldsymbol{Q}) &= \sum_{i=1}^n \mathsf{E}(\boldsymbol{y}_i \boldsymbol{y}_i^\top) - n \, \mathsf{E}(\overline{\boldsymbol{y}} \, \overline{\boldsymbol{y}}^\top) \\ &= \sum_{i=1}^n \mathsf{Cov}(\boldsymbol{y}_i) - n \, \mathsf{Cov}(\overline{\boldsymbol{y}}) \\ &= n \boldsymbol{\Sigma} - n \Big(\frac{1}{n} \boldsymbol{\Sigma}\Big) = (n-1) \boldsymbol{\Sigma}. \end{split}$$

Es decir, \overline{x} y S son estimadores insesgados de μ y Σ , respectivamente.

Observación:

Evidentemente

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{n} \boldsymbol{Q} = \left(\frac{n-1}{n}\right) \boldsymbol{S},$$

es un estimador sesgado para Σ .

