Análisis Estadístico Multivariante

Francisco Javier Mercader Martínez

Índice

1	Vec	ctores aleatorios			
	1.1	Introducción	1		
	1.2	Independencia de las variables aleatorias	1		
	1.3	Distribuciones marginales	1		
	1.4	Vector aleatorio absolutamente continuo	2		
	1.5	Vector aleatorio discreto	2		
	1.6	Distribuciones marginales	2		
		1.6.1 Caso continuo	2		
		1.6.2 Caso discreto	3		
	1.7	Distribuciones condicionadas	3		
		1.7.1 Caso continuo	3		
		1.7.2 Caso discreto	4		
	1.8	Distribución normal multivariante $\mathcal{N}_k(\mu, V)$	4		
		1.8.1 Normal bivariante	5		
	1.9	Distribución multinomial $\mathcal{M}_k(n, p_1, \dots, p_k)$	9		
	1.10	Estadístico de Pearson	9		
	1.11	Medias y covarianzas	10		
		1.11.1 Esperanza de la transformación $g:\mathbb{R}^k\longrightarrow\mathbb{R}$	10		
	1.12	Correlación	11		
		1.12.1 Correlación entre vectores aleatorios	12		
	1.13	Resultados básicos de la inferencia	13		
		1.13.1 ¿Cómo se representan las muestras aleatorias?	13		
		1.13.2 ¿Cómo se muestra n los valores muestrales?	13		
		1.13.3 El conjunto de datos LifeCycleSavings	14		
	1.14	Estimador para el vector de medias μ	14		
		1.14.1 ¿Dónde se encuentra el vector de medias muestrales?	15		
	1.15	Estimador para la matriz de covarianzas V	15		
		1.15.1 Para una distribución normal	15		
2	Reg	resión lineal simple y múltiple	23		
	2.1	Estimación de los parámetros	23		
		2.1.1 Muestra	23		
	2.2	Conjunto de datos USArrests	23		
		2.2.1 Objetivo	24		
		2.2.2 Matriz de gráficos	25		
		2.2.3 Resumen numérico de las variables	25		

	2.2.4	Estimación de las varianzas y covarianzas	26
	2.2.5	Modelo completo	26
2.3	Regres	sión lineal simple	26
	2.3.1	Modelo teórico	26
	2.3.2	Función óptima	27
2.4	Caso d	le normalidad	27
	2.4.1	Coeficiente de correlación de Pearson	28
2.5	Caso d	le no normalidad	28
2.6	Restric	cción sobre la función h	28
2.7	Minim	izar la función costo	29
	2.7.1	Ecuaciones normales de la recta	29
2.8	Expres	sión de la recta	29
	2.8.1	Recta de regresión para predecir Y en función de X	30
2.9	Descor	nposición de la varianza	30
	2.9.1	Relaciones entre las varianzas	30
2.10	Coefic	iente de determinación	30
2.11	Inferer	ncia y predicción	31
2.12	Funció	on costo empírica	31
	2.12.1	Objetivo	31
	2.12.2	Diferenciar J	31
	2.12.3	Solución exacta	32
2.13	Regres	sión lineal múltiple	33
	2.13.1	Modelo teórico	33
	2.13.2	Obtención del mínimo	33

Tema 1: Vectores aleatorios

1.1) Introducción

Objetivo: estudiar k variables sobre una población de individuos (objetos).

Algunos ejemplos:

- \rightarrow Las variables meteorológicas como temperatura, humedad y velocidad del viento.
- \rightarrow La intensidad y la fase de una señal aleatoria que se miden en los canales de comunicación.
- → Los parámetros clínicos de los pacientes (como presión arterial, niveles de glucosa, etc.)

Habitualmente estas variables cualitativas o discretas que nos indicarán grupos de individuos.

Estas variables se representarán mediante vectores aleatorios sobre un espacio de probabilidad.

1) Definiciones

Un vector aleatorio (v.a.) k-dimensional sobre un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{S}, \mathcal{P})$ es $X = (X_1, \dots, X_k)$ tal que

$$X_i^{-1}(-\infty, x] \in \mathcal{S}$$

para todo $x \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, k$

• Función de distribución conjunta

$$F: \mathbb{R}^k \longrightarrow [0,1],$$

$$F(x_1, ..., x_k) := P[X_1 < x_1, X_2 < x_2, ..., X_k < x_k],$$

para todo $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}$.

1.2) Independencia de las variables aleatorias

• Definición

Las variables aleatorias X_1, \ldots, X_k son independientes si los sucesos

$$\{x_1 \le x_1\}, \{X_2 \le x_2\}, \dots, \{X_k \le x_k\}$$

son independientes para todo $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}$.

Esto es equivalente a que

$$F(x_1, \dots, x_k) = P[X_1 \le x_1] \cdot P[X_2 \le x_2] \cdots P[X_k \le x_k]$$

para todo $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}$.

1.3) Distribuciones marginales

La función $F_{X_i}(x_i) = P[X_i \le x_i]$ se denomina función de distribución marginal i-ésima y corresponde con la función de distribución de la variable aleatoria X_i

Las distribuciones marginales pueden obtenerse a partir de la distribución conjunta:

$$F_{X_i}(x_I) = F(+\infty, \dots, +\infty, x_i, +\infty, \dots, +\infty)$$

Análogamente, la función de distribución marginal del subvector aleatorio (X_{i_1},\ldots,X_{i_m}) vendrá dada por

$$F_{X_{i_1},\ldots,X_{i_m}}(x_{i_1},\ldots,x_{i_m})=F(+\infty,\ldots,+\infty,x_{i_1},+\infty,\ldots,+\infty,x_{i_m},+\infty,\ldots,+\infty).$$

1.4) Vector aleatorio absolutamente continuo

Un vector aleatorio X es absolutamente continuo si existe una función $f: \mathbb{R}^k \longrightarrow \mathbb{R}$ no negativa (llamada función de densidad) tal que

$$F(x) = F(x_1, \dots, x_k) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_k} f(z_1, \dots, z_k) dz_k, \dots, dz_1,$$

para todo $x = (x_1, \dots, x_k) \in \mathbb{R}^k$

Usando el teorema fundamental del cálculo, se tiene que en cada punto de continuidad (x_1, \ldots, x_k) de f:

$$\frac{\partial^k F(x_1,\ldots,x_k)}{\partial x_1,\ldots,\partial x_k} = f(x_1,\ldots,x_k).$$

Existen variables aleatorias cuya función de distribución es continua pero que no son absolutamente continuas (tienen una parte singular) y puede ocurrir que X_1, \ldots, X_k sean absolutamente continuas y que (X_1, \ldots, X_k) no lo sea.

- \rightarrow Ejemplo: Si X_1 es una variable aleatoria absolutamente continua, entonces el vector aleatorio $X=(X_1,X_2)$ es continuo pero no absolutamente continuo.
- \rightarrow De hecho, es completamente singular ya que está contenido en la recta y=x que tiene medida cero en \mathbb{R}^2 .

Esto ocurre si consideramos las notas de unos alumnos y sus medidas. En estos casos deberemos eliminar estas variables dependientes del vector.

1.5) Vector aleatorio discreto

Un vector aleatorio X se dice que es discreto si existe un conjunto numerable $S \in \mathbb{R}^k$ tal que $P(X \in S) = 1$.

Función masa de probabilidad de una vector aleatorio discreto:

$$P[X = x] = P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k]$$

para todo $x = (x_1, \ldots, x_k) \in \mathbb{R}^k$, satisfaciendo:

$$\rightarrow P[X = x] \ge 0, \ \forall x \in \mathcal{S}$$

$$\rightarrow \sum_{x \in S} P[X = x] = 1$$

Función de distribución de un vector aleatorio discreto:

$$F(x) = P[X \le x] = \sum_{\substack{z \in \mathcal{S} \\ z \le x}} P[X = z],$$

para todo $x \in \mathbb{R}^k$.

1.6) Distribuciones marginales

1.6.1) Caso continuo

• Distribución marginal de la variable aleatoria X_i

Sea $X = (X_1, ..., X_k)$ un vector aleatorio continuo con función de densidad f entonces cada componente X_i es de tipo continuo y su función de distribución es;

$$F_{X_i}(x_i) = P[X_i \le x_i] = \int_{-\infty}^{x_i} f_{X_i}(z_i) \mathrm{d}z_i,$$

con

$$f_{X_i} = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} f(z_1, \dots, z_k) dz_1, \dots, dz_{i-1} \cdot dz_{i+1} \dots, dz_k,$$

para todo $z_i \in \mathbb{R}$.

La función de densidad marginal de cualquier subvector se calcularía de igual forma.

$$X_1, \ldots, X_k$$
 son independientes $\longleftrightarrow f(x_1, \ldots, x_k) = f_{X_1}(x_1) \cdots f_{X_k}(x_k)$.

1.6.2) Caso discreto

 \bullet Distribución marginal de la variable aleatoria X_i

Sea $X = (X_1, ..., X_l)$ un vector aleatorio discreto con $P[X \in \mathcal{S}] = 1$ y función masa de probabilidad P[X = x], para todo $x \in \mathcal{S}$.

Si X_i es una componente arbitraria y por tanto discreta con valores en S_i , entonces su función masa de probabilidad puede obtenerse a partir de la conjunta:

$$P[X_i = x_i] = \sum_{\substack{x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_k \\ (x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) \in S}} P[X_1 = x_1, \dots, X_{i-1} = x_{i-1}, X_i = x_i, X_{i+1} = x_{i+1}, \dots, X_k = x_k].$$

La función masa de probabilidad marginal de cualquier subvector se calcularía de igual forma.

 X_1, \ldots, X_k son independientes \longleftrightarrow para todo $(x_1, \ldots, x_k) \in \mathcal{S}$,

$$P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] = P[X_1 = x_1] \cdots P[X_k = x_k].$$

Nota:

A y B independientes
$$\longleftrightarrow P(A|B) = P(A)$$

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = P(A) \longrightarrow P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B)$$

1.7) Distribuciones condicionadas

1.7.1) Caso continuo

• Distribución condicionada al valor de una variable

Sea $X = (X_1, \dots, X_k)$ un vector aleatorio continuo con función de densidad f.

Sea X_i una componente arbitraria y $x_i^* \in \mathbb{R}$ tal que $f_{X_i}(x_i^*) > 0$.

Se define la distribución condicionada de $(X_1, \ldots, X_{i-1}, X_{i+1}, \ldots, X_k)$ a $(X_i = x_i^*)$ como la determinada por la función de densidad:

$$f_{X_1,\ldots,X_{i-1},\ldots,X_k|X_i=x_i^*}(x_1,\ldots,x_{i-1},x_{i+1},\ldots,x_k|x_i^*) = \frac{f(x_1,\ldots,x^*,\ldots,x_k)}{f_{X_i}(x_i^*)}.$$

• Distribución condicionada a valores de varias variables

Sea $X = (X_1, \ldots, X_k)$ un vector aleatorio continuo con función de densidad f. Sea $(X_{i_1}, \ldots, X_{i_m})$ un subvector arbitrario y $(x_{i_1}^*, \ldots, x_{i_m}^*) \in \mathbb{R}^m$ tal que:

$$f_{X_{i_1},...,X_{i_m}}(x_{i_1}^*,...,x_{i_m}^*) > 0.$$

Se define la distribución condicionada de $(X_1, \ldots, X_{i_1-1}, X_{i_1+1}, \ldots, X_{i_m-1}; X_{i_m+1}, \ldots, X_k)$ a $(X_{i_1} = x_{i_1}^*, \ldots, X_{i_m} = x_{i_m}^*)$ como la determinada por la función de densidad:

$$f_{X_1,\dots,X_{i_1-1},X_{i_1+1},\dots,X_{i_m-1},\dots,X_k|X_{i_1}=x_{i_1}^*,\dots,X_{i_m}=x_{i_m}^*}(x_1,\dots,x_{i-1},x_{i+1},\dots,x_{i_{m-1}},x_{i_{m+1}},\dots,x_k|x_i^*) = \frac{f(x_1,\dots,x_{i_1}^*,\dots,x_{i_m}^*,\dots,x_{i_m}^*,\dots,x_k)}{f(x_1,\dots,x_{i_m},\dots,x_{i_m},\dots,x_{i_m},\dots,x_{i_m},\dots,x_k)}$$

1.7.2) Caso discreto

• Distribución condicionada al valor de una variable

Sea $X = (X_1, ..., X_k)$ un vector aleatorio discreto. Sea X_i una componente arbitraria y $x_i^* \in \mathbb{R}$ tal que

$$P[X_i = x_i^*] > 0.$$

Se define la distribución condicionada de $(X_1, \ldots, X_{i-1}, X_{i+1}, \ldots, X_k)$ a $(X_i = x_i^*)$ como la determinada por la función masa de probabilidad:

$$P[X_1 = x_1, \dots, X_{i-1} = x_{i-1}, X_{i+1} = x_{i+1}, \dots, X_k = x_k | X_i = x_i^*] = P[X_1 = x_1, \dots, X_{i-1} = x_{i-1}, X_i = x_i^*, X_{i+1} = x_{i+1}, \dots, X_k = x_k]$$

$$P[X_i = x_i^*]$$

para todo $(x_1, ..., x_{i-1}, x_{i+1}, ..., x_k)$ tal que $x_1, ..., x_{i-1}, x_i^*, x_{i+1}, ..., x_k \in \mathcal{S}$.

• Distribución condicionada a valores de varias variables

Sea $X = (X_1, \ldots, X_k)$ un vector aleatorio discreto.

Sea X_{i_1}, \dots, X_{i_m} un subvector arbitrario y $(x_{i_1}^*, \dots, x_{i_m}^*) \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$P[X_{i_1} = x_{i_1}^*, \dots, X_{i_m} = x_{i_m}^*] > 0.$$

Se define la distribución condicionada de $(X_1, \ldots, X_{i_1-1}, X_{i_1+1}, \ldots, X_{i_m-1}, X_{i_m+1}, \ldots, X_k)$ a $(X_{i_1} = x_{i_1}^*, \ldots, X_{i_m} = x_{i_m}^*)$ como la determinada por la función masa de probabilidad:

$$P[X_{1} = x_{1}, \dots, X_{i_{1}-1} = x_{i_{1}-1}, X_{i_{1}+1} = x_{i_{1}+1}, \dots, X_{i_{m}-1} = x_{i_{m}-1}, X_{i_{m}+1} = x_{i_{m}+1}, \dots, X_{k} = x_{k} | X_{i_{1}} = x_{i_{1}}^{*}, \dots, X_{i_{m}} = x_{i_{m}}^{*}, \dots, X_{k} = x_{k}]$$

$$x_{i_{m}^{*}}] = \frac{P[X_{1} = x_{1}, \dots, X_{i_{1}} = x_{i_{1}}^{*}, \dots, X_{i_{m}} = x_{i_{m}}^{*}, \dots, X_{k} = x_{k}]}{P[X_{i_{1}} = x_{i_{1}}^{*}, \dots, X_{i_{m}} = x_{i_{m}}^{*}]}$$

para todo $(x_1, \ldots, x_{i_1}, x_{i_1+1}, \ldots, x_{i_m-1}, x_{i_m+1}, \ldots, x_k)$, tal que $(x_1, \ldots, x_{i_1}^*, \ldots, x_{i_m}^*, \ldots, x_k) \in \mathcal{S}$

1.8) Distribución normal multivariante $\mathcal{N}_k(\mu, V)$

1) Función de densidad

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{|V|(2\pi)^k}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)'V^{-1}(x-\mu)\right),$$

para $x \in \mathbb{R}^k$, donde μ es un vector k-dimensional y V es una matriz $k \times k$ simétrica y definida positiva.

• Definiciones

Una matriz simétrica A, de dimensión $k \times k$, se dice que es definida positiva si se verifica que x'Ax > 0 para cualquier vector no nulo $x \in \mathbb{R}^k$.

Una matriz simétrica A, de dimensión $k \times k$, se dice que es semidefinida positiva si se verifica que $x'Ax \ge 0$ para cualquier vector $x \in \mathbb{R}^k$.

¿Cómo calcular la inversa de $V = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$ con R?

```
## [,1] [,2]
## [1,] 1.3333333 -0.6666667
## [2,] -0.6666667 1.3333333
```

1.8.1) Normal bivariante

• Función de densidad

```
Caso bivariante, k=2, para \mu=(0,0) y V=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}.
```

Cálculo de la función de densidad en x = (1,1) utilizando la función de de la librería mytnorm de R:

[1] 0.0943539

• Función de distribución

Cálculo (aproximado) de la función de distribución en x = (1, 1) con la función:

```
pmvnorm(lower = -Inf, upper = x, mean = mu, sigma = V)
```

[1] 0.7452036

• Probabilidad en rectángulos

Cálculo (aproximado) de las probabilidades en rectángulos dando los límites inferiores y superiores del rectángulo. Por ejemplo, para calcular

$$P(-1 < X_1 < 1, -1 < X_2 < 1)$$

[1] 0.499718

Su representación gráfica:

```
f <- function(x1, x2) dmvnorm(data.frame(x1, x2), mu, V)

x <- seq(-3, 3, length = 50)

y <- seq(-3, 3, length = 50)

z <- outer(x, y, f)

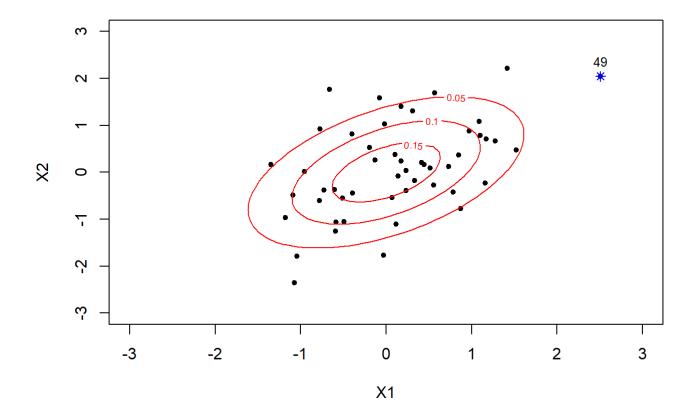
persp(x, y, z, xlab = 'x1', ylab = 'x2', zlab = 'f(x1, x2)', col = 'orange', main = "
Función de densidad")</pre>
```

Función de densidad



Su representación gráfica $(f(x_1, x_2) = c)$ y 50 datos simulados de este modelo

```
#Se fija la semilla para la generación aleatoria
set.seed(123)
#Generación aleatoria del modelo
d <- rmvnorm(50, mu, V)
plot(d, xlab = "X1", ylab = "X2", pch = 20, xlim = c(-3, 3), ylim = c(-3, 3))
contour(x, y, z, nlevels = 4, add = T, col = 'red')</pre>
```



• Distancia de Mahalanobis

La distancia de Mahalanobis del vector x al vector μ basada en la matriz V:

$$D = \sqrt{(x-\mu)'V^{-1}(x-\mu)}$$

Tiene en cuenta la diferentes escalas de los datos y sus correlaciones.

Servirá para detectar las observaciones más alejadas del vector de medias que podrían ser observaciones atípicas (outliers) que no provengan de nuestra población o contengan errores.

- ightarrow Cuando se pueda, se deberán chequear y, si es posible, corregir o eliminar.
- \rightarrow En otros casos, se deberán mantener por ser observaciones correctas que hay que tener en cuenta.
- Cálculo de la distancia de Mahalanobis

Para calcular las distancias de Mahalanobis al cuadrado de los datos al vector de medias (teóricas o muestrales) podemos utilizar la función mahalanobis.

• Distancias de los datos simulados al vector de medias teóricas μ con respecto a V

```
summary(dM1)
```

```
## Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu. Max.
## 0.05216 0.41016 1.26433 1.66615 2.31591 7.13332
```

• ¿Dónde se encuentra la observación más alejada del vector de medias?

```
d[which.max(dM1),]
```

[1] 2.509470 2.046512

```
f <- function(x1, x2) dmvnorm(data.frame(x1, x2), mu, V)

x <- seq(-3, 3, length = 50)

y <- seq(-3, 3, length = 50)

z <- outer(x, y, f)

plot(d, xlab = "X1", ylab = "X2", pch = 20, xlim = c(-3, 3), ylim = c(-3, 3))

points(d[which.max(dM1), 1], d[which.max(dM1), 2], col = "blue", pch = 8)

text(d[which.max(dM1), 1], d[which.max(dM1), 2], which.max(dM1), cex = 0.8, pos = 3)

contour(x, y, z, nlevels = 4, add = T, col = 'red')</pre>
```



• Distancias de los datos simulados al vector de medias muestrales \overline{x} con respecto a $\mathcal S$

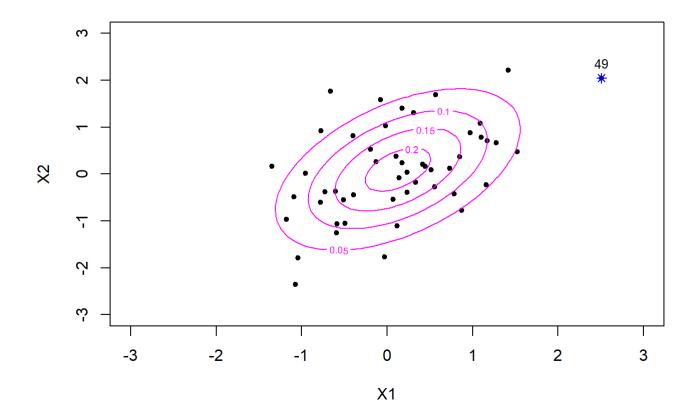
```
summary(dM2)
```

```
## Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu. Max.
## 0.02114 0.67111 1.52636 1.96000 2.64131 8.65906
```

• ¿Dónde se encuentra la observación más alejada del vector de medias?

```
d[which.max(dM2), ]
```

```
f <- function(x1, x2) dmvnorm(data.frame(x1, x2), colMeans(d), cov(d))
x <- seq(-3, 3, length = 50)
y <- seq(-3, 3, length = 50)
z <- outer(x, y, f)
plot(d, xlab = "X1", ylab = "X2", pch = 20, xlim = c(-3, 3), ylim = c(-3, 3))
points(d[which.max(dM2), 1], d[which.max(dM2), 2], col = "blue", pch = 8)
text(d[which.max(dM2), 1], d[which.max(dM2), 2], which.max(dM2), cex = 0.8, pos = 3)
contour(x, y, z, nlevels = 4, add = T, col = 'magenta')</pre>
```



1.9) Distribución multinomial $\mathcal{M}_k(n, p_1, \dots, p_k)$

• Modelo multinomial

 (X_1, \ldots, X_k) : variables aleatorias que representan el número de veces que ocurre el suceso A_i en un experimento aleatorio repetido n veces con k opciones dadas por $\{A_1, \ldots, A_k\}$ y con probabilidades constantes $p_i = P(A_i)$, para $i = 1, \ldots, k$. Función masa de probabilidad conjunta:

$$p(x_1, \dots, x_k) = P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] = \frac{n!}{x_1! \cdots x_k!} p_1^{x_1} \cdots p_k^{x_k},$$

para enteros no negativos tales que $x_1 + \cdots + x_k = n$ y donde $p_i \in [0,1]$ satisface $p_1 + \cdots + p_k = 1$.

Distribuciones marginales: X_i sigue una distribución binomial $B(n, p_i)$, con $E(X_i) = np_i$.

1.10) Estadístico de Pearson

• Discrepancias entre lo observado y lo esperado

Contexto: Lanzamos un dado $n = \text{veces}, p_i = \frac{1}{6}$ para todo i, y los valores esperados son $np_i = 10$, para $i = 1, \dots, 6$.

Objetivo: Medir las discrepancias entre valores observados y esperados.

Sea $X = (X_1, \dots, X_k)$ una variable aleatoria con distribución multinomial, entonces el estadístico

$$T = \sum_{i=1}^{k} \frac{X_i - np_i}{np_i}$$

sigue una distribución Chi-cuadrado χ^2_{k-1} de Pearson con k-1 grados de libertad, cuando $n \longrightarrow \infty$.

1.11) Medias y covarianzas

• Definiciones

Dado el vector aleatorio.

 \rightarrow El vector de medias (o esperanza matemática de X) se define como:

$$\mu := E[X] = (E[X_1], \dots, E[X_k])' = (\mu_1, \dots, \mu_k)'$$

(note que es un vector columna).

→ La matriz de covarianzas (o varianzas-covarianzas) se define como:

$$V = (\sigma_{i,j}),$$

donde $\sigma_{i,j}$ es la covarianza entre X_i y X_j , definida como:

$$\sigma_{i,j} = \text{Cov}(X_i, X_j) = E[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)] = E[X_i X_j] - \mu_i \mu_j$$

Notemos que $\sigma_{i,i} = E\left[(X_i - \mu_i)^2\right] = \text{Var}(X_i) = \sigma_i^2$.

• Cálculo de la esperanza matemática

La media de cada componente X_i del vector puede calcularse a partir de la distribución conjunta o a partir de la marginal.

 \rightarrow Caso discreto:

$$E[X_i] = \sum_{x_i} x_i P[X_i = x_i]$$

$$= \sum_{x_1, \dots, x_k} x_i P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k]$$

→ Caso continuo:

$$E[X_i] = \int_{\mathbb{R}} x_i f_{X_i}(x_i) \, \mathrm{d}x_i$$
$$= \int_{\mathbb{R}^k} x_i f(x_1, \dots, x_k) \, \mathrm{d}x_1 \dots \, \mathrm{d}x_k$$

1.11.1) Esperanza de la transformación $g: \mathbb{R}^k \longrightarrow \mathbb{R}$

• Caso discreto

Sea $g:\mathbb{R}^k\longrightarrow\mathbb{R}$ una función medible $\longrightarrow Y=g(X)$ es una variable aleatoria .

Si X es de tipo discreto,

$$\exists E[g(X)] \longleftrightarrow \sum_{x_1, \dots, x_k} |g(x_1, \dots, x_k)| P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k] < \infty$$

Y en caso de existir:

$$E[g(X_1, \dots, X_k)] = \sum_{x_1, \dots, x_k} g(x_1, \dots, x_k) P[X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k]$$

• Caso continuo

Sea $g:\mathbb{R}^k \longrightarrow \mathbb{R}$ una función medible $\longrightarrow Y = g(X)$ es una variable aleatoria .

Si X es de tipo continuo,

$$\exists E[g(X)] \longleftrightarrow \int_{\mathbb{R}^k} |g(x_1, \dots, x_k)| f_X(x_1, \dots, x_k) \, \mathrm{d}x_1 \cdots \, \mathrm{d}x_k < \infty$$

Y en caso de existir:

$$E[g(X_1,\ldots,X_k)] = \int_{\mathbb{R}^k} g(x_1,\ldots,x_k) f_X(x_1,\ldots,x_k) dx_1 \cdots dx_k.$$

• Propiedades

V es una matriz simétrica y semidefinida positiva ($x'Vx \ge 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^k$).

En forma matricial,

$$V = E[(X - \mu)(X - \mu)'] = E[XX'] - \mu\mu'.$$

donde la esperanza de una matriz aleatoria se define como la matriz de las esperanzas de cada variable.

Si X_i y X_j son independientes, entonces

$$E[X_i X_j] = E[X_i] E[X_j]$$

y, por lo tanto, $Cov(X_i, X_j) = 0$. El recíproco no es cierto.

Si $X \longrightarrow \mathcal{N}_k(\mu, V)$, se puede demostrar que μ es el vector de medias y V es la matriz de covarianzas.

1.12) Correlación

La correlación (lineal de Pearson) entre X_i y X_j se define como

$$\rho_{i,j} = \operatorname{Corr}(X_i, X_j) = \frac{\sigma_{i,j}}{\sigma_i \sigma_j}$$

siendo $\rho_{i,i} = \operatorname{Corr}(X_i, X_j) = 1.$

Mide el grado de relación lineal entre X_i y X_j .

Puede demostrarse que

$$-1 \le \rho_{i,j} \le 1.$$

Se dice que X_i y X_j son incorreladas si $\rho_{i,j} = 0$.

Si son independientes serán incorreladas, pero el recíproco no es cierto.

La matriz de correlaciones es $R = (\rho_{i,j})$.

1.12.1) Correlación entre vectores aleatorios

Análogamente, si X e Y son vectores aleatorios (de dimensiones cualesquiera), se define su matriz de covarianzas como

$$Cov(X, Y) = (Cov(X_i, Y_i))$$

y su matriz de correlaciones como

$$Corr(X, Y) = (Corr(X_i, Y_j)).$$

Puede demostrarse que

$$Cov(X, Y) = E[(X - E[X])(Y - E[Y])'].$$

Evidentemente, Cov(X) = Cov(X, X).

• Propiedades

Si X, Y, Z son vectores (columna) aleatorios, se verifican las propiedades siguientes:

- 1) $E[a_1g_1(X) + a_2g_2(X)] = a_1E[g_1(X)] + a_2E[X_2]$, donde $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ y g_1 y g_2 son funciones medible de vectores aleatorios.
- 2) $X = (Y, Z), E_X[g(Y)] = E_Y[g(Y)]$, donde g es una función medible de un vector aleatorio, E_X denota la esperanza en la distribución conjunta y E_Y en la distribución marginal.
- 3) Si X e Y son independientes, entonces

$$E[g_1(X)g_2(Y)] = E[g_1(X)]E[g_2(Y)],$$

donde g_1 y g_2 son funciones medibles cualesquiera de vectores aleatorios .

- 4) $E[AX + b] = AE[X] + b, A \in M_{m,k}b' \in \mathbb{R}^m$.
- 5) $Cov(X_i, X_j) = E[X_i X_j] E[X_i]E[X_j].$
- 6) Si X_1, \ldots, X_k son independientes, $Cov(X_i, X_i) = 0$.
- 7) $\operatorname{Var}(X_i + X_i) = \operatorname{Var}(X_i) + 2\operatorname{Cov}(X_i, X_i) + \operatorname{Var}(X_i)$.
- 8) $\operatorname{Cov}(aX_i + b, cX_i + d) = \operatorname{ac}\operatorname{Cov}(X_i, X_i)$, donde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$.
- 9) $Cov(X) = E[(X \mu)(X \mu)'] = E[XX'] \mu\mu'.$
- 10) $\operatorname{Var}(a'X) = a' \operatorname{Cov}(X) a = \sum_{i,j} a_i a_j \sigma_{i,j}$, donde $a \in \mathbb{R}^k$.
- 11) $\operatorname{Cov}(AX + b) = A \operatorname{Cov}(X)A'$, donde $A \in M_{m,k}$ y $b' \in \mathbb{R}^m$.
- 12) Si X_1, \ldots, X_k son independientes, $Corr(X_i, X_j) = 0$.
- 13) $\operatorname{Corr}(aX_i + b, cX_i + d) = \operatorname{Corr}(X_i, X_i)$, donde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$.
- 14) $-1 \leq Corr(X_i, X_i) \leq 1$.
- 15) $\operatorname{Corr}(X_i, aX_i + b) = \pm 1$, donde $a, b \in \mathbb{R}$ (según el signo de a).
- 16) $\operatorname{Corr}(X) = \delta^{-1} \operatorname{Cov}(X) \delta^{-1}$, donde δ es la matriz diagonal formada por las desviaciones típicas $(\delta = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_k))$.
- 17) $\operatorname{Cov}(X, Y) = (\operatorname{Cov}(X_i, Y_j)) = \operatorname{Cov}(Y, X)'.$
- 18) $\operatorname{Cov}(X + Z, Y) = \operatorname{Cov}(X, Y) + \operatorname{Cov}(Z, Y)$

- 19) Si X e Y tienen la misma dimensión, entonces Cov(X + Y) = Cov(X) + Cov(X, Y) + Cov(Y, X) + Cov(Y).
- 20) Cov(AX, BY) = ACov(X, Y)B', donde A y B son matrices (de dimensiones adecuadas).
- 21) Si X e Y independientes, entonces Cov(X, Y) = 0.
- Demostración apartado (10)

Directamente se tiene que:

$$Var(a'X) = Cov(a'X, a'X) = E[a'(X - \mu)(X - \mu)'a] = a Cov(X)a$$

Como consecuencia, se obtiene que la matriz de covarianzas Cov(X) es semidefinida positiva ya que $Var(a'X) \ge 0$.

Lo mismo le ocurre a la matriz de correlaciones Corr(X) ya que es la matriz de covarianzas de las variables aleatorias tipificadas $Z_i = \frac{X_i - \mu_i}{\sigma_i}$.

1.13) Resultados básicos de la inferencia

Contexto

En la práctica, todas las medidas, varianzas y covarianzas serán desconocidas por lo que tenemos que estimarlas. Para ello dispondremos de una muestra de individuos (objetos) en los que se han medido todas las variables. Proporcionamos resultados básicos de inferencia para poder aplicar las técnicas multivariantes que desarrollaremos en temas posteriores.

Se ilustran estos procedimientos de inferencia con conjuntos de datos de R, accesibles con data().

1.13.1) ¿Cómo se representan las muestras aleatorias?

• Matriz de la muestra aleatoria simple

En general, nuestra muestra aleatoria se representará como:

La variable Y solo se usará para detonar la variable respuesta en regresión.

Si no hay grupos supondremos que los objetos

$$O_i = (X_{i,1}, X_{i,2}, \dots, X_{i,k})'$$

son una muestra aleatoria simple de X, es decir, serán vectores (columna) aleatorios independientes con la misma distribución que X. Si no hay grupos supondremos lo mismo en cada grupo

En algunos casos usaremos la matriz $M = (X_{i,j})$ que será una matriz aleatoria.

1.13.2) ¿Cómo se muestran los valores muestrales?

• Matriz de datos

En general, nuestra muestra se representará como:

i	x_1	x_2	 x_k	y
\mathbf{o}_1	$x_{1,1}$	$x_{1,2}$	 $x_{1,k}$	y_1
	• • •		 	
\mathbf{o}_i	$x_{i,1}$	$x_{i,2}$	 $x_{i,k}$	y_i
	• • •		 	
\mathbf{o}_n	$x_{n,1}$	$x_{n,2}$	 $x_{n,k}$	y_n

La variable Y solo se usará para detonar la variable respuesta en regresión.

En algunos casos usaremos la matriz de datos $M = (x_{i,j})$

Si no hay grupos, supondremos que los vectores

$$o_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,k})'$$

son una realización de una muestra aleatoria simple de X, es decir, serán vectores (columna) con los datos muestrales.

Si hay grupos supondremos lo mismo en cada grupo.

1.13.3) El conjunto de datos LifeCycleSavings

• Cargamos los datos y visualizamos las primeras filas

```
datos <- LifeCycleSavings
head(datos, n = 6)
```

```
## Australia 11.43 29.35 2.87 2329.68 2.87 ## Austria 12.07 23.32 4.41 1507.99 3.93 ## Belgium 13.17 23.80 4.43 2108.47 3.82 ## Bolivia 5.75 41.89 1.67 189.13 0.22 ## Brazil 12.88 42.19 0.83 728.47 4.56 ## Canada 8.79 31.72 2.85 2982.88 2.43
```

• ¿Qué información está recogida en el conjunto de datos?

Con la instrucción help(LifeCycleSavings) conocemos qué información está contenida en el conjunto:

- sr: incremento de los ahorros personales 1960-1970.
- pop15: % población menor de 15 años.
- pop75: % población menor de 75.
- dpi: ingresos per-capita.

1.14) Estimador para el vector de medias μ

Vector de medias muestrales, también llamado objeto medio, se define como:

$$\overline{O} = \overline{X} = (\overline{X}_1, \dots, \overline{X}_k)' = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n O_i,$$

donde
$$\overline{X}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{i,j}$$
.

Se puede demostrar fácilmente que:

$$\rightarrow E(\overline{O}) = \mu$$
 (estimador centrado de μ)

$$\rightarrow \operatorname{Cov}(\overline{O}) = \frac{V}{n}$$

1.14.1) ¿Dónde se encuentra el vector de medias muestrales?

Propiedad

 \overline{O} es el punto de \mathbb{R}^k que minimiza la suma de las distancias al cuadrado (error cuadrático medio, MSE), es decir, es la solución de

$$\min_{P \in \mathbb{R}^k} MSE = \sum_{i=1}^n d^2(O_i, P),$$

donde d representa la distancia Euclídea, definida para dos vectores $x, y \in \mathbb{R}^k$ como

$$d(x,y) = \sqrt{\sum_{j=1}^{k} (x_j - y_j)^2}.$$

1.15) Estimador para la matriz de covarianzas V

Para estimar $\sigma_{i,j}$ usaremos

- \rightarrow La covarianza muestral: $\hat{\sigma}_{i,j} = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} (X_{l,i} \overline{X}_i)(X_{l,j} \overline{X}_j)$
- \rightarrow La cuasi-covarianza muestral:

$$S_{i,j} = \frac{1}{n-1} \sum_{l=1}^{n} (X_{l,i} - \overline{X}_i)(X_{l,j} - \overline{X}_j)$$

Para estimar V usaremos:

$$\rightarrow \hat{V} = (\hat{\sigma}_{i,j}) = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} (O_l - \overline{O})(O_l - \overline{O})'$$

$$\rightarrow \mathcal{S} = (\mathcal{S}_{i,j}) = \frac{1}{n-1} \sum_{n=1}^{n} (O_l - \overline{O})(O_l - \overline{O})'$$

Se verifica que E(S) = V (estimador centrado de V).

1.15.1) Para una distribución normal

• Proposición

Si $X \longrightarrow \mathcal{N}_k(\mu, V)$ entonces se verifica que:

- $\overline{O} \longrightarrow \mathcal{N}_k\left(\mu, \frac{V}{n}\right)$
- \overline{O} y \hat{V} son los estimadores máximos verosímiles de μ y V, respectivamente.
- Además, \overline{O} y \hat{V} son independientes entre sí. Por tanto, también \overline{O} y \mathcal{S} son independientes entre sí.
- La distribución aleatoria

$$n\hat{V} = (n-1)\mathcal{S}$$

se conoce como distribuidor de Wishart.

• Test de normalidad multivariante: Test de Shapiro-Wilk

Para la aplicación de algunas técnicas multivariantes la hipótesis de normalidad es importante y debe ser contrastada.

$$H_0: (X_1,\ldots,X_k) \to \mathcal{N}_k(\mu,V)$$

$$H_1:(X_1,\ldots,X_k)\nrightarrow\mathcal{N}_k(\mu,V)$$

15

Podremos utilizar la función mshapiro.test de la librería mvnormtest de R para realizar el test de normalidad multivariante de Shapiro-Wilk.

 \rightarrow Si aplicamos el test a los 50 datos simulados de la normal bivariante lógicamente obtnedremos un p-valor que apoya la hipótesis nula.

```
## [1] 0.6922
```

• Seguimos con LifeCycleSavings

Cálculo de las medias muestrales para cada variable.

```
mean(datos$sr); mean(datos$pop15); mean(datos$pop75); mean(datos$dpi); mean(datos$
    ddpi)
```

```
## [1] 9.671
## [1] 35.0896
## [1] 2.293
## [1] 1106.758
## [1] 3.7576
```

O bien, podemos calcular todas las características de estas variables

```
summary(datos)
```

```
##
          sr
                          pop15
                                          pop75
                                                            dpi
##
   Min.
           : 0.600
                             :21.44
                                             :0.560
                                                              : 88.94
                     Min.
                                      Min.
                                                       Min.
    1st Qu.: 6.970
                     1st Qu.:26.21
                                      1st Qu.:1.125
                                                       1st Qu.: 288.21
##
   Median :10.510
                     Median :32.58
                                      Median :2.175
                                                       Median: 695.66
          : 9.671
##
   Mean
                     Mean
                             :35.09
                                      Mean
                                            :2.293
                                                       Mean
                                                              :1106.76
##
    3rd Qu.:12.617
                     3rd Qu.:44.06
                                      3rd Qu.:3.325
                                                       3rd Qu.:1795.62
    Max.
           :21.100
                     Max.
                             :47.64
                                      Max.
                                             :4.700
                                                              :4001.89
                                                       Max.
##
         ddpi
           : 0.220
##
   Min.
##
    1st Qu.: 2.002
   Median : 3.000
##
          : 3.758
   Mean
    3rd Qu.: 4.478
##
           :16.710
##
   Max.
```

Cálculo de la matriz de covarianzas muestrales

```
cov(d)
```

Cálculo de la matriz de correlaciones muestrales

En este caso es mejor usar correlaciones muestrales que eliminan el efecto de las unidades:

$$R_{i,j} = \frac{\mathcal{S}_{i,j}}{\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j},$$

donde
$$S_i = \sqrt{S_{i,i}}$$
 y $S_j = \sqrt{S_{j,j}}$.

Cálculo de la matriz de correlaciones muestrales

cor(datos)

```
##
                                       pop75
                                                                ddpi
                          pop15
                                                    dpi
                 sr
          1.0000000 -0.45553809
                                  0.31652112 0.2203589
## sr
                                                         0.30478716
  pop15 -0.4555381 1.00000000 -0.90847871 -0.7561881 -0.04782569
## pop75
         0.3165211 -0.90847871
                                  1.00000000 0.7869995
          0.2203589 -0.75618810
                                 0.78699951
## dpi
                                             1.0000000 -0.12948552
## ddpi
          0.3047872 \ -0.04782569 \ \ 0.02532138 \ -0.1294855
                                                         1.00000000
```

Observamos que algunas variables tienen correlaciones positivas y otras negativas







RELACIÓN DE PROBLEMAS: VECTORES ALEATORIOS

ANÁLISIS ESTADÍSTICO MULTIVARIANTE GRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE DATOS

1. Sea (X,Y) un vector aleatorio con función de densidad conjunta

$$f(x,y) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si } 0 < x < 1, 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right.$$

Hallar las distribuciones marginales y condicionadas.

2. Obtener las distribuciones marginales y condicionadas asociadas al vector aleatorio (X,Y) con función de densidad

$$f(x,y) = \left\{ \begin{array}{ll} 2 & \text{si } 0 < x < 1, 0 < y < x \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right.$$

3. Sea (X,Y) un vector aleatorio con función de densidad

$$f(x,y) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{3}{4} \left[xy + \frac{x^2}{2} \right] & \text{si } 0 < x < 1, 0 < y < 2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right.$$

Hallar la distribución marginal de X y la distribución de Y condicionada a $X=\frac{1}{2}$.

4. Sea $\mathbf{X}=(X_1,X_2)$ un vector aleatorio con función masa de probabilidad

$$P[X_1 = x_1, X_2 = x_2] = \frac{k}{2^{x_1 + x_2}}, x_1, x_2 \in \mathbb{N},$$

donde k es una constante. Obtener las distribuciones marginales y condicionadas.

- 5. Calcular la función de densidad de una distribución normal bidimensional en (1, 1) si las medias son cero, las varianzas 1 y 4, y la covarianza 1.
- 6. Sea (X,Y) un vector aleatorio con distribución uniforme en el cuadrado unidad, $[0,1] \times [0,1]$, con función de densidad conjunta

$$f(x,y) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si } 0 < x < 1, 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right.$$

Calcular el valor esperado de $g(X,Y)=XY^2$, es decir, $E[XY^2]$.

7. (X,Y) vector aleatorio discreto con función masa de probabilidad conjunta:

$$\begin{array}{c|cccc}
X \backslash Y & 1 & 2 \\
\hline
1 & 1/9 & 2/9 \\
2 & 2/9 & 4/9
\end{array}$$

- a) Calcular E[X+Y], E[2X+3Y].
- b) Obtener el vector de medias, la matriz de covarianzas y la matriz de correlaciones del vector (X,Y).
- c) ¿Son independientes? ¿Están incorreladas?
- 8. Demostrar que el vector de medias muestral es el punto de \mathbb{R}^k que minimiza la suma de las distancias al cuadrado (error cuadrático medio, MSE).

1

1) Sea (X,Y) un vector aleatorio con función de densidad conjunta

$$f(x,y) = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 < x < 1, \ 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Hallar las distribuciones marginales y condicionadas

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) \, \mathrm{d}y = \int_{-\infty}^{0} 0 \, \mathrm{d}y + \int_{0}^{1} 1 \, \mathrm{d}y + \int_{0}^{+\infty} 0 \, \mathrm{d}y = [y]_{y=0}^{y=1} = 1 \qquad f_X(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 < x < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \, \mathrm{d}x = \int_0^1 1 \, \mathrm{d}x = [x]_{x=0}^{x=1} = 1 \qquad f_Y(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$f(x,y) = \begin{cases} 1 & 0 < x < 1, \ 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$y|x = x^* \longrightarrow f_{y|x = x^*} = \frac{f(x^*, y)}{f_X(x^*)} = \begin{cases} 1 & 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$f(x,y) = f_X(x) \cdot f_Y(y)$$
 X e Y independientes

2) Obtener las distribuciones marginales y condicionadas asociadas al vector aleatorio (X,Y) con función de densidad

$$f(x,y) = \begin{cases} 2 & \text{si } 0 < x < 1, \ 0 < y < x \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \, \mathrm{d}y = \int_0^x 2 \, \mathrm{d}y = [2y]_{y=0}^{y=x} = 2x \longrightarrow \begin{cases} 2x & \text{si } 0 < x < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) \, \mathrm{d}x = \int_y^1 2 \, \mathrm{d}x = [2x]_{x=y}^{x=1} = 2 - 2y \longrightarrow \begin{cases} 2 - 2y & \text{si } 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Los recintos son dependientes.

$$y|x=x^*$$

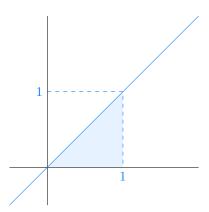
$$f_X(x^*) > 0$$

$$f_{y|x=x^*}(y|x^*) = \frac{f(x^*,y)}{f(x^*)} = \begin{cases} \frac{2}{2x^*} & 0 < y < x^* \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} = \begin{cases} \frac{1}{x^*} & 0 < y < x^* \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$x|y=y^*$$

$$f_Y(y^*) > 0$$

$$f_{x|y=y^*}(x|y^*) = \frac{f(x,y^*)}{f_Y(y^*)} = \begin{cases} \frac{2}{2-2y^*} & \text{si } y^* < x < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} = \begin{cases} \frac{1}{1-y^*} & \text{si } y^* < x < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$



3) Sea (X,Y) un vector aleatorio con función de densidad

$$f(x,y) = \begin{cases} \frac{3}{4} \left[xy + \frac{x^2}{2} \right] & \text{si } 0 < x < 1, \ 0 < y < 2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Hallar la distribución marginal de X y la distribución de Y condicionada a $X = \frac{1}{2}$

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) \, \mathrm{d}y = \int_0^2 \frac{3}{4} \left[xy + \frac{x^2}{2} \right] = \frac{3}{4} \left[\frac{xy^2}{2} + \frac{x^2}{2} \cdot y \right]_{y=0}^{y=2} = \frac{3}{4} \left(2x + x^2 \right) \longrightarrow \begin{cases} \frac{3}{4} \left(2x + x^2 \right) & \text{si } 0 < x < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$y|x = x^*$$

$$\begin{aligned} y|x &= x^* \\ f_{y|x=x^*}(y|x^*) &= \frac{f(x^*,y)}{f(x^*)} = \frac{\frac{3}{4} \left(x^*y + \frac{(x^*)^2}{2} \right)}{\frac{3}{4} \left(2x^* + (x^*)^2 \right)} = \frac{x^*y + \frac{(x^*)^2}{2}}{2x^* + \frac{(x^*)^2}{2}} = \frac{x^*y + (x^*)^2}{4x^* + 2(x^*)^2} \xrightarrow{x^* = \frac{1}{2}} \xrightarrow{\frac{1}{2}y + \frac{1}{8}}{2 \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{4}} = 2 \cdot \frac{y + \frac{1}{4}}{5} \\ \begin{cases} 2 \cdot \frac{y + \frac{1}{4}}{5} & \text{si } 0 < y < 2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \end{aligned}$$

4) Sea $X=(X_1,X_2)$ un vector aleatorio con función masa de probabilidad

$$P[X_1=x_1,X_2=x_2]=\frac{k}{2^{x_1+x_2}},x_1,x_2\in\mathbb{N}$$

donde k es una constante. Obtener las distribuciones marginales y condicionadas.

$$P[X_1 = x_1, X_2 = x_2] = \frac{k}{2^{x_1 + x_2}}, \ x_1, x_2 \in \mathbb{N}$$
 (incluido el 0)

$$P[X_1 = x_1] = \sum_{x_2 \in \mathbb{N}} \frac{k}{2^{x_1 + x_2}} = \frac{k}{2^{x_1}} \sum_{x_2 \in \mathbb{N}} \frac{1}{2^{x_2}} = \frac{k}{2^{x_1}} \cdot \frac{1}{1 - \frac{1}{2}} = \frac{2k}{2^{x_1}}$$

$$P[X_2 = \underset{x_1^* \in \mathbb{N}}{x_1^* \in \mathbb{N}} = x_1^*] = \frac{P[X_1 = x_1^*, X_2 = x_2]}{P[X_1 = x_1]} = \begin{cases} \frac{\frac{k}{2^{x_1 + x_2}}}{\frac{2k}{2^{x_1}}} = \frac{1}{2 \cdot 2^{x_2}} & x_2 \in \mathbb{N} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

5) Calcular la función de densidad de una distribución normal bidimensional en (1,1) si las medias son cero, las varianzas 1 y 4, y la covarianza 1.

Fórmula de la función de densidad de una distribución normal bidimensional:

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho^2}} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)} \left[\frac{(x-\mu_x)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y-\mu_y)^2}{\sigma_y^2} - \frac{2\rho(x-\mu_x)(y-\mu_y)}{\sigma_x\sigma_y} \right] \right)$$

$$\mu_{x} = \mu_{y} = 0$$

$$\sigma_{x}^{2} = 1$$

$$\sigma_{y}^{2} = 4$$

$$\rho = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{x} \cdot \sigma_{y}} = \frac{1}{\sqrt{1} \cdot \sqrt{4}} = \frac{1}{2}$$

$$f(1,1) = \frac{1}{2\pi \cdot 1 \cdot 2\sqrt{1 - \left(\frac{1}{2}\right)^{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2\left(1 - \left(\frac{1}{2}\right)^{2}\right)} \cdot \left[1^{2} + \frac{1^{2}}{4} - \frac{2 \cdot \frac{1}{2}}{1 \cdot 2}\right]\right)$$

$$= \frac{1}{2\pi\sqrt{3}} \exp\left(-\frac{2}{3} \cdot \frac{3}{4}\right)$$

$$= \frac{1}{2\pi\sqrt{3}} \exp\left(-\frac{1}{2}\right) \simeq \boxed{0.0557}$$

$$f(x) = \frac{1}{|V|(2\pi)^k} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^\mathsf{T} \Sigma^{-1}(x-\mu)}$$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \qquad |V| = 3$$

$$\mathrm{Adj}(V^\intercal) = \begin{pmatrix} 4 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \qquad V^{-1} = \frac{1}{|V|} \mathrm{Adj}(V^\intercal) = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x - 0 & y - 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x - 0 \\ y - 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3}x\frac{y}{3} & -\frac{x}{3} + \frac{y}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{4}{3}x^2 - \frac{xy}{3} - \frac{x}{y} + \frac{y^2}{3}$$

$$f(x,y) = \frac{1}{\sqrt{3(2\pi)^k}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{4}{3}x^2 - \frac{2xy}{3} - \frac{x}{y} + \frac{y^2}{3}\right)} \longrightarrow f(1,1) \simeq 0.0557$$

6) Sea (X,Y) un vector aleatorio con distribución uniforme en el cuadradado unidad, $[0,1] \times [0,1]$, con función de densidad conjunta

$$f(x,y) = \begin{cases} 1 & \text{si } 0 < x < 1, \ 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Calcular el valor esperado de $g(X,Y)=XY^2$, es decir, $E[XY^2]$.

El valor esperado de una función g(X,Y) para una variable aleatoria conjunta (X,Y) se define como:

$$E[g(X,Y)] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(x,y)f(x,y) \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y$$

En este caso, $g(X,Y) = XY^2$ y la función de densidad conjunta f(x,y) es 1 para 0 < x < 1 y 0 < y < 1, y 0 en otro caso. Por lo tanto, el valor esperado se convierte en:

$$E[XY^2] = \int_0^1 \int_0^1 xy^2 \, dx \, dy$$

Resolviendo la integral obtenemos:

$$E[XY^2] = \int_0^1 \left[\frac{1}{2} x^2 y^2 \right]_0^1 dy = \int_0^1 \frac{1}{2} y^2 dy = \left[\frac{1}{6} y^3 \right]_0^1 = \frac{1}{6}$$

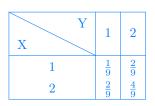
Por lo tanto, el valor esperado de XY^2 es $\frac{1}{6}$.

$$E[XY^2] = E[X] \cdot E[Y^2] = (*) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$$

$$E[X] = \int_0^1 x \, dx = \left[\frac{x^2}{2}\right]_0^1 = \frac{1}{2}$$

$$E[Y^2] = \int_0^1 y^2 \, dy = \left[\frac{y^3}{3}\right]_0^1 = \frac{1}{3}$$

7) (X,Y) vector aleatorio discreto con función masa de probabilidad conjunta:



a) Calcular E[X + Y], E[2X + 3Y].

$$E[X+Y] = E[X] + E[Y] = \frac{5}{3} + \frac{5}{3} = \frac{10}{3}$$

$$E[X] = 1 \cdot P(X=1) + 2 \cdot P(X=2) = 1 \cdot \left(\frac{1}{9} + \frac{2}{9}\right) + 2 \cdot \left(\frac{2}{9} + \frac{4}{9}\right) = \frac{1}{3} + \frac{4}{3} = \frac{5}{3}$$

$$E[Y] = 1 \cdot P(Y=1) + 2 \cdot P(Y=2) = 1 \cdot \left(\frac{1}{9} + \frac{2}{9}\right) + 2 \cdot \left(\frac{2}{9} + \frac{4}{9}\right) = \frac{1}{3} + \frac{4}{3} = \frac{5}{3}$$

$$E[2X + 3Y] = 2E[X] + 3E[Y] = 2 \cdot \frac{5}{3} + 3 \cdot \frac{5}{3} = \frac{25}{3}$$

- b) Obtener el vector de medias, la matriz de covarianzas y la matriz de correlaciones del vector (X,Y).
 - Vector de medias:

$$\mu = \begin{bmatrix} E[X] \\ E[Y] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{3} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix} = \frac{5}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

• Matriz de covarianzas:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \operatorname{Var}(X) & \operatorname{Cov}(X,Y) \\ \operatorname{Cov}(Y,X) & \operatorname{Var}(Y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{9} & 0 \\ 0 & \frac{2}{9} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} &\operatorname{Var}(X) = E[X^2] - (E[X])^2 = 3 - \left(\frac{5}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} \\ &\operatorname{Cov}(X,Y) = E[XY] - E[X]E[Y] = \frac{25}{9} - \frac{5}{3} \cdot \frac{5}{3} = 0 \\ &\operatorname{Var}(Y) = E[Y^2] - (E[Y])^2 = 3 - \left(\frac{5}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} \\ &E[X^2] = 1^2 \cdot P(X = 1) + 2^2 \cdot P(X = 2) = 1^2 \cdot \left(\frac{1}{9} + \frac{2}{9}\right) + 2^2 \cdot \left(\frac{2}{9} + \frac{4}{9}\right) = \frac{1}{3} + \frac{8}{3} = 3 \\ &E[Y^2] = 1^2 \cdot P(Y = 1) + 2^2 \cdot P(Y = 2) = 1^2 \cdot \left(\frac{1}{9} + \frac{2}{9}\right) + 2^2 \cdot \left(\frac{2}{9} + \frac{4}{9}\right) = \frac{1}{3} + \frac{8}{3} = 3 \\ &E[XY] = 1 \cdot 1 \cdot P(X = 1, Y = 1) + 1 \cdot 2 \cdot P(X = 1, Y = 2) + 2 \cdot 1 \cdot P(X = 2, Y = 1) + 2 \cdot 2 \cdot P(X = 2, Y = 2) = \frac{1}{9} + 2 \cdot \frac{2}{9} + 2 \cdot \frac{2}{9} + 4 \cdot \frac{4}{9} = \frac{25}{9} \end{aligned}$$

• Matriz de correlaciones:

$$R = \begin{bmatrix} 1 & \operatorname{Corr}(X, Y) \\ \operatorname{Corr}(Y, X) & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

$$\operatorname{Corr}(X, Y) = \frac{\operatorname{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\operatorname{Var}(X) \cdot \operatorname{Var}(Y)}} = \frac{0}{\sqrt{\frac{2}{9} \cdot \frac{2}{9}}} = 0$$

c) ¿Son independientes? ¿Están incorreladas?

Las variables aleatorias X e Y serán independientes si se cumple la condición: $P(X=x,Y=y)=P(X=x)\cdot P(Y=y) \forall x,y\in\mathbb{N}$

$$P(X=1,Y=1) = P(X=1) \cdot P(Y=1) \longrightarrow \frac{1}{9} = \left(\frac{1}{9} + \frac{2}{9}\right) \cdot \left(\frac{1}{9} + \frac{2}{9}\right) \longrightarrow \frac{1}{9} = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3}$$

Por lo tanto, son independientes.

Las variables aleatorias X e Y están incorreladas si su covarianza vale 0. En este caso sí están incorreladas.

8) Demostrar que el vector de medias muestral es el punto \mathbb{R}^k que minimiza la suma de las distancias al cuadrado (error cuadrático medio, MSE).

Tema 2: Regresión lineal simple y múltiple

• Introducción

Objetivo: predecir una variable numérica a partir de k variables numéricas (variables predictoras) minimizando el error en la predicción.

Para ello necesitamos disponer de una muestra en la que se conozcan dichas variables (aprendizaje supervisado), esta muestra se usará para elegir el mejor modelo y para validar su fiabilidad.

• Planteamiento

Se trata de predecir el valor (numérico) de una variable aleatoria (v.a.) Y a partir de unas variables predictoras X_1, \ldots, X_k .

Para ello usaremos una función predictora lineal

$$h_{\theta}(x_1,\ldots,x_k) := \theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_k x_k$$

donde $\theta = (\theta_0, \dots, \theta_k)' \in \mathbb{R}^{k+1}$ serán los parámetros del modelo que se deben elegir de forma que la estimación de Y sea óptima (el error sea mínimo).

- \rightarrow Una sola variable predictora \longrightarrow Regresión lineal simple.
- ightarrow Más de una variable predictora ightarrow Regresión lineal múltiple.

2.1) Estimación de los parámetros

2.1.1) Muestra

Para ello necesitamos disponer de una muestra (training sample) de esas k+1 variables sobre n individuos.

Una realización de la muestra se denotará como

$$(x_1^{(i)}, \dots, x_k^{(i)}, y^{(i)}), \quad i = 1, \dots, n,$$

que equivale a la notación introducida en el tema anterior

$$(x_{i,1},\ldots,x_{i,k},y_i), i=1,\ldots,n.$$

Los datos se representan en forma de tabla:

2.2) Conjunto de datos USArrests

Cargamos los datos

Podemos visualizar los datos con view(d) y las primeras filas con head(d).

```
d <- USArrests
head(d, n = 6)
```

#	#	Murder	Assault	${\tt UrbanPop}$	Rape
#	# Alabama	13.2	236	58	21.2
#	# Alaska	10.0	263	48	44.5
#	# Arizona	8.1	294	80	31.0
#	# Arkansas	8.8	190	50	19.5
#	# California	9.0	276	91	40.6
#	# Colorado	7.9	204	78	38.7

¿Qué información está recogida en el conjunto de datos?

Con la instrucción help(USArrests) conocemos qué información está contenida en el conjunto:

- Murder: Ratios de arrestos por asesinatos por cada 100 000 residentes en cada uno de los 50 estados de la unión.
- Assault: Ratios de arrestos por agresión por cada 100 000 residentes en cada uno de los 50 estados de la unión.
- UrbanPop: Porcentaje de población que vive en áreas urbanas.
- Rape: Ratios de arrestos por violación por cada 100 000 residentes en cada uno de los 50 estados de la unión.

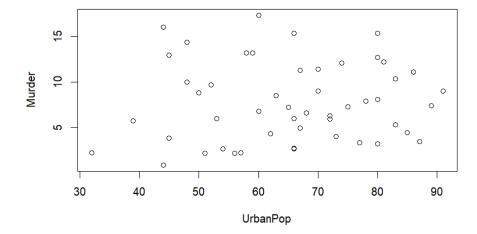
2.2.1) Objetivo

Predecir el ratio de arrestos por asesinatos (Y = Murder) en función de la variable X = UrbanPop.

Para visualizar la relación entre estas variables podemos representarlas situando X en el eje horizontal e Y en el vertical.

```
x <- d$UrbanPop #Elegimos x
y <- d$Murder #Elegimos y
plot(x, y, xlab = 'UrbanPop', ylab = 'Murder')</pre>
```

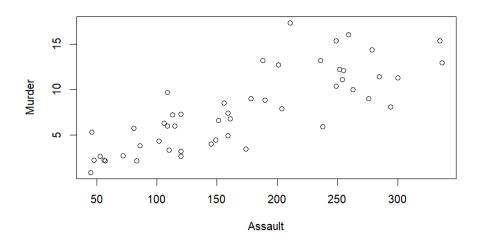
Podemos observar que no parece existir ninguna relación entre las variables Murder y UrbanPop por lo que la predicción no será muy buena.



Si usamos como predictor la variable ${\tt Assault}$ y representamos gráficamente:

Ahora sí se aprecia una relación lineal (creciente entre ambas variables.)

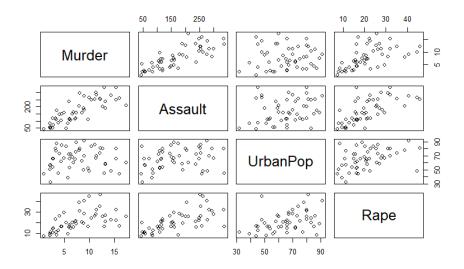
```
x <- d$Assault #Elegimos x
y <- d$Murder #Elegimos y
plot(x, y, xlab = 'Assault', ylab = 'Murder')</pre>
```



2.2.2) Matriz de gráficos

Podemos representar conjuntamente todas las variables con gráficos bidimensionales para cada pareja de variables.

```
plot(d)
```



2.2.3) Resumen numérico de las variables

Podemos obtener los estadísticos descriptivos de estas variables con summary(d) que incluyen los extremos (mínimo y máximo), los cuartiles, la mediana y la media.

```
summary(d)
```

```
##
        Murder
                         Assault
                                           UrbanPop
                                                              Rape
##
           : 0.800
                              : 45.0
                                               :32.00
                                                                 : 7.30
    Min.
                      Min.
                                       Min.
                                                         Min.
    1st Qu.: 4.075
                      1st Qu.:109.0
                                        1st Qu.:54.50
                                                         1st Qu.:15.07
##
    Median: 7.250
                      Median :159.0
                                       Median :66.00
                                                         Median :20.10
##
##
    Mean
           : 7.788
                      Mean
                              :170.8
                                       Mean
                                               :65.54
                                                         Mean
                                                                 :21.23
##
    3rd Qu.:11.250
                      3rd Qu.:249.0
                                        3rd Qu.:77.75
                                                         3rd Qu.:26.18
           :17.400
                              :337.0
                                               :91.00
                                                                 :46.00
##
    Max.
                      Max.
                                       Max.
                                                         Max.
```

Siempre es buena idea usar medidas descriptivas y gráficas para analizar los datos antes de aplicar un procedimiento estadístico multivariante.

2.2.4) Estimación de las varianzas y covarianzas

Para calcular una estimación de las varianzas y covarianzas utilizaremos la función var (R obtiene las cuasivarianzas).

```
#calculo directo de la varianza y cuasivarianza para Murder
mu <- mean(d$Murder)
n <- length(d)
hat_sigma = sum((d$Murder-mu)^ 2)/n #varianza muestral
S = sum((d$Murder-mu)^ 2)/(n-1) #cuasivarianza muestral
#calculo de la matriz de covarianzas
var(d)</pre>
```

```
##
                Murder
                         Assault
                                   UrbanPop
                                                  Rape
## Murder
             18.970465
                        291.0624
                                   4.386204
                                             22.99141
            291.062367 6945.1657 312.275102 519.26906
## Assault
## UrbanPop
                        312.2751 209.518776
              4.386204
## Rape
             22.991412 519.2691 55.768082 87.72916
```

2.2.5) Modelo completo

Podemos incluir todas las variables en el modelo considerado

$$h_{\theta} = \theta_0 + \theta_1 \text{Assault} + \theta_2 \text{UrbanPop} + \theta_3 \text{Rape}$$

donde $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2, \theta_3)' \in \mathbb{R}^4$ son los parámetros del modelo que debemos ajustar para obtener las mejores aproximaciones posibles.

Los casos en los que solo usamos una variable están incluidos en este modelo haciendo que los parámetros de las otras variables sean cero.

También podemos intentar mejorar estas aproximaciones considerando otras funciones h (no lineales).

2.3) Regresión lineal simple

2.3.1) Modelo teórico

Partiremos de un vector aleatorio (X, Y).

Objetivo: Construir una nueva variable h(X) que se parezca (aproxime) a Y.

Los errores (residuos) serán otra variable aleatoria

$$R = Y - h(X)$$

(notemos que pueden ser positivos o negativos).

Existen diversas reglas para determinar una función objetivo que mida cómo son esos errores y trate de minimizarlos.

La más usada es el denominado error cuadrático medio (EMC) definido como:

$$EMC = E\left[(h(X) - Y)^2 \right]$$

(MSE, Mean Square Error)

2.3.2) Función óptima

Supongamos que (X, Y) tiene una distribución absolutamente continua con función de densidad conjunta f y marginales f_X y f_Y .

Entonces se puede demostrar que la función h que minimiza el EMC es

$$h_{\text{opt}}(x) = E(Y|X=x) = \int_{-\infty}^{+\infty} y f_{Y|X}(y|x) \, \mathrm{d}y,$$

donde

$$f_{Y|X}(y|x) = f(x,y)|f_X(x),$$

para tales $f_X(x) > 0$, es la función de densidad condicionada de (Y|X=x).

Esta función se denomina curva de regresión y es el mejor predictor de Y dado X según el ECM.

2.4) Caso de normalidad

El vector (X,Y) tiene una distribución normal $\mathcal{N}_2(\mu,V)$:

 $\mu = (\mu_1, \mu_2)'$ es el vector de medias (A' representa la traspuesta de la matriz A), donde

$$\mu_1 = \mu_X = E[X]$$

$$\mu_2 = \mu_Y = [Y]$$

$$V = \begin{pmatrix} \sigma_{1,1} & \sigma_{1,2} \\ \sigma_{2,1} & \sigma_{2,2} \end{pmatrix}$$
 es la matriz de varianzas-covarianzas, donde

$$\begin{split} &\sigma_{1,1} = \sigma_X^2 = \text{Var}(X) = E[(X - \mu_X)^2], \\ &\sigma_{2,2} = \sigma_Y^2 = \text{Var}(Y) = E[(Y - \mu_Y)^2], \\ &\sigma_{1,2} = \sigma_{2,1} = \sigma_{X,Y} = \text{Cov}(X,Y) = E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]. \end{split}$$

Entonces la distribución condicionada (Y|X=x) se comporta también como una distribución normal,

$$(Y|X=x) \longrightarrow \mathcal{N}_1(\overline{\mu}, \overline{\sigma}^2),$$

con

$$h_{\text{opt}}(x) = \overline{\mu} = E(Y|X = x) = \mu_2 + \frac{\sigma_{1,2}}{\sigma_{1,1}}(x - \mu_1)$$
$$= \mu_Y + \frac{\text{Cov}(X,Y)}{\sigma_X^2}(x - \mu_X)$$
$$\overline{\sigma}^2 = \text{Var}(Y|X = x) = \sigma_{2,2} - \frac{\sigma_{1,2}^2}{\sigma_{1,1}} = \sigma_Y^2 - \frac{\text{Cov}(X,Y)^2}{\sigma_X^2}.$$

Observaciones

Bajo la hipótesis de normalidad, la curva de regresión $h_{\rm opt}$ es siempre una recta y la varianza $\overline{\sigma}^2$ no depende de x.

Los residuos condicionados $R_x = R|X = x$ también serán normales $R_x \longrightarrow \mathcal{N}(0, \overline{\sigma}^2)$ e idénticamente distribuidos.

La curva (recta) de regresión para predecir Y en función de X se puede escribir como

$$\frac{y - \mu_Y}{\sigma_Y} = \rho_{X,Y} \frac{x - \mu_X}{\sigma_X},$$

donde $\rho_{X,Y} = \frac{\mathrm{Cov}(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y}$ es el coeficiente de correlación lineal de Pearson.

La recta siempre pasa por el punto (μ_X, μ_Y) .

2.4.1) Coeficiente de correlación de Pearson

• Propiedades

El signo de la pendiente de la recta de regresión siempre coincide con el signo de $\rho_{X,Y}$.

Se verifica que:

$$\overline{\sigma}^2 = \sigma_Y^2 - \frac{\text{Cov}(X, Y)^2}{\sigma_X^2 \sigma_Y^2} \sigma_Y^2 = (1 - \rho_{X, Y}^2) \sigma_Y^2 \ge 0,$$

por lo que $-1 \le \rho_{X,Y} \le 1$.

Cuando $\rho_{X,Y} = \pm 1$ tendremos ajustes perfectos con residuos nulos.

La recta (curva) para predecir X a partir de Y se calcula de forma similar y no coincide con la curva para predecir Y a partir de X que acabamos de calcular salvo cuando $\rho_{X,Y} = \pm 1$.

2.5) Caso de no normalidad

Observaciones

Para otras distribuciones bivariantes la curva de regresión no tiene por qué ser una recta.

Cuando X e Y sean independientes, Y e (Y|X=x) tienen la misma distribución y la curva óptima

$$h_{\text{opt}}(x) = E(Y|X=x) = E(Y)$$

es constante (por lo que también es una recta).

- \rightarrow En este caso el valor de X no influye en la predicción sobre Y.
- $\rightarrow \rho_{X,Y} = 0$ (recta horizontal).

2.6) Restricción sobre la función h

En Regresión Lineal Simple supondremos que la función h es una recta

• Limitamos nuestra función h a una recta, es decir,

$$h_{\theta}(x) \coloneqq \theta_0 + \theta_1 x$$

- Usamos como criterio minimizar el ECM.
- El objetivo será

$$\min_{\theta_0,\theta_1} J(\theta_0,\theta_1),$$

donde

$$J(\theta_0, \theta_1) := E[(h_{\theta}(X) - Y)^2] = E[(\theta_0 + \theta_1 X + Y)^2]$$

se conoce como función costo y $J(\theta_0, \theta_1) \ge 0$.

→ Por lo tanto, se trata de minimizar una función costo

2.7) Minimizar la función costo

2.7.1) Ecuaciones normales de la recta

La función $J(\theta)$ es convexa por lo que tendrá un único mínimo que se puede obtener resolviendo el sistema

$$\begin{split} \frac{\partial J(\theta_0,\theta_1)}{\partial \theta_0} &= 2E[\theta_0 + \theta_1 X - Y] = 0 \\ \frac{\partial J(\theta_0,\theta_1)}{\partial \theta_1} &= 2E[(\theta_0 + \theta_1 X - Y)X] = 0 \end{split}$$

Estas ecuaciones se conocen como ecuaciones normales.

De la primera ecuación obtenemos

$$\theta_0 = E(Y) - \theta_1 E(X)$$

(con lo que la recta pasará por el punto formado con las medias).

De la segunda

$$\theta_0 E(X) + \theta_1 E(X^2) = E(XY)$$

Y sustituyendo la primera en la segunda, se obtiene

$$E(X)E(Y) - \theta_1 E^2(X) + \theta_1 E(X^2) = E(XY),$$

es decir,

$$\theta_1 \operatorname{Var}(X) = \operatorname{Cov}(X, Y),$$

puesto que $Var(X) = E(X^2) - E^2(X)$ y Cov(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y).

Con lo cual,

$$\rightarrow \hat{\theta}_1 = \frac{\operatorname{Cov}(X,Y)}{\operatorname{Var}(X)} = \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_X^2}$$

$$\rightarrow \hat{\theta}_0 = E(Y) - \hat{\theta}_1 E(X) = E(Y) - E(X) \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\text{Var}(X)} = \mu_Y - \mu_X \frac{\sigma_{X, Y}}{\sigma_Y^2}$$

2.8) Expresión de la recta

2.8.1) Recta de regresión para predecir Y en función de X

En el punto $(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1)$ se alcanza el mínimo de la función J,

$$\min_{\theta_0,\theta_1} J(\theta_0,\theta_1) = J(\hat{\theta}_0,\hat{\theta}_1)$$

Expresión de la recta:

$$h_{\hat{\theta}}(x) = \mu_Y - \mu_X \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_Y^2} + \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_Y^2} x = \mu_Y + \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_Y^2} (x - \mu_X).$$

(Note que la fórmula es la misma que la de la curva de regresión de la normal).

Otra expresión:

$$\frac{y - \mu_Y}{\sigma_Y} = \rho_{X,Y} \frac{x - \mu_X}{\sigma_X}$$

donde $\rho_{X,Y} = \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_X \sigma_Y}$ es el coeficiente de correlación lineal de Pearson.

La variable aleatoria

$$\hat{Y} = h_{\hat{\theta}}(X) = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 X$$

se usará para estimar Y.

Los residuos se definen como $R = Y - \hat{Y}$.

Se verifica:

$$\rightarrow E(\hat{Y}) = E(Y)$$

$$\rightarrow E(R) = 0$$

2.9) Descomposición de la varianza

2.9.1) Relaciones entre las varianzas

Expresando $Y = \hat{Y} + R$, se tiene que:

$$\sigma_u = \operatorname{Var}(Y) = \operatorname{Var}(\hat{Y}) + \operatorname{Var}(R)$$

Puesto que

$$\operatorname{Var}(\hat{Y}) = \hat{\theta}_1^2 \sigma_X^2 = \frac{\sigma_{X,Y} P2}{\sigma_X^2} = \rho_{X,Y}^2 \sigma_Y^2$$
$$\operatorname{Var}(R) = \operatorname{Var}(Y - \hat{\theta}_1 X) = (1 - \rho_{X,Y}^2) \sigma_Y^2.$$

Es decir, la información (varianza) contenida en Y se descompone como

$$\sigma_V^2 = \rho_{X|V}^2 \sigma_V^2 + (1 - \rho_{X|V}^2) \sigma_V^2.$$

2.10) Coeficiente de determinación

• Definición

El coeficiente de determinación $d_{X,Y} = \rho_{X,Y}^2$ es el porcentaje (en tanto por 1) de la información de Y explicada por la recta de regresión (por relaciones lineales de X). Denotado habitualmente en los paquetes estadísticos por R^2 .

Análogamente, $1-d_{X,Y}=1-\rho_{X,Y}^2$ indicaría la parte de Y no explicada por esa recta y que se queda en el residuo.

Además, se tiene que

$$E(\hat{Y}R) = 0,$$

es decir, la variable que se obtiene con la recta de regresión y los residuos son incorrelados.

Bajo normalidad, ambas variables serán normales (por ser combinaciones lineales de X e Y) y, por lo tanto, serán independientes.

2.11) Inferencia y predicción

• Una muestra

En la práctica tanto la distribución conjunta (densidad) de (X,Y) como todas esas medidas serán desconocidas por lo que tendrán que ser estimadas a partir de una muestra de esas variables (training sample).

Si la muestra es grande, podemos extraer algunos datos (no usados en el cálculo de la recta) para comprobar cómo de fiables serán nuestras estimaciones.

La muestra se denotará como

$$(x^{(i)}, y^{(i)}), \quad i = 1, \dots, n,$$

donde n será el tamaño muestral.

Los datos de cada variable se representarán como columnas y todos lo datos como una matriz D.

2.12) Función costo empírica

2.12.1) Objetivo

Queremos aproximar los valores de Y mediante una recta (función lineal) de X, es decir,

$$h_{\theta} \coloneqq \theta_0 + \theta_1 x,$$

donde $\theta = (\theta_0, \theta_1)$ son parámetros desconocidos.

Para calcular estos parámetros minimizaremos una función coste empírica J que nos mida el error cometido.

La más utilizada es el error cuadrático medio (o una función proporcional a él), por ejemplo podemos considerar

$$J(\theta_0, \theta_1) := \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \left(h_\theta \left(x^{(i)} \right) - y^{(i)} \right)^2 = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \left(\theta_0 + \theta_1 x^{(i)} - y^{(i)} \right)^2$$

El objetivo es minimizar esta función en \mathbb{R}^2 .

2.12.2) Differenciar J

Para obtener la solución exacta debemos diferencias J con respecto a los parámetros obteniendo

$$\frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(h\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)} \right)$$
$$\frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) x^{(i)}$$

Igualando a cero obtenemos las ecuaciones normales empíricas:

$$\frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(h\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\theta_0 + \theta x^{(i)} - y^{(i)} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(h\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) x^{(i)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\theta_0 + \theta_1 x^{(i)} - y^{(i)} \right) x^{(i)} = 0$$

2.12.3) Solución exacta

De la primera ecuación,

$$\theta_0 + \theta_1 \overline{x} - \overline{y} = 0$$

donde $\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x^{(i)}$ e $\overline{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y^{(i)}$ son las medias muestrales de x e y, respectivamente.

La solución óptima pasa por el punto medio $(\overline{x}, \overline{y})$ (individuo promedio).

De la segunda,

$$\theta_0 \overline{x} + \theta_1 a(x, x) - a(x, y) = 0,$$

donde
$$a(x,x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x^{(i)} \right)^2$$
 y $a(x,y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x^{(i)} y^{(i)}$.

Resolviendo este sistema de ecuaciones obtenemos

$$\theta_1 \left(a(x,x) - (\overline{x})^2 \right) = a(x,y) - \overline{xy}$$

Obtenemos:

$$\hat{\theta}_1 = \frac{s_{x,y}}{s_x^2}, \quad \hat{\theta}_0 = \overline{y} - \hat{\theta}_1 \overline{x},$$

donde $s_{x,y} = a(x,y) - \overline{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x^{(i)} y^{(i)} - \overline{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x^{(i)} - \overline{x} \right) \left(y^{(i)} \cdot \overline{y} \right)$ es la covarianza muestral y $s_x^2 = a(x,x) - (\overline{x})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x^{(i)} \right)^2 - (\overline{x})^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(x^{(i)} - \overline{x} \right)^2$ es la varianza muestral de x.

Supondremos que s_x^2 no es cero, es decir, que x presenta más de un valor. Si no, el sistema tendría infinitas soluciones.

Puede comprobarse que J es convexa y por lo tanto la solución que hemos obtenido de las ecuaciones normales empíricas es un mínimo local.

 \rightarrow Además, como es único y J es continua, se trata del único mínimo global.

¿Es un mínimo local?

Las segundas derivadas parciales son

$$D_{1,1} = \frac{\partial^2}{\partial \theta_0^2} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1 = 1$$

$$D_{1,2} = \frac{\partial^2}{\partial \theta_0 \theta_1} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)} = \overline{x}$$

$$D_{2,2} = \frac{\partial}{\partial \theta_1^2} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(x^{(i)} \right)^2 = a(x, x)$$

Se verifica que $D_{1,1}=1>0$ y si $D=(D_{i,j})$ es la matriz con esas derivadas, tenemos

$$|D| = \begin{vmatrix} 1 & \overline{x} \\ \overline{x} & a(x,x) \end{vmatrix} = a(x,x) - (\overline{x})^2 = s_x^2 > 0$$

por lo que el punto sería un mínimo local de J.

Como es el único mínimo local en \mathbb{R} y J es continua, será el único mínimo global.

La solución óptima empírica coincide con la que obtendríamos sustituyendo en la solución teórica las medias, varianzas y covarianzas por sus estimaciones.

2.13) Regresión lineal múltiple

2.13.1) Modelo teórico

En el caso general queremos predecir Y (o X_{k+1}) a partir de k variables X_1, \ldots, X_k (sobre el mismo espacio de probabilidad).

En el modelo lineal queremos construir una función

$$h_{\theta}(x_1,\ldots,x_k) \coloneqq \theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_k x_K,$$

de forma que $h_{\theta}(X_1, \dots, X_k)$ esté lo más cerca posible de Y.

Para medir el error usaremos de nuevo el error cuadrático medio

$$EMC(\theta) = E \left[(h_{\theta}(X_1, \dots, X_k) - Y)^2 \right].$$

Si consideramos una nueva variable constante (degenerada) $X_0=1$, podemos escribir ese error como

$$ECM(\theta) = E[(\theta'\mathbf{X} - Y)^2],$$

donde
$$\mathbf{X} = (X_0, X_1, \dots, X_k)'$$
 y $\theta' = (\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_k) \in \mathbb{R}^{k+1}$.

2.13.2) Obtención del mínimo







RELACIÓN DE PROBLEMAS: REGRESIÓN LINEAL SIMPLE Y MÚLTIIPLE

ANÁLISIS ESTADÍSTICO MULTIVARIANTE GRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE DATOS

1. Dado el vector aleatorio (X,Y) con función de densidad

$$f(x,y) = \left\{ \begin{array}{ll} 2 & \text{si } 0 < x < 1, 0 < y < x \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right.$$

- a) Obtener la curva de regresión para predecir Y en función de valores de la variable X.
- b) ¿Coincide con la recta de regresión?
- 2. Sea (X,Y) un vector aleatorio con función de densidad

$$f(x,y) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{3}{4} \left[xy + \frac{x^2}{2} \right] & \text{si } 0 < x < 1, 0 < y < 2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{array} \right.$$

A partir de la distribución de Y condicionada a X=x, obtener la curva de regresión para predecir Y a partir de valores de X y proporcionar una predicción para X=2/3.

- 3. Sabiendo que el vector (X,Y) tiene una distribución normal con medias 1 y 2, varianzas 2 y correlación -1/2, calcular la curva de regresión para predecir Y a partir de valores de X y obtener una predicción para X=1.5.
- 4. Encontrar la recta de regresión para el conjunto de datos:

$$\{(x_i, y_i)\} = \{(1, 4), (2, 2), (1, 5), (5, 3), (6, 2)\}\$$

Estimar y para x=3. ¿Será fiable esa aproximación?

5. El rendimiento de una reacción química depende de la concentración del reactivo y de la temperatura de la operación.

Concentración	Temperatura	
1.00	150	
1.00	180	
2.00	150	
2.00	180	
1.00	150	
1.00	180	
2.00	150	
2.00	180	
	1.00 1.00 2.00 2.00 1.00 1.00 2.00	

En el modelo de regresión del rendimiento sobre la temperatura y la concentración, los valores ajustados son

$$\hat{\mathbf{y}} = (80.25, 87.75, 83.25, 90.75, 80.25, 87.75, 83.25, 90.75)'$$

Calcular el error cuadrático medio y el coeficiente de determinación e interpretar su valor.

6. Un modelo ajustado para predecir la extracción de manganeso en % (y) a partir del tamaño de partícula en mm (x_1) , la cantidad de dióxido de azufre en múltiplos de la cantidad estequiométrica necesaria para la disolución de manganeso (x_2) y la duración de la filtración en minutos (x_3) están dadas como

$$y = 56.145 - 9.0469x_1 - 33.421x_2 + 0.243x_3 - 0.5963x_1x_2$$
$$-0.0394x_1x_3 + 0.60022x_2x_3 + 0.6901x_1^2 + 11.7244x_2^2 - 0.0097x_3^2$$

Se consideraron 27 observaciones, con
$$\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2=209.55$$
, $\sum_{i=1}^{n}(y_i-\overline{y})^2=6777.5$.

Se pide:

- a) Obtener una predicción para el porcentaje de extracción cuando el tamaño de partícula es 3 mm, la cantidad de dióxido de azufre 1.5 y la duración de la filtración es de 20 minutos.
- b) ¿Es posible predecir el cambio en el porcentaje de extracción cuando la duración de la filtración aumenta en un minuto? Si la respuesta es afirmativa, encontrar el cambio pronosticado. Si la respuesta es negativa, ¿qué otra información se necesitaría para determinarlo?
- c) Calcular el coeficiente de determinación \mathbb{R}^2 . Interpretar su valor.
- 7. Se efectúa un estudio sobre el desgaste de un cojinete (y) y su relación con la viscosidad del aceite (x_1) y carga (x_2) . Se obtienen los datos siguientes:

\overline{y}	x_1	x_2
193	1.6	851
230	15.5	816
172	22.0	1058
91	43.0	1201
113	33.0	1357
125	40.0	1115

a) El análisis de regresión lineal múltiple con los datos de la tabla anterior proporciona $\hat{\theta}$ =(350.994, -1.27999,-0.15390)' y los valores ajustados son

$$\hat{\mathbf{y}} = (217.99, 205.69, 160.18, 111.46, 100.17, 128.51)'$$

Calcular una estimación de la varianza residual y el coeficiente de determinación \mathbb{R}^2 .

- b) Utilizar el modelo para predecir el desgaste cuando $x_1 = 25$ y $x_2 = 1000$.
- 8. En un proceso industrial se sospecha que la dureza de las láminas de acero reducido en frío depende del contenido en cobre (x_1) y de la temperatura de recocido (x_2) . Para comprobar esta suposición se mide en doce especímenes de láminas de acero la dureza para varios valores del contenido de cobre y de la temperatura, obteniéndose los siguientes resultados:

Dureza	Contenido de cobre (%)	Temperatura de recocido (? F)
(Rockwell 30-T)	(x_1)	(x_2)
79.1	0.025	1000
65.3	0.025	1100
55.5	0.025	1200
56.6	0.025	1300
81.1	0.15	1000
69.9	0.15	1100
57.6	0.15	1200
55.6	0.15	1300
85.5	0.2	1000
72.0	0.2	1100
60.9	0.2	1200
59.1	0.2	1300

- a) Plantear el modelo de regresión lineal múltiple para explicar la dureza de la lámina en función del contenido de cobre y de la temperatura.
- b) Sabiendo que $\hat{\theta}=(161.404,27.1923,-0.08547)'$, obtener una estimación para la varianza del error y el valor de R^2 . Comentar la bondad del ajuste.
- c) Se decide eliminar la variable x_1 del modelo y ajustar un modelo de regresión lineal simple para predecir la dureza en función de x_2 .
 - 1) ¿Qué modelo se obtendría?
 - 2) ¿Qué cambio se espera en la dureza promedio si la temperatura se incrementa en 100 grados Farenheith?

1) Dado el vector aleatorio (X, Y) con función de densidad

$$f(x,y) = \begin{cases} 2 & \text{si } 0 < x < 1, \ 0 < y < x \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

a) Obtener la curva de regresión para predecir Y en función de valores de la variable X.

Primero saco las distribución marginal f_X :

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \, \mathrm{d}y = \int_0^1 2 \, \mathrm{d}y = [2y]_0^1 = 2 \longrightarrow \begin{cases} 2 & \text{si } 0 < y < 1 \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

$$f_{\substack{Y \mid X \\ 0 < x < 1}}(y \mid x) = \frac{f(x,y)}{f(x)} = \begin{cases} \frac{1}{x} & \text{si } 0 < y < x \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

$$\text{Curva de regresión: } h_{\text{opt}}(X) = E[Y|X=x] = \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot f_{Y|X}(y|x) \, \mathrm{d}y = \int_{0}^{x} y \cdot \frac{1}{x} \, \mathrm{d}y = \frac{1}{x} \left[\frac{y^2}{2}\right]_{y=0}^{y=x} = \frac{1}{x} \cdot \frac{x^2}{2} = \frac{x}{2}$$

b) ¿Coincide con la recta de regresión?

Recta de regresión de
$$Y|X=x$$
: $Y-\mu_Y=\frac{\cos(X,Y)}{\sigma_X^2}(x-\mu_X)\longrightarrow y-\frac{1}{3}-\frac{\frac{1}{36}}{\frac{1}{18}}\left(x-\frac{2}{3}\right)\longrightarrow y=\frac{x}{2}$

$$\begin{split} E[X] &= \int_0^1 2x \, \mathrm{d}x = \left[2 \cdot \frac{x^3}{3}\right]_{x=0}^{x=1} = \frac{2}{3} \\ E[Y] &= \int_0^1 y \cdot 2(1-y) \, \mathrm{d}y = 2 \int_0^1 (y-y^2) \, \mathrm{d}y = 2 \left[\frac{y^2}{2} - \frac{y^3}{3}\right]_{y=0}^{y=1} = 2 \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{3} \\ \sigma_X^2 &= E[X^2] - (E[X])^2 = \frac{1}{2} - \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{1}{2} - \frac{4}{9} = \frac{1}{18} \\ E[X^2] &= \int_0^1 x^2 \cdot 2x \, \mathrm{d}x = 2 \int_0^1 x^3 \, \mathrm{d}x = 2 \left[\frac{x^4}{4}\right]_{x=0}^{x=1} = \frac{1}{2} \\ \operatorname{Cov}(X,Y) &= E[X \cdot Y] - E[X] \cdot E[Y] = \frac{1}{4} - \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{36} \\ E[X \cdot Y] &= \int_0^1 \int_0^x 2xy \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}x = 2 \int_0^1 x \left[\frac{y^2}{2}\right]_{y=0}^{y=x} \, \mathrm{d}x = 2 \int_0^1 x \cdot \frac{x^2}{2} \, \mathrm{d}x = 2 \cdot \left[\frac{x^4}{4}\right]_{x=0}^{x=1} = \frac{1}{4} \end{split}$$

- c) $\rho_{X,Y}^2$, Var(R), ECM
- 2) Sea (X, Y) un vector aleatorio con función de densidad

$$f(x,y) = \begin{cases} \frac{3}{4} \left[xy + \frac{x^2}{2} \right] & \text{si } 0 < x < 1, \ 0 < y < 2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

A partir de la distribución de Y condicionada a X=x, obtener la curva de regresión para predecir Y a partir de los valores de X y proporcionar una predicción para $X=\frac{2}{3}$

$$h_{\text{opt}}(x) = E[Y|X = x] = \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot f_{Y|X}(y|x) \, dy = \int_{0}^{2} y \cdot \frac{y + \frac{x}{2}}{x + 2} \, dy = \frac{1}{x + 2} \int_{0}^{2} y \cdot (y + \frac{x}{2}) \, dy = \frac{1}{x + 2} \cdot \left[\frac{y^{3}}{3} - \frac{y^{2}x}{4} \right]_{0}^{2} = \frac{1}{x + 2} \left(\frac{8}{3} - x \right)$$

$$f_X(x) = \begin{cases} \frac{3}{4}(x^2 + 2x) & \text{si } 0 < x < 1\\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$f_{Y|X}(y|x) = \begin{cases} \frac{y + \frac{x}{2}}{x + 2} & \text{si } 0 < y < 2\\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Para
$$x = \frac{2}{3}$$
, $h_{\text{opt}}\left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1}{\frac{2}{3} + 2} \cdot \left(\frac{8}{3} + \frac{2}{3}\right) = \boxed{1.25}$

3) Sabiendo que el vector (X, Y) tiene una distribución normal con medias 1 y 2, varianzas 2 y correlación $-\frac{1}{2}$, calcular la curva de regresión para predecir Y a partir de valores de X y obtener una predicción para X = 1.5

$$(X,Y) \rightsquigarrow \mathcal{N}_2(\mu,V)$$

$$\mu = (1, 2)$$

$$V = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \qquad f_{X,Y} = -\frac{1}{2} = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\sigma_X^2 \cdot \sigma_Y^2}} \longrightarrow \text{Cov}(X, Y) = -\frac{1}{2} \cdot \sqrt{2 \cdot 2} = -1$$

$$h_{\text{top}} = \mu_Y + \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sigma_X^2}(x - \mu_X) = 2 + \frac{-1}{2}(x - 1) = -\frac{x}{2} + \frac{5}{2} \longrightarrow h_{\text{opt}}(1.5) = 2 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \boxed{\frac{7}{4}}$$