

# Distribuições Multivariadas

L. F. Bossa

UFSC

24/03/25

## Section 1

# Variável Aleatória unidimensional

# Variável Aleatória unidimensional

Uma variável aleatória  $X$  é uma função que associa um número real a cada resultado de um experimento aleatório. Podemos caracterizar uma variável aleatória por sua função densidade de probabilidade  $f(x)$ , que satisfaz a propriedade

$$\mathbb{P}(X \leq a) = \int_{-\infty}^a f(x) dx$$

# Esperança

Também conhecido como média e denotado por  $\mu$ .

$$\mathbb{E}(X) = \int_{\mathbb{R}} xf(x)dx$$

Em geral, dada  $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  temos

$$\mathbb{E}(g(X)) = \int_{\mathbb{R}} g(x)f(x)dx$$

# Variância

$$\text{Var}(X) = \mathbb{E}((X - \mu)^2)$$

Mede o quão dispersos estão os dados de  $X$ : quanto maior a variância, mais longe da média estão os dados.

A raiz quadrada da variância é o *desvio-padrão*, geralmente denotado por  $\sigma$ .

# Variáveis Gaussianas

São caracterizadas pela sua função de densidade

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

Uma variável aleatória  $X$  com média  $\mu$  e variância  $\sigma^2$  é denotada por  $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ .

## Z-score

Dada uma variável aleatória  $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ , podemos fazer uma transformação

$$Z = \frac{X - \mu}{\sigma}$$

de modo que  $Z \sim N(0, 1)$ .



## Section 2

# Variável Aleatória em várias dimensões

# Motivação

- Dificilmente uma coleta de dados vai coletar apenas um dado de cada amostra estudada
- Fazer uma análise conjunta dos dados permite usar ferramentas de álgebra linear (análise de componentes principais, clustering)

- Temos um vetor  $\vec{X} = (X_1, \dots, X_n)$  cujas componentes são variáveis aleatórias.
- Temos uma função de densidade  $f(x_1, \dots, x_n)$  de modo que

$$\mathbb{P}(X_1 \leq a_1, \dots, X_n \leq a_n) = \int_{-\infty}^{a_1} \dots \int_{-\infty}^{a_n} f(x_1, \dots, x_n) dx_n \dots dx_1$$

## Probabilidade marginal

Surge quando queremos estudar a distribuição geral de uma variável só, "ignorando" as outras. Nesse caso, integramos a variável de interesse no intervalo de interesse, e as outras variáveis são integradas em todo  $\mathbb{R}$ .

$$\mathbb{P}(X_1 \leq a_1) = \int_{-\infty}^{a_1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_n \dots dx_1$$

Podemos definir então as densidades marginais

$$f_1(x) = \int_{-\infty}^x \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_n \dots dx_1$$

# Esperança

No caso vetorial, o operador esperança atua entrada-a-entrada

$$\mathbb{E}(\vec{X}) = (\mathbb{E}(X_1), \mathbb{E}(X_2), \dots, \mathbb{E}(X_n))$$

em que cada esperança é calculada com respeito à distribuição marginal de cada variável.

## Propriedades da esperança

- Sendo  $c$  um vetor de constantes,

$$\mathbb{E}(c^\top \vec{X}) = c^\top \vec{\mu}$$

- Sendo  $A$  uma matriz de constantes,

$$\mathbb{E}(A\vec{X}) = A\vec{\mu}$$

## Covariância

Dadas variáveis  $X$ ,  $Y$  unidimensionais com médias  $\mu_X, \mu_Y$ , definimos a covariância de  $X$  e  $Y$  como

$$\text{Cov}(X, Y) = \mathbb{E}((X - \mu_X)(Y - \mu_Y))$$

Por vezes também é usada a notação  $\sigma_{XY}$  para denotar a covariância.

A covariância indica o quanto  $X$  e  $Y$  estão *linearmente* relacionadas.

Note que

$$\text{Cov}(X, X) = \mathbb{E}((X - \mu_X)(X - \mu_X)) = \mathbb{E}((X - \mu_X)^2) = \text{Var}(X)$$



## Independência estatística

Duas variáveis  $X_1$  e  $X_2$  são ditas independentes se for possível escrever a função de densidade como  $f(x_1, x_2) = f_1(x_1)f_2(x_2)$

### Teorema

Se  $X_1$  e  $X_2$  são independentes, então  $\text{Cov}(X, Y) = 0$

### Contra-exemplo

A recíproca não é verdadeira. Considere  $X$  uma variável aleatória com média zero e densidade  $f(x)$  sendo uma função par. Defina  $Y = X^2$ . Nesse caso, claramente  $Y$  e  $X$  não são independentes, mas

$$\text{Cov}(X, Y) = 0$$

# Correlação

É a covariância “normalizada”

$$\text{Corr}(X, Y) = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma_X \cdot \sigma_Y},$$

com  $\sigma_X$  e  $\sigma_Y$  sendo os desvios-padrão de  $X$  e  $Y$ .

A correlação é também denotada por  $\rho_{XY}$ .

- Por quê é normalizada?

## Matriz de Variância-Covariância

Para calcular a variância de uma variável unidimensional, temos que calcular

$$\mathbb{E}((X - \mu_X)^2)$$

Por causa do termo quadrático, temos que adaptar esse cálculo para o caso vetorial.

Sendo  $\vec{X} = (X_1, \dots, X_n)$  uma variável aleatória e seja  $\mathbb{E}(\vec{X}) = \vec{\mu}_X$  seu vetor-médio. Calculamos a variância de  $\vec{X}$  como

$$\Sigma = \mathbb{E}((\vec{X} - \vec{\mu}_X)(\vec{X} - \vec{\mu}_X)^\top)$$

$$\Sigma = \mathbb{E} \begin{pmatrix} (X_1 - \mu_{X_1})(X_1 - \mu_{X_1}) & (X_1 - \mu_{X_1})(X_2 - \mu_{X_2}) & \dots & (X_1 - \mu_{X_1})(X_n - \mu_{X_n}) \\ (X_2 - \mu_{X_2})(X_1 - \mu_{X_1}) & (X_2 - \mu_{X_2})(X_2 - \mu_{X_2}) & \dots & (X_2 - \mu_{X_2})(X_n - \mu_{X_n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (X_n - \mu_{X_n})(X_1 - \mu_{X_1}) & (X_n - \mu_{X_n})(X_2 - \mu_{X_2}) & \dots & (X_n - \mu_{X_n})(X_n - \mu_{X_n}) \end{pmatrix}$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \text{Var}(X_1) & \text{Cov}(X_1, X_2) & \dots & \text{Cov}(X_1, X_n) \\ \text{Cov}(X_1, X_2) & \text{Var}(X_2) & \dots & \text{Cov}(X_2, X_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(X_n, X_1) & \text{Cov}(X_n, X_2) & \dots & \text{Var}(X_n) \end{pmatrix}$$

## Teorema

A matriz de variância-covariância é simétrica definida positiva.

## Teorema

A matriz de variância-covariância é simétrica definida positiva.

Para simplificar os cálculos, seja  $\vec{W} = \vec{X} - \vec{\mu}_X$ . A matriz de variância-covariância pode ser reescrita como

$$\Sigma = \mathbb{E}(\vec{W}\vec{W}^\top)$$

Dado um vetor  $x$  qualquer, note que, por linearidade da esperança,

$$x^\top \Sigma x = x^\top \mathbb{E}(\vec{W}\vec{W}^\top)x = \mathbb{E}((\vec{W}x)^\top \vec{W}x) = \mathbb{E}(\|\vec{W}x\|^2) \geq 0.$$



## Teorema

Dada uma matriz  $\Sigma$  simétrica definida positiva, existe um vetor aleatório  $\vec{X}$  tal que  $\Sigma$  é sua matriz de variância-covariância.

## Teorema

Dada uma matriz  $\Sigma$  simétrica definida positiva, existe um vetor aleatório  $\vec{X}$  tal que  $\Sigma$  é sua matriz de variância-covariância.

Da teoria de diagonalização, sabemos que toda matriz simétrica definida positiva pode ser diagonalizada por uma matriz ortogonal. Assim, podemos escrever

$$\Sigma = QDQ^T$$

em que  $Q$  é uma matriz ortogonal ( $Q^T Q = I$ ) e  $D$  é uma matriz diagonal  $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  com  $\lambda_i$  sendo os autovalores de  $\Sigma$ .

Escreva  $\sqrt{D} = \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n})$ . Note então que  $\sqrt{D}$  é simétrica e

$$\Sigma = Q\sqrt{D}\sqrt{D}Q^T = (Q\sqrt{D})(Q\sqrt{D})^T$$

Sejam  $Y_i \sim N(0, 1)$  variáveis aleatórias independentes, para  $i \in \{1, \dots, n\}$ , e forme  $\vec{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)$ . Finalmente, faça  $\vec{X} = Q\sqrt{D}\vec{Y}$ , e vamos mostrar que  $\vec{X}$  tem matriz de variância-covariância  $\Sigma$ .

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\vec{X}\vec{X}^\top) &= \mathbb{E}(Q\sqrt{D}\vec{Y}(Q\sqrt{D}\vec{Y})^\top) = \mathbb{E}(Q\sqrt{D}\vec{Y}\vec{Y}^\top(Q\sqrt{D})^\top) \\ &= Q\sqrt{D}\mathbb{E}(\vec{Y}\vec{Y}^\top)\sqrt{D}Q^\top = Q\sqrt{D}\sqrt{D}Q^\top = \Sigma\end{aligned}$$

## Como resumir a variância?

Por vezes, não queremos apresentar a variância como uma matriz, mas como um número que resuma o quão dispersos estão nossos dados.

Para isso, temos a

### Variância Total

$$\text{tr}(\Sigma) = \sum_{i=1}^n \text{Var}(X_i)$$

### Variância Generalizada

$$\det(\Sigma)$$

# Variáveis gaussianas multivariadas

Finalmente estamos aptos a entender a fórmula para a distribuição gaussiana multivariada.

Para tal, vamos reinterpretar a fórmula da gaussiana em 1 dimensão

A gaussiana padrão é dada por

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$$

Podemos aplicar uma mudança de variáveis para alterar seu centro e dispersão, lembrando fazer uma escala para que a integral sobre  $\mathbb{R}$  continue sendo 1.

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



Mas note que termos quadráticos não generalizam bem para vetores. Para tanto, vamos reescrever o lado direito como

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)(\sigma^2)^{-1}(x - \mu)\right)$$

Nessa expressão fica mais claro que podemos substituir  $\sigma^2$  pela matriz de covariância,  $x - \mu$  por vetores, e o termo de escala por um determinante.

Nesse caso, temos a distribuição gaussiana multivariada com média  $\vec{\mu}$  e matriz de variância-covariância  $\Sigma$ , cuja expressão é dada por

$$f(\vec{X}) = \frac{1}{\sqrt{|2\pi\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2} (\vec{X} - \vec{\mu})^\top \Sigma^{-1} (\vec{X} - \vec{\mu})\right)$$

## Distância Mahalanobis

Dados vetores  $X$  e  $Y$  que pertençam a uma distribuição multivariada com matriz de variância-covariância  $\Sigma$ , definimos a distância Mahalanobi entre eles como

$$d_{XY}^2 = (X - Y)^{\top} \Sigma^{-1} (X - Y)$$

Essa é a generalização do Z-score.

## Section 3

### Análise de componentes principais

# Análise de Componentes Principais

- Podemos usar a matriz de variância-covariância para encontrar a direção de maior variância dos dados.
- Embora tenhamos  $n$  direções nas quais os dados variam, com uma mudança de coordenadas, podemos encontrar as direções que concentram boa parte da variação dos dados.

# Diagonalização

Lembre-se que  $\Sigma$  pode ser escrita como

$$\Sigma = QDQ^T$$

em que  $Q$  é uma matriz ortogonal e  $D$  é uma matriz diagonal.

Faça então a transformação  $\vec{Y} = Q^T \vec{X}$ .

Note que a matriz de variância-covariância de  $\vec{Y}$  é dada por

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\vec{Y}\vec{Y}^\top) &= \mathbb{E}(Q^\top \vec{X}\vec{X}^\top Q) = Q^\top \mathbb{E}(\vec{X}\vec{X}^\top)Q = Q^\top \Sigma Q \\ &= Q^\top Q D Q^\top Q = D\end{aligned}$$

Veja que  $\vec{Y}$  é uma variável aleatória com covariâncias zeradas.

Note que a matriz de variância-covariância de  $\vec{Y}$  e de  $\vec{X}$  são similares, então podemos usar a propriedade de invariância do traço e do determinante e obtemos

$$\text{tr}(\Sigma) = \text{tr}(D) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \quad (\text{soma dos autovalores})$$

$$\det(\Sigma) = \det(D) = \prod_{i=1}^n \lambda_i \quad (\text{produto dos autovalores})$$

Ou seja, a variância total e a variância generalizada se mantêm inalteradas quando mudamos nossa análise de  $\vec{X}$  para  $\vec{Y}$ .



# Exemplos interativos

↗ Aplicação no Geogebra