Correlación Canónica

Graciela Boente

Un investigador recopiló datos sobre tres variables psicológicas, cuatro variables académicas (resultados de exámenes estandarizados) y de género para 600 estudiantes de primer año de universidad.

Está interesado en la forma en que el conjunto de variables psicológicas se relaciona con las variables académicas y el sexo.

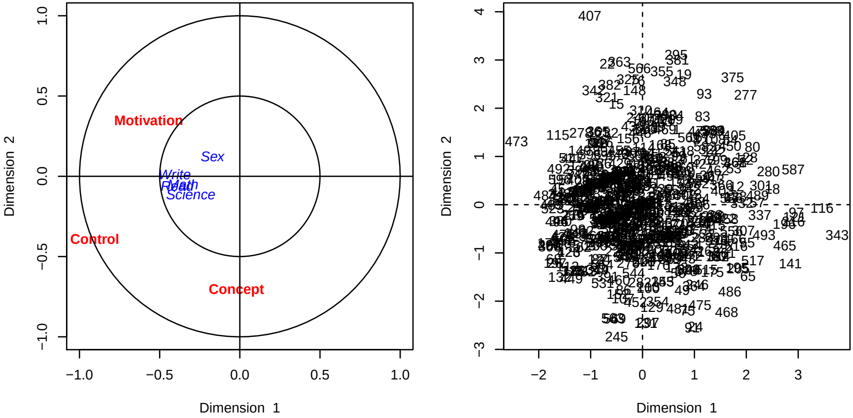
En particular, el investigador está interesado en saber cuántas dimensiones (variables canónicas) son necesarias para comprender la asociación entre los dos conjuntos de variables.

Las variables psicológicas son

- capacidad de control
- autoconcepto
- motivación

y las académicas son las pruebas estandarizadas de

- lectura (READ)
- escritura (WRITING)
- matemáticas (MATH)
- y ciencia (SCIENCE)


Motivation
Sex
Write
Read
Math
Science
Control
Concept
Dimension 1
Dimension 2
407
473
343
116
Dimension 1
Dimension 2

Sea $\mathbf{z} = (z_1, \ldots, z_{p+q})^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$ donde $d = p + q$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^q$. Supongamos por simplicidad que $\mathbb{E}\mathbf{z} = \mathbf{0}_d$. Sea

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{z}) = \mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Sigma}_{11} & \mathbf{\Sigma}_{12} \\ \mathbf{\Sigma}_{21} & \mathbf{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}$$

donde $\mathbf{\Sigma}_{11} \in \mathbb{R}^{p\times p}$, $\mathbf{\Sigma}_{22} \in \mathbb{R}^{q\times q}$. Supongamos $\mathbf{\Sigma} > 0$.

Supongamos $p = 1$

Queremos medir la relación lineal entre z_1 y $\mathbf{y} = (z_2, \ldots, z_d)^{\mathrm{T}} \Rightarrow$ usamos el cuadrado del coeficiente de correlación múltiple, $\rho^2_{1,(23\ldots d)}$ que es *la máxima correlación al cuadrado entre z_1 y cualquier combinación lineal $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$*

$$\rho^2_{1,(23\ldots d)} = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{21}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_{21}}{\sigma_{11}}$$

donde $\boldsymbol{\sigma}_{21} = \mathrm{Cov}(\mathbf{y}, z_1)$ y el máximo se alcanzaba en $\boldsymbol{\beta}_0 = \mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_{21}$.

Caso General: $q < p$

Queremos medir la asociación entre $\mathbf{x}$ y $\mathbf{y}$ que estará dada por:

la máxima correlación al cuadrado entre cualquier combinación lineal $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y cualquier combinación lineal $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{0}_p,\boldsymbol{\beta}\neq\mathbf{0}_q} \rho^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$$

con

$$\rho^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} = \frac{\mathrm{Cov}^2\left(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}\right)}{\mathrm{Var}\left(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right)\mathrm{Var}\left(\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}\right)} = \frac{\left(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\beta}\right)^2}{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}\ \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\beta}}$$

Sea $\mathbf{\Sigma}_{jj} = \mathbf{A}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_j$,

$$\mathbf{\Psi}_1 = \left(\mathbf{A}_1^{\mathrm{T}}\right)^{-1} \mathbf{\Sigma}_{12}\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}\mathbf{A}_1^{-1} \qquad \mathbf{\Psi}_2 = \left(\mathbf{A}_2^{\mathrm{T}}\right)^{-1} \mathbf{\Sigma}_{21}\mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}\mathbf{A}_2^{-1}$$

entonces

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{0}_p,\boldsymbol{\beta}\neq\mathbf{0}_q} \rho^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}} = \rho^2_{\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\beta}_1} = \rho_1^2$$

- ρ_1^2 es el máximo autovalor de $\mathbf{\Psi}_1$, es decir, el máximo autovalor de $\mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}$
- $\boldsymbol{\alpha}_1$ es el autovector de $\mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}$ asociado a ρ_1^2 tal que $\boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_1 = 1$.
- $\boldsymbol{\beta}_1$ es el autovector de $\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}\mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}$ asociado a ρ_1^2 tal que $\boldsymbol{\beta}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\beta}_1 = 1$.

$$\boldsymbol{\beta}_1 = \frac{\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_1}{\rho_1} \qquad \boldsymbol{\alpha}_1 = \frac{\mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\beta}_1}{\rho_1}$$

Definición.

- $\rho_1 = \sqrt{\rho_1^2}$ se llama la primer correlación canónica entre **x** y **y**.
- $u_1 = \boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$, $v_1 = \boldsymbol{\beta}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ se llaman las primeras variables canónicas. Se cumple $\mathrm{VAR}(u_1) = \mathrm{VAR}(v_1) = 1$

Como $\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_1 = \rho_1^2\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_1$ y $\boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_1 = 1$ tenemos que

$$\rho_1^2 = \boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_1$$

O sea, ρ_1^2 es el cuadrado del coeficiente de correlación multiple entre la variable $u_1 = \boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y el vector **y** ya que $\mathrm{VAR}(u_1) = 1$ y $\mathrm{COV}(u_1, \mathbf{y}) = \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_1$.

Cómo seguimos?

Este procedimiento puede verse como una técnica de reducción de dimensión en la que $\mathbf{x}$ y $\mathbf{y}$ se reducen a u_1 y v_1 de modo que $\rho^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}$ sea máxima. Pero, la reducción u_1 de $\mathbf{x}$ puede no ser adecuada.

Buscamos $\mathbf{u} = (u_1, \ldots, u_m)^{\mathrm{T}}$ y $\mathbf{v} = (v_1, \ldots, v_m)$ tales que

- $u_j = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$, $v_j = \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$
- $u_1, \ldots, u_m$ sean no correlacionados
- $v_1, \ldots, v_m$ sean no correlacionados
- $\mathrm{C{\scriptsize ORR}}(u_j, v_j)$ sea máxima en algún sentido

Observemos primero que como hablamos de correlaciones podemos suponer que $\mathrm{V{\scriptsize AR}}(u_j) = \mathrm{V{\scriptsize AR}}(v_j) = 1$, es decir,

$$\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_j = 1 \qquad \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\beta}_j = 1$$

Teorema

Supongamos $\boldsymbol{\Sigma}_{11} > 0$, $\boldsymbol{\Sigma}_{22} > 0$, $q < p$, $\boldsymbol{\Sigma}_{jj} = \mathbf{A}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_j$. Sean

- $\mathbf{C} = (\mathbf{A}_1^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{A}_2^{-1}$
- $\boldsymbol{\Upsilon}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$
- $\boldsymbol{\Upsilon}_2 = \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}$
- $1 > \rho_1^2 \geq \rho_2^2 \geq \cdots \geq \rho_m^2 > 0$ con $m = \mathrm{rango}(\boldsymbol{\Sigma}_{12})$ los autovalores no nulos de $\boldsymbol{\Upsilon}_1$ (y de $\boldsymbol{\Upsilon}_2$)
- $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m$ los autovectores de $\boldsymbol{\Upsilon}_1$ asociados a $\rho_1^2 \geq \rho_2^2 \geq \cdots \geq \rho_m^2$ tales que $\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_j = 1$
- $\boldsymbol{\beta}_1, \ldots, \boldsymbol{\beta}_m$ los autovectores de $\boldsymbol{\Upsilon}_2$ asociados a $\rho_1^2 \geq \rho_2^2 \geq \cdots \geq \rho_m^2$ tales que $\boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\beta}_j = 1$

Sea $s \leq m - 1$ y sean $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^p$ y $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^q$ tales que

$$\begin{aligned} \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}) &= 0 \qquad 1 \leq j \leq s \\ \mathrm{Cov}(\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}) &= 0 \qquad 1 \leq j \leq s \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow$$

i) La máxima correlación al cuadrado entre $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ está dada por ρ_{s+1}^2 y ocurre cuando $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_{s+1}$ y $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_{s+1}$, o sea,

$$\max_{\substack{\boldsymbol{\alpha}\neq \mathbf{0}, \boldsymbol{\beta}\neq \mathbf{0} \\ \mathrm{COV}(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}) = 0,\ 1\leq j\leq s \\ \mathrm{COV}(\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}) = 0,\ 1\leq j\leq s}} \rho_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}^2 = \rho_{s+1}^2 = \rho_{\boldsymbol{\alpha}_{s+1},\boldsymbol{\beta}_{s+1}}^2$$

ii) $\mathrm{COV}(\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{x}) = 0$ si $j\neq k$ y $\mathrm{COV}(\boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}, \boldsymbol{\beta}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{y}) = 0$ si $j\neq k$

iii) $\mathrm{VAR}(\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}) = \mathrm{VAR}(\boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}) = 1$

iv) Sea $m = \mathrm{rango}(\boldsymbol{\Sigma}_{12}) \leq \min(q,p) = q$ y tomemos

$$\mathbf{u} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \text{ con } \mathbf{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m, \boldsymbol{\alpha}_{m+1}, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_p)$$
$$\mathbf{v} = \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \text{ con } \mathbf{B} = (\boldsymbol{\beta}_1, \ldots, \boldsymbol{\beta}_q)$$

Luego, si $\mathbf{D}_{\boldsymbol{\rho}} = \mathrm{DIAG}(\rho_1, \ldots, \rho_q)$ con $\rho_i = 0$ si $i > m$

$$\mathrm{VAR}\begin{pmatrix}\mathbf{u}\\ \mathbf{v}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mathbf{I}_q & \mathbf{0} & \mathbf{D}_{\boldsymbol{\rho}} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{p-q} & \mathbf{0} \\ \mathbf{D}_{\boldsymbol{\rho}} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_q\end{pmatrix}$$

o sea, $\mathrm{COV}(u_i, v_j) = 0$ si $i\neq j$ y $\mathrm{COV}(u_i, v_i) = \rho_i$

Definición.

- $\mathbf{u}$ se llama las variables canónicas del espacio $\mathbf{x}$.
- $\mathbf{v}$ se llama las variables canónicas del espacio $\mathbf{y}$.
- $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m$ y $\boldsymbol{\beta}_1, \ldots, \boldsymbol{\beta}_m$ son los vectores canónicos
- u_j es la $j-$ésima variable canónica en el espacio $\mathbf{x}$
- v_j es la $j-$ésima variable canónica en el espacio $\mathbf{y}$

La relación entre $\mathbf{x}$ y $\mathbf{y}$ queda expresada por las correlaciones canónicas $\rho_1^2, \ldots, \rho_m^2$

Como $\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_j = \rho_j^2\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_j$ y $\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_j = 1$ tenemos que

$$\rho_j^2 = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_j$$

O sea, ρ_j^2 es el cuadrado del coeficiente de correlación multiple entre la variable $u_j = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y el vector $\mathbf{y}$, pues $\mathrm{VAR}(u_j) = 1$ y $\mathrm{COV}(u_j, \mathbf{y}) = \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_j$.

Otro enfoque

$$\boldsymbol{\Sigma}_{jj} = \mathbf{A}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_j \qquad \mathbf{A}_j > 0 \qquad\qquad \mathbf{C} = \left(\mathbf{A}_1^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{A}_2^{-1}$$

Por la descomposición de valores singulares

$$\mathbf{C} = \mathbf{L}\begin{pmatrix} \mathbf{D}_{\boldsymbol{\rho}} \\ \mathbf{0}_{(p-q)\times q} \end{pmatrix}\mathbf{M}^{\mathrm{T}}$$

- $\mathbf{L} = (\boldsymbol{\ell}_1, \cdots, \boldsymbol{\ell}_p) \in \mathbb{R}^{p\times p}$, $\mathbf{M} = (\mathbf{m}_1, \cdots, \mathbf{m}_q) \in \mathbb{R}^{q\times q}$, ortogonales, $\mathbf{m}_j \in \mathbb{R}^q$ y $\boldsymbol{\ell}_j \in \mathbb{R}^p$.
- $\mathbf{D}_{\boldsymbol{\rho}} = \mathrm{DIAG}(\rho_1, \ldots, \rho_q)$, $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_q \geq 0$, ρ_j es la raíz cuadrada de $j-$ésimo autovalor de $\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{C} = \Psi_2$.

Los vectores $\{\mathbf{m}_1, \cdots, \mathbf{m}_q\}$ son los autovectores de $\mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{C} = \Psi_2$ y

$$\boldsymbol{\ell}_j = \frac{\mathbf{C}\mathbf{m}_j}{\rho_j} \qquad 1 \leq j \leq q$$

son los autovectores ortonormales de $\mathbf{C}\mathbf{C}^{\mathrm{T}} = \Psi_1$

Definamos

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{L}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{A}_1^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{x} = (u_1, \ldots, u_p)^{\mathrm{T}} \qquad u_j = \left(\mathbf{A}_1^{-1} \boldsymbol{\ell}_j\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{x} \\ \mathbf{v} &= \mathbf{M}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{A}_2^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{y} = (v_1, \ldots, v_q)^{\mathrm{T}} \qquad v_j = \left(\mathbf{A}_2^{-1} \mathbf{m}_j\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{y} \end{aligned}$$

Entonces,

$$\mathrm{VAR}\begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_p & \begin{pmatrix} \mathbf{D}_\rho \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ (\mathbf{D}_\rho \quad \mathbf{0}) & \mathbf{I}_q \end{pmatrix}$$

- $\mathrm{VAR}(u_i) = \mathrm{VAR}(u_j) = 1$
- $\mathrm{CORR}(u_i, v_j) = \rho_i\, \delta_{ij}$, $1 \leq i \leq p$, $1 \leq j \leq q$.

Definición. Las variables $u_1, \ldots, u_p$ y $v_1, \ldots, v_q$ se llaman las variables canónicas y los números ρ_j, $\rho_1 \geq \rho_2 \geq \cdots \geq \rho_q \geq 0$ son las correlaciones canónicas.

La cantidad de correlaciones no nulas es $m = \mathrm{rango}(\boldsymbol{\Sigma}_{12})$

Las dos definiciones coinciden

Sean dos puntos $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^p$, $\mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^p$ y definamos

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{L}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{A}_1^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i = (u_{1,i}, \ldots, u_{p,i})^{\mathrm{T}} \qquad u_{j,i} = \left(\mathbf{A}_1^{-1}\ell_j\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i \quad i = 1, 2$$

Luego,

$$\|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\|^2 = \|\mathbf{L}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{A}_1^{-1}\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\|^2 = (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$$

Sean dos puntos $\mathbf{y}_1 \in \mathbb{R}^p$, $\mathbf{y}_2 \in \mathbb{R}^p$ y definamos

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{M}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{A}_2^{-1}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i = (v_{1,i}, \ldots, v_{q,i})^{\mathrm{T}} \qquad v_{j,i} = \left(\mathbf{A}_2^{-1}\mathbf{m}_j\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \quad i = 1, 2$$

Luego,

$$\|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\|^2 = \|\mathbf{M}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{A}_2^{-1}\right)^{\mathrm{T}} (\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2)\|^2 = (\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} (\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2)$$

O sea, distancias entre puntos del espacio de las variables canónicas representan distancias de Mahalanobis en el espacio original.

Al usar, la reducción de s variables canónicas, las distancias entre puntos del espacio de variables canónicas dan aproximadamente la distancia de Mahalanobis en el espacio original.

Resumen de propiedades de las variables y correlaciones canónicas

- Las variables canónicas son indicadores de los dos conjuntos de variables que se definen por pares, con la condición de máxima correlación
- Los coeficientes de las variables canónicas son los autovectores asociados al mismo autovalor de las matrices

$$\boldsymbol{\Sigma}_{ii}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ij}\boldsymbol{\Sigma}_{jj}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ji} \qquad i = 1,2 \qquad i \neq j$$

- Si $\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ es una variable canónica también lo es $-\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$. Los signos de las variables canónicas suelen tomarse para que la correlación entre las variables canónicas $u_j = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y $v_j = \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ sean positiva.
- Los cuadrados de las correlaciones canónicas ρ_j^2 son los autovalores de $\boldsymbol{\Upsilon}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ y $\boldsymbol{\Upsilon}_2 = \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}$, o sea las raíces de

$$|\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} - \lambda\mathbf{I}_p| = 0$$

Resumen de propiedades de las variables y correlaciones canónicas

- Los cuadrados de las correlaciones canónicas ρ_j^2 son el cuadrado del coeficiente de correlación entre las dos variables canónicas $u_j = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y $v_j = \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ correspondientes.
- Las correlaciones canónicas son invariantes ante transformaciones lineales no singulares de las variables.
- La primer correlación canónica ρ_1^2 es mayor o igual que el mayor coeficiente de correlación al cuadrado entre una variable de cada conjunto.

  $\rho_1^2 \geq \textsc{Corr}^2(x_i, y_j) \qquad \text{para todo} \qquad 1 \leq i \leq p, 1 \leq j \leq q$
- El coeficiente de correlación canónica ρ_j^2 es el cuadrado del coeficiente de correlación multiple entre la variable $u_j = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y el vector $\mathbf{y}$.
- El coeficiente de correlación canónica ρ_j^2 es el cuadrado del coeficiente de correlación multiple entre la variable $v_j = \boldsymbol{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ y el vector $\mathbf{x}$.

Resumen de propiedades de las variables y correlaciones canónicas

- Las variables canónicas son predictores óptimos en el siguiente sentido:

Queremos hallar $2s$ combinaciones lineales $\mathbf{u} = \mathbf{A}_s^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$ y $\mathbf{v} = \mathbf{B}_s^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ con $s \leq m = \mathrm{rango}(\mathbf{\Sigma}_{12})$

- $\mathbf{A}_s = (\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_s)$, $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_s$ linealmente independientes (o sea, $\mathrm{rango}(\mathbf{A}_s) = s$)
- $\mathbf{B}_s = (\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_s)$, $\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_s$ linealmente independientes (o sea, $\mathrm{rango}(\mathbf{B}_s) = s$)
- $\mathbf{A}_s^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}_{11}\mathbf{A}_s = \mathbf{I}_s$, $\mathbf{B}_s^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}_{22}\mathbf{B}_s = \mathbf{I}_s$

tales que $\mathbb{E}\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2$ sea mínima.

El mínimo se alcanza si $\mathbf{a}_j = \boldsymbol{\alpha}_j$ y $\mathbf{b}_j = \boldsymbol{\beta}_j$.

Propiedades

Propiedad 1. Sean

$$\mathbf{\Delta_x} = \text{DIAG}\left(\text{VAR}(x_1), \ldots, \text{VAR}(x_p)\right)$$
$$\mathbf{\Delta_x} = \text{DIAG}\left(\text{VAR}(y_1), \ldots, \text{VAR}(y_q)\right)$$

Se tiene que

- $\text{CORR}(u_j, x_\ell) = \mathbb{E}\left(x_\ell \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\right) \boldsymbol{\alpha}_j / \sqrt{\text{VAR}(x_\ell)}$
- $\text{CORR}(v_j, y_\ell) = \mathbb{E}\left(y_\ell \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\right) \boldsymbol{\beta}_j / \sqrt{\text{VAR}(y_\ell)}$

es decir,

$$\text{CORR}(u_j, \mathbf{x}) = \mathbf{\Delta_x}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{\Sigma}_{11} \boldsymbol{\alpha}_j \qquad \text{CORR}(v_j, \mathbf{y}) = \mathbf{\Delta_y}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{\Sigma}_{22} \boldsymbol{\beta}_j$$
$$\text{CORR}(u_j, \mathbf{y}) = \mathbf{\Delta_y}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{\Sigma}_{21} \boldsymbol{\alpha}_j \qquad \text{CORR}(v_j, \mathbf{x}) = \mathbf{\Delta_x}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\beta}_j$$

Propiedad 2. Si $\mathbf{z} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma})$, $\mathbf{x}$ es independiente de $\mathbf{y}$ si y sólo si $\rho_1 = 0$.

Propiedades

Propiedad 3. Invarianza del análisis.

Si llamamos $\mathbf{z}^\star = \begin{pmatrix} \mathbf{\Delta}_{\mathbf{x}}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{x} \\ \mathbf{\Delta}_{\mathbf{y}}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{y} \end{pmatrix}$ y efectuamos el análisis de correlación canónica de $\mathbf{z}^\star$, o sea, en lugar de

$$\mathbf{\Upsilon}_1 = \mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21} \quad \mathbf{\Upsilon}_2 = \mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}\mathbf{\Sigma}_{11}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{12}$$

tomamos

$$\mathbf{\Upsilon}_1^\star = \mathbf{R}_{11}^{-1}\mathbf{R}_{12}\mathbf{R}_{22}^{-1}\mathbf{R}_{21} \quad \mathbf{\Upsilon}_2^\star = \mathbf{R}_{22}^{-1}\mathbf{R}_{21}\mathbf{R}_{11}^{-1}\mathbf{R}_{12}$$

con $\mathbf{R}_{ij}$ las matrices de correlación entonces

- Las correlaciones canónicas no cambian
- $\boldsymbol{\alpha}_j^\star = \mathbf{\Delta}_{\mathbf{x}}^{1/2}\boldsymbol{\alpha}_j$,
- $\boldsymbol{\beta}_j^\star = \mathbf{\Delta}_{\mathbf{y}}^{1/2}\boldsymbol{\beta}_j$

Por lo tanto, las variables canónicas u_j y v_j son las mismas.

Sean $\mathbf{z}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_i \\ \mathbf{y}_i \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$ i.i.d. con densidad ($\mathbf{\Sigma} > 0$), $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p$, $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^q$. Sea

- $\widetilde{\mathbf{x}}_i = \mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}}$
- $\widetilde{\mathbf{y}}_i = \mathbf{y}_i - \overline{\mathbf{y}}$
- $\widetilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{x}}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \widetilde{\mathbf{x}}_n^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \quad \widetilde{\mathbf{Y}} = \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{y}}_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \widetilde{\mathbf{y}}_n^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$
- $\mathbf{Q}_{11} = \widetilde{\mathbf{X}}^{\mathrm{T}}\widetilde{\mathbf{X}}$, $\mathbf{Q}_{22} = \widetilde{\mathbf{Y}}^{\mathrm{T}}\widetilde{\mathbf{Y}}$, $\mathbf{Q}_{12} = \widetilde{\mathbf{X}}^{\mathrm{T}}\widetilde{\mathbf{Y}}$.
- $\mathbf{S}_{ij} = \mathbf{Q}_{ij}/(n-1)$
- $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix}$

Supongamos $n > d = p + q$ y $q < p$ luego $\mathbf{S}$ es definida positiva con probabilidad 1 y $\mathrm{rango}(\mathbf{Q}_{12}) = q$.

Definición. Se definen las correlaciones canónicas muestrales r_j, $r_1 > r_2 > \cdots > r_q > 0$ (con prob. 1) como $r_j = \sqrt{r_j^2}$ donde $r_1^2 > r_2^2 > \cdots > r_q^2 > 0$ (con prob. 1) son los autovalores de

$$\widehat{\boldsymbol{\Upsilon}}_1 = \mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21} \quad \text{o de} \quad \widehat{\boldsymbol{\Upsilon}}_2 = \mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}$$

o sea, la solución de

$$|\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21} - \lambda \mathbf{I}_p| = 0 \quad \text{o} \quad |\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21} - \lambda \mathbf{S}_{11}| = 0$$

Definición. Se definen las variables canónicas muestrales como

- $\mathbf{u}_i = (u_{1,i}, \ldots, u_{q,i})^{\mathrm{T}}$ con $u_{j,i} = \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i$ y
- $\mathbf{v}_i = (v_{1,i}, \ldots, v_{q,i})^{\mathrm{T}}$ $v_{j,i} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i$

$$\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = r_j^2 \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j \qquad \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{11}\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = 1$$
$$\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = r_j^2 \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j \qquad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{22}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = 1$$

Observemos que

$$1 = \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{11}\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} u_{j,i}^2$$
$$1 = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{22}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} v_{j,i}^2$$

La distribución exacta de r_j, aún el el caso $\mathbf{z}_i \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ es complicada (ver Muirhead, 1982, sección 11.3.4). La distribución asintótica puede verse en Bilodeau & Brenner (1999, sección 11.5).

Distribución asintótica de r_j^2

Proposición 1. Sean $\mathbf{z}_i \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ i.i.d., tales que $\rho_1 > \rho_2 > \cdots > \rho_k > \rho_{k+1} = \cdots = \rho_p = 0$, luego

$$\sqrt{n}\,(r_j^2 - \rho_j^2) \xrightarrow{D} N\left(0, 4\,\rho_j^2\,\left(1-\rho_j^2\right)^2\right), \quad j = 1, \ldots, k$$

- Más aún, si $\mathbf{r}_k^{(2)} = (r_1^2, \ldots, r_k^2)^{\mathrm{T}}$ y $\boldsymbol{\rho}_k^{(2)} = (\rho_1^2, \ldots, \rho_k^2)$ entonces

$$\sqrt{n}\,(\mathbf{r}_k^{(2)} - \boldsymbol{\rho}_k^{(2)}) \xrightarrow{D} N\left(\mathbf{0}_q, 4\,\mathrm{DIAG}\left(\rho_1^2\,\left(1-\rho_1^2\right)^2, \ldots, \rho_k^2\,\left(1-\rho_k^2\right)^2\right)\right)$$

- Además, $\mathbf{r}_k^{(2)}$ es independiente de r_j para $j > k$.

Distribución asintótica de r_j^2

- Si $w_j = nr_j^2$ para $j > k$, entonces $w_{k+1}, \ldots, w_q$ son dependientes y no–normales.

- La distribución asintótica conjunta de $\mathbf{w} = (w_{k+1}, \ldots, w_q)^{\mathrm{T}}$ es la distribución de los autovalores de una matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(q-k)\times(q-k)}$ tal que $\mathbf{A} \sim \mathcal{W}(\mathbf{I}_{q-k}, q-m, p-k)$.

- La densidad asintótica de $\mathbf{w}$ es

$$C \exp\{-\frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{q} w_j\} \prod_{j=k+1}^{q} w_j^{\frac{p-q-1}{2}} \prod_{k+1\leq i<j\leq q} (w_i - w_j)$$

Ejemplo

La matriz **S** es igual a

	Control	*Concept*	*Motiv.*	*Read*	*Write*	*Math*	*Science*	*Sex*
Control	0.449	0.081	0.056	2.530	2.340	2.128	2.112	0.038
Concept	0.081	0.498	0.070	0.432	0.133	0.356	0.478	−0.044
Motiv.	0.056	0.070	0.117	0.729	0.848	0.629	0.385	0.017
Read	2.530	0.432	0.729	102.070	61.769	64.611	67.730	−0.210
Write	2.340	0.133	0.848	61.769	94.604	57.935	53.732	1.184
Math	2.128	0.356	0.629	64.611	57.935	88.637	59.354	−0.226
Science	2.112	0.478	0.385	67.730	53.732	59.354	94.210	−0.668
Sex	0.038	−0.044	0.017	−0.210	1.184	−0.226	−0.668	0.248

Las correlaciones canónicas son

j	1	2	3
r_j	0.464	0.167	0.104

En CANCOR, los vectores canónicos están normalizados de modo que

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_{11} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = 1 \qquad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_{22} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = 1$$

mientras que en CCA, están normalizados de modo que

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{11} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = 1 \qquad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{22} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = 1$$

Estos últimos son los que presentamos

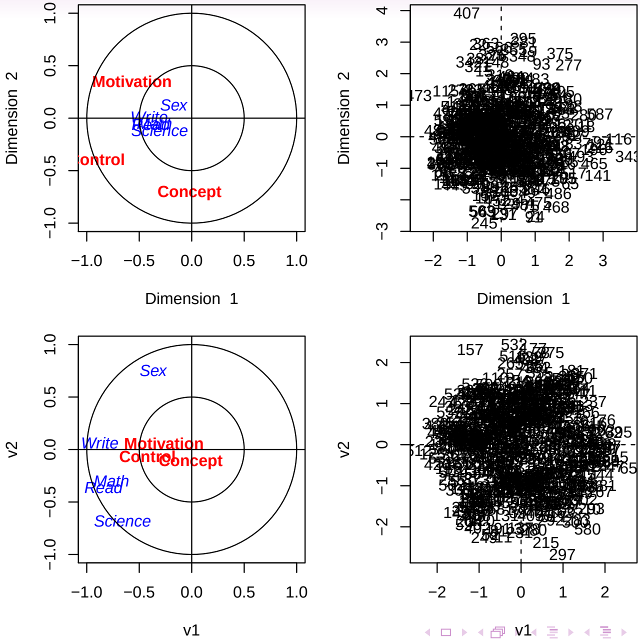
	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1$	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_2$	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_3$
Control	-1.2538	-0.6215	-0.6617
Concept	0.3513	-1.1877	0.8267
Motivation	-1.2624	2.0273	2.0002
	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1$	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2$	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_3$
Read	-0.0446	-0.0049	0.0214
Write	-0.0359	0.0421	0.0913
Math	-0.0234	0.0042	0.0094
Science	-0.0050	-0.0852	-0.1098
Sex	-0.6321	1.0846	-1.7946

Los coeficientes canónicos se interpretan en forma análoga a los coeficientes de regresión, o sea, por ejemplo para la variable *Read* una unidad de incremento en Lectura lleva a un 0.0446 de decrecimiento en la primer variable canónica $\mathbf{v}_1$ cuando todas las demás variables permanecen constantes.

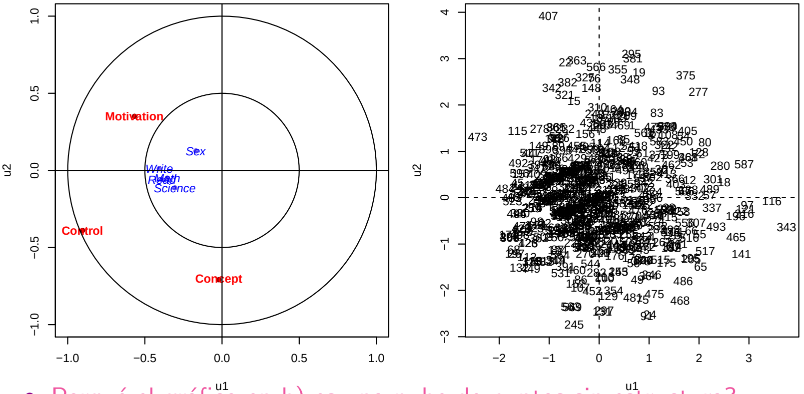
Por otra parte

	$\text{Corr}(\mathbf{u}_1, \mathbf{x})$	$\text{Corr}(\mathbf{u}_2, \mathbf{x})$	$\text{Corr}(\mathbf{u}_3, \mathbf{x})$	$\text{Corr}(\mathbf{v}_1, \mathbf{x})$	$\text{Corr}(\mathbf{v}_2, \mathbf{x})$	$\text{Corr}(\mathbf{v}_3, \mathbf{x})$
Control	−0.9040	−0.3897	−0.1756	−0.4196	−0.0653	−0.0183
Concept	−0.0208	−0.7087	0.7052	−0.0097	−0.1187	0.0733
Motivation	−0.5672	0.3509	0.7451	−0.2632	0.0588	0.0775

	$\text{Corr}(\mathbf{u}_1, \mathbf{y})$	$\text{Corr}(\mathbf{u}_2, \mathbf{y})$	$\text{Corr}(\mathbf{u}_3, \mathbf{y})$	$\text{Corr}(\mathbf{v}_1, \mathbf{y})$	$\text{Corr}(\mathbf{v}_2, \mathbf{y})$	$\text{Corr}(\mathbf{v}_3, \mathbf{y})$
Read	−0.3900	−0.0601	0.0141	−0.8404	−0.3588	0.1354
Write	−0.4068	0.0109	0.0265	−0.8765	0.0648	0.2546
Math	−0.3545	−0.0499	0.0154	−0.7639	−0.2979	0.1478
Science	−0.3056	−0.1134	−0.0240	−0.6584	−0.6768	−0.2304
Sex	−0.1690	0.1265	−0.0565	−0.3641	0.7549	−0.5434

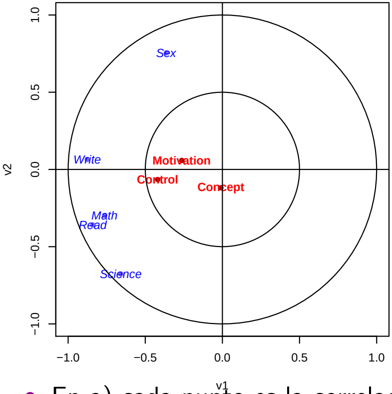

Dimension 1
Dimension 2
Motivation
Sex
Write
Read
Science
ontrol
Concept
407
v1
v2
Sex
Write
Motivation
Control
Concept
Math
Read
Science
157

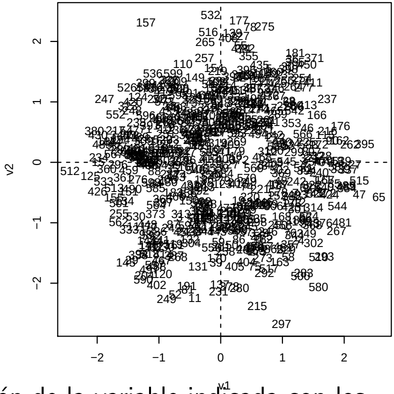
a) b)



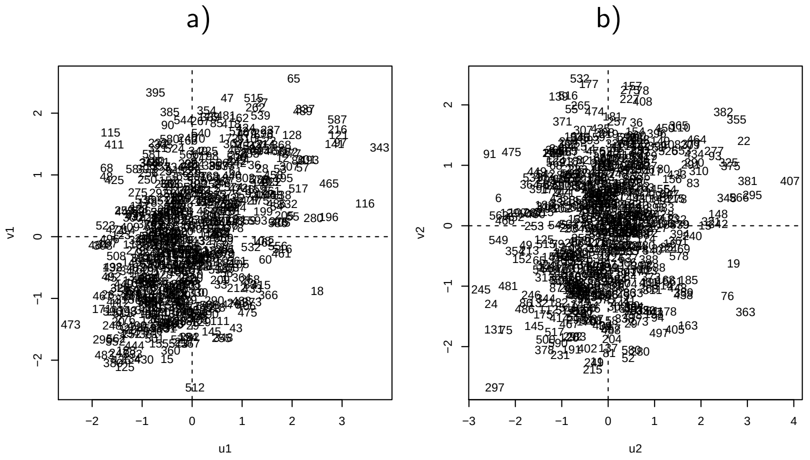
- Porqué el gráfico en b) es una nube de puntos sin estructura?
- En a) cada punto es la correlación de la variable indicada con los ejes u_1, u_2.
- En b), las distancias entre puntos del espacio de variables canónicas $(u_{1,i}, u_{2,i}) = (\widehat{\alpha}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i, \widehat{\alpha}_2^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i)$ dan aproximadamente la distancia de Mahalanobis entre observaciones $\widetilde{\mathbf{x}}_i$.

a) b)





- En a) cada punto es la correlación de la variable indicada con los ejes v_1, v_2.
- En b), las distancias entre puntos del espacio de variables canónicas $(v_{1,i}, v_{2,i}) = (\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i, \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i)$ dan aproximadamente la distancia de Mahalanobis entre observaciones $\widetilde{\mathbf{y}}_i$.



La relación entre u_j y v_j decrece con j, como esperábamos.

Cuando las variables en el modelo tienen desvíos estándar muy distintos, se usan los coeficientes estandarizados que se definen como

- $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^\star = \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_{\mathbf{x}}^{1/2} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j$,
- $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^\star = \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_{\mathbf{y}}^{1/2} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j$

permiten comparaciones más simples entre variables. Estas direcciones cumplen

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\star\,\mathrm{T}} \widehat{\mathbf{R}}_{11} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^\star = 1 \qquad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\star\,\mathrm{T}} \widehat{\mathbf{R}}_{22} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^\star = 1$$

donde $\widehat{\mathbf{R}}_{11} = \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_{\mathbf{x}}^{-1/2} \mathbf{S}_{11} \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_{\mathbf{x}}^{-1/2}$ y $\widehat{\mathbf{R}}_{22} = \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_{\mathbf{y}}^{-1/2} \mathbf{S}_{22} \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_{\mathbf{y}}^{-1/2}$

	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^\star$	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_2^\star$	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_3^\star$
Control	-0.8404	-0.4166	-0.4435
Concept	0.2479	-0.8379	0.5833
Motivation	-0.4327	0.6948	0.6855
	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^\star$	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2^\star$	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_3^\star$
Read	-0.4508	-0.0496	0.2160
Write	-0.3490	0.4092	0.8881
Math	-0.2205	0.0398	0.0885
Science	-0.0488	-0.8266	-1.0661
Sex	-0.3150	0.5406	-0.8944

- En este caso, la interpretación es como sigue: para la variable *Read* un aumento de 1 desvío estándar en Lectura lleva a un decrecimiento de 0.45 desvíos estándar en la primer variable canónica $\mathbf{v}_1$ cuando todas las demás variables permanecen constantes.
- Para las variables psicológicas, el primer vector canónico está fuertemente influenciado por Control (.84) y para $\mathbf{u}_2$ por Concepto (-.84) and y Motivación (.69).
- Para las variables académicas más sexo, $\mathbf{v}_1$ es un compromiso entre Lectura (.45), Escritura (.35) y Sexo (.32), mientras que para $\mathbf{v}_2$ Escritura (.41), Ciencia (-.83) y Sexo (.54) son las variables dominantes.

Criterio de Wilks

Tanto en el caso del test de independencia como en el modelo lineal multivariado es posible hallar dos matrices

- $\mathbf{U} \sim \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}, p, N-r)$ y
- $\mathbf{H} \sim \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}, p, r)$

independientes bajo la hipótesis nula de interés.

Más generalmente, tendremos

- $\mathbf{U} \sim \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}, p, N-r)$ y
- $\mathbf{z}_j \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{\Sigma})$, $1 \leq j \leq r$, $\mathbf{H} = \sum_{j=1}^{r} \mathbf{z}_j \mathbf{z}_j^{\mathrm{T}}$

donde muchas veces $r < p$ pero $N - r > p$.

El estadístico de Wilks se utiliza para testear cualquier hipótesis equivalente a $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$. Rechazaremos si el Wilks es pequeño.

Criterio de Wilks

En analogía con el caso univariado Wilks (1932) definió el estadístico de Wilks.

Definición Sean $\mathbf{U} \sim \mathcal{W}(\boldsymbol{\Sigma}, p, N-r)$ y $\mathbf{z}_j \sim N(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$, $1 \leq j \leq r$ independientes entre sí, el criterio de Wilks se define como

$$\Lambda(N, p, r) = \frac{|\mathbf{U}|}{|\mathbf{U} + \mathbf{H}|}$$

donde $|\mathbf{A}|$ indica el determinante de la matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ y $\mathbf{H} = \sum_{j=1}^{r} \mathbf{z}_j \mathbf{z}_j^{\mathrm{T}} \sim \mathcal{W}(\boldsymbol{\Sigma}, p, r)$

N, p y r son los parámetros del Wilks Λ y corresponden respectivamente a los grados de libertad de $\mathbf{U} + \mathbf{H}$, la dimensión de las matrices y los grados de libertad de $\mathbf{H}$.

Por otra parte, si $\mathbf{U}$ es inversible $\Lambda(N, p, r)$ depende sólo de los autovalores de $\mathbf{HU}^{-1}$.

Distribución del criterio de Wilks

a) Si $r \geq p$, $\mathbf{H} \sim \mathcal{W}(\boldsymbol{\Sigma}, p, r)$ tiene densidad y

$$\Lambda(N,p,r) \sim \prod_{j=1}^{p} b_{ii}^2$$

con $b_{11}^2, \dots, b_{pp}^2$ son independientes $b_{ii}^2 \sim \mathcal{B}\left(\frac{N-r+1-i}{2}, \frac{r}{2}\right)$

b) Si $r < p$,

$$\Lambda(N,p,r) \sim \prod_{j=1}^{r} b_{ii}^2$$

con $b_{11}^2, \dots, b_{rr}^2$ son independientes $b_{ii}^2 \sim \mathcal{B}\left(\frac{N-p+1-i}{2}, \frac{p}{2}\right)$

Es decir, $\Lambda(N,p,r) \sim \Lambda(N,r,p)$

Corolario

a) Si $p = 1$,

$$\frac{1 - \Lambda(N, 1, r)}{\Lambda(N, 1, r)} \frac{N - r}{r} \sim \mathcal{F}_{r, N-r}$$

b) Si $r = 1$,

$$\frac{1 - \Lambda(N, p, 1)}{\Lambda(N, p, 1)} \frac{N - p}{p} \sim \mathcal{F}_{p, N-p}$$

c) Si $p = 2$,

$$\frac{1 - \Lambda(N, 2, r)^{\frac{1}{2}}}{\Lambda(N, 2, r)^{\frac{1}{2}}} \frac{N - r - 1}{r} \sim \mathcal{F}_{2r, 2(N-r-1)}$$

d) Si $r = 2$,

$$\frac{1 - \Lambda(N, p, 2)^{\frac{1}{2}}}{\Lambda(N, p, 2)^{\frac{1}{2}}} \frac{N - p - 1}{p} \sim \mathcal{F}_{2p, 2(N-p-1)}$$

Aproximaciones a la Distribución del criterio de Wilks

- Rao (1951) mostró que

$$\frac{(fs+\lambda)}{m}\,\frac{(1-\Lambda(N,p,r)^{\frac{1}{s}})}{\Lambda(N,p,r)^{\frac{1}{s}}} \approx \mathcal{F}_{m,fs+\lambda}$$

donde

$$\begin{aligned} f &= N - \frac{p+r+1}{2} \qquad\qquad m = pr \\ \lambda &= -\frac{pr}{2}+1 \qquad\qquad s = \frac{(p^2r^2-4)^{\frac{1}{2}}}{(p^2+r^2-5)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

Otros criterios

Hay otros criterios que se utilizan

- **Criterio de Roy** o de la máxima raíz. Considera la máxima raíz θ_{max} de $|\mathbf{H} - \theta(\mathbf{U} + \mathbf{H})| = 0$. Luego

$$\theta_{\text{max}} = \frac{\lambda_1}{1 + \lambda_1}$$

y rechazo si θ_{max} es grande. Los percentiles de la distribución de θ_{max} están dados en el Apéndice D14 de Seber (1984).

Test de Independencia $H_{01} : \boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma}_{11}, \boldsymbol{\Sigma}_{22})$

Supongamos $\mathbf{z} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$.

Queremos testear $\boldsymbol{\Sigma}_{12} = 0$ o equivalentemente $H_{01} : \rho_1 = 0$

El test de cociente de máxima verosimilitud para H_0 está basado en

$$\gamma_1 = \frac{|\mathbf{Q}|}{|\mathbf{Q}_{11}|\ |\mathbf{Q}_{22}|} = \frac{|\mathbf{Q}_{11.2}|}{|\mathbf{Q}_{11}|}\,.$$

Vimos que

$$-n\log(\gamma_1) \xrightarrow{D} \chi^2_{\nu_1}$$

donde

$$\nu_1 = \frac{1}{2}\left(d^2 - (p^2 + q^2)\right) = pq\,.$$

La aproximación mejora si tomamos en lugar de n la corrección de Bartlett, $m = n - (p + q + 3)/2$, es decir,

$$-m\log(\gamma_1) \xrightarrow{D} \chi^2_{\nu_1}\,.$$

Test de Independencia $H_{01} : \mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\mathbf{\Sigma}_{11}, \mathbf{\Sigma}_{22})$

Por otra parte,

$$|\mathbf{Q}| \quad = \quad = |\mathbf{Q}_{22}|\,|\mathbf{Q}_{11.2}| = |\mathbf{Q}_{11}|\,|\mathbf{Q}_{22}|\,|\mathbf{I}_p - \mathbf{Q}_{11}^{-1}\mathbf{Q}_{12}\mathbf{Q}_{22}^{-1}\mathbf{Q}_{21}|$$

con lo cual

$$\gamma_1 = |\mathbf{I}_p - \mathbf{Q}_{11}^{-1}\mathbf{Q}_{12}\mathbf{Q}_{22}^{-1}\mathbf{Q}_{21}| = \prod_{j=1}^{q}(1 - r_i^2)$$

donde r_j^2 son los autovalores de $\mathbf{Q}_{12}\mathbf{Q}_{22}^{-1}\mathbf{Q}_{21}\mathbf{Q}_{11}^{-1}$, o sea, el cuadrado de las correlaciones canónicas muestrales.

Es decir, rechazo con nivel α si

$$\prod_{j=1}^{q}(1 - r_i^2) < k << 1$$

con $k = \exp\left(-\chi^2_{\nu_1,\alpha}/m\right)$ con $m = n - (p + q + 3)/2$.

Test de Independencia $H_{01} : \mathbf{\Sigma} = \mathrm{diag}(\mathbf{\Sigma}_{11}, \mathbf{\Sigma}_{22})$

Por otra parte,

$$\gamma_1 = \frac{|\mathbf{Q}_{11.2}|}{|\mathbf{Q}_{11}|} = \frac{|\mathbf{U}|}{|\mathbf{U} + \mathbf{H}|}$$

donde $\mathbf{\Sigma}_{11.2} = \mathbf{\Sigma}_{11} - \mathbf{\Sigma}_{12}\mathbf{\Sigma}_{22}^{-1}\mathbf{\Sigma}_{21}$. Ahora bien,

- $\mathbf{U} = \mathbf{Q}_{11.2} \sim \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}_{11.2}, q, n-1-p) = \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}_{11}, p, n-1-q)$ bajo H_{01}
- $\mathbf{H} = \mathbf{Q}_{12}\mathbf{Q}_{22}^{-1}\mathbf{Q}_{21} \sim \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}_{11.2}, p, q) = \mathcal{W}(\mathbf{\Sigma}_{11}, p, q)$ bajo H_{01}
- $\mathbf{H}$ y $\mathbf{U}$ son independientes bajo H_{01}.

Luego,

$$\gamma_1 = \Lambda(n-1, p, q)$$

Test de Independencia $H_{01} : \boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\boldsymbol{\Sigma}_{11}, \boldsymbol{\Sigma}_{22})$

Queremos aplicar el principio de unión interseción de Roy para testear $H_{01} : \boldsymbol{\Sigma}_{12} = 0$.

Recordemos que

$$\mathbf{z}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_i \\ \mathbf{y}_i \end{pmatrix}$$

entonces $\mathrm{Cov}(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}) = \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b}$. Definamos

$$H_{0,\mathbf{ab}} : \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\mathbf{b} = 0$$

Luego

$$H_{01} = \cap_{\mathbf{a}\neq\mathbf{0}} \cap_{\mathbf{b}\neq\mathbf{0}} H_{0,\mathbf{ab}}$$

Test de Independencia $H_{01} : \mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\mathbf{\Sigma}_{11}, \mathbf{\Sigma}_{22})$

Aplicando el principio de unión intersección, se obtiene el criterio de Roy.

Es decir, el test rechaza si

$$\theta_{\max} > k_\alpha.$$

donde $\theta_{\max}$ es la máxima raíz de $|\mathbf{H} - \theta(\mathbf{U} + \mathbf{H})| = 0$, o sea, $\theta_{\max}$ es el máximo autovalor de $\mathbf{Q}_{12}\mathbf{Q}_{22}^{-1}\mathbf{Q}_{21}\mathbf{Q}_{11}^{-1}$, es decir, rechaza si

$$r_1 > k_\alpha$$

Determinando la cantidad de correlaciones canónicas

Aunque rechacemos $H_{01} : \rho_1 = 0$ es posible que $\rho_2 = 0$, por lo tanto nos interesa testear

$$H_{0,k+1} : \rho_{k+1} = 0 \qquad \rho_k > 0$$

que da la dimensión de la relación entre $\mathbf{x}$ y $\mathbf{y}$.

- Si $\rho_1 > 0$ y $\rho_2 = 0$ la relación es lineal.
- Si $\rho_1 > \rho_2 > 0$ y $\rho_3 = 0$ la relación es planar.

El número de correlaciones no nulas da el rango de $\boldsymbol{\Sigma}_{12}$

Si $\rho_1 \geq \cdots \geq \rho_k > 0$ y $\rho_{k+1} = 0$, las variables canónicas asociadas a ρ_{k+1} se llaman funciones nulas y se usan en economía.

Determinando la cantidad de correlaciones canónicas

El test de cociente de verosimilitud para

$$H_{0,k+1} : \rho_{k+1} = 0 \qquad \rho_k > 0$$

se basa en

$$\gamma_{k+1} = \prod_{j=k+1}^{q} (1 - r_j^2)$$

Además,

$$\gamma_{k+1} = \Lambda(n-1-k, p-k, q-k)$$

Por la aproximación de Rao

$$\frac{(fs+\lambda)}{m} \frac{(1-\gamma_{k+1}^{\frac{1}{s}})}{\gamma_{k+1}^{\frac{1}{s}}} \approx \mathcal{F}_{m,fs+\lambda} = \mathcal{F}_{\nu_{1,k+1},\nu_{2,k+1}}$$

$$\begin{aligned} f &= n - 3/2 - (p+q)/2 & m &= (p-k)(q-k) \\ \lambda &= -\frac{(p-k)(q-k)}{2} + 1 & s &= \frac{((p-k)^2(q-k)^2-4)^{\frac{1}{2}}}{((p-k)^2+(q-k)^2-5)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

Determinando la cantidad de correlaciones canónicas

El test de cociente de verosimilitud para
$H_{0,k+1} : \rho_{k+1} = 0 \qquad \rho_k > 0$ se basa en

$$\gamma_{k+1} = \prod_{j=k+1}^{q} (1 - r_j^2)$$

Si $H_{0,k+1}$ es cierta,

$$-n \log(\gamma_{k+1}) \xrightarrow{D} \chi^2_{\nu_{k+1}} \qquad \nu_{k+1} = (p-k)(q-k)$$

- Bartlett (1947) sugiere tomar $m = n - (p+q+3)/2$, y usar la aproximación
$$-m \log(\gamma_{k+1}) \xrightarrow{D} \chi^2_{\nu_{k+1}} .$$
- Glynn y Muirhead (1978) sugieren la modificación
$$\ell_{k+1} = -\left[n - k - \frac{p+q+3}{2} + \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{r_j^2}\right] \log(\gamma_{k+1}) \xrightarrow{D} \chi^2_{\nu_{k+1}} .$$

Determinando la cantidad de correlaciones canónicas

Nos interesaba testear

$$H_{0,k+1} : \rho_{k+1} = 0 \qquad \rho_k > 0$$

que da la dimensión de la relación entre $\mathbf{x}$ y $\mathbf{y}$.

Para determinar k testeamos la secuencia

$$H_{01}, H_{02}, \ldots$$

hasta encontrar un test no significativo para digamos H_{0r} entonces elegimos $k = r - 1$.

Ejemplo

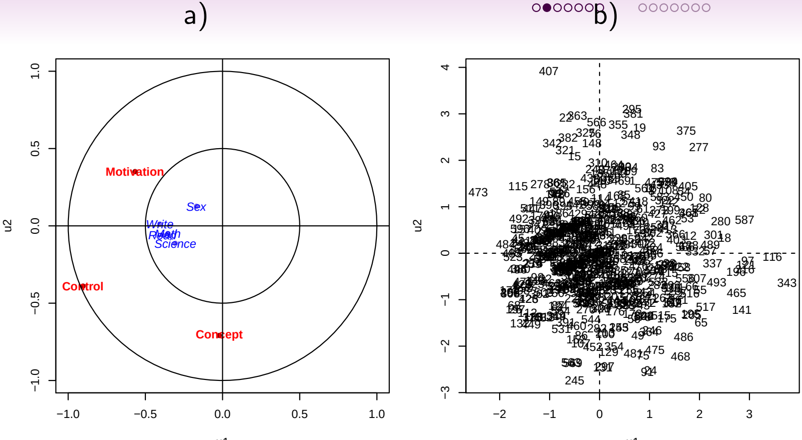
Deseamos saber cuantas correlaciones son significativas

$H_{0,k+1}$	γ_{k+1}	$\mathcal{F}$	$\nu_{1,k+1}$	$\nu_{2,k+1}$	$p - valor$
$H_{01} : \rho_1 = 0$	0.7544	11.716	15	1635	$7.498e - 28$
$H_{02} : \rho_2 = 0(\rho_1 > 0)$	0.9614	2.944	8	1186	0.002905
$H_{03} : \rho_3 = 0(\rho_2 > 0)$	0.9892	2.165	3	594	0.09109

Aproximación Asintótica

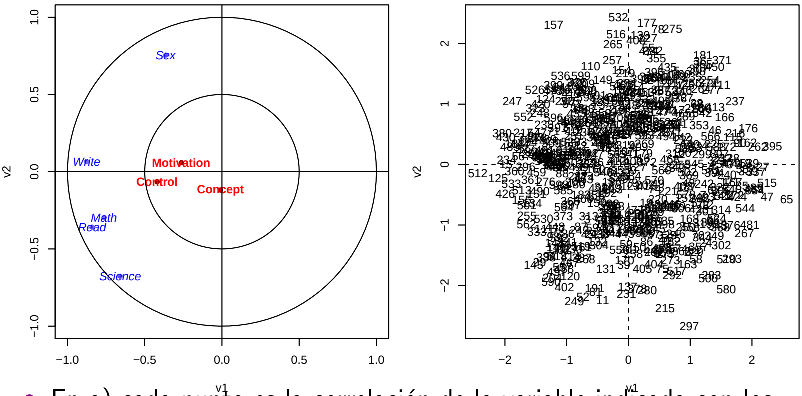
$H_{0,k+1}$	ℓ_{k+1}	ν_{k+1}	$p - valor$
$H_{01} : \rho_1 = 0$	167.580	15	0.00000000
$H_{02} : \rho_2 = 0(\rho_1 > 0)$	23.162	8	0.003163
$H_{03} : \rho_3 = 0(\rho_2 > 0)$	6.004	3	0.111401

Alcanza con 2 variables canónicas.

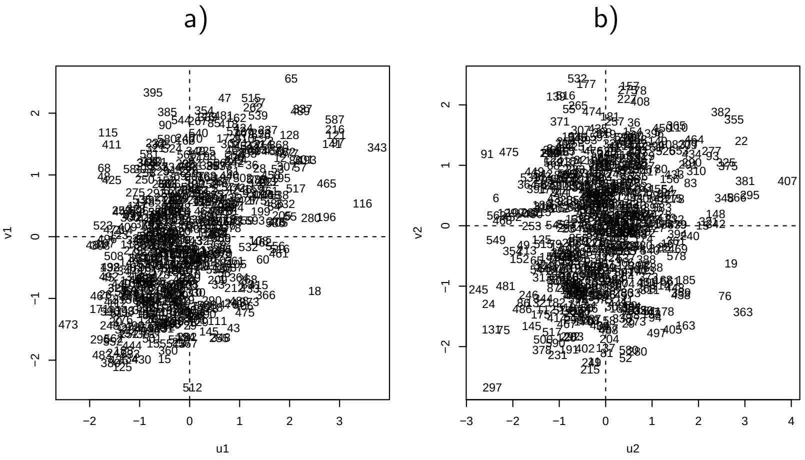


- Porqué el gráfico en b) es una nube de puntos sin estructura?
- En a) cada punto es la correlación de la variable indicada con los ejes u_1, u_2.
- En b), las distancias entre puntos del espacio de variables canónicas $(u_{1,i}, u_{2,i}) = (\widehat{\alpha}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i, \widehat{\alpha}_2^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i)$ dan aproximadamente la distancia de Mahalanobis entre observaciones $\widetilde{\mathbf{x}}_i$.

a) b)



- En a) cada punto es la correlación de la variable indicada con los ejes v_1, v_2.
- En b), las distancias entre puntos del espacio de variables canónicas $(v_{1,i}, v_{2,i}) = (\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i, \widehat{\boldsymbol{\beta}}_2^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i)$ dan aproximadamente la distancia de Mahalanobis entre observaciones $\widetilde{\mathbf{y}}_i$.



La relación entre u_j y v_j decrece con j, como esperábamos.

Vectores canónicos estandarizados

Espacio $\mathbf{x}$			Espacio $\mathbf{y}$		
	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^\star$	$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_2^\star$		$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^\star$	$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_2^\star$
Control	-0.8404	-0.4166	Read	-0.4508	-0.0496
Concept	0.2479	-0.8379	Write	-0.3490	0.4092
Motivation	-0.4327	0.6948	Math	-0.2205	0.0398
			Science	-0.0488	-0.8266
			Sex	-0.3150	0.5406

- Para las variables psicológicas,
  - el primer vector canónico está fuertemente influenciado por Control (.84)
  - $\mathbf{u}_2$ está influenciado por Concepto (-.84) and y Motivación (.69).
- Para las variables académicas más sexo,
  - $\mathbf{v}_1$ es un compromiso entre Lectura (.45), Escritura (.35) y Sexo (.32),
  - para $\mathbf{v}_2$ Escritura (.41), Ciencia (-.83) y Sexo (.54) son las variables dominantes.

Qué pasa si p crece con n?

- Fujikoshi *et al.* (2008) Asymptotic results in canonical discriminant analysis when the dimension is large compared to the sample size. *Journal of Statistical Planning and Inference* **128**,3457-3466.
- Fujikoshi, Y. (2016). High-Dimensional asymptotic distributions of characteristic roots in multivariate linear models and canonical correlation analysis.
- Fujikoshi *et al.* (2010) *Multivariate Statistics: High–dimensional and large–sample approximations*
- Bao *et al.* (2017). Canonical correlation coefficients of high-dimensional Gaussian vectors: finite rank case. En prensa en *Annals of Statistics.*

Obtuvieron la distribución asintótica de las correlaciones canónicas cuando q es fijo y $p/n \to c \in (0, 1)$

Qué pasa si p crece con n?

- Oda *et al.* (2016). Asymptotic non-null distributions of test statistics for redundancy in the high-dimensional canonical correlation analysis.

Considera el problema de testear redundancia si $(p+q)/n \to c \in (0,1)$

- C. Gao, Z. Ma, Z. Ren, HH Zhou. (2015). Minimax estimation in sparse canonical correlation analysis. *Annals of Statistics*, **43**, 2168-2197.
- C. Gao, Z. Ma, HH Zhou. (2014). Sparse CCA: Adaptive estimation and computational barriers.

Consideran el caso ralo pero con $(p+q)/n \to c \in (0,1)$.

Supongamos que

- $n < \min(p, q)$

  o

- las componentes del vector $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_p)^{\mathrm{T}}$ o del vector $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_q)^{\mathrm{T}}$ son casi colineales.

En ese caso, **las matrices $\mathbf{S}_{11}$ y/o $\mathbf{S}_{22}$ son singulares.**

No podemos definir

- $\mathbf{u}_i = (u_{1,i}, \ldots, u_{q,i})^{\mathrm{T}}$ con $u_{j,i} = \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i$ y
- $\mathbf{v}_i = (v_{1,i}, \ldots, v_{q,i})^{\mathrm{T}}$ $v_{j,i} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i$

como

$$\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = r_j^2 \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j \qquad \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{11} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_j = 1$$

$$\mathbf{S}_{22}^{-1}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = r_j^2 \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j \qquad \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{22} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_j = 1$$

CCA Ridge

Propuesto por

- Vinod, H. (1976), Canonical ridge and econometrics of joint production. *Journal of Econometrics*, **4**, 147-166.

Reemplaza las matrices

$$\mathbf{S}_{11} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{S}_{22}$$

por

$$\mathbf{S}_{11}(\lambda_1) = \mathbf{S}_{11} + \lambda_1 \mathbf{I}_p \qquad \text{y} \qquad \mathbf{S}_{22}(\lambda_2) = \mathbf{S}_{22} + \lambda_2 \mathbf{I}_q$$

CCA Ridge

Es decir, resolvemos

$$\mathbf{S}_{11}(\lambda_1)^{-1}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}(\lambda_2)^{-1}\mathbf{S}_{21}\widehat{\alpha}_j = r_j^2\widehat{\alpha}_j \qquad \widehat{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{11}(\lambda_1)\widehat{\alpha}_j = 1$$

$$\mathbf{S}_{22}(\lambda_2)^{-1}\mathbf{S}_{21}\mathbf{S}_{11}(\lambda_1)^{-1}\mathbf{S}_{12}\widehat{\beta}_j = r_j^2\widehat{\beta}_j \qquad \widehat{\beta}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{22}(\lambda_2)\widehat{\beta}_j = 1$$

Equivalentemente, para encontrar $\left(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1, \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1\right) = \left(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1(\lambda_1,\lambda_2), \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1(\lambda_1,\lambda_2)\right)$ maximizamos

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{0}_p,\boldsymbol{\beta}\neq\mathbf{0}_q} \widehat{\rho}^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}(\lambda_1,\lambda_2) = \max_{\boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{0}_p,\boldsymbol{\beta}\neq\mathbf{0}_q} \frac{(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{12}\boldsymbol{\beta})^2}{(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{11}(\lambda_1)\boldsymbol{\alpha})\ (\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_{22}(\lambda_2)\boldsymbol{\beta})}$$

Como en regresión ridge al agregar las penalizaciones λ_1 y λ_2 a los elementos diagonales de $\mathbf{S}_{11}$ y $\mathbf{S}_{22}$ se obtienen estimadores más estables y confiables cuando los datos están cerca de la colinealidad.

CCA Ridge

- $\widehat{\rho}^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}(\lambda_1, \lambda_2) \leq \widehat{\rho}^2_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}(0,0)$
- Como la condición de vínculo es

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{11}(\lambda_1) \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1 = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{22}(\lambda_2) \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 = 1$$

entonces

$$\|\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1(\lambda_1, \lambda_2)\| \leq \|\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1(0,0)\| \qquad \|\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1(\lambda_1, \lambda_2)\| \leq \|\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1(0,0)\|$$

CCA Ridge

Estamos resolviendo un problema de regresión ridge alternado

- Fijado $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1$ si $\widehat{v}_{1,i} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i$

- $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1$ resuelve

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1 = \underset{\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{0}_p}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} \left(\widehat{v}_{1,i} - \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i \right)^2 + \lambda_1 \|\boldsymbol{\alpha}\|^2$$

- Fijado $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1$ si $\widehat{u}_{1,i} = \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i$

- $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1$ resuelve

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 = \underset{\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}_q}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} \left(\widehat{u}_{1,i} - \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i \right)^2 + \lambda_2 \|\boldsymbol{\beta}\|^2$$

Hasta convergencia.

Cómo elegir λ_1 y λ_2, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2)^{\mathrm{T}}$

- Para cada $1 \leq i \leq n$, sea la muestra sin la observación $i-$ésima, o sea, $\{(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j)\}_{j \neq i}$ e indiquemos por

$$\mathbf{S}^{(-i)} = \frac{1}{n-1} \sum_{j \neq i} \left(\mathbf{z}_j - \overline{\mathbf{z}}^{(-i)}\right) \left(\mathbf{z}_j - \overline{\mathbf{z}}^{(-i)}\right)^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(-i)} & \mathbf{S}_{12}^{(-i)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(-i)} & \mathbf{S}_{22}^{(-i)} \end{pmatrix}$$

- Definamos $\left(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^{(-i)}(\boldsymbol{\lambda}), \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(-i)}(\boldsymbol{\lambda})\right)$ los valores tales que

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^{(-i)}(\boldsymbol{\lambda}), \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(-i)}(\boldsymbol{\lambda})\right) &= \underset{\substack{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{11}^{(-i)}(\lambda_1)\boldsymbol{\alpha}=1 \\ \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{22}^{(-i)}(\lambda_2)\boldsymbol{\beta}=1}}{\operatorname{argmax}} \left(\widehat{\rho}_{\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}}^{(-i)}(\lambda_1, \lambda_2)\right)^2 \\
&= \underset{\substack{\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{11}^{(-i)}(\lambda_1)\boldsymbol{\alpha}=1 \\ \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{22}^{(-i)}(\lambda_2)\boldsymbol{\beta}=1}}{\operatorname{argmax}} \left(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_{12}^{(-i)} \boldsymbol{\beta}\right)^2
\end{aligned}$$

- Sean

$$u_i^{(-i)} = \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^{(-i)}(\boldsymbol{\lambda}) \qquad v_i^{(-i)} = \mathbf{y}_i^{\mathrm{T}} \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{(-i)}(\boldsymbol{\lambda})$$

- Definamos

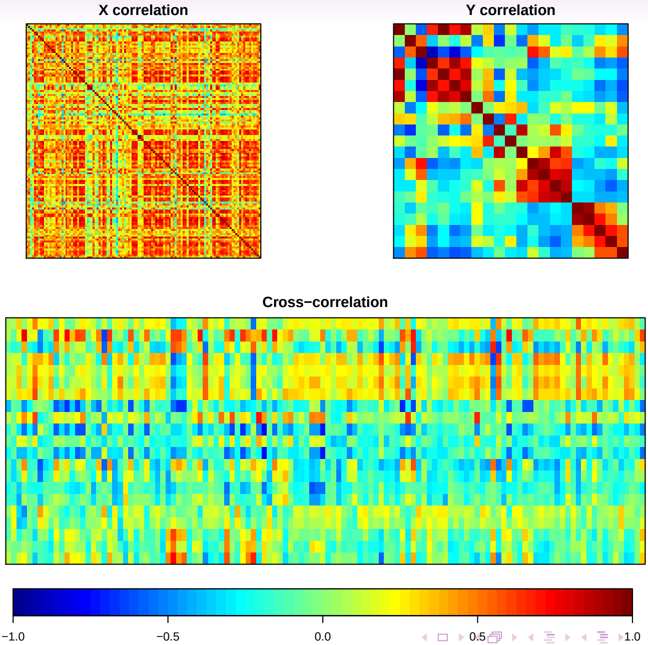
$$\begin{aligned} CV(\boldsymbol{\lambda}) &= \operatorname{cor}\left(\{u_{1,i}^{(-i)}\}_{1\le i\le n}, \{v_{1,i}^{(-i)}\}_{1\le i\le n}\right) \\ &= \frac{\sum_{i=1}^{n}(u_{1,i}^{(-i)} - \overline{u}^{(-i)})(v_{1,i}^{(-i)} - \overline{v}^{(-i)})}{\left\{\sum_{i=1}^{n}(u_{1,i}^{(-i)} - \overline{u}^{(-i)})^2 \sum_{i=1}^{n}(v_{1,i}^{(-i)} - \overline{v}^{(-i)})^2\right\}^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

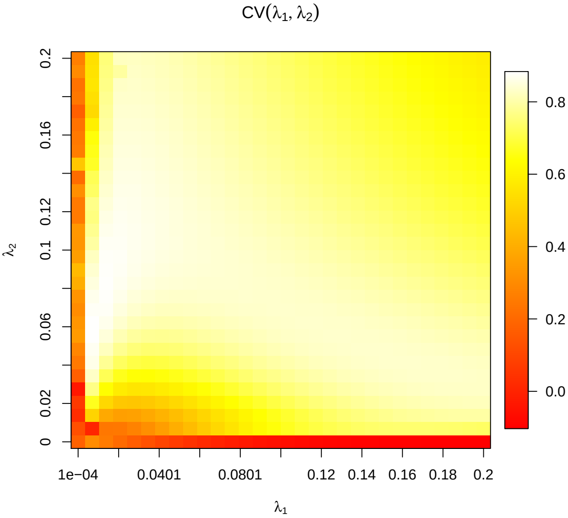
$$\widehat{\boldsymbol{\lambda}} = \underset{\boldsymbol{\lambda}}{\operatorname{argmax}}\, CV^2(\boldsymbol{\lambda})$$

Ejemplo

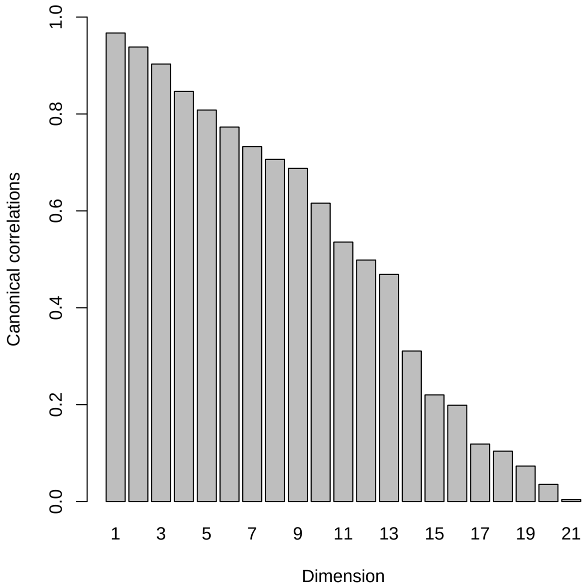
Estudio de nutrición en ratones (Martin *et al.* 2007).

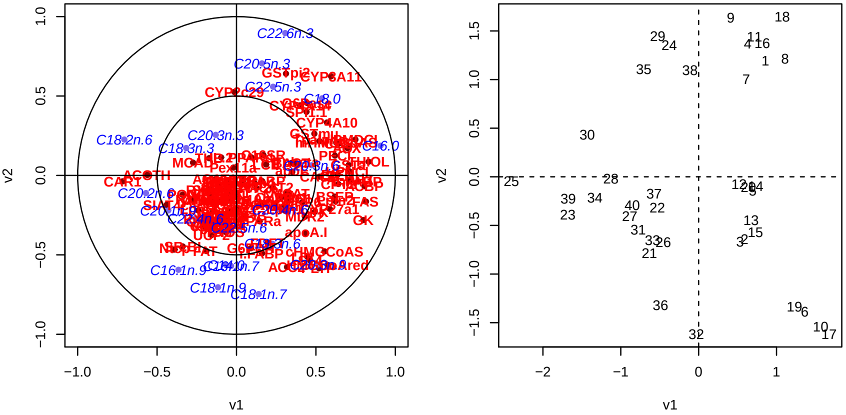
- 40 ratones
- expresiones de 120 genes medidas en células de hígado ($\mathbf{x}$)
- concentraciones de 21 ácidos grasos hepáticos medidos por cromatografía.

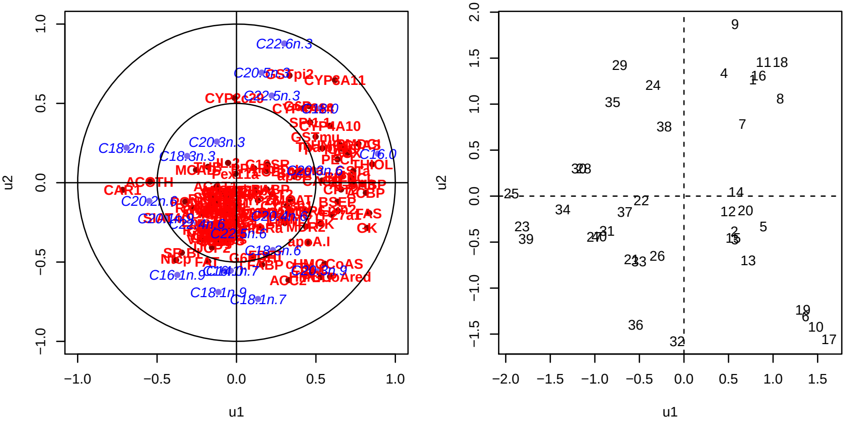

X correlation
Y correlation
Cross−correlation
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0

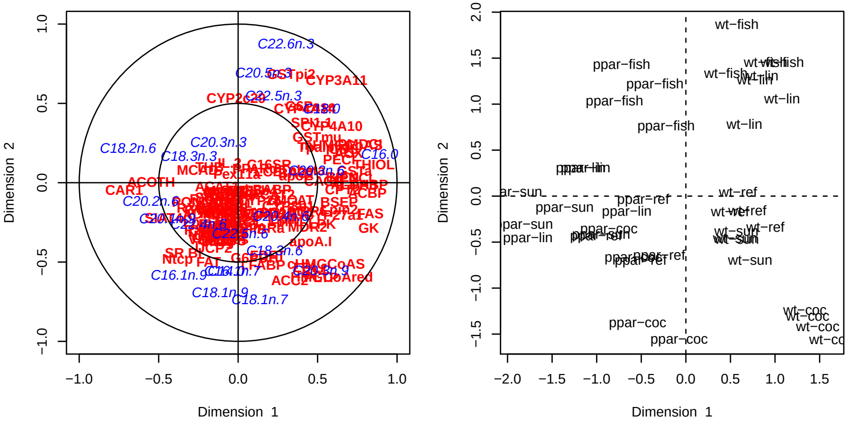


$$\widehat{\lambda}_1 = 0.006993103 \quad \widehat{\lambda}_2 = 0.06206897 \quad CV(\widehat{\boldsymbol{\lambda}}) = 0.8837507$$


Canonical correlations
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
1
3
5
7
9
11
13
15
17
19
21
Dimension


v1
v2
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
C22.6n.3
C20.5n.3
C22.5n.3
C18.0
C18.2n.6
C20.3n.3
C18.3n.3
C16.0
C20.2n.6
C16.1n.9
C18.1n.9
C18.1n.7
C22.5n.6
CYP8A11
CYP4A10
CAR1
MCAD
Pex11a
THIOL
apoA.I
HMGCoAS
FAS
CK
−2
−1
0
1
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
9
18
29
24
11
4
16
1
8
35
38
7
30
25
28
12
20
14
5
39
34
37
40
22
23
27
13
31
15
33
26
3
2
21
36
19
6
32
10
17


u1
u2
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
C22.6n.3
CYP8A11
C20.3n.3
C18.2n.6
C18.3n.3
C16.0
CHOL
CAR1
ACOTH
C20.2n.6
apoA.I
HMGCoAS
C16.1n.9
C18.1n.9
C18.1n.7
GK
FAS
ACC2
−2.0
−1.5
1.5
2.0
9
11
18
29
4
16
1
24
35
8
7
38
30
28
25
14
22
34
37
12
20
23
31
2
5
39
40
15
13
21
33
26
19
6
10
17
36
32



Dimension 1
Dimension 2
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
C22.6n.3
C20.5n.3
GSTpi2
CYP3A11
CYP2c29
C22.5n.3
CYP4A10
C18.2n.6
C20.3n.3
C18.3n.3
C16.0
THIOL
CAR1
ACOTH
C20.2n.6
MCAD
BSEP
FAS
GK
apoA.I
C16.1n.9
C18.1n.9
C18.1n.7
ACC2
HMGCoAS
Ntcp
FAT
UCP2
ACBP
−2.0
−1.5
2.0
wt−fish
ppar−fish
wt−lin
ppar−lin
wt−ref
ppar−ref
ppar−sun
wt−sun
ppar−coc
wt−coc

CCA rala

Otra aproximación es usar CCA rala.

- Parkhomenko *et al.* (2009) Sparse canonical correlation analysis with application to genomic data integration. *Statistical Applications in Genetics and Molecular Biology*, **8**, 1-34.
- Witten *et al.* (2009). A penalized matrix decomposition, with applications to sparse principal components and canonical correlation analysis. *Biostatistics*, **10**, 515-534.
- Waaijenborg *et al.* (2008). Quantifying the association between gene expressions and DNA-markers by penalized canonical correlation analysis. *Statistical Applications in Genetics and Molecular Biology*, **7**, Article 3.

Usan distintos tipos de penalizaciones (LASSO, elastic net) pero suponen que $\boldsymbol{\Sigma}_{11} = \mathbf{I}$ y $\boldsymbol{\Sigma}_{22} = \mathbf{I}$, lo que ignora dependencia entre las variables de cada grupo.

CCA rala

- Wilms, I. and Croux, C. (2015). Sparse canonical correlation analysis from a predictive point of view. *Biometrical Journal*, **57**, 834-851

Usa un enfoque de regresión LASSO alternada.

CCA rala

- Fijado $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1$ si $\widehat{v}_{1,i} = \widehat{\boldsymbol{\beta}}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i$

- $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1$ resuelve

$$\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1 = \underset{\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{0}_p}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} \left(\widehat{v}_{1,i} - \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i\right)^2 + \lambda_1 \sum_{\ell=1}^{p} |\alpha_\ell|$$

- Fijado $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1$ si $\widehat{u}_{1,i} = \widehat{\boldsymbol{\alpha}}_1^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{x}}_i$

- $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1$ resuelve

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_1 = \underset{\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}_q}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} \left(\widehat{u}_{1,i} - \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \widetilde{\mathbf{y}}_i\right)^2 + \lambda_2 \sum_{\ell=1}^{q} |\beta_\ell|$$

Ver detalles en Wilms and Croux (2015)