

#### SME0822 Análise Multivariada e Aprendizado Não-Supervisionado

#### Aula 4c: Inferência sobre a média

Prof. Cibele Russo

cibele@icmc.usp.br

http://www.icmc.usp.br/~cibele

Baseado em Johnson, R. A., & Wichern, D. W. (2007). Applied Multivariate Statistical Analysis. Prentice Hall.



Sejam  $X_1,\ldots,X_n$  vetores que representam uma amostra aleatória de uma distribuição  $N_p(\underline{\mu},\Sigma)$ . A função densidade de probabilidade conjunta de  $X_1,\ldots,X_n$  é dada por

$$f(x_1, \dots, x_n) = \prod_{j=1}^n \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{(x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu})}{2}\right\}$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^{np/2} |\Sigma|^{n/2}} \exp\sum_{j=1}^n \left\{-\frac{(x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu})}{2}\right\}.$$

#### Resultado

Seja  $A_{k imes k}$  uma matriz simétrica e  $\underline{x}_{k imes 1}$  um vetor

$$\bullet \ \underline{\boldsymbol{x}}^{\top} A \underline{\boldsymbol{x}} = tr(\underline{\boldsymbol{x}}^{\top} A \underline{\boldsymbol{x}}) = tr(A \underline{\boldsymbol{x}} \underline{\boldsymbol{x}}^{\top})$$

•  $tr(A) = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i$ , com  $\lambda_i$  autovalores de A para  $i = 1, \dots, k$ .

$$\begin{split} &\sum_{j=1}^n \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \\ \operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \end{split}$$

$$\begin{split} &\sum_{j=1}^n \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \\ &\operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \end{split}$$

$$\begin{split} &\sum_{j=1}^n \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \\ &\operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \end{split}$$

$$\begin{split} &\sum_{j=1}^n \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ (x_j - \underline{\mu})^\top \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) \right\} = \\ &\sum_{j=1}^n \operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \\ &\operatorname{tr} \left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \end{split}$$

$$\operatorname{tr}\left\{\Sigma^{-1}\sum_{j=1}^{n}(x_{j}-\underline{\mu})(x_{j}-\underline{\mu})^{\top}\right\} = \\ \operatorname{tr}\left\{\Sigma^{-1}\sum_{j=1}^{n}(x_{j}-\overline{x}+\overline{x}-\underline{\mu})(x_{j}-\overline{x}+\overline{x}-\underline{\mu})^{\top}\right\} = \\$$

(após alguns cálculos - exercício)

$$\operatorname{tr}\left\{\Sigma^{-1}\left[\sum_{j=1}^n(x_j-\overline{x})(x_j-\overline{x})^\top+n(\overline{x}-\underline{\mu})(\overline{x}-\underline{\mu})^\top\right]\right\}.$$

$$\operatorname{tr}\left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \\ \operatorname{tr}\left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \overline{x} + \overline{x} - \underline{\mu}) (x_j - \overline{x} + \overline{x} - \underline{\mu})^\top \right\} =$$

(após alguns cálculos - exercício)

$$\operatorname{tr}\left\{\Sigma^{-1}\left[\sum_{j=1}^n(x_j-\overline{x})(x_j-\overline{x})^\top+n(\overline{x}-\underline{\mu})(\overline{x}-\underline{\mu})^\top\right]\right\}$$

$$\operatorname{tr}\left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \underline{\mu}) (x_j - \underline{\mu})^\top \right\} = \\ \operatorname{tr}\left\{ \Sigma^{-1} \sum_{j=1}^n (x_j - \overline{x} + \overline{x} - \underline{\mu}) (x_j - \overline{x} + \overline{x} - \underline{\mu})^\top \right\} =$$

(após alguns cálculos - exercício)

$$\operatorname{tr}\left\{\Sigma^{-1}\left[\sum_{j=1}^n(x_j-\overline{x})(x_j-\overline{x})^\top+n(\overline{x}-\underline{\mu})(\overline{x}-\underline{\mu})^\top\right]\right\}.$$

Reescrevemos então a função densidade de probabilidade agora como função de verossimilhança:

$$L(\underline{\mu}, \Sigma | x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{np/2} |\Sigma|^{n/2}} \times \exp \left\{ -\text{tr} \left\{ \sum_{j=1}^n (x_j - \overline{x}) (x_j - \overline{x})^\top + n(\overline{x} - \underline{\mu}) (\overline{x} - \underline{\mu})^\top \right] \right\} / 2 \right\}$$

e então, obtemos o logaritmo da verossimilhança:

$$\begin{split} \log \ L(\underline{\mu}, \Sigma | \underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n) &= -\frac{np}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log |\Sigma| \\ - \mathrm{tr} \left\{ \Sigma^{-1} \left[ \sum_{j=1}^n (\underline{x}_j - \overline{\underline{x}}) (\underline{x}_j - \overline{\underline{x}})^\top + n(\overline{\underline{x}} - \underline{\mu}) (\overline{\underline{x}} - \underline{\mu})^\top \right] \right\} / 2. \end{split}$$

#### Resultado

Os estimadores de máxima verossimilhança de  $\underline{\mu}$  e  $\Sigma$  são dados por

$$\hat{\underline{\mu}} = \overline{X} \quad \mathbf{e} \quad \hat{\Sigma}_{MV} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (\underline{X}_{j} - \overline{\underline{X}}) (\underline{X}_{j} - \overline{\underline{X}})^{\top}.$$

As estimativas de máxima verossimilhança (após observar a amostra) de  $\underline{\mu}$  e  $\Sigma$  são dados por

$$\hat{\mu} = \overline{x} \quad e \quad \hat{\Sigma}_{MV} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} (\underline{x}_{j} - \overline{\underline{x}}) (\underline{x}_{j} - \overline{\underline{x}})^{\top}$$

Prova em Johnson (2007, p. 172).



Note que, como já mostramos,  $\hat{\Sigma}_{\text{MV}}$  é viesado para estimar  $\Sigma$ . Assim, em muitas aplicações consideramos o estimador não viesado para  $\Sigma$ :

$$\hat{\Sigma} = S = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^{n} (X_j - \overline{X}) (X_j - \overline{X})^{\top}$$

# Distribuição amostral de $\overline{\underline{X}}$ e S

Seja  $\underbrace{X}_1,\dots,\underbrace{X}_n$  uma amostra aleatória de uma distribuição  $N_p(\underline{\mu},\Sigma)$  e

$$\hat{\underline{\mu}} = \overline{\underline{X}} \quad \mathbf{e} \quad \hat{\Sigma} = S = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (\underline{X}_j - \overline{\underline{X}}) (\underline{X}_j - \overline{\underline{X}})^\top.$$

Temos o seguinte

#### Resultado

- $\bullet \ \overline{X} \sim N_p\left(\underline{\mu}, \frac{\Sigma}{n}\right).$
- $(n-1)S \sim Wishart(n-1).$
- **3**  $\overline{X}$  e S são independentes.

## Distribuição amostral de $\overline{X}$ e S

Obs: A distribuição Wishart é uma generalização da distribuição Gama, e é definida como a soma de produtos de normais multivariadas independentes de média  $\underline{0}$  e variância  $\Sigma$ : Em outras palavras, seja

$$W = \sum_{j=1}^n \tilde{Z}_j \tilde{Z}_j^\top \text{ com } \tilde{Z}_j \overset{i.i.d}{\sim} N(\underline{0}, \Sigma),$$

Então

$$W \sim Wishart(\Sigma, n)$$
.

# A distribuição assintótica de $\overline{X}$

#### Teorema do Limite Central

Seja  $\underline{\mathfrak{X}}_1,\ldots,\underline{\mathfrak{X}}_n$  uma amostra aleatória de uma distribuição qualquer p-variada com  $\mathsf{E}(\underline{\mathfrak{X}}_i)=\underline{\mu}$  e  $\mathsf{Var}(\underline{\mathfrak{X}}_i)=\Sigma$ , para  $i=1,\ldots,n$  e  $\Sigma$  positiva definida.

Então, para n suficientemente grande e n>>p, temos

$$\sqrt{n}(\overline{X} - \underline{\mu}) \sim N_p(\underline{0}, \Sigma)$$

e ainda

$$n(\overline{X} - \underline{\mu})^{\top} S^{-1}(\overline{X} - \underline{\mu}) \sim \chi_p^2.$$

Seja  $\underline{X}_1,\dots,\underline{X}_n$  uma amostra aleatória de uma distribuição normal p-variada com vetor de médias  $\underline{\mu}$  e matriz de variâncias e covariâncias  $\Sigma$ . Sejam  $\overline{\underline{X}}$  e S o vetor de médias amostrais e a matriz de variâncias e covariâncias amostrais.

Queremos avaliar se

$$H_0: \underline{\mu} = \underline{\mu}_0 \text{ contra}$$
  
 $H_1: \underline{\mu} \neq \underline{\mu}_0,$ 

#### Relembramos o resultado anterior

#### Resultado

- $\bullet \ \overline{X} \sim N_p \left( \underbrace{\mu}_{\sim}, \frac{\Sigma}{n} \right).$
- $(n-1)S \sim Wishart(n-1).$
- **3**  $\overline{X}$  e S são independentes.

Além disso, sob  $H_0$ ,

$$T^2 = \sqrt{n}(\overline{\underline{X}} - \underline{\mu}_0)^\top \left(\frac{(n-1)S}{n-1}^{-1}\right) \sqrt{n}(\overline{\underline{X}} - \underline{\mu}_0) \sim \frac{(n-1)p}{n-p} F_{p,n-p}$$

A quantidade

$$T^{2} = n(\overline{X} - \underline{\mu}_{0})^{\top} S^{-1}(\overline{X} - \underline{\mu}_{0}) \sim \frac{(n-1)p}{n-p} F_{p,n-p}$$

é conhecida como a Estatística  $T^2$  de Hotelling.

Assim, rejeitamos  $H_0$  a um nível de significância lpha se

$$T_{obs}^2 = n(\overline{\underline{X}} - \underline{\mu}_0)^{\top} S^{-1}(\overline{\underline{X}} - \underline{\mu}_0) > \frac{(n-1)p}{n-p} \ q_{F_{p,n-p,\alpha}}$$

em que  $q_{F_{p,n-p,\alpha}}$  é o quantil  $\alpha-$ superior de uma distribuição  $F_{p,n-p}.$ 

### Propriedade de $T^2$

Seja  $\underline{\mathcal{X}}_1,\dots,\underline{\mathcal{X}}_n$  uma amostra aleatória de uma distribuição normal p-variada com vetor de médias  $\underline{\mu}_X$  e matriz de variâncias e covariâncias  $\Sigma_X$ .

Seja  $\underline{Y}_i = C\underline{X}_i + \underline{d}$ , com C uma matriz não singular fixa e  $\underline{d}$  um vetor fixo.

Temos que 
$$\mathsf{E}(\underline{Y}_i) = C\underline{\mu}_X + \underline{d}, \, \mathsf{Var}(\underline{Y}_i) = C\Sigma_X C^\top.$$

Além disso,  $\overline{\underline{Y}} = C\overline{\underline{X}} + \underline{d}$  e  $S_Y = CS_xC^{\top}$  (exercício).

### Propriedade de $T^2$

É possível mostrar que a estatística  $T^2$  para avaliar

$$H_0: \underline{\mu} = \underline{\mu}_0 \text{ contra}$$
  
 $H_1: \underline{\mu} \neq \underline{\mu}_0,$ 

 $\acute{\mathrm{e}}$  equivalente à estatística  $T^2$  para avaliar

$$H_0: C\underline{\mu} + \underline{d} = C\underline{\mu}_0 + \underline{d} \text{ contra}$$
 
$$H_1: C\underline{\mu} + \underline{d} \neq C\underline{\mu}_0 + \underline{d},$$