



---

# Universidad de Valladolid

Facultad de Ciencias

MÁSTER EN MATEMÁTICAS

TRABAJO DE FIN DE MÁSTER:

## ANÁLISIS PROBABILÍSTICO DE UNA MEDIDA DE DIAGONALIDAD PARA MATRICES DE COVARIANZAS

AUTOR:

David Rodríguez Vítores

TUTOR:

Carlos Matrán Bea

Julio 2022

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2. Distancia de Wasserstein</b>	<b>4</b>
2.1. Definición y primeras propiedades . . . . .	5
2.2. Emparejamientos óptimos . . . . .	6
2.3. Cota de Gelbrich . . . . .	21
2.4. Consecuencias de la cota de Gelbrich . . . . .	24
<b>3. Baricentros en espacios de Wasserstein</b>	<b>26</b>
<b>4. Cálculo diferencial con matrices</b>	<b>30</b>
4.1. Cálculo diferencial con matrices simétricas . . . . .	31
4.2. Notación alternativa . . . . .	35
4.3. Cálculo diferencial con funciones espectrales . . . . .	37
<b>5. Medida de diagonalidad</b>	<b>38</b>
5.1. Definición de la medida . . . . .	38
5.2. Diferenciales de la función de diagonalidad . . . . .	43
5.3. Comportamiento asintótico . . . . .	47
5.3.1. Matriz no diagonal . . . . .	49
5.3.2. Matriz diagonal . . . . .	50
5.4. Test de diagonalidad . . . . .	51
<b>6. Medida de esfericidad</b>	<b>55</b>
6.1. Definición de la medida . . . . .	55
6.2. Diferenciales de la función de esfericidad . . . . .	57
6.3. Comportamiento asintótico . . . . .	58
6.3.1. Matriz no esférica . . . . .	58
6.3.2. Matriz esférica . . . . .	59
6.4. Test de esfericidad . . . . .	60
<b>7. Medida de proporcionalidad</b>	<b>62</b>
<b>8. Aplicaciones</b>	<b>63</b>
8.1. Componentes Principales Comunes . . . . .	65
8.1.1. Método de Flury: Máxima verosimilitud . . . . .	65
8.1.2. Método de Krzanowski: Media muestral . . . . .	65
8.1.3. Método alternativo: Baricentro . . . . .	66
8.1.4. Comparación de los distintos métodos . . . . .	67
8.2. Proporcionalidad de las matrices de covarianza . . . . .	77
8.3. Ejemplo con datos reales: Penguin Dataset . . . . .	79
<b>9. Anexo</b>	<b>83</b>

# 1. Introducción

A lo largo de las últimas décadas, el auge del Análisis de Datos o la Ciencia de Datos, como ahora empieza a denominarse, ha provocado la aparición de multitud de técnicas novedosas para dar solución a los problemas que han surgido en este campo, muchas veces relacionados con el tratamiento de grandes volúmenes de datos. También han resurgido otras teorías y métodos clásicos, potenciados por su utilidad para la resolución de este tipo de problemas. En este ámbito, recientemente se ha desarrollado un gran interés por la teoría del **Problema de Transporte Óptimo** y la distancia de Wasserstein, que ha demostrado ser una herramienta de gran utilidad a la hora de resolver muchos problemas del Análisis de Datos. Las propiedades geométricas de la distancia de Wasserstein justifican su conveniencia para encontrar diferentes patrones o comportamientos, “formas”, dentro de un conjunto de datos, permitiéndonos abordar problemas de gran complejidad como el reconocimiento de patrones en imágenes (ver [19]).

Aprovechando estas ideas, en este trabajo proponemos utilizar la teoría del problema de transporte óptimo para estudiar la estructura de un conjunto de datos con información sobre individuos de distintos grupos. Situaciones como esta aparecen campos tan variados como la taxonomía, cuando estudiamos distintas especies, o medicina, cuando tenemos pacientes con distintas variedades de una misma enfermedad.

Para ello, comenzamos introduciendo el **espacio y la distancia de Wasserstein**, y enunciamos sus propiedades más importantes. Las primeras propiedades se presentan de forma sencilla y sin demostraciones, ya que estos conceptos fueron tratados por el alumno en el Trabajo de Fin de Grado: “*Análisis cluster en espacios abstractos*”. El principal esfuerzo realizado en esta sección ha sido el estudio de las propiedades de los emparejamientos óptimos y la cota de Gelbrich siguiendo [7] y [6], que nos servirán como base para la teoría que se desarrolla posteriormente. A continuación, se definen los **baricentros** en el espacio de Wasserstein, y se muestran sus principales propiedades, de nuevo sin entrar en detalle.

Seguidamente, desarrollamos la teoría del **cálculo diferencial con matrices** necesaria para el problema que vamos a tratar. El trabajo realizado consiste en adaptar la teoría del cálculo diferencial con funciones vectoriales al caso en el que trabajamos con funciones definidas sobre el conjunto de matrices simétricas, siguiendo la misma línea de trabajo que se sigue en [15] para trabajar con funciones matriciales generales. Esta sección termina mostrando los dos resultados fundamentales que aparecen en [13] y [14], y que nos permiten estudiar de forma sencilla la diferenciabilidad de un tipo concreto de funciones con las que vamos a trabajar, las funciones espectrales.

A continuación pasamos a mostrar los primeros resultados que hemos obtenido en esta línea. Utilizando la distancia de Wasserstein y las ideas del problema de transporte óptimo, hemos definido diferentes **medidas para estudiar la estructura de una matriz de covarianzas**. La teoría presentada para la diferenciabilidad de funciones espectrales nos permite hallar las diferenciales de las funciones que hemos definido, y a partir de esto logramos obtener resultados para el comportamiento asintótico de cada una de las medidas que hemos definido, en el caso en que los datos provienen de una distribución normal. Esto nos permite realizar contrastes sobre las diferentes hipótesis que estamos estudiando, para los que realizamos una comparación con otros contrastes conocidos en la literatura.

Finalmente, mostramos diferentes modelos para estudiar la estructura de un conjunto de datos con individuos de distintos grupos. Nos vamos a centrar principalmente en el modelo de **Componentes Principales Comunes (CPC)** planteado por B. Flury en [10], aunque también trataremos el modelo de proporcionalidad de las matrices de covarianzas. Además de presentar el modelo de B. Flury para la estimación de las CPC, mostramos también otras soluciones planteadas por otros autores, aportamos otra **nueva alternativa basada en los baricentros**, y estudiamos las diferencias entre unos modelos y otros. Obtenidas las soluciones a partir de los distintos métodos, podemos **valorar la adecuación de los diferentes modelos para cada uno de los grupos a partir de las medidas** que hemos definido, lo que nos nos permite interpretar los resultados y dar diferentes alternativas para tratar situaciones en las que no se verifican los modelos. Además de los ejemplos con simulaciones, finalizamos tratando el problema con un **conjunto de datos reales sobre pingüinos**, en el que intentamos estudiar las relaciones entre las matrices de covarianza cuando agrupamos los individuos por especie y sexo.

Antes de comenzar, quiero mostrar mi agradecimiento al Departamento de Estadística e Investigación Operativa de la Universidad de Valladolid, puesto que la generación del software necesario para los distintos ejemplos no habría sido posible sin los programas que me han facilitado, que han sido desarrollados por los miembros de dicho departamento para trabajos previos.

## 2. Distancia de Wasserstein

En esta sección recurriremos al estudio de probabilidades definidas en espacios producto. Siempre que tengamos dos espacios medibles  $(\Omega_1, \sigma_1)$  y  $(\Omega_2, \sigma_2)$ , al considerar el espacio producto  $\Omega_1 \times \Omega_2$ , entenderemos que trabajamos en él con la  $\sigma$ -álgebra producto  $\sigma_1 \otimes \sigma_2$ , definida como la mínima  $\sigma$ -álgebra que contiene a todos los conjuntos  $A \times B$ , con  $A \in \sigma_1$  y  $B \in \sigma_2$ . Como es habitual, denotaremos por  $(x, y)$  a los puntos de  $\Omega_1 \times \Omega_2$ . En particular, en el caso en que tengamos una función medible:

$$f : \Omega_1 \times \Omega_2 \rightarrow \mathbb{R}$$

si  $\pi$  es una probabilidad en  $(\Omega_1 \times \Omega_2)$ , denotaremos a la integral de  $f$  respecto de  $\pi$  por:

$$\int_{\Omega_1 \times \Omega_2} f d\pi \quad \text{o} \quad \int_{\Omega_1 \times \Omega_2} f(x, y) d\pi(x, y)$$

siempre que dicha integral exista, dependiendo si es necesario especificar las variables respecto de las que integramos o no.

A lo largo de todo el trabajo, vamos a denotar por  $\Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  el conjunto de probabilidades  $P$  en  $\beta^d$ , la  $\sigma$ -álgebra de Borel de  $\mathbb{R}^d$ , tales que:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \|x\|^2 dP(x) < \infty$$

Esto es, si  $X$  es una variable aleatoria definida en algún espacio probabilístico  $(\Omega, \sigma, \mathbb{P})$  que induce la probabilidad  $P$  en  $\mathbb{R}^d$ , se pide que  $X \in L^2(\Omega)$ , es decir:

$$E(\|X\|^2) < \infty$$

Para indicar que una variable aleatoria  $X$  sigue una ley de probabilidad  $P$ , utilizaremos indistintamente la notación:

$$X \stackrel{d}{\sim} P \quad \mathcal{L}(X) = P$$

Dadas dos probabilidades  $P, Q \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , vamos a denotar por  $\Pi(P, Q)$  al conjunto de emparejamientos probabilísticos de  $P$  y  $Q$ , es decir, al conjunto de probabilidades  $\pi$  sobre  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$  tales que las distribuciones marginales de  $\pi$  son  $P$  y  $Q$ .

Cuando trabajemos con matrices, denotaremos por  $\mathcal{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$  al conjunto de matrices de dimensión  $n \times m$  con coeficientes en  $\mathbb{R}$ , y por  $\mathcal{M}_d(\mathbb{R})$  al conjunto de matrices cuadradas de dimensión  $d \times d$  con coeficientes reales. El subconjunto de las matrices simétricas de dimensión  $d \times d$  lo denotaremos por  $\mathbb{S}^d$ , y utilizaremos la notación  $\mathbb{S}_{\geq 0}^d$  y  $\mathbb{S}_{> 0}^d$  para denotar a los subconjuntos de las matrices simétricas semidefinidas positivas y definidas positivas, respectivamente. Finalmente, diremos que una matriz cuadrada  $U \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R})$  es ortogonal si verifica:

$$U^T U = U U^T = I_d$$

donde  $U^T$  denota la matriz transpuesta de  $U$ , e  $I_d$  la matriz identidad de dimensión  $d \times d$ .

## 2.1. Definición y primeras propiedades

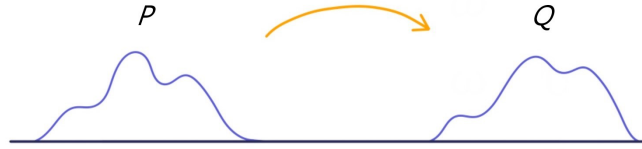
Vamos a comenzar dando la definición de la distancia de Wasserstein. Existen dos definiciones equivalentes para la distancia de Wasserstein: en términos de variables aleatorias, o en términos de emparejamientos probabilísticos.

**Definición 1.** Dadas  $P, Q \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  se define la distancia de Wasserstein por:

$$W_2(P, Q) = \inf \left\{ (E\|X - Y\|^2)^{1/2} : \mathcal{L}(X) = P, \mathcal{L}(Y) = Q \right\} = \quad (1)$$

$$= \inf \left\{ \left( \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \|x - y\|^2 d\pi(x, y) \right)^{1/2} : \pi \in \Pi(P, Q) \right\}$$

La distancia de Wasserstein tiene un gran interés para tratar diferentes problemas estadísticos. Parte de este interés surge de su relación con el problema de transporte óptimo. Hallar el inferior en la segunda definición es equivalente a hallar la solución del problema de transporte óptimo formulado por Kantorovich, que consiste en minimizar el coste de llevar una distribución de masa  $P$  a otra distribución de masa situada en  $Q$ , cuando utilizamos como función de coste  $c(x, y) = \|x - y\|^2$ .



A partir de la distancia de Wasserstein, podemos establecer las siguientes definiciones:

- Una probabilidad  $\bar{\pi} \in \Pi(P, Q)$  se dice que es un *emparejamiento óptimo* para la distancia de Wasserstein si cumple que:

$$\left( \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \|x - y\|^2 d\bar{\pi}(x, y) \right)^{1/2} = \inf \left\{ \left( \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \|x - y\|^2 d\pi(x, y) \right)^{1/2} : \pi \in \Pi(P, Q) \right\}$$

- Análogamente, dadas un par de variables aleatorias  $(\bar{X}, \bar{Y})$  definidas en un espacio probabilístico común  $(\Omega, \sigma, \mathbb{P})$  y que toman valores en  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ , decimos que son un *emparejamiento óptimo* de  $P$  y  $Q$  si  $\mathcal{L}(\bar{X}) = P, \mathcal{L}(\bar{Y}) = Q$  y además:

$$(E\|\bar{X} - \bar{Y}\|^2)^{1/2} = \inf \left\{ (E\|X - Y\|^2)^{1/2} : \mathcal{L}(X) = P, \mathcal{L}(Y) = Q \right\}$$

A continuación, vamos a presentar algunos conceptos y resultados básicos relativos a la distancia de Wasserstein. Las demostraciones correspondientes aparecen en [4], bajo una situación más general. El primer resultado que vamos a mostrar nos asegura la existencia de emparejamientos óptimos para la distancia de Wasserstein.

**Proposición 1.** Con las definiciones introducidas antes:

1. El inferior en la definición de  $W_2(P, Q)$  se alcanza.
2.  $W_2$  es una distancia en  $\Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ .

La definición de la distancia de Wasserstein se puede extender a variables aleatorias a través de sus leyes de probabilidad. A partir de esta definición, algunos resultados se pueden enunciar de forma más sencilla.

**Definición 2.** En el caso en que tenemos dos variables aleatorias  $X, Y$ , definimos  $W_2(X, Y)$  como la distancia entre las leyes de  $X$  y  $Y$ , suponiendo que ambas están en  $\Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ .

$$W_2(X, Y) = W_2(\mathcal{L}(X), \mathcal{L}(Y))$$

**Proposición 2.** Sean  $X, Y$  variables aleatorias que toman valores en  $\mathbb{R}^d$  con momento de orden 2 finito. Se cumplen las siguientes propiedades:

1. Si  $a \in \mathbb{R}$ , entonces  $W_2(aX, aY) = |a|W_2(X, Y)$
2.  $W_2(TX, TY) \leq \|T\|W_2(X, Y)$  para cualquier aplicación lineal  $T : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ .

La siguiente proposición refleja la relación existente entre la distancia de Wasserstein entre dos variables aleatorias, y la distancia de Wasserstein entre las dos variables aleatorias centradas.

**Proposición 3.** Sean  $X, Y$  variables aleatorias que toman valores en  $\mathbb{R}^d$  y con momento de orden 2 finito. Entonces:

$$W_2^2(X, Y) = W_2^2(X - E(X), Y - E(Y)) + \|E(X) - E(Y)\|^2$$

Por último, enunciaremos un resultado que afirma que la distancia de Wasserstein entre dos probabilidades no depende de la base en la que estamos expresando dichas probabilidades.

**Proposición 4.** Sean  $X, Y$  variables aleatorias que toman valores en  $\mathbb{R}^d$  y con momento de orden 2 finito. Si  $A$  es una matriz ortogonal, se cumple que:

$$W_2(X, Y) = W_2(AX, AY)$$

## 2.2. Emparejamientos óptimos

En esta sección, vamos a mostrar una serie de resultados que nos permiten estudiar las características los emparejamientos óptimos cuando trabajamos con variables aleatorias que toman valores en  $\mathbb{R}$ . En el caso general en el que tenemos variables aleatorias con llegada a  $\mathbb{R}^d, d > 1$ , trabajando con la estructura de dependencia, enunciaremos alguna condición bajo la cual podemos afirmar que un emparejamiento es óptimo.

Para el primer resultado, vamos a utilizar la siguiente notación.

- Sean  $\{X_i\}_{i=1}^n$  variables aleatorias definidas en un mismo espacio probabilístico  $(\Omega, \sigma, \mathbb{P})$  con funciones de distribución  $F_i$  correspondientes a probabilidades  $P_i, 1 \leq i \leq n$ . Sean  $\{V_i\}_{i=1}^n$  variables aleatorias independientes, con distribución  $U(0, 1)$  e independientes de  $\{X_i\}_{i=1}^n$ . Definimos para  $x \in \mathbb{R}, \alpha \in (0, 1)$ :

$$\mathcal{F}_i(x, \alpha) := \mathbb{P}(X_i < x) + \alpha \mathbb{P}(X_i = x)$$

$$U_i := \mathcal{F}_i(X_i, V_i), 1 \leq i \leq n$$

Bajo esta situación, el lema [2] del anexo nos permite afirmar que:

$$\mathcal{L}(U_i) = U(0, 1) \quad \text{y} \quad X_i = F_i^{-1} \circ U_i \quad \mathbb{P} - \text{c.s.}$$

donde  $F_i^{-1}(u) = \inf\{y : F_i(y) \geq u\}$  es la función cuantil asociada a  $F_i$ .

- Decimos que  $X_1 \overset{S.O.}{\sim} X_2$  (similarly ordered) si:

$$(X_1(w) - X_1(w'))(X_2(w) - X_2(w')) \geq 0 \quad \mathbb{P} \otimes \mathbb{P} - \text{c.s.}$$

El siguiente teorema caracteriza los emparejamientos óptimos en el caso de variables aleatorias reales. A partir de ahora, asumiremos que nuestro espacio probabilístico  $(\Omega, \sigma, \mathbb{P})$  es suficientemente rico para definir una variable aleatoria  $U(0, 1)$ .

**Teorema 1.** Sean  $X_1, X_2$  variables aleatorias reales con  $E(X_1^2) < \infty, E(X_2^2) < \infty$ , con  $F_1$  y  $F_2$  sus funciones de distribución y  $P_1, P_2$  sus leyes de probabilidad asociadas, y denotemos por  $F_{(X_1, X_2)}$  a la función de distribución conjunta del vector aleatorio  $(X_1, X_2)$ . Entonces:

1. Son equivalentes:

- a)  $(X_1, X_2)$  es un emparejamiento óptimo.
- b)  $F_{(X_1, X_2)}(x, y) = \min\{F_1(x), F_2(y)\}$
- c) Existe una v.a.  $U \stackrel{d}{\sim} U(0, 1)$  tal que para algunas funciones no decrecientes  $\phi_1$  y  $\phi_2$ ,

$$X_1 = \phi_1(U) \quad \text{y} \quad X_2 = \phi_2(U) \quad \mathbb{P} - \text{c.s.}$$

- d)  $X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} X_2$

2. Las funciones  $\phi_i$  en 1.c) son esencialmente únicas:  $\phi_i = F_i^{-1}$  c.s. con respecto a la medida de Lebesgue  $\ell$  en  $(0, 1)$ .

3. Con la notación previa al teorema, los pares:

$$(X_1, F_2^{-1} \circ \mathcal{F}_1(X_1, V_1)) \quad (F_1^{-1} \circ \mathcal{F}_2(X_2, V_2), X_2)$$

son emparejamientos óptimos de  $P_1$  y  $P_2$ .

4. Si  $P_1$  es no atómica y  $(X_1, X_2)$  es un emparejamiento óptimo, entonces:

$$X_2 = F_2^{-1} \circ F_1(X_1) \quad \mathbb{P} - \text{c.s.}$$

5. Si  $X_2 = \phi_1(X_1)$  con  $\phi_1$  no decreciente, entonces  $(X_1, X_2)$  es un emparejamiento óptimo de  $P_1$  y  $P_2$ .

*Demostración.* Vamos a comenzar mostrando las equivalencias que aparecen en (1).

■  $a \Leftrightarrow b$

Por el lema de Hoeffding [3] del anexo, sabemos que:

$$E(X_1 X_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (F_{(X_1, X_2)}(x, y) - F_1(x)F_2(y)) dx dy + E(X_1)E(X_2)$$

Por tanto, hallar el mínimo en la expresión:

$$E(X_1 - X_2)^2 = E(X_1^2) + E(X_2^2) - 2E(X_1 X_2)$$

es equivalente a hallar el máximo de  $E(X_1 X_2)$ . Utilizando las cotas de Fréchet [4], sabemos que la clase de las funciones de distribución con marginales  $P_1$  y  $P_2$  está acotada superiormente por:

$$\bar{F}(x, y) = \min\{F_1(x), F_2(y)\}$$

y además  $\bar{F}$  es una función función de distribución con marginales  $P_1$  y  $P_2$ . Por tanto,  $(X_1, X_2)$  es un emparejamiento óptimo si y sólo si:

$$F_{(X_1, X_2)}(x, y) = \min\{F_1(x), F_2(y)\}$$



■  $c \Rightarrow b$

Con la representación dada de las variables aleatorias  $X_1$  y  $X_2$ , tenemos que:

$$F_1(x) = \mathbb{P}(X_1 \leq x) = \mathbb{P}(\phi_1(U) \leq x)$$

$$F_2(y) = \mathbb{P}(X_2 \leq y) = \mathbb{P}(\phi_2(U) \leq y)$$

Las funciones  $\phi_1$  y  $\phi_2$  son no decrecientes, por tanto:

$$\begin{aligned} F_{(X_1, X_2)}(x, y) &= \mathbb{P}(X_1 \leq x, X_2 \leq y) = \mathbb{P}(\phi_1(U) \leq x, \phi_2(U) \leq y) = \\ &= \min\{\mathbb{P}(\phi_1(U) \leq x), \mathbb{P}(\phi_2(U) \leq y)\} = \min\{F_1(x), F_2(y)\} \end{aligned}$$

ya que o bien  $(\phi_1(U) \leq x) \subset (\phi_2(U) \leq y)$  o bien  $(\phi_1(U) \leq x) \supset (\phi_2(U) \leq y)$

■  $a \Rightarrow d$

Como ya hemos probado que  $a \Rightarrow c$ , si  $(X_1, X_2)$  es un emparejamiento óptimo podemos suponer que las v.a. están definidas sobre  $\Omega = [0, 1]$  y que  $\mathbb{P}$  es la medida de Lebesgue  $\ell$  en  $[0, 1]$ . Veamos ahora que si  $(X_1, X_2)$  es un emparejamiento óptimo, entonces  $X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} X_2$ . Supongamos que no se verifica. Entonces:

$$\mathbb{P} \otimes \mathbb{P} \left( \left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega'))(X_2(\omega) - X_2(\omega')) < 0 \right\} \right) > 0$$

Se cumple que:

$$\begin{aligned} &\left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega'))(X_2(\omega) - X_2(\omega')) < 0 \right\} = \\ &= \left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) > 0, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) < 0 \right\} \cup \\ &\cup \left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) < 0, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) > 0 \right\} = \\ &= \left( \bigcup_{n=1}^{\infty} \left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) > \frac{1}{n}, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) < \frac{-1}{n} \right\} \right) \cup \\ &\cup \left( \bigcup_{n=1}^{\infty} \left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) < \frac{-1}{n}, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) > \frac{1}{n} \right\} \right) \end{aligned}$$

Por tanto, existe  $\varepsilon > 0$  tal que uno de los siguientes conjuntos tiene probabilidad positiva:

$$\{(\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) < -3\varepsilon, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) > 3\varepsilon\}$$

$$\{(\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) > 3\varepsilon, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) < -3\varepsilon\}$$

Supongamos sin pérdida de generalidad que el primer conjunto tiene probabilidad positiva. Entonces existen enteros  $j_1, j_2, k_1$  y  $k_2$  con  $j_1 + 1 < j_2$  y  $k_1 + 1 < k_2$  tales que el conjunto:

$$\tilde{A}_{j_1, j_2, k_1, k_2} = \left\{ (\omega, \omega') : \begin{array}{ll} j_1\varepsilon < X_1(\omega) \leq (j_1 + 1)\varepsilon, & j_2\varepsilon < X_1(\omega') \leq (j_2 + 1)\varepsilon \\ k_1\varepsilon < X_2(\omega') \leq (k_1 + 1)\varepsilon, & k_2\varepsilon < X_2(\omega) \leq (k_2 + 1)\varepsilon \end{array} \right\}$$

tiene probabilidad positiva, ya que:

$$\begin{aligned} & \{(\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega) - X_1(\omega')) < -3\varepsilon, (X_2(\omega) - X_2(\omega')) > 3\varepsilon\} \subset \\ & \subset \bigcup_{\substack{j_1, j_2 \in \mathbb{Z} \\ j_1 + 1 < j_2}} \bigcup_{\substack{k_1, k_2 \in \mathbb{Z} \\ k_1 + 1 < k_2}} \tilde{A}_{j_1, j_2, k_1, k_2} \end{aligned}$$

Si denotamos:

$$A = \{\omega : j_1\varepsilon < X_1(\omega) \leq (j_1 + 1)\varepsilon, k_2\varepsilon < X_2(\omega) \leq (k_2 + 1)\varepsilon\}$$

$$A' = \{\omega : j_2\varepsilon < X_1(\omega) \leq (j_2 + 1)\varepsilon, k_1\varepsilon < X_2(\omega) \leq (k_1 + 1)\varepsilon\}$$

Entonces se tiene que  $\tilde{A}_{j_1, j_2, k_1, k_2} = A \times A'$ , y por tanto  $\mathbb{P}(A) > 0, \mathbb{P}(A') > 0$ . Sea ahora  $\lambda \in \mathbb{I}$ , y denotamos por  $T$  el automorfismo de Weyl:

$$\omega \in \Omega = [0, 1) \xrightarrow{T} w + \lambda \pmod{1}$$

EL automorfismo de Weyl conserva la medida en  $([0, 1), \beta_{[0, 1)}, \mathbb{P})$  y es ergódico, es decir, no existe  $A \in \beta_{[0, 1)}$  tal que  $\mathbb{P}(A) > 0$  y  $T^{-1}(A) = A$ . Por el teorema ergódico (sección 24 en [5]):

$$\mathbb{P}\left(\left\{x \in [0, 1) : \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n I_{A'}(T^k x) = \mathbb{P}(A')\right\}\right) = 1$$

Por tanto, como  $\mathbb{P}(A') > 0$ :

$$\mathbb{P}\left(\left\{x \in [0, 1) : \exists k \in \mathbb{N} \text{ con } x \in T^{-k}(A')\right\}\right) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} T^{-k}(A')\right) = 1$$

En consecuencia, existe  $n \in \mathbb{N}$  tal que  $\mathbb{P}(A \cap T^{-n}A') > 0$ . Si no fuera así:

$$\mathbb{P}(A) = \mathbb{P}\left(A \cap \left(\bigcup_{k=1}^{\infty} T^{-k}A'\right)\right) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} A \cap T^{-k}A'\right) = 0$$

Sea  $n \in \mathbb{N}$  tal que  $\mathbb{P}(A \cap T^{-n}A') > 0$ . Tomamos  $B = A \cap T^{-n}A'$  y  $B' = T^n B$ . Consideramos el automorfismo  $\phi = T^n$ . Como  $\phi$  conserva la medida:

$$\mathbb{P}(B') = \mathbb{P}(\phi(B)) = \mathbb{P}(B) > 0$$

Definimos entonces la variable aleatoria:

$$X_1^* = \begin{cases} X_1(\phi(\omega)) & \text{si } \omega \in B \\ X_1(\phi^{-1}(\omega)) & \text{si } \omega \in B' \\ X_1(\omega) & \text{si } \omega \notin B \cup B' \end{cases}$$

Veamos que  $X_1^* \stackrel{d}{=} X_1$ . Si  $C$  es un conjunto medible en la  $\sigma$ -álgebra de borel de  $\mathbb{R}$ :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(X_1^* \in C) &= \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1^*(\omega) \in C\}) = \\ &= \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1(\phi(\omega)) \in C, \omega \in B\}) + \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1(\phi^{-1}(\omega)) \in C, \omega \in B'\}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1(\omega) \in C, \omega \notin B \cup B'\}) = \\
& = \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1(\omega) \in C, \omega \in \phi(B) = B'\}) + \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1(\omega) \in C, \omega \in \phi^{-1}(B') = B\}) + \\
& +\mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : X_1(\omega) \in C, \omega \notin B \cup B'\}) = \\
& = \mathbb{P}(X_1 \in C)
\end{aligned}$$

Además, por el teorema del cambio de variable:

$$\begin{aligned}
& E((X_1^* - X_2)^2) = \\
& = \int_B (X_1(\phi(\omega)) - X_2(\omega))^2 d\omega + \int_{B'} (X_1(\phi^{-1}(\omega)) - X_2(\omega))^2 d\omega + \int_{(B \cup B')^c} (X_1(\omega) - X_2(\omega))^2 d\omega = \\
& = \int_B [(X_1(\phi(\omega)) - X_2(\omega))^2 + (X_1(\omega) - X_2(\phi(\omega)))^2] d\omega + \int_{(B \cup B')^c} (X_1(\omega) - X_2(\omega))^2 d\omega
\end{aligned}$$

Si  $\omega \in B = A \cap T^{-n}A'$ , entonces  $\omega \in A$  y  $\phi(\omega) \in A'$ , luego  $(\omega, \phi(\omega)) \in \tilde{A}_{j_1, j_2, k_1, k_2}$  y por tanto:

$$X_1(\omega) < X_1(\phi(\omega)) \quad \text{y} \quad X_2(\phi(\omega)) < X_2(\omega)$$

En consecuencia, si  $\omega \in B$ , se cumple que:

$$(X_1(\phi(\omega)) - X_2(\omega))^2 + (X_1(\omega) - X_2(\phi(\omega)))^2 < (X_1(\omega) - X_2(\omega))^2 + (X_1(\phi(\omega)) - X_2(\phi(\omega)))^2$$

Como  $\mathbb{P}(B) > 0$ , se deduce que:

$$\begin{aligned}
& E((X_1^* - X_2)^2) < \\
& < \int_B [(X_1(\omega) - X_2(\omega))^2 + (X_1(\phi(\omega)) - X_2(\phi(\omega)))^2] d\omega + \int_{(B \cup B')^c} (X_1(\omega) - X_2(\omega))^2 d\omega = \\
& = E(X_1 - X_2)^2
\end{aligned}$$

y por tanto  $(X_1, X_2)$  no es un emparejamiento óptimo, hemos llegado a una contradicción.

■  $d \Rightarrow c$

Consideramos las variables aleatorias  $U_1 = \mathcal{F}_1(X_1, V_1)$  y  $U_2 = \mathcal{F}_2(X_2, U_1)$  donde  $V_1 \sim U(0, 1)$  y es independiente de  $X_1, X_2$ . Sabemos por el lema [2] que:

$$U_1 \sim U(0, 1) \quad \text{y} \quad X_1 = F_1^{-1} \circ U_1$$

No podemos aplicar lo mismo para  $U_2$ , ya que  $X_1$  y  $X_2$  no son independientes y por tanto tampoco lo son  $X_2$  y  $U_1$ . Lo que vamos a probar en primer lugar que la distribución de  $U_2$  es continua. Sean  $\omega, \omega' \in \Omega$  tales que  $U_2(\omega) = U_2(\omega')$ , y denotemos:

$$x_1 = X_1(\omega) \quad x'_1 = X_1(\omega')$$

$$x_2 = X_2(\omega) \quad x'_2 = X_2(\omega')$$

Utilizando en todos los casos que:

$$U_2(\omega) = \mathcal{F}_2(x_2, U_1(\omega)) = \mathbb{P}(X_2 < x_2) + U_1(\omega)\mathbb{P}(X_2 = x_2)$$

$$U_2(\omega') = \mathcal{F}_2(x'_2, U_1(\omega')) = \mathbb{P}(X_2 < x'_2) + U_1(\omega')\mathbb{P}(X_2 = x'_2)$$

se tiene que como  $U_2(\omega) = U_2(\omega')$ , entonces:

- Si  $x_2 = x'_2$  y  $\mathbb{P}(X_2 = x_2) > 0$

$$\Rightarrow U_1(\omega) = U_1(\omega')$$

- Por otra parte, denotemos por:

$$C = \{x_2 \in \mathbb{R} : \mathbb{P}(X_2 = x_2) = 0\}$$

- Si  $x_2 < x'_2$  y  $U_1(\omega), U_1(\omega') \in (0, 1)$

$$\Rightarrow \begin{cases} P(X_2 < x_2) = P(X_2 < x'_2) \\ P(X_2 = x_2) = P(X_2 = x'_2) = 0 \end{cases} \Rightarrow \mathbb{P}(X_2 \in [x_2, x'_2]) = 0$$

ya que si no fuera así, se tendría que si  $x_2 < x'_2$ :

- Si  $P(X_2 < x_2) = P(X_2 < x'_2)$ , entonces necesariamente  $P(X_2 = x_2) = 0$ , y entonces:

$$U_2(\omega) = U_2(\omega') \Rightarrow P(X_2 = x'_2) = 0$$

- Si  $P(X_2 < x_2) < P(X_2 < x'_2)$ , entonces:

$$\begin{aligned} U_2(\omega) &= \mathbb{P}(X_2 < x_2) + U_1(\omega)\mathbb{P}(X_2 = x_2) < \mathbb{P}(X_2 < x'_2) \leq \\ &\leq \mathbb{P}(X_2 < x'_2) + U_1(\omega')\mathbb{P}(X_2 = x'_2) = U_2(\omega') \end{aligned}$$

Por tanto, hemos probado que:

$$\begin{aligned} &\mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : U_2(\omega) = U_2(\omega')\}) \leq \\ &\leq \mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : X_2(\omega) = X_2(\omega'), X_2(\omega) \in C\}) + \\ &\quad + \mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : U_1(\omega) = U_1(\omega')\}) + \\ &\quad + \mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : X_2(\omega), X_2(\omega') \in A\}) + \\ &\quad + \mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : U_1(\omega) \notin (0, 1) \text{ o } U_1(\omega') \notin (0, 1)\}) \end{aligned}$$

donde  $A$  es el conjunto definido como la unión de todos los intervalos cerrados y no triviales con  $P_2$ -probabilidad 0. Si tomamos dichos intervalos disjuntos, como mucho puede haber una cantidad numerable, y por tanto  $P_2(A) = 0$  y el segundo sumando que aparece es nulo. Por otra parte, como  $U_1 \sim U(0, 1)$ , el primer y el tercer sumando también son nulos.

$$\begin{aligned} &\mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : U_1(\omega) \notin (0, 1) \text{ o } U_1(\omega') \notin (0, 1)\}) \leq \\ &\leq 2\mathbb{P}(\{\omega : U_1(\omega) \notin (0, 1)\}) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \otimes \mathbb{P}(\{(\omega, \omega') : U_1(\omega) = U_1(\omega')\}) &= \int_{\Omega} \left( \int_{\Omega} I_{\{(\omega, \omega') : U_1(\omega') = U_1(\omega)\}}(\omega, \omega') d\omega' \right) d\omega = \\ &= \int_{\Omega} \mathbb{P}(\{\omega' : U_1(\omega') = U_1(\omega)\}) d\omega = \int_{\Omega} 0 d\omega = 0 \end{aligned}$$

De forma análoga se prueba que el primer sumando es 0. Por tanto, hemos probado que la distribución de  $U_2$  es continua. Por otra parte, dados  $\omega, \omega' \in \Omega$ , utilizando la misma notación que antes:

- Si  $x_2 < x'_2$

$$\Rightarrow U_2(\omega) \leq U_2(\omega') \quad \text{por construcción}$$

$$\Rightarrow x_1 \leq x'_1 \text{ c.s.} \quad \text{por hipótesis, ya que } X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} X_2$$

- Si  $x_2 = x'_2$  y  $x_1 < x'_1$

$$x_1 < x'_1 \Rightarrow U_1(\omega) \leq U_1(\omega')$$

$$\Rightarrow U_2(\omega) \leq U_2(\omega')$$

Por tanto, hemos probado que  $X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} U_2$ . Veamos ahora que existe una función creciente  $\phi_1$  tal que  $X_1 = \phi_1(U_2)$ . Si vemos esto, como además el mismo argumento utilizado en el lema [2] nos permite escribir:

$$X_2 = F_2^{-1}(U_2) \quad \mathbb{P} - \text{c.s.}$$

y podemos concluir teniendo en cuenta que se puede reescribir  $U_2$  como una función creciente de una variable aleatoria  $U(0, 1)$ , a partir de su función cuantil.

Veamos que podemos escribir  $X_1$  como una función creciente de  $U_2$ . Denotemos por  $P$  a la ley de probabilidad de  $(X_1, U_2)$ , que sabemos que es una probabilidad regular, por estar definida en  $\mathbb{R}^2$ , que es un espacio métrico y separable. Denotemos a las probabilidades marginales por  $P_{X_1}, P_{U_2}$  respectivamente. Sabemos entonces que existen probabilidades de transición  $\{P_y\}_{y \in \mathbb{R}}$  tal que para cada  $D \in \beta^2$ , la  $\sigma$ -álgebra de Borel de  $\mathbb{R}^2$ , se cumple que:

$$P(D) = \int_{\mathbb{R}} P_y(D_y) dP_{U_2}(y) = \int_{\mathbb{R}} \left( \int_{\mathbb{R}} I_{D_y}(x) dP_y(x) \right) dP_{U_2}(y)$$

donde  $D_y = \{x \in \mathbb{R} : (x, y) \in D\}$  es la sección del conjunto  $D$  en  $y$ . Considerando en el espacio producto  $\Omega \times \Omega$  la probabilidad  $\mathbb{P} \otimes \mathbb{P}$ , definimos entonces las variables aleatorias:

$$\Omega \times \Omega \xrightarrow{\overline{X_1, U_2}} \mathbb{R}^2$$

dadas por:

$$\overline{X_1}(\omega, \omega') = (X_1(\omega), X_1(\omega'))$$

$$\overline{U_2}(\omega, \omega') = (U_2(\omega), U_2(\omega'))$$

Las distribuciones marginales de  $\overline{X_1}, \overline{U_2}$  son  $Q_1 = P_{X_1} \otimes P_{X_1}$  y  $Q_2 = P_{U_2} \otimes P_{U_2}$  respectivamente. La probabilidad  $Q = \mathcal{L}(\overline{X_1}, \overline{U_2})$  es una probabilidad regular definida sobre  $\mathbb{R}^4$ , con marginales  $Q_1, Q_2$ . Sabemos que existen  $\{Q_{(y, y')}\}_{(y, y') \in \mathbb{R}^2}$  probabilidades de transición que cumplen que para todo  $D \in \beta^4$ :

$$Q(D) = \int_{\mathbb{R}^2} Q_{(y, y')}(D_{(y, y')}) dQ_2(y, y')$$

Veamos que podemos tomar  $Q_{(y, y')} = P_y \otimes P_{y'}$ . Para ver esto:

- En primer lugar, veamos que podemos definir una probabilidad a partir de la expresión:

$$Q^*(D) = \int_{\mathbb{R}^2} (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y, y')}) dQ_2(y, y') \quad D \in \beta^4 \quad (2)$$

Para ello, tenemos que comprobar que para cada  $D \in \beta^4$ , la función:

$$(y, y') \mapsto (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y, y')})$$

es  $\beta^2$ -medible. Como  $\{P_y\}_{y \in \mathbb{R}}$  son probabilidades de transición asociadas una la probabilidad regular  $P$ , sabemos que para cada  $A \in \beta^2$ , la función:

$$y \mapsto P_y(A_y)$$

es  $\beta$ -medible. Utilizando esto, vamos a comprobar que:

$$\Lambda := \{D \in \beta^4 : (y, y') \mapsto (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y, y')}) \text{ es } \beta^2\text{-medible}\}$$

coincide con  $\beta^4$ . La contención  $\Lambda \subset \beta^4$  es obvia. Para ver la otra contención, necesitamos varios pasos:

(1) Tomamos la clase:

$$\Pi = \{A_1 \times A_2 \times B_1 \times B_2 : A_1, A_2, B_1, B_2 \in \beta\}$$

$\Pi$  es cerrada para intersecciones finitas, luego es  $\pi$ -clase. Además,  $\Pi \subset \Lambda$ , ya que dado  $A_1 \times A_2 \times B_1 \times B_2 \in \Pi$ , la función:

$$\begin{aligned} (y, y') &\mapsto (P_y \otimes P_{y'})((A_1 \times A_2 \times B_1 \times B_2)_{(y, y')}) = \\ &= \begin{cases} 0 & \text{si } (y, y') \notin B_1 \times B_2 \\ (P_y \otimes P_{y'})(A_1 \times A_2) & \text{si } (y, y') \in B_1 \times B_2 \end{cases} = \\ &= P_y((A_1 \times B_1)_y) P_{y'}((A_2 \times B_2)_{y'}) \end{aligned}$$

es medible por ser producto de funciones medibles.

(2)  $\Lambda$  es una  $\lambda$ -clase. Veamos que cumple las propiedades que definen una  $\lambda$ -clase:

- $\mathbb{R}^4 \in \Lambda$ . Es claro, ya que  $\mathbb{R}^4 \in \Pi \subset \Lambda$
- Si  $D \in \Lambda \Rightarrow D^C \in \Lambda$ . Si la función:

$$(y, y') \mapsto (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y, y')}) \text{ es } \beta^2\text{-medible}$$

entonces la función:

$$\begin{aligned} (y, y') &\mapsto (P_y \otimes P_{y'})((D^C)_{(y, y')}) = \\ &= (P_y \otimes P_{y'})((D_{(y, y')})^C) = 1 - (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y, y')}) \end{aligned}$$

es medible por ser diferencia de dos funciones medibles.

- Si  $\{D_n\}_{n=1}^\infty \subset \Lambda$  son disjuntos, entonces  $\cup_{n=1}^\infty D_n \in \Lambda$ . En primer lugar, dado  $N \in \mathbb{N}$ , la función:

$$\begin{aligned} (y, y') &\mapsto (P_y \otimes P_{y'}) \left( \left( \cup_{n=1}^N D_n \right)_{(y, y')} \right) = \\ &= \sum_{n=1}^N (P_y \otimes P_{y'})((D_n)_{(y, y')}) \end{aligned}$$

es medible por ser suma de funciones medibles. Por tanto:

$$(y, y') \mapsto (P_y \otimes P_{y'}) \left( \left( \cup_{n=1}^\infty D_n \right)_{(y, y')} \right) =$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} (P_y \otimes P_{y'}) \left( \left( \bigcup_{n=1}^N D_n \right)_{(y,y')} \right)$$

es medible por ser límite de funciones medibles.

- (3) Por el teorema de la  $\pi - \lambda$  clase, sabemos que como  $\Pi$  es una  $\pi$ -clase contenida en  $\Lambda$ , que es una  $\lambda$ -clase, entonces  $\sigma(\Pi) \subset \Lambda$ . Como  $\Pi$  genera la  $\sigma$ -álgebra  $\beta^4$ , deducimos entonces que  $\beta^4 \subset \Lambda$  y por tanto:

$$\{D \in \beta^4 : (y, y') \mapsto (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y,y')}) \text{ es } \beta^2\text{-medible}\} = \beta^4$$

- Finalmente, veamos que las probabilidad  $Q^*$  definida en (2) coincide con  $Q$ . Para ello, basta ver que coinciden sobre la  $\pi$ -clase  $\Pi$ , ya que genera la  $\sigma$ -álgebra  $\beta^4$ . Sea  $D = A_1 \times A_2 \times B_1 \times B_2 \in \Pi$ :

$$\begin{aligned} Q^*(D) &= \int_{\mathbb{R}^2} (P_y \otimes P_{y'})(D_{(y,y')}) dQ_2(y, y') = \\ &= \int_{B_1 \times B_2} (P_y \otimes P_{y'})(A_1 \times A_2) dQ_2(y, y') = \int_{B_1 \times B_2} P_y(A_1) P_{y'}(A_2) d(P_{U_2} \otimes P_{U_2})(y, y') = \\ &= \int_{B_1} P_y(A_1) dP_{U_2}(y) \int_{B_2} P_{y'}(A_2) dP_{U_2}(y') = P(A_1 \times B_1) P(A_2 \times B_2) = \\ &= \mathbb{P} \otimes \mathbb{P} \left( \left\{ (\omega, \omega') \in \Omega \times \Omega : (X_1(\omega), X_1(\omega'), X_2(\omega), X_2(\omega')) \in D \right\} \right) = Q(D) \end{aligned}$$

Por tanto, hemos visto que  $\{P_y \otimes P_{y'}\}_{(y,y')}$  son probabilidades de transición para  $Q$ . Utilizando que  $X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} U_2$  llegamos a que:

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}^2} \left( \int_{\mathbb{R}^2} I_{\{(x,x',y,y') \in \mathbb{R}^4 : (x-x')(y-y') \geq 0\}}(x, x', y, y') d(P_y \otimes P_{y'})(x, x') \right) dQ_2(y, y') = \\ &= Q(\{(x, x', y, y') \in \mathbb{R}^4 : (x - x')(y - y') \geq 0\}) = 1 \end{aligned}$$

Se tiene por tanto que para casi todo  $(y, y')$  con respecto de  $Q_2 = P_{U_2} \otimes P_{U_2}$ :

$$\int_{\mathbb{R}^2} I_{\{(x,x',y,y') \in \mathbb{R}^4 : (x-x')(y-y') \geq 0\}}(x, x', y, y') d(P_y \otimes P_{y'})(x, x') = 1$$

Si denotamos  $\Gamma_1 = \{(x, x') : x \geq x'\}$ , entonces se tiene que:

$$\text{sop}(P_y \otimes P_{y'}) \subset \Gamma_1 \text{ para casi todo } (y, y') \subset \Gamma_1$$

Si denotamos por  $S_y$  al menor intervalo cerrado tal que  $P_y(S_y) = 1$  para cada  $y \in \mathbb{R}$ , lo que hemos probado se permite ver que

$$S_y \times S_{y'} \subset \Gamma_1 \text{ para casi todo } (y, y') \subset \Gamma_1$$

y de aquí deducimos que  $S_y$  y  $S_{y'}$  no se superponen para casi todo  $(y, y')$  respecto de la probabilidad  $Q_2 = P_{U_2} \otimes P_{U_2}$ . A partir de esto, podemos ver que necesariamente  $S_y$  es un único punto para casi todo  $y$  con respecto de  $P_{U_2}$ .

- Si no se cumple, existe un subconjunto  $H \subset \mathbb{R}$  con probabilidad positiva en el  $S_y$  es un intervalo no trivial para todo  $y \in H$ .

- $S_y$  y  $S_{y'}$  no se superponen para casi todo  $(y, y')$  respecto de  $Q_2 = P_{U_2} \otimes P_{U_2}$ , luego podemos suponer que para todo  $y, y' \in H$ , con  $y \neq y'$ ,  $S_y$  y  $S_{y'}$  no se superponen.
- Como  $U_2$  es una variable continua y  $P_{U_2}(H) > 0$ , necesariamente  $H$  contiene una infinidad no numerable de puntos.
- Por tanto,  $\{S_y : y \in H\}$  es una familia no numerable de intervalos disjuntos no triviales de  $\mathbb{R}$ , lo cual sabemos que no puede existir.

Denotamos por  $S$  al subconjunto de  $\mathbb{R}$  con  $P_{U_2}(S) = 1$  tal que si  $y \in S$ , entonces  $S_y$  es un único punto,  $S_y = \{x_y\}$ . Consideramos entonces la aplicación:

$$\begin{aligned} f : S &\longrightarrow \mathbb{R} \\ y &\longmapsto x_y \end{aligned}$$

Por lo visto antes:

$$\mathbb{P}\left(\{\omega \in \Omega : X_2(\omega) \in S\}\right) = P\left(\{(x, y) : x = f(y)\}\right) = 1$$

Si denotamos por  $\Omega'$  al subconjunto de  $\Omega$  con  $\mathbb{P}(\Omega') = 1$  en el que se verifica la condición, utilizando que  $X_1 \stackrel{S.Q.}{\sim} U_2$  llegamos a que:

$$\begin{aligned} &\mathbb{P} \otimes \mathbb{P}\left(\{(\omega, \omega') \in \Omega' \times \Omega' : (X_1(\omega) - X_1(\omega'))(U_2(\omega) - U_2(\omega')) \geq 0\}\right) = \\ &= \mathbb{P} \otimes \mathbb{P}\left(\{(\omega, \omega') \in \Omega' \times \Omega' : (f(U_2(\omega)) - f(U_2(\omega')))(U_2(\omega) - U_2(\omega')) \geq 0\}\right) = 1 \end{aligned}$$

lo cual solo es posible si  $f$  es una función no decreciente casi seguro, ya que como  $U_2$  es una variable continua:

$$\mathbb{P} \otimes \mathbb{P}\left(\{(\omega, \omega') \in \Omega' \times \Omega' : U_2(\omega) = U_2(\omega')\}\right) = 0$$

Por tanto, podemos tomar  $f$  que sea no decreciente en todo  $\Omega = [0, 1)$ , y que cumpla que:

$$X_1 = f(U_2) \quad \mathbb{P} - c.s.$$

- (2) Sabemos que la variable aleatoria  $F_1^{-1}(U) \stackrel{d}{\sim} P_1$ . Si denotamos por  $\ell$  la medida de Lebesgue en  $(0, 1)$ , se tiene que:

$$\mathbb{P}(\phi(U) \leq x) = \ell\left(\{t \in (0, 1) : \phi_1(t) \leq x\}\right)$$

$$\mathbb{P}(F_1^{-1}(U) \leq x) = \ell\left(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) \leq x\}\right)$$

Queremos ver que  $\phi_1 = F_1^{-1}$  c.s. respecto de la medida de Lebesgue. Para ello, utilizamos que si  $D$  es un conjunto denso y numerable en  $(0, 1)$ , entonces:

$$\begin{aligned} &\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) \neq \phi_1(t)\} = \\ &= \bigcup_{d \in D} \{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) > d \geq \phi_1(t)\} \cup \{t \in (0, 1) : \phi_1(t) > d \geq F_1^{-1}(t)\} \end{aligned}$$

Si no se cumple que  $\phi_1 = F_1^{-1}$  c.s. podemos suponer sin pérdida de generalidad que existe  $d \in D$  tal que:

$$\ell\left(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) > d \geq \phi_1(t)\}\right) > 0 \tag{3}$$



y por tanto:

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}(\phi_1(t) \leq d) - \mathbb{P}(F_1^{-1}(t) \leq d) = \\ & = \ell\left(\{t \in (0, 1) : \phi_1(t) \leq d\}\right) - \ell\left(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) \leq d\}\right) = [\boxtimes] \end{aligned}$$

Como  $F_1^{-1}$  y  $\phi_1$  son ambas funciones crecientes, los dos conjuntos que aparecen son intervalos. Por la condición (3) sabemos además que el primer intervalo contiene al segundo. Por tanto, podemos escribir la diferencia como:

$$[\boxtimes] = \ell\left(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) > d \geq \phi_1(t)\}\right) > 0$$

en contra de que  $\phi_1(U)$  y  $F_1^{-1}(U)$  tienen la misma distribución.

(3) Se deduce de (1), ya que:

$$X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} F_2^{-1} \circ \mathcal{F}_1(X_1, V_1)$$

$$X_2 \stackrel{S.O.}{\sim} F_1^{-1} \circ \mathcal{F}_2(X_2, V_2)$$

Veamos la primera propiedad.

- Si  $X_1(\omega) > X_1(\omega')$ , entonces por construcción:

$$\mathcal{F}_1(X_1(\omega), V_1(\omega)) \geq \mathcal{F}_1(X_1(\omega'), V_1(\omega'))$$

y como  $F_2^{-1}$  es una función creciente:

$$F_2^{-1} \circ \mathcal{F}_1(X_1(\omega), V_1(\omega)) \geq F_2^{-1} \circ \mathcal{F}_1(X_1(\omega'), V_1(\omega'))$$

- Si  $X_1(\omega) = X_1(\omega')$ , entonces:

$$(X_1(\omega) - X_1(\omega')) = 0$$

y se cumple la condición de S.O.

(4) Por (1) y (2) sabemos que existe una variable aleatoria  $U \sim U(0, 1)$  tal que:

$$X_1 = F_1^{-1}(U) \quad \text{y} \quad X_2 = F_2^{-1}(U)$$

Como  $P_1$  es no atómica,  $F_1$  es continua, y entonces  $F_1 \circ F_1^{-1}(t) = t$ . Por tanto,  $U = F_1(X_1)$  y se cumple que:

$$X_2 = F_2^{-1}(F_1(X_1))$$

(5) Se deduce de nuevo de (1) y de que  $X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} \phi_1(X_1)$

□

En el caso multivariante, no existe ningún resultado similar que nos de una representación los emparejamientos óptimos, tal y como hace la función cuantil en el caso real. Con el siguiente resultado comenzamos a ver las dificultades que surgen al trabajar con variables aleatorias definidas en  $\mathbb{R}^d$ .

**Proposición 5.** Sean  $\bar{X} = (X_1, \dots, X_d)^T$  e  $\bar{Y} = (Y_1, \dots, Y_d)^T$  dos variables aleatorias en  $\mathbb{R}^d$ , con funciones de distribución  $F$  y  $G$  y distribuciones  $P$  y  $Q$ . Sean  $P_i, Q_i, i = 1, \dots, d$  las distribuciones marginales de  $P$  y  $Q$  respectivamente, y  $F_i, G_i, i = 1, \dots, d$  sus funciones de distribución. Denotemos por  $\mathcal{F}(P, Q)$  el conjunto de funciones de distribución en  $\mathbb{R}^{2d}$  con marginales  $P$  y  $Q$ .

1.  $\max\{H(x, y) : H \in \mathcal{F}(P, Q)\} = \min\{F(x), G(y)\} =: \bar{F}(x, y)$
2.  $\min\{H(x, y) : H \in \mathcal{F}(P, Q)\} = (F(x) + G(y) - 1)_+ := \underline{F}(x, y)$
3. Si  $\bar{F}$  es una función de distribución, y  $(X, Y) \stackrel{d}{\sim} \bar{F}$ , entonces  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_j$  para todo  $i, j$ . Si además  $P_1$  y  $Q_j$  son no atómicas, para algún  $j$ , entonces  $X_i = \Phi_i(X_1)$  para funciones no decrecientes  $\Phi_i, i = 1, \dots, d$ .

*Demostración.* Las propiedades (1) y (2) se deducen del teorema 6 en [18], pero no nos aseguran que  $\underline{F}$  y  $\bar{F}$  sean funciones de distribución. En el caso en que  $\bar{F}$  es una función de distribución, tenemos que la función de distribución de  $(X_i, Y_j)$  viene dada por:

$$\bar{F}_{i,j} = \min\{F_i(x_i), G_j(y_j)\}$$

y utilizando el apartado (a) del teorema [1], se obtiene que  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_j$  para todo  $i, j$ . Si  $P_1$  es no atómica, entonces como  $X_1 \stackrel{S.O.}{\sim} Y_j$ , por el apartado (d) del teorema [1]:

$$Y_j = G_j^{-1} \circ F_1(X_1) = \phi_{1,j}(X_1)$$

Si  $Q_j$  también es no atómica, entonces como  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_j$

$$X_i = F_i^{-1} \circ G_j(Y_j) = \psi_{j,i}(Y_j)$$

Las funciones  $\phi_{1,j}$  y  $\psi_{j,i}$  son no decrecientes, por ser composición de funciones no decrecientes, y por tanto podemos escribir:

$$X_i = \phi_{1,j} \circ \psi_{j,i}(X_1) = \Phi_i(X_1)$$

con  $\Phi_i$  una función no decreciente. □

A pesar de las consideraciones previas, a partir de las translaciones se puede caracterizar un emparejamiento óptimo sencillo.

**Proposición 6.** Sea  $X$  una variable aleatoria, con  $\mathcal{L}(X) = P \in \Gamma^2(\mathbb{R}^d)$ , y para algún  $a \in \mathbb{R}^d$ , consideramos la variable aleatoria  $X + a$ , y denotamos su ley de probabilidad por  $\mathcal{L}(X + a) = Q$ . Entonces  $(X, X + a)$  es un emparejamiento óptimo de  $P$  y  $Q$ .

*Demostración.* Sean  $(X, Y)$  dos variables aleatorias con distribuciones marginales  $P$  y  $Q$ , respectivamente. Como  $\|\cdot\|^2$  es una función convexa, por la desigualdad de Jensen:

$$\begin{aligned} E(\|X - Y\|^2) &\geq \|E(X - Y)\|^2 = \|E(X) - E(Y)\|^2 = \\ &= \|a\|^2 = E(\|X - (X + a)\|^2) \end{aligned}$$

□

Las translaciones son un caso particular de transformaciones monótonas componente a componente. La optimalidad de este tipo de translaciones es consecuencia del siguiente resultado:

**Proposición 7.** Sean  $P, Q \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , con distribuciones marginales  $P_i, Q_i, i = 1, \dots, d$ , y sean  $X, Y$  dos variables aleatorias con  $\mathcal{L}(X) = P$ ,  $\mathcal{L}(Y) = Q$ . Entonces:

$$(a) \quad W_2^2(P, Q) \geq \sum_{i=1}^d W_2^2(P_i, Q_i)$$

(b)  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_i, i = 1, \dots, d$  si y sólo si  $(X, Y)$  es un emparejamiento óptimo y

$$W_2^2(P, Q) = \sum_{i=1}^d W_2^2(P_i, Q_i)$$

*Demostración.*

$$\begin{aligned} W_2^2(P, Q) &= \inf \left\{ \int \sum_{i=1}^d \|x_i - y_i\|^2 d\pi(x, y) : \pi \in \Pi(P, Q) \right\} \geq \\ &\geq \sum_{i=1}^d \inf \left\{ \int \|x_i - y_i\|^2 d\pi(x, y) : \pi \in \Pi(P, Q) \right\} = \\ &= \sum_{i=1}^d \inf \left\{ \int \|x_i - y_i\|^2 d\pi_i(x_i, y_i) : \pi_i \in \Pi(P_i, Q_i) \right\} = \\ &= \sum_{i=1}^d W_2^2(P_i, Q_i) \end{aligned}$$

Por otra parte, la igualdad se da si y sólo si existe un emparejamiento óptimo  $(X, Y)$  entre  $P$  y  $Q$  tal que:

$$W_2^2(P_i, Q_i) = E(\|X_i - Y_i\|^2) \quad \forall i = 1, \dots, d$$

Por el apartado (1) del teorema [1], sabemos que una condición necesaria y suficiente es que  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_i$ , para todo  $i = 1, \dots, d$ .  $\square$

**Corolario 1.** Sean  $P, Q \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , con distribuciones marginales  $P_i, Q_i$ , y funciones de distribución asociadas  $F_i, G_i, i = 1, \dots, d$ . Sean  $X, Y$  dos variables aleatorias tales que  $\mathcal{L}(X) = P, \mathcal{L}(Y) = Q$ . Si además asumimos que las distribuciones  $P_i, i = 1, \dots, d$  son no atómicas, son equivalentes:

(a)  $(X, Y)$  es un emparejamiento óptimo y  $W_2^2(P, Q) = \sum_{i=1}^d W_2^2(P_i, Q_i)$

(b)  $Y_i = G_i^{-1} \circ F_i(X_i) \quad \mathbb{P} - c.s. \quad \forall i = 1, \dots, d$

*Demostración.* Se deduce del apartado (4) del teorema [1].  $\square$

Una consecuencia inmediata de la proposición [7] es la siguiente:

**Corolario 2.** Sean  $P, Q \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , con funciones de distribución  $F$  y  $G$ . Si la función:

$$\bar{F}(x, y) = \min\{F(x), G(y)\}$$

es realmente una función de distribución, entonces la probabilidad definida por  $\bar{F}$  es un emparejamiento óptimo de  $P$  y  $Q$ .

*Demostración.* Se deduce del apartado 3 de la proposición [5], que nos dice que si  $(X, Y) \stackrel{d}{\sim} \bar{F}$ , entonces  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_i, i = 1, \dots, d$  y por la proposición [7] se concluye.  $\square$

Dada una función de distribución  $F$  asociada a una probabilidad  $P \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , existe una función de distribución  $C \in \mathcal{F}(U(0, 1), \dots, U(0, 1))$  (es decir, que todas sus distribuciones marginales son  $U(0, 1)$ ) tal que si denotamos por  $F_i, i = 1, \dots, d$ , a las funciones de distribución marginales de  $F$ , entonces:

$$F(x_1, \dots, x_d) = C(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d))$$

La función  $C$  se dice que es una *función de dependencia* de  $F$ . Una construcción natural de la función de dependencia viene dada por:

$$C^*(u_1, \dots, u_d) = \mathbb{P}(U_1 \leq u_1, \dots, U_d \leq u_d)$$

donde  $X = (X_1, \dots, X_d)^T$  es un vector aleatorio con  $\mathcal{L}(X) = P$  y  $U_i = \mathcal{F}(X_i, V_i)$  siendo  $\{V_i\}_{i=1}^d$  v.a.i.i.d.  $U(0, 1)$ . Notemos que  $C^*$  depende de la elección de las  $\{V_i\}_{i=1}^d$ . Veamos que esta construcción es válida:

$$C^*(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d)) = \mathbb{P}(U_1 \leq F_1(x_1), \dots, U_d \leq F_d(x_d)) = [\boxtimes]$$

Utilizando que  $F_i^{-1}(t) \leq x \Leftrightarrow t \leq F_i(x)$  y que  $X_i = F_i^{-1} \circ U_i$   $\mathbb{P}$ -c.s.

$$[\boxtimes] = \mathbb{P}(F_1^{-1} \circ U_1 \leq x_1, \dots, F_d^{-1} \circ U_d \leq x_d) = \quad (4)$$

$$= \mathbb{P}(X_1 \leq x_1, \dots, X_d \leq x_d) = F(x_1, \dots, x_d)$$

Si además suponemos que las funciones  $F_i$  son continuas, se puede probar que la función de dependencia es única y además coincide con la *función de estructura*, definida por:

$$D(u_1, \dots, u_d) = \mathbb{P}(F_1(X_1) \leq u_1, \dots, F_d(X_d) \leq u_d)$$

ya que si  $F_i$  es continua, entonces por construcción:

$$U_i = \mathcal{F}_i(X_i, V_i) = F_i(X_i-) = F_i(X_i)$$

**Definición 3.** Decimos que dos probabilidades  $P$  y  $Q$  tienen la misma estructura de dependencia si existe una función de dependencia común de  $P$  y  $Q$ . Equivalentemente, si:

$$C_X^* = C_Y^* \text{ para algunas v.a. } X, Y \text{ con } \mathcal{L}(X) = P, \mathcal{L}(Y) = Q \text{ (con la misma elección de } \{V_i\}_{i=1}^d)$$

**Teorema 2.** Sean  $P, Q \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , con funciones de distribución  $P$  y  $Q$ , respectivamente. Sean  $P_i, Q_i$ , sus distribuciones marginales, con funciones de distribución asociadas  $F_i$  y  $G_i$ , para cada  $i = 1, \dots, d$ . Sea  $X$  una variable aleatoria con  $\mathcal{L}(X) = P$ . Son equivalentes:

- (a)  $W_2^2(P, Q) = \sum_{i=1}^d W_2^2(P_i, Q_i)$
- (b)  $P, Q$  tienen la misma estructura de dependencia
- (c)  $(X, \bar{Y})$  es un emparejamiento óptimo, donde:

$$\bar{Y}_i = G_i^{-1} \circ \mathcal{F}_i(X_i, V_i)$$

siendo  $\{V_i\}_{i=1}^d$  i.i.d.  $U(0, 1)$  e independientes de las  $\{X_i\}_{i=1}^d$

- (d) Existe una variable aleatoria  $Y$ , con  $\mathcal{L}(Y) = Q$ , tal que  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_i$  para todo  $i = 1, \dots, d$ .

*Demostración.* La equivalencia  $a \Leftrightarrow d$  se deduce de la proposición [7].

■  $c \Rightarrow d$

Se deduce del teorema [1], ya que los pares  $(X_i, \bar{Y}_i)$  son emparejamientos óptimos y por tanto  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} \bar{Y}_i$  para todo  $i = 1, \dots, d$ .

■  $b \Rightarrow c$

Si  $P, Q$  tienen la misma estructura de dependencia, entonces existen variables aleatorias  $X, Y$  con  $\mathcal{L}(X) = P, \mathcal{L}(Y) = Q$  tales que si para cada  $i = 1, \dots, d$  denotamos:

$$U_i = \mathcal{F}_i(X_i, V_i) \quad \bar{U}_i = \mathcal{F}_i(Y_i, V_i)$$

entonces  $C_X^* = C_Y^*$ , es decir:

$$\mathbb{P}(U_1 \leq u_1, \dots, U_d \leq u_d) = \mathbb{P}(\bar{U}_1 \leq u_1, \dots, \bar{U}_d \leq u_d)$$

Por tanto,  $(U_1, \dots, U_d) \stackrel{d}{=} (\bar{U}_1, \dots, \bar{U}_d)$  y en consecuencia:

$$Y = (G_1^{-1} \circ \bar{U}_1, \dots, G_d^{-1} \circ \bar{U}_d) = (G_1^{-1} \circ U_1, \dots, G_d^{-1} \circ U_d) = \bar{Y}$$

Por tanto, sabemos que  $\mathcal{L}(\bar{Y}) = Q$ , y por el teorema [1] y la proposición [7] sabemos que  $(X, \bar{Y})$  es un emparejamiento óptimo.

■  $d \Rightarrow b$

Si  $\mathcal{L}(X) = P, \mathcal{L}(Y) = Q$  y además  $X_i \stackrel{S.O.}{\sim} Y_i$  para todo  $i = 1, \dots, d$ , por el teorema 1 sabemos que existen variables aleatorias  $U_1, \dots, U_d$  con distribución  $U(0, 1)$  y tales que:

$$X_i = F_i^{-1}(U_i) \quad Y_i = G_i^{-1}(U_i)$$

para cada  $i = 1, \dots, d$ . Sea  $C(u_1, \dots, u_d) = \mathbb{P}(U_1 \leq u_1, \dots, U_d \leq u_d)$ . Entonces, utilizando un razonamiento análogo al que hicimos en la igualdad (4), tenemos que:

$$F(x_1, \dots, x_d) = C(F_1(x_1), \dots, F_d(x_d))$$

$$G(x_1, \dots, x_d) = C(G_1(x_1), \dots, G_d(x_d))$$

Y por tanto  $P$  y  $Q$  tienen la misma estructura de dependencia. □

**Teorema 3.** Sea  $P \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ , y  $X$  un vector aleatorio con  $\mathcal{L}(X) = P$ . Si  $A$  es una matriz simétrica semidefinida positiva de tamaño  $d \times d$ , entonces  $(X, AX)$  es un emparejamiento óptimo.

*Demostración.* Como  $A$  es simétrica y semidefinida positiva, sabemos que existe una base ortonormal de autovectores  $\{e_i\}_{i=1}^d$  con autovalores correspondientes  $\{\lambda_i\}_{i=1}^d$  no negativos. Entonces:

$$X = \sum_{i=1}^d \langle X, e_i \rangle e_i$$

$$AX = \sum_{i=1}^d \langle AX, e_i \rangle e_i = \sum_{i=1}^d \lambda_i \langle X, e_i \rangle e_i$$

Por la proposición [4], sabemos que la distancia de Wasserstein es invariante por cambios de base, y por tanto la optimalidad de los emparejamientos se mantiene por cambios de base. Si denotamos por  $U$  la matriz de cambio de base cuyas columnas son  $\{e_i\}_{i=1}^d$ , se tiene que  $(X, AX)$  es un emparejamiento óptimo si y sólo si  $(U^T X, U^T AX)$  es un emparejamiento óptimo. Las distribuciones marginales en esta nueva base son:

$$U^T X = (\langle X, e_1 \rangle, \dots, \langle X, e_d \rangle)^T$$

$$U^T AX = (\langle AX, e_1 \rangle, \dots, \langle AX, e_d \rangle)^T = (\lambda_1 \langle X, e_1 \rangle, \dots, \lambda_d \langle X, e_d \rangle)^T$$

Como todos los autovalores son positivos, se cumple que  $\langle X, e_i \rangle \stackrel{S.Q.}{\sim} \langle AX, e_i \rangle$ , ya que dados  $\omega, \omega' \in \Omega$ :

$$\begin{aligned} & (\langle X(\omega), e_i \rangle - \langle X(\omega'), e_i \rangle) (\langle AX(\omega), e_i \rangle - \langle AX(\omega'), e_i \rangle) = \\ & = (\langle X(\omega), e_i \rangle - \langle X(\omega'), e_i \rangle) (\lambda_i \langle X(\omega), e_i \rangle - \lambda_i \langle X(\omega'), e_i \rangle) = \\ & = \lambda_i (\langle X(\omega), e_i \rangle - \langle X(\omega'), e_i \rangle)^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Por la proposición [7], sabemos que  $(U^T X, U^T AX)$  es un emparejamiento óptimo.  $\square$

### 2.3. Cota de Gelbrich

Antes de enunciar el siguiente resultado, recordemos que si  $X = (X_1, X_2, \dots, X_d)^T$  es un vector aleatorio con valores en  $\mathbb{R}^d$ , entonces su media es un vector  $m = (m_1, m_2, \dots, m_d)^T \in \mathbb{R}^d$  y su matriz de covarianzas es una matriz  $\Sigma$  de tamaño  $d \times d$ , que viene dada por:

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

Es una matriz simétrica, con todos los elementos de la diagonal no negativos, y que además será semidefinida positiva ya que si  $a \in \mathbb{R}^d$ , entonces  $a^T X$  es una variable aleatoria real que cumple que

$$\text{Var}(a^T X) = a^T \text{Var}(X) a = a^T \Sigma a \geq 0$$

Esto lo utilizaremos en la demostración del siguiente teorema, que es un caso particular del teorema 2.1 en [6].

**Teorema 4.** Sean  $P, Q$  probabilidades en  $\Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  con vectores de medias  $m_P, m_Q$ , y matrices de covarianza  $\Sigma_P, \Sigma_Q$ . Si  $\Sigma_P$  suponemos que es definida positiva, entonces:

$$W_2^2(P, Q) \geq \|m_P - m_Q\|^2 + \text{tr} \left( \Sigma_P + \Sigma_Q - 2(\Sigma_P^{1/2} \Sigma_Q \Sigma_P^{1/2})^{1/2} \right) \quad (5)$$

Además, la igualdad se da si y sólo si la aplicación  $T(x) = (m_Q - m_P) + Ax$  transporta  $P$  en  $Q$ , siendo  $A$  la matriz semidefinida positiva dada por

$$A = \Sigma_P^{-1/2} (\Sigma_P^{1/2} \Sigma_Q \Sigma_P^{1/2})^{1/2} \Sigma_P^{-1/2}$$

*Demostración.* Hemos visto que si  $P^*$  y  $Q^*$  son las probabilidades que quedan al centrar  $P$  y  $Q$ , entonces:

$$W_2^2(P, Q) = \|m_P - m_Q\|^2 + W_2^2(P^*, Q^*)$$

Podemos suponer entonces sin pérdida de generalidad  $m_P = m_Q = 0$ .

$A$  es una matriz simétrica y semidefinida positiva. Sabemos entonces que existe una base ortonormal  $\{e_k\}_{k=1}^d$  formada por autovectores de la matriz  $A$ . Sean  $\{\lambda_k\}_{k=1}^d$  los autovalores asociados a dichos autovectores. En primer lugar, se tiene que:

$$\text{tr} \left( (\Sigma_P^{1/2} \Sigma_Q \Sigma_P^{1/2})^{1/2} \right) = \text{tr}(\Sigma_P^{1/2} A \Sigma_P^{1/2}) = \text{tr}(A \Sigma_P) = \sum_{i=1}^d e_i^T (A \Sigma_P) e_i =$$

$$= \sum_{i=1}^d (\Sigma_P A e_i)^T \cdot e_i = \sum_{i=1}^d \lambda_i (\Sigma_P e_i)^T \cdot e_i = \sum_{i=1}^d \lambda_i (e_i^T \Sigma_P e_i) \quad (6)$$

Sean  $X, Y$  dos vectores aleatorios en  $\mathbb{R}^d$  tales que:

$$\mathcal{L}(X) = P \quad \mathcal{L}(Y) = Q \quad y \quad W_2^2(P, Q) = E(\|X - Y\|^2)$$

Si denotamos  $X_i = X^T e_i, Y_i = Y^T e_i$  para  $i = 1, 2, \dots, d$  tenemos que:

$$W_2^2(P, Q) = E(\|X - Y\|^2) = E\left(\sum_{i=1}^d (X_i - Y_i)^2\right) = \sum_{i=1}^d E(X_i - Y_i)^2$$

Para cada  $i = 1, 2, \dots, d$  sean  $\bar{X}_i, \bar{Y}_i$  variables aleatorias reales tales que:

$$\bar{X}_i \stackrel{d}{=} X_i \quad \bar{Y}_i \stackrel{d}{=} Y_i \quad y \quad W_2^2(\mathcal{L}(X_i), \mathcal{L}(Y_i)) = E(\|\bar{X}_i - \bar{Y}_i\|^2)$$

Si denotamos  $\sigma(X_i), \sigma(Y_i)$  a las desviaciones típicas de las variables  $X_i, Y_i$ , entonces tenemos las siguientes desigualdades:

$$\begin{aligned} W_2^2(P, Q) &= \sum_{i=1}^d E\left((X_i - Y_i)^2\right) \geq \sum_{i=1}^d W_2^2(\mathcal{L}(X_i), \mathcal{L}(Y_i)) = \sum_{i=1}^d E\left((\bar{X}_i - \bar{Y}_i)^2\right) \geq \quad (7) \\ &\geq \sum_{i=1}^d \left(E(\bar{X}_i^2)^{1/2} - E(\bar{Y}_i^2)^{1/2}\right)^2 = \sum_{i=1}^d \left(E(X_i^2)^{1/2} - E(Y_i^2)^{1/2}\right)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^d (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2 = \sum_{i=1}^d \left((e_i^T \Sigma_P e_i)^{1/2} - (e_i^T \Sigma_Q e_i)^{1/2}\right)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^d \left((e_i^T \Sigma_P e_i) + (e_i^T \Sigma_Q e_i) - 2(e_i^T \Sigma_P e_i)^{1/2}(e_i^T \Sigma_Q e_i)^{1/2}\right) \end{aligned}$$

donde la segunda desigualdad en (7) es consecuencia de la desigualdad de Holder:

$$E(X_i Y_i) \leq E(|X_i Y_i|) \leq E(X_i^2)^{1/2} E(Y_i^2)^{1/2}$$

Se tiene además que  $A \Sigma_P A = \Sigma_Q$ , por tanto:

$$e_i^T \Sigma_Q e_i = e_i^T A \Sigma_P A e_i = (A e_i)^T \Sigma_P (A e_i) = \lambda_i^2 (e_i^T \Sigma_P e_i)$$

Hemos probado entonces que:

$$\begin{aligned} W_2^2(P, Q) &\geq \sum_{i=1}^d (e_i^T \Sigma_P e_i) + \sum_{i=1}^d (e_i^T \Sigma_Q e_i) - 2 \sum_{i=1}^d \lambda_i (e_i^T \Sigma_P e_i) = \\ &= \text{tr}(\Sigma_P) + \text{tr}(\Sigma_Q) - 2 \text{tr}\left(\left(\Sigma_P^{1/2} \Sigma_Q \Sigma_P^{1/2}\right)^{1/2}\right) \end{aligned}$$

donde la última igualdad es consecuencia de la igualdad (6).

Veamos la segunda parte de la proposición. Para ello, notemos que la primera desigualdad en (7) es una igualdad si y sólo si:

$$W_2^2(\mathcal{L}(X_i), \mathcal{L}(Y_i)) = E\left((X_i - Y_i)^2\right) \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, d\}$$

Es decir, si y sólo si podemos asumir que  $\bar{X}_i \stackrel{c.s.}{=} X_i$  y  $\bar{Y}_i \stackrel{c.s.}{=} Y_i$ . La segunda desigualdad es una igualdad si y sólo si  $\bar{X}_i, \bar{Y}_i$  están relacionadas linealmente:  $\bar{Y}_i = \alpha_i \bar{X}_i$  para alguna constante  $\alpha_i > 0$ . En ese caso,

$$\begin{cases} \text{Var}(\bar{Y}_i) = \text{Var}(\alpha_i \bar{X}_i) = \alpha_i^2 \text{Var}(\bar{X}_i) = \alpha_i^2 (e_i^T \Sigma_P e_i) \\ \text{Var}(\bar{Y}_i) = e_i^T \Sigma_Q e_i = e_i^T A \Sigma_P A e_i = (A e_i)^T \Sigma_P (A e_i) = \lambda_i^2 (e_i^T \Sigma_P e_i) \end{cases}$$

Luego necesariamente  $\alpha_i = \lambda_i$  y por tanto si se dan las dos igualdades,

$$Y^T \cdot e_i = Y_i = \lambda_i X_i = \lambda_i X^T \cdot e_i = X^T A e_i \quad \forall i = 1, 2, \dots, d$$

y se tiene por tanto que  $Y^T = X^T A \Rightarrow Y = AX$ , es decir, la aplicación lineal de matriz A lleva la probabilidad  $P$  en  $Q$ .

Recíprocamente, si la aplicación lineal de matriz A lleva la probabilidad  $P$  en  $Q$ , si  $\mathcal{L}(X) = P$  se tiene que tomando  $Y = AX$ , entonces  $\mathcal{L}(Y) = Q$ , y por tanto para cada  $i = 1, \dots, n$ :

$$Y_i = Y^T e_i = (AX)^T e_i = X^T (A e_i) = \lambda_i X^T e_i = \lambda_i X_i$$

Luego  $X_i, Y_i$  están relacionadas linealmente y la segunda desigualdad es por tanto una igualdad. El hecho de que la primera desigualdad sea una igualdad es consecuencia de que los vectores  $X, Y = AX$ , escritos en la base dada por los autovectores de  $A$  tienen la misma estructura de dependencia, como vimos en la demostración del teorema [3]. Por lo visto en el teorema [2], sabemos que en esta situación:

$$W_2^2(P, Q) = \sum_{i=1}^d W_2^2(\mathcal{L}(X_i), \mathcal{L}(Y_i))$$

□

En particular, esto nos permite calcular de forma directa la distancia de Wasserstein en algunos casos sencillos, como cuando tenemos **distribuciones de una familia de localización y escala**. Recordemos que si  $X = (X_1, X_2, \dots, X_d)^T$  es un vector aleatorio con valores en  $\mathbb{R}^d$ , vector de medias  $m = (m_1, m_2, \dots, m_d)^T \in \mathbb{R}^d$  y matriz de covarianzas  $\Sigma$ , entonces si  $Z = AX + p$ , donde A es una matriz de tamaño  $d \times d$  y  $p \in \mathbb{R}^d$ , se cumplen las siguientes propiedades:

$$E(Z) = AE(X) + p \quad \text{Var}(Z) = A \Sigma A^T$$

**Definición 4.** Sea  $X_0$  un vector aleatorio con ley de probabilidad  $P_0 \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  absolutamente continua. La familia

$$\mathcal{F}(P_0) = \{\mathcal{L}(AX_0 + p) : A \in \mathbb{S}_{>0}^d, p \in \mathbb{R}^d\}$$

de leyes de probabilidad definidas por transformaciones definidas positivas de  $U_0$  se dice que es una familia de localización y escala.

Por supuesto, una familia de localización y escala  $\mathcal{F}(P_0)$  se puede parametrizar mediante los parámetros  $p$  y  $A$ . Si  $m_0$  y  $A_0$  son la media y la matriz de covarianzas de  $X_0$ , entonces la familia puede definirse a partir de la probabilidad:

$$P_0^* = \mathcal{L}(A_0^{-1/2}(P_0 - m_0))$$



que por los comentarios anteriores sabemos que tiene media 0 y matriz de covarianzas  $I_d$ . Esto nos permite parametrizar a la familia a través de la media y la matriz de covarianzas de las distribuciones, algo que asumiremos a partir de ahora. Con esta suposición, una ley de probabilidad de la familia  $\mathcal{F}(P_0)$  se denotará en términos de su media  $m$  y su matriz de covarianzas  $\Sigma$  por  $P_{m,\Sigma}$ .

La aplicación dada por  $T(x) = (m_2 - m_1) + Ax$ , siendo:

$$A = \Sigma_1^{-1/2} (\Sigma_1^{1/2} \Sigma_2 \Sigma_1^{1/2})^{1/2} \Sigma_1^{-1/2}$$

cumple que si  $X$  es un vector aleatorio con  $\mathcal{L}(X) = P_{m_1, \Sigma_1}$  entonces  $E(T(X)) = m_2$  y además:

$$\text{Var}(T(X)) = \left( \Sigma_1^{-1/2} (\Sigma_1^{1/2} \Sigma_2 \Sigma_1^{1/2})^{1/2} \Sigma_1^{-1/2} \right) \Sigma_1 \left( \Sigma_1^{-1/2} (\Sigma_1^{1/2} \Sigma_2 \Sigma_1^{1/2})^{1/2} \Sigma_1^{-1/2} \right)^T = \Sigma_2$$

Por tanto,  $T$  transporta la probabilidad  $\mathcal{L}(X) = P_{m_1, \Sigma_1}$  en la probabilidad  $\mathcal{L}(TX) = P_{m_2, \Sigma_2}$ , luego por el teorema [4] sabemos que:

$$\begin{aligned} W_2^2(P_{m_1, \Sigma_1}, P_{m_2, \Sigma_2}) &= \|m_1 - m_2\|^2 + \text{tr} \left( \Sigma_1 + \Sigma_2 - 2(\Sigma_1^{1/2} \Sigma_2 \Sigma_1^{1/2})^{1/2} \right) = \\ &= W_2^2(N(m_1, \Sigma_1), N(m_2, \Sigma_2)) \end{aligned} \quad (8)$$

La última igualdad se deduce del hecho de que la distancia sólo depende de los vectores de medias y las matrices de covarianzas de las distribuciones de la familia de localización y escala general, y de que sabemos que la familia de distribuciones normales  $d$ -dimensionales es un caso particular de familia de localización y escala.

## 2.4. Consecuencias de la cota de Gelbrich

De todo lo anterior, se pueden deducir los siguientes hechos:

- Razonando como en la demostración del teorema [4], tenemos que si  $X, Y$  son dos vectores aleatorios en  $\mathbb{R}^d$  con distribuciones  $P, Q$  centradas,  $\{e_k\}_{k=1}^d$  es una base ortonormal de  $\mathbb{R}^d$  y  $X_i = X^T \cdot e_i, Y_i = Y^T \cdot e_i$ , se tienen las desigualdades:

$$W_2^2(P, Q) \geq \sum_{i=1}^d W_2^2(\mathcal{L}(X_i), \mathcal{L}(Y_i)) \geq \sum_{i=1}^d (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2$$

que dependen de la base  $\{e_k\}_{k=1}^d$  que estamos considerando.

- La cota que nos da la segunda desigualdad tan sólo depende de las matrices de covarianzas  $\Sigma_P$  y  $\Sigma_Q$ , y de la base que estamos considerando. El mejor valor para la segunda de las cotas se obtiene en el caso en que como base  $\{e_k\}_{k=1}^d$  se toma la base de autovectores de la matriz:

$$A = \Sigma_P^{-1/2} (\Sigma_P^{1/2} \Sigma_Q \Sigma_P^{1/2})^{1/2} \Sigma_P^{-1/2}$$

ya que en ese caso se puede ver que la cota se alcanza. Si tenemos dos distribuciones Gaussianas centradas con matrices de covarianzas  $\Sigma_P$  y  $\Sigma_Q$ , en ese caso la aplicación  $T$  del teorema lleva una distribución en la otra, y en la demostración del teorema [4] se puede ver que en ese caso todas las desigualdades serán igualdades.

- Por otra parte, en el teorema [2] se prueba que la cota dada por la primera desigualdad:

$$W_2^2(P, Q) \geq \sum_{i=1}^d W_2^2(\mathcal{L}(X_i), \mathcal{L}(Y_i))$$

es una igualdad si y sólo si los vectores

$$X = (X_1, \dots, X_d)^T \quad Y = (Y_1, \dots, Y_d)^T$$

tienen la misma estructura de dependencia.

Veamos entonces qué ocurre en el caso particular en que estamos trabajando con distribuciones de una misma familia de localización y escala. Por el teorema [4], basta ver que ocurre cuando trabajamos con distribuciones normales.

- Sea  $\{e_k\}_{k=1}^d$  es una base ortonormal. Si  $X \stackrel{d}{\sim} N(0, \Sigma_1)$  y  $Y \stackrel{d}{\sim} N(0, \Sigma_2)$ , consideramos  $X_i = X^T \cdot e_i, Y_i = Y^T \cdot e_i$ . En esta situación:

$$W_2^2(X_i, Y_i) = (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2$$

ya que  $X_i, Y_i$  son distribuciones normales centradas con varianzas  $\sigma(X_i)^2, \sigma(Y_i)^2$ , y entonces sus funciones cuantiles asociadas son:

$$F^{-1}(t) = \sigma(X_i)\phi^{-1}(t)$$

$$G^{-1}(t) = \sigma(Y_i)\phi^{-1}(t)$$

siendo  $\phi^{-1}$  la función cuantil asociada a una  $N(0,1)$ . Por la caracterización de los emparejamiento óptimos en el caso unidimensional:

$$\begin{aligned} W_2^2(X_i, Y_i) &= \int_0^1 (F^{-1}(t) - G^{-1}(t))^2 dt = \int_0^1 (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2 \phi^{-1}(t)^2 dt = \\ &= (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2 \int_0^1 \phi^{-1}(t)^2 dt = (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2 \end{aligned}$$

- Por tanto, en la situación de antes:

$$W_2^2(N(0, \Sigma_1), N(0, \Sigma_2)) \geq \sum_{i=1}^d (\sigma(X_i) - \sigma(Y_i))^2$$

y la desigualdad es una igualdad si y sólo si los vectores aleatorios:

$$X = (X_1, \dots, X_d)^T \quad Y = (Y_1, \dots, Y_d)^T$$

tienen la misma estructura de dependencia.

Por otra parte, a partir de la distancia de Wasserstein, se puede definir de forma natural una distancia entre matrices de covarianzas definidas positivas. Dadas  $A = (a_{ij})_{i,j}$  y  $B = (b_{ij})_{i,j}$  dos matrices definidas positivas de tamaño  $d \times d$ , podemos definir una distancia entre ellas a partir de la distancia  $W_2$  entre las distribuciones normales centradas y con matrices de covarianzas  $A$  y  $B$ .

$$W_2(A, B) = W_2(N(0, A), N(0, B)) = \left( \text{tr}(A + B - 2(A^{1/2}BA^{1/2})^{1/2}) \right)^{1/2}$$

Esta distancia se conoce habitualmente como **distancia de Bures-Wasserstein**, y hereda todas las propiedades que hemos visto para  $W_2$ .

- Considerando la base canónica de  $\mathbb{R}^d$ , se tiene que:

$$W_2^2(A, B) \geq \sum_{i=1}^d (a_{ii}^{1/2} - b_{ii}^{1/2})^2$$

y la desigualdad es una igualdad si y sólo si las distribuciones  $N(0, A)$  y  $N(0, B)$  tienen la misma estructura de dependencia.

- Si además la matriz  $B$  es diagonal, se cumple que:

$$W_2^2(A, B) = \sum_{i=1}^d (a_{ii}^{1/2} - b_{ii}^{1/2})^2$$

si y sólo si  $A$  es diagonal. Para ver esto, consideramos dos vectores aleatorios:

$$X = (X_1, \dots, X_d) \stackrel{d}{\sim} N(0, A) \quad \text{con F.D. } F \text{ y F.D. marginales } F_i$$

$$Y = (Y_1, \dots, Y_d) \stackrel{d}{\sim} N(0, B) \quad \text{con F.D. } G \text{ y F.D. marginales } G_i$$

Como las distribuciones marginales son normales, sabemos que la función de dependencia es única, y viene dada por:

$$C_X(u_1, \dots, u_d) = \mathbb{P}(F_1(X_1) \leq u_1, \dots, F_d(X_d) \leq u_d)$$

$$C_Y(u_1, \dots, u_d) = \mathbb{P}(G_1(Y_1) \leq u_1, \dots, G_d(Y_d) \leq u_d)$$

Por tanto,  $N(0, A)$  y  $N(0, B)$  tienen la misma estructura de dependencia si y sólo si  $C_X$  y  $C_Y$  son iguales, o lo que es equivalente, si y sólo si:

$$(F_1(X_1), \dots, F_d(X_d)) \stackrel{d}{=} (G_1(Y_1), \dots, G_d(Y_d)) \quad (9)$$

Las distribuciones marginales de ambos vectores son  $U(0, 1)$ . Además, como  $Y \stackrel{d}{\sim} N(0, B)$  y  $B$  es diagonal, sabemos que las componentes de  $Y$  son independientes, y por tanto las componentes de  $(G_1(Y_1), \dots, G_d(Y_d))$  también lo son. Por tanto:

$$W_2^2(A, B) = \sum_{i=1}^d (a_{ii}^{1/2} - b_{ii}^{1/2})^2 \Leftrightarrow (F_1(X_1), \dots, F_d(X_d)) \stackrel{d}{\sim} U((0, 1)^d) \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \{F_i(X_i)\}_{i=1}^d \text{ son independientes} \Leftrightarrow \{X_i\}_{i=1}^d \text{ son independientes} \Leftrightarrow A \text{ es diagonal}$$

### 3. Baricentros en espacios de Wasserstein

Comenzamos introduciendo el concepto de media Fréchet. La idea de la media Fréchet consiste en dar un representante central de un conjunto de puntos de un espacio métrico. Más formalmente:

**Definición 5.** Sea  $(M, d)$  un espacio métrico, y tomamos  $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$  y unos pesos  $0 < \lambda_i \leq 1, i \in \{1, 2, \dots, n\}$  y  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$ . Para cada  $p \in M$ , definimos:

$$\Phi(p) = \sum_{i=1}^n \lambda_i d^2(p, x_i)$$

Si existe algún  $m \in M$  tal que  $\Phi(m)$  sea mínimo, entonces decimos que:

$$m = \operatorname{argmin}_{p \in M} \Phi(p) = \operatorname{argmin}_{p \in M} \sum_{i=1}^n \lambda_i d^2(p, x_i)$$

es una media Fréchet (o un baricentro) de  $x_1, x_2, \dots, x_n$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ .

La media Fréchet de un conjunto de puntos puede no ser única. Existen multitud medias Fréchet en distintos espacios métricos y con distintas distancias. Mostramos algunos ejemplos de medias Fréchet con pesos uniformes:

1. Tomamos  $M = \mathbb{R}^d$  con la distancia euclídea, la media Fréchet será entonces el mínimo de la función:

$$\Phi(p) = \sum_{i=1}^n \|p - x_i\|^2$$

que coincide con el valor de la media:

$$\frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

2. Cuando  $M = (0, \infty)$  y  $d(x, y) = |\log(x) - \log(y)|$ , buscamos  $p > 0$  que minimice la función:

$$\Phi(p) = \sum_{i=1}^n (\log(p) - \log(x_i))^2$$

El valor  $p$  que minimiza la función  $\Phi$  coincide con la media geométrica:

$$(x_1 x_2 \cdots x_n)^{1/n}$$

**Definición 6.** Dadas probabilidades  $P_1, P_2, \dots, P_n \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  y unos pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ , se dice que  $\bar{P} \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  es un baricentro de dichas probabilidades si es una media Fréchet de dichos puntos con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$  en el espacio  $\Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  utilizando la distancia de Wasserstein  $W_2$ .

Es decir, el baricentro de  $P_1, P_2, \dots, P_n \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ , si existe, será una probabilidad  $\bar{P} \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  que cumpla que:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i W_2^2(\bar{P}, P_i) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_i W_2^2(P, P_i) : P \in \Gamma_2 \right\}$$

$\bar{P}$  nos servirá como “representante” de las probabilidades  $P_1, P_2, \dots, P_n$ . El siguiente resultado nos afirma que el baricentro de un conjunto de probabilidades siempre existe, y además es único si imponemos condiciones adicionales.

**Proposición 8.** Dadas probabilidades  $P_1, P_2, \dots, P_n \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$ :

- Existe un baricentro de dichas probabilidades.
- Si además alguna de las probabilidades  $P_1, P_2, \dots, P_n$  da probabilidad nula a los conjuntos de dimensión  $d - 1$ , entonces el baricentro es único.

El cálculo del baricentro presenta en muchos casos grandes dificultades. En [2] se trata el problema de encontrar un el baricentro de un conjunto finito de probabilidades  $P_1, P_2, \dots, P_n \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  absolutamente continuas, con el objetivo de dar un método iterativo para aproximar el baricentro de un conjunto de probabilidades. En dicho trabajo se propone un método de cálculo efectivo del baricentro cuando estamos trabajando con familias de localización y escala, basado en el siguiente resultado:

**Teorema 5.** Si  $P_j = P_{m_j, \Sigma_j} \in \mathcal{F}(P_0), j = 1, 2, \dots, k$  donde  $P_0$  tiene densidad, está centrada y su matriz de covarianzas es  $I_d$ , entonces el baricentro de  $P_1, P_2, \dots, P_k$  con pesos  $\{\lambda_j\}_{j=1}^k$  es  $P_{m_0, \Sigma_0}$  siendo  $m_0 = \sum_{j=1}^k \lambda_j m_j$  y  $\Sigma_0$  la única solución definida positiva de la ecuación

$$S = \sum_{j=1}^k \lambda_j (S^{1/2} \Sigma_j S^{1/2})^{1/2}$$

Además, si  $S_0 \in \mathbb{S}_{>0}^d$  y definimos  $S_n$  por

$$S_{n+1} = S_n^{-1/2} \left( \sum_{j=1}^k \lambda_j (S_n^{1/2} \Sigma_j S_n^{1/2})^{1/2} \right)^2 S_n^{-1/2}, \quad n \geq 0$$

entonces  $\|S_n - \Sigma_0\| \rightarrow 0$  y se cumple que

$$\det(\Sigma_0)^{1/2d} \geq \sum_{j=1}^k \lambda_j \det(\Sigma_j)^{1/2d}$$

$$\text{tr}(S_n) \leq \text{tr}(S_{n+1}) \leq \text{tr}(\Sigma_0) \leq \sum_{j=1}^k \lambda_j \text{tr}(\Sigma_j)$$

dándose la igualdad en la última desigualdad si y sólo si  $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \dots = \Sigma_k$ .

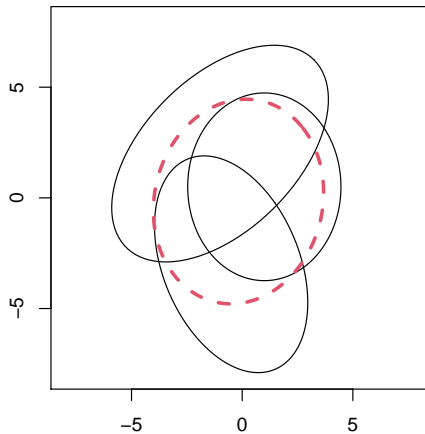
Veamos ahora un ejemplo de computación del baricentro para distribuciones Gaussianas en  $\mathbb{R}^2$ , con pesos uniformes, vectores de medias dados por:

$$m_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad m_2 = \begin{pmatrix} -1/2 \\ -3 \end{pmatrix} \quad m_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

y con matrices de covarianzas:

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \quad \Sigma_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \quad \Sigma_3 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Asociando cada una de las distribuciones a partir del elipsoide de confianza que contiene al 95% de la probabilidad, representamos en negro las tres distribuciones normales de las que partíamos, y en rojo el baricentro.



En [3] se introduce además una extensión de este concepto mediante la consideración de los baricentros recortados. Estos siguen la misma idea que los baricentros, pero aquí mediante un proceso de reasignación de los pesos, se permite descartar una parte de los datos que tenemos. La definición formal es:

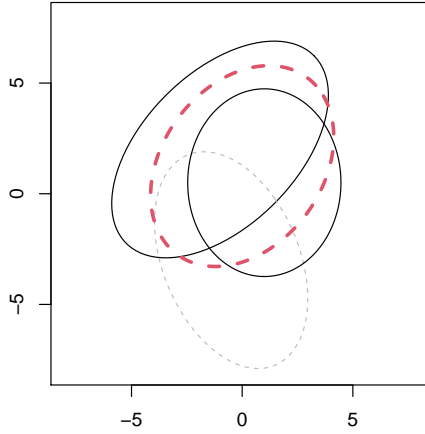
**Definición 7.** Un baricentro recortado de nivel  $\alpha$  de las probabilidades  $P_1, \dots, P_n$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$  es una probabilidad  $\bar{P} \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  para la que existen unos pesos  $\{\bar{\lambda}_i\}_{i=1}^n \in C_{\{\lambda_i\}_{i=1}^n}$ , donde

$$C_{\{\lambda_i\}_{i=1}^n} = \left\{ \{\lambda_i^*\}_{i=1}^n : 0 \leq \lambda_i^* \leq \frac{\lambda_i}{1-\alpha}, \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i^* = 1 \right\}$$

tal que para cada probabilidad  $P \in \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  y para cada  $\{\lambda_i^*\}_{i=1}^n \in C_{\{\lambda_i\}_{i=1}^n}$  se verifica

$$\sum_{i=1}^n \bar{\lambda}_i W_2^2(P_i, \bar{P}) \leq \sum_{i=1}^n \lambda_i^* W_2^2(P_i, P)$$

En el ejemplo anterior, el baricentro recortado de nivel  $\alpha = \frac{1}{3}$  da peso 0.5 a las dos distribuciones que aparecen en negro, y 0 a la que aparece en gris.



Finalmente, vamos a mencionar la existencia de los k-baricentros y k-baricentros recortados. Al igual que las k-medias son una generalización de la media, se pueden definir los k-baricentros como una extensión de los k-baricentros, y se puede incorporar el concepto de recorte al igual que para los baricentros. Mostramos únicamente su definición:

**Definición 8.** Un k-baricentro recortado de nivel  $\alpha$  de las probabilidades  $P_1, \dots, P_n$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$  es un conjunto de  $k$  probabilidades  $\{\bar{Q}_1, \dots, \bar{Q}_k\} \subset \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  para el que existen unos pesos  $\{\bar{\lambda}_i\}_{i=1}^n \in C_{\{\lambda_i\}_{i=1}^n}$ , donde

$$C_{\{\lambda_i\}_{i=1}^n} = \left\{ \{\lambda_i^*\}_{i=1}^n : 0 \leq \lambda_i^* \leq \frac{\lambda_i}{1-\alpha}, \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i^* = 1 \right\}$$

tal que para cada conjunto  $\{Q_1, \dots, Q_k\} \subset \Gamma_2(\mathbb{R}^d)$  y para cada  $\{\lambda_i^*\}_{i=1}^n \in C_{\{\lambda_i\}_{i=1}^n}$  se verifica

$$\sum_{i=1}^n \bar{\lambda}_i \min_{j=1, \dots, k} W_2^2(P_i, \bar{Q}_j) \leq \sum_{i=1}^n \lambda_i^* \min_{j=1, \dots, k} W_2^2(P_i, Q_j)$$

## 4. Cálculo diferencial con matrices

Los principales resultados del cálculo diferencial para funciones vectoriales  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  se pueden extender para funciones matriciales. Algunos ejemplos de funciones matriciales son:

- Funciones que llevan un escalar en una matriz:

$$F(\xi) = \begin{pmatrix} \xi & 0 \\ 0 & \xi^2 \end{pmatrix} \quad \xi \in \mathbb{R}$$

- Funciones que llevan un vector en una matriz:

$$F(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}' \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$$

- Funciones que llevan una matriz en una matriz:

$$F(X) = X' \quad X \in \mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$$

- Funciones que llevan una matriz en un escalar:

$$F(X) = \text{tr}(X) \quad X \in \mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$$

Para extender la teoría del cálculo diferencial a funciones matriciales, resulta clave el operador  $\text{vec}$ :

**Definición 9.** Dada una matriz  $A \in \mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$ , si denotamos por  $a_j$  a su columna  $j$ -ésima, se define:

$$\text{vec } A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{np}$$

Este operador nos da un isomorfismo, y nos permite trasladar la topología de  $\mathbb{R}^{np}$  a  $\mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$ . La topología inducida coincide con la dada por la norma:

$$\|A\| = \|\text{vec}(A)\|_2 \quad A \in \mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$$

En general, para desarrollar la teoría del cálculo diferencial sobre funciones matriciales, vamos a considerar que estamos trabajando con una función:

$$F : S \rightarrow \mathcal{M}_{m \times q}(\mathbb{R})$$

donde  $S$  va a ser un abierto de  $\mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$ . Los resultados para este tipo de funciones se deducen de forma inmediata a partir de los correspondientes para funciones vectoriales. A partir del operador  $\text{vec}$ , vamos a estudiar la diferenciabilidad de la función matricial  $F : S \rightarrow \mathcal{M}_{m \times q}(\mathbb{R})$  a partir de la función vectorial asociada:

$$f : \text{vec } S \rightarrow \mathbb{R}^{mq} \tag{10}$$

definida por  $f(\text{vec}(X)) = \text{vec}(F(X))$ . Por ejemplo, la definición de la diferenciabilidad de la función  $F$  en un punto  $C$  se puede comprobar que es equivalente a la diferenciabilidad de  $f$  en  $\text{vec}(C)$ .

**Definición 10.** Con la notación anterior, sea  $C \in S$ , y sea  $B(C, r) \subset S$ . Se dice que  $F$  es diferenciable en el punto  $C$  si existe una matriz  $A(C) \in \mathcal{M}_{mq \times np}(\mathbb{R})$  tal que:

$$\text{vec } F(C + U) = \text{vec } F(C) + A(C) \text{vec } U + r_C(U)$$

para toda  $U \in \mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$  con  $\|U\| < r$ , y además:

$$\lim_{U \rightarrow 0} \frac{r_C(U)}{\|U\|} = 0$$

Los principales resultados del cálculo diferencial de primer y segundo orden para este tipo de funciones aparecen en [15], y no son más que una reescritura adecuada de los principales resultados del cálculo diferencial para funciones vectoriales.

#### 4.1. Cálculo diferencial con matrices simétricas

La teoría que se desarrolla en [15] para el cálculo diferencial con matrices no nos va a servir cuando trabajamos con funciones definidas en  $\mathbb{S}^d$ , el espacio de matrices simétricas de dimensión  $d$ . El problema que nos encontramos es que  $\mathbb{S}^d$  no es un abierto de  $\mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ , luego no podemos estudiar la diferenciabilidad de funciones definidas sobre  $\mathbb{S}^d$  con las mismas definiciones y resultados.

En esta sección, vamos a realizar una adaptación de la teoría para el caso en que trabajamos con funciones matriciales definidas sobre  $\mathbb{S}^d$ . Nos centraremos únicamente en el caso de funciones con llegada a  $\mathbb{R}^n$ , que es el que nos va a ocupar más adelante. Es decir, vamos a estudiar funciones de la forma:

$$\Phi : \mathbb{S}^d \rightarrow \mathbb{R}^n$$

La idea para estudiar la diferenciabilidad de este tipo de funciones es bastante sencilla. En el cálculo diferencial con matrices generales,  $\mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R})$  vimos que era isomorfo a  $\mathbb{R}^{np}$ , y que la diferenciabilidad de una función  $F : \mathcal{M}_{n \times p}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{M}_{m \times q}(\mathbb{R})$  era equivalente a la diferenciabilidad de la función vectorial  $f : \mathbb{R}^{np} \rightarrow \mathbb{R}^{mq}$  dada por:

$$f(\text{vec } X) = \text{vec } F(X)$$

El espacio de matrices simétricas  $\mathbb{S}^d$  es isomorfo a  $\mathbb{R}^{d(d+1)/2}$ . A cada matriz  $X \in \mathbb{S}^d$  se le asigna un único vector de  $\mathbb{R}^{d(d+1)/2}$  a partir de la aplicación que envía a una matriz en el vector que contiene todos los elementos de la submatriz triangular inferior, ordenados por columnas. Es decir, si  $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$ , se define:

$$\text{vech}(A) = \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{d1} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{d2} \\ a_{33} \\ \vdots \\ a_{dd} \end{pmatrix}$$

El isomorfismo dado por el operador  $\text{vech}$  induce una topología en  $\mathbb{S}^d$ , que coincide con la topología inducida por la norma:

$$\|A\| = \|\text{vech}(A)\|_2 \quad A \in \mathbb{S}^d$$

La forma natural de definir la diferenciabilidad de una función  $\Phi : \mathbb{S}^d \rightarrow \mathbb{R}^n$  es a partir de la función:

$$\phi : \mathbb{R}^{d(d+1)/2} \rightarrow \mathbb{R}^n$$

definida por  $\phi(\text{vech } X) = \Phi(X)$ . De forma más general, vamos a enunciar los resultados para funciones:

$$\Phi : S \rightarrow \mathbb{R}^n$$



donde  $S$  es un abierto de  $\mathbb{S}^d$ , y la diferenciabilidad para este tipo de funciones se definirá a partir de la diferenciabilidad de la función:

$$\phi : \text{vech}(S) \rightarrow \mathbb{R}^n$$

definida de nuevo a partir de la igualdad  $\phi(\text{vech } X) = \Phi(X)$ .

**Definición 11.** Con la notación anterior, sea  $C \in S$ , y sea  $B(C, r) \subset S$ . Se dice que  $\Phi$  es diferenciable en el punto  $C$  si existe una matriz una matriz  $A(C) \in \mathcal{M}_{n \times \frac{d(d+1)}{2}}(\mathbb{R})$  tal que:

$$\Phi(C + U) = \Phi(C) + A(C) \text{vech } U + r_C(U)$$

para toda  $U \in \mathbb{S}^d$  con  $\|U\| < r$ , y además:

$$\lim_{U \rightarrow 0} \frac{r_C(U)}{\|U\|} = 0$$

De la definición, se deduce que la diferenciabilidad de  $\Phi$  es equivalente a la diferenciabilidad de  $\phi$ , y que la matriz  $A(C)$  que aparece en la definición es única, y se dice que es la *derivada de  $\Phi$  en  $C$* .

Se define entonces la *diferencial de  $\Phi$  en  $C$*  como la aplicación lineal  $d\Phi(C; \cdot) : \mathbb{S}^d \rightarrow \mathbb{R}^n$  dada por:

$$d\Phi(C; U) = d\phi(\text{vech } C; \text{vech } U) = A(C) \text{vech } U$$

y el vector  $d\Phi(C; U) \in \mathbb{R}^n$  es la *diferencial de  $F$  en  $C$  con incremento  $U$* . Con estas definiciones, todas los resultados conocidos para funciones vectoriales, se pueden generalizar de forma directa para la función  $\Phi$  a través de  $\phi$ .

Si  $\Phi = (\Phi_1, \dots, \Phi_n)$  es diferenciable, entonces  $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_n)$  es diferenciable y las derivadas parciales de  $\phi$  existen. Se define entonces la matriz Jacobiana o matriz de derivadas parciales de  $\Phi$  en  $C$  a partir de  $\phi$  mediante:

$$\nabla\Phi(C) = \nabla\phi(\text{vech } C) = \left. \frac{\partial(\phi_1, \dots, \phi_n)}{\partial(x_1, \dots, x_{d(d+1)/2})} \right|_{\text{vech } C}$$

$\nabla\Phi(C)$  es una matriz  $n \times \frac{d(d+1)}{2}$ , cuyo elemento  $(i, j)$  es la derivada parcial de la  $i$ -ésima componente de  $\Phi(X)$  respecto de la  $j$ -ésima componente de  $\text{vech}(X)$ . Veamos como se relaciona con la diferencial:

**Teorema 6.** Si  $\Phi$  es diferenciable en  $C$ , las derivadas parciales de  $\Phi(X)$  respecto de las componentes de  $\text{vech}(X)$  existen, y la derivada de  $\Phi$  en  $C$  coincide con la matriz jacobiana  $\nabla\Phi(C)$ , es decir:

$$d\Phi(C; U) = \nabla\Phi(C) \text{vech } U$$

*Demostración.* Si  $\Phi$  es diferenciable en  $C$ , entonces  $\phi$  es diferenciable en  $\text{vech } C$ , y sabemos por tanto que todas las derivadas parciales existen, y la matriz jacobiana  $\nabla\phi(\text{vech } C)$  coincide con la derivada de  $\phi$  en  $\text{vech } C$ . El resultado es consecuencia de las definiciones de la derivada y el jacobiano de  $\Phi$  en  $C$ . □

El recíproco no tiene por qué cumplirse. La existencia de todas las derivadas parciales de  $\Phi(X)$  respecto de las componentes de  $\text{vech}(X)$  en un punto no implica la diferenciabilidad de  $\Phi$  en ese punto. Sin embargo, esto sí se cumple si pedimos condiciones adicionales:

**Teorema 7.** Sea  $C \in S$ . Si todas las derivadas parciales de  $\Phi(X)$  respecto  $\text{vech}(X)$  existen en alguna bola  $B(C, r) \subset S$  y son continuas en  $C$ , entonces  $\Phi$  es diferenciable en  $C$ .

Vamos ahora a estudiar la regla de la cadena cuando estamos trabajando con funciones matriciales, que es consecuencia directa del mismo resultado para funciones vectoriales.

**Teorema 8.** Sea  $\Phi : S \rightarrow \mathbb{R}^n$  una función diferenciable en un punto  $C$  de  $S$ . Sea  $T \subset \mathbb{R}^n$  tal que  $\Phi(S) \subset T$ , y sea  $g : T \rightarrow \mathbb{R}^p$  una función diferenciable en  $F(C) \in T$ . Entonces la función compuesta  $H : S \rightarrow \mathbb{R}^p$  dada por:

$$H(X) = g(\Phi(X))$$

es diferenciable en  $C$ , y cumple que:

$$\nabla H(C) = \nabla g(\Phi(C)) \nabla \Phi(C)$$

*Demostración.* Por definición,  $H$  es diferenciable si y sólo si lo es la función  $h : \text{vech}(S) \rightarrow \mathbb{R}^p$  dada por:

$$h(\text{vech } X) = H(X) = (g \circ \Phi)(X) = g(\Phi(X)) = g(\phi(\text{vech } X)) = (g \circ \phi)(\text{vech } X)$$

Como  $\Phi$  es diferenciable en  $C$ , entonces sabemos que  $\phi$  es diferenciable en  $\text{vech } C$  y por definición  $\nabla \Phi(C) = \nabla \phi(\text{vech } C)$ . Por tanto, aplicando la regla de la cadena en el caso vectorial:

$$\nabla H(C) = \nabla h(\text{vech } C) = \nabla(g \circ \phi)(\text{vech } C) = \nabla g(\phi(\text{vech } C)) \nabla \phi(\text{vech } C) = \nabla g(\Phi(C)) \nabla \Phi(C)$$

□

Si escribimos el resultado en términos de los incrementos, tenemos la siguiente propiedad:

**Corolario 3.** En la situación del teorema anterior, la diferencial de  $H$  en  $C$  con incremento  $U$  viene dada por:

$$dH(C; U) = dg(\Phi(C); d\Phi(C; U))$$

Al igual que para la primera diferencial, la extensión de la segunda diferencial para funciones matriciales se realiza a partir de la teoría para funciones vectoriales. Recordemos la definición de una función dos veces diferenciable en un punto en el caso vectorial.

**Definición 12.** Sea  $g : U \rightarrow \mathbb{R}^m$  una función definida en un conjunto  $U \subset \mathbb{R}^n$ , y  $c$  un punto interior de  $U$ . Si  $g$  es diferenciable en un entorno de  $c$  y todas las derivadas parciales son diferenciables en  $c$ , entonces decimos que  $g$  es dos veces diferenciable en  $c$ .

Con la notación de esta sección, diremos que  $\Phi$  es dos veces diferenciable en  $C$  si  $\phi$  es dos veces diferenciable en  $\text{vech } C$ . Si  $\Phi$  es dos veces diferenciable en  $C$ , definimos entonces la matriz Hessiana de  $\Phi$  a partir de la matriz Hessiana de  $\phi$ , mediante la relación:

$$\nabla^2 \Phi(C) = \nabla^2 \phi(\text{vech } C)$$

Esta es una matriz de tamaño  $n \frac{d(d+1)}{2} \times \frac{d(d+1)}{2}$ , que contiene las  $n$  matrices Hessianas de las funciones componentes  $\Phi_i$  en la forma siguiente:

$$\nabla^2 \Phi(C) = \begin{pmatrix} \nabla^2 \Phi_1(C) \\ \vdots \\ \nabla^2 \Phi_n(C) \end{pmatrix}$$

Cada una de las matrices  $\nabla^2 \Phi_i(C)$  es de tamaño  $\frac{d(d+1)}{2} \times \frac{d(d+1)}{2}$ , y el elemento  $(s, t)$  de la matriz contiene la derivada parcial de segundo orden de  $\Phi_i(X)$  con respecto de los elementos  $s$  y  $t$  de  $\text{vech } X$ ,

evaluada en  $X = C$ . Además, si  $\Phi$  es dos veces diferenciable, cada una de las matrices  $\nabla^2\Phi_i(C)$  es simétrica.

Veamos cómo se define entonces la segunda diferencial de  $\Phi$ .

**Definición 13.** Con la notación de esta sección, supongamos que  $C \in S$ , y que  $\Phi$  es diferenciable en todos los puntos de una bola  $B(C, r) \subset S$ . Sea  $U \in \mathbb{S}^d$ , y sea  $G : B(C, r) \rightarrow \mathbb{R}^n$  la función definida por:

$$G(X) = d\Phi(X; U)$$

Si  $G$  es diferenciable en  $C$ , se define la segunda diferencial de  $\Phi$  en  $C$  con incremento  $U$  por:

$$d^2\Phi(C; U) := dG(C; U)$$

Se puede comprobar que si  $\Phi$  es dos veces diferenciable en  $C$ , entonces la segunda diferencial existe. Dado que las diferenciales de  $\Phi$  y  $\phi$  están relacionadas por:

$$d\Phi(C; U) = d\phi(\text{vech } C; \text{vech } U)$$

Las segundas diferenciales están relacionadas por:

$$d^2\Phi(C; U) = d^2\phi(\text{vech } C; \text{vech } U)$$

Veamos ahora la relación existente entre la matriz Hessiana y la segunda diferencial de  $\Phi$ .

**Teorema 9.** Sea  $\Phi$  una función definida en  $S$ , y dos veces diferenciable en un punto  $C$ . Entonces:

$$d^2\Phi(C; U) = (I_n \otimes \text{vech } U)' \nabla^2\Phi(C) \text{vech } U$$

donde  $\otimes$  denota el producto de Kroneker.

*Demostración.* Sabemos que  $\phi : \text{vech}(S) \rightarrow \mathbb{R}^n$  es dos veces diferenciable en  $C$ . Por la teoría para funciones vectoriales:

$$d^2\phi(\text{vech } C; \text{vech } U) = (I_n \otimes \text{vech } U)' \nabla^2\phi(\text{vech } C) \text{vech } U$$

y por tanto:

$$d^2\Phi(C; U) = (I_n \otimes \text{vech } U)' \nabla^2\Phi(C) \text{vech } U$$

□

Cuando tenemos funciones dos veces diferenciables, la fórmula de Taylor nos permite obtener aproximaciones de grado 2 al valor de la función.

**Teorema 10.** Sea  $\Phi$  una función definida en un abierto  $S \subset \mathbb{S}^d$ , y  $C$  un punto de  $S$  con  $B(C, r) \subset S$ . Si  $\Phi$  es dos veces diferenciable en  $C$ , entonces:

$$\Phi(C + U) = \Phi(C) + d\Phi(C; U) + \frac{1}{2}d^2\Phi(C; U) + r_C(U)$$

para toda  $U \in \mathbb{S}^d$ ,  $\|U\| < r$ , donde:

$$\lim_{U \rightarrow 0} \frac{r_C(U)}{\|U\|^2} = 0$$

Finalmente, vamos a ver la regla de la cadena para la segunda diferencial:

**Teorema 11.** Sea  $\Phi : S \rightarrow \mathbb{R}^n$  una función definida en un abierto  $S \subset \mathbb{S}^d$ , y dos veces diferenciable en un punto  $C$  de  $S$ . Sea  $T \subset \mathbb{R}^n$  tal que  $\Phi(S) \subset T$ , y sea  $g : T \rightarrow \mathbb{R}^p$  una función dos veces diferenciable en  $\Phi(C) \in T$ . Entonces la función compuesta  $H : S \rightarrow \mathbb{R}^p$  dada por:

$$H(X) = g(\Phi(X))$$

es dos veces diferenciable en  $C$ , y cumple que:

$$\nabla^2 H(C) = (I_p \otimes \nabla \Phi(C))' (\nabla^2 g(\Phi(C))) \nabla \Phi(C) + \left( \nabla g(\Phi(C)) \otimes I_{\frac{d(d+1)}{2}} \right) \nabla^2 \Phi(C)$$

Si lo escribimos en términos de las diferenciales segundas, tenemos el siguiente corolario:

**Corolario 4.** En la situación del teorema anterior, la segunda diferencial de  $H$  en  $C$  con incremento  $U$  viene dada por:

$$d^2 H(C; U) = d^2 g(\Phi(C); d\Phi(C; U)) + dg(\Phi(C); d^2 \Phi(C; U))$$

## 4.2. Notación alternativa

A priori, la forma más razonable de extender la teoría del cálculo diferencial a funciones:

$$\Phi : S \rightarrow \mathbb{R}^n$$

donde  $S$  es un abierto de  $\mathbb{S}^d$ , es utilizando el operador *vech*. Sin embargo, en muchos casos prácticos puede resultar más útil trabajar con el operador *vec*. La siguiente proposición nos da una alternativa para plantear la diferenciabilidad de  $\Phi$ .

**Proposición 9.** Son equivalentes:

1.  $\Phi$  es diferenciable en  $C$ .
2. Existe una matriz una matriz  $\bar{A}(C) \in \mathcal{M}_{n \times d^2}$  tal que:

$$\Phi(C + U) = \Phi(C) + \bar{A}(C) \text{vec } U + r_C(U)$$

para toda matriz  $U$  en un entorno de  $C$  en  $S$ , y además:

$$\lim_{U \rightarrow 0} \frac{r_C(U)}{\|U\|} = 0$$

Además, si se verifican las equivalencias, necesariamente:

$$d\Phi(C : U) = \nabla \Phi(C) \text{vech } U = \bar{A}(C) \text{vec } U$$

En ocasiones, va a ser más cómodo trabajar con  $\bar{A}(C)$  que con  $\nabla \Phi(C)$ , que recordemos que se definía como el jacobiano de  $\phi(\text{vech } X) = \Phi(X)$ . El problema ahora es que la matriz  $\bar{A}(C)$  que aparece en la segunda equivalencia no es única. Sin embargo, si exigimos que cada una de las filas sea de la forma  $\text{vec}(X)^T$ , con  $X$  una matriz simétrica, si que lo va a ser.

Vamos a explicar en un ejemplo sencillo cómo calcular la matriz  $\bar{A}(C)$  que cumpla dicha condición de unicidad.

**Ejemplo:** Consideramos la función  $\Phi : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  dada por:

$$\Phi \left( \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \right) = a^2 b + 2b^3 + c$$

Se define entonces la función  $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  dada por:

$$\phi(a, b, c) = a^2b + 2b^3 + c$$

y se tiene que:

$$\nabla\Phi \left( \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \right) = \nabla\phi \left( \text{vech} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \right) = \nabla\phi(a, b, c) = (2ab, 6b^2 + a^2, 1)$$

Para hallar la matriz  $\bar{A}(C)$ , hacemos:

$$\begin{aligned} \nabla\Phi(C) &= (2ab, 6b^2 + a^2, 1) \xrightarrow{\text{vech}^{-1} \circ T} \begin{bmatrix} 2ab & 6b^2 + a^2 \\ 6b^2 + a^2 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{offdiag}} \\ &\xrightarrow{\text{offdiag}} \begin{bmatrix} 2ab & 3b^2 + \frac{a^2}{2} \\ 3b^2 + \frac{a^2}{2} + a^2 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{T \circ \text{vec}} (2ab, 3b^2 + \frac{a^2}{2}, 3b^2 + \frac{a^2}{2} + a^2, 1) = \bar{A}(C) \end{aligned}$$

donde  $T$  es la aplicación que envía una matriz en su traspuesta,  $\text{vech}^{-1}$  y  $\text{vec}^{-1}$  son las aplicaciones inversas de  $\text{vech}$  y  $\text{vec}$ , y  $\text{offdiag}$  es la aplicación que envía una matriz simétrica  $A$  en la misma matriz, pero con elementos no diagonales divididos entre 2. Si  $\Phi$  tuviera varias componentes, para hallar  $A(C)$  tendríamos que hacer este proceso para cada una de las filas de  $\nabla\Phi(C)$ .

Además, vemos que si:

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{12} & u_{22} \end{bmatrix}$$

entonces se cumple la relación:

$$\begin{aligned} d\Phi(C; U) &= \nabla\Phi(C) \text{vech} U = (2ab, 6b^2 + a^2, 1) \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{22} \end{pmatrix} = \\ &= (2ab, 3b^2 + \frac{a^2}{2}, 3b^2 + \frac{a^2}{2} + a^2, 1) \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{12} \\ u_{22} \end{pmatrix} = \bar{A}(C) \text{vec} U \end{aligned}$$

Vamos ahora a dar una notación específica para el caso en que estamos trabajando con una función real  $\Phi : S \rightarrow \mathbb{R}$ , siendo  $S$  un abierto de  $\mathbb{S}^d$ . Si  $\Phi$  es diferenciable, entonces la matriz  $\bar{A}(C)$  hallada imponiendo la condición de unicidad es un vector fila de tamaño  $d^2$ , tal que la matriz  $\text{vec}^{-1}(\bar{A}(C)^T)$  es una matriz simétrica de tamaño  $d \times d$ . Denotamos por  $D\Phi(C)$  a dicha matriz, que llamaremos **matriz diferencial de  $\Phi$  en  $C$** , teniendo en cuenta que se está produciendo un abuso de notación. En este caso, se tiene que:

$$d\Phi(C; U) = \nabla\Phi(C) \text{vech} U = \bar{A}(C) \text{vec} U = \text{tr}(D\Phi(C)U)$$

Además, esta matriz cumple una propiedad interesante, que nos va a permitir calcularla de forma sencilla. Si  $\Phi$  es diferenciable, las derivadas parciales existen, y cumplen la siguiente relación:

$$D\Phi(C) = \begin{pmatrix} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,1}} & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,2}} & \cdots & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,d}} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,2}} & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,2}} & \cdots & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,d}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,d}} & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,d}} & \cdots & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{d,d}} \end{pmatrix} \quad (11)$$

ya que podemos hallar  $\bar{A}(C)$  haciendo:

$$\begin{aligned} \nabla\Phi(C) = \nabla\phi(\text{vech}(C)) &= \left( \frac{\partial\Phi}{\partial x_{11}}, \dots, \frac{\partial\Phi}{\partial x_{d1}}, \frac{\partial\Phi}{\partial x_{22}}, \dots, \frac{\partial\Phi}{\partial x_{d2}}, \frac{\partial\Phi}{\partial x_{33}}, \dots, \frac{\partial\Phi}{\partial x_{dd}} \right) \xrightarrow{\text{vech}^{-1} \circ T} \\ &\xrightarrow{\text{vech}^{-1} \circ T} \begin{pmatrix} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,2}} & \dots & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,d}} \\ \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,2}} & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,2}} & \dots & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,d}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,d}} & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,d}} & \dots & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{d,d}} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{offdiag}} \\ &\xrightarrow{\text{offdiag}} \begin{pmatrix} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,1}} & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,2}} & \dots & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,d}} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,2}} & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,2}} & \dots & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,d}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{1,d}} & \frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial x_{2,d}} & \dots & \frac{\partial\Phi}{\partial x_{d,d}} \end{pmatrix} \xrightarrow{T \circ \text{vec}} \bar{A}(C) \end{aligned}$$

y por tanto  $D\Phi(C) = \text{vec}^{-1} \bar{A}(C)^T$  es de la forma indicada.

### 4.3. Cálculo diferencial con funciones espectrales

En esta sección vamos a centrarnos en el cálculo diferencial para funciones  $F$  que dependen de una matriz simétrica y que son invariantes bajo transformaciones ortogonales. Es decir, vamos a estudiar entonces funciones  $F$  definidas en  $\mathbb{S}^d$  que verifican:

$$F(U^T A U) = F(A) \quad \forall A \in \mathbb{S}^d, \quad \forall U \text{ ortogonal}$$

Cada función de este tipo se puede descomponer como:

$$F(A) = (f \circ \Lambda)(A)$$

donde  $\Lambda$  es la función que envía a la matriz  $A$  en sus autovalores, y  $f$  es una función simétrica, es decir, que verifica:

$$f(x) = f(Px) \quad \forall x \in \mathbb{R}^d \quad \forall P \text{ matriz de permutación}$$

Las funciones  $F$  que cumplen estas propiedades se llaman funciones espectrales. La diferencial primera de este tipo de funciones se estudia en [13], y viene caracterizada por el siguiente resultado:

**Teorema 12.** *Sea  $A \in \mathbb{S}^d$ , y supongamos que  $\Lambda(A)$  está en el dominio de la función simétrica  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ . Entonces  $f$  es diferenciable en  $\Lambda(A)$  si y sólo si  $F = f \circ \Lambda$  es diferenciable en  $A$ . En este caso, se tiene que la matriz diferencial de  $F$  viene dada por:*

$$D(f \circ \Lambda)(A) = U \text{diag}(\nabla f(\Lambda(A))) U^T$$

siendo  $U$  la matriz ortogonal tal que  $A = U \text{diag}(\Lambda(A)) U^T$ , y  $\text{diag}()$  la aplicación que envía a un vector en la matriz diagonal dada por ese vector.

Para el cálculo de la segunda diferencial, utilizamos el siguiente resultado, que aparece en [14].

**Teorema 13.** *Sea  $A \in \mathbb{S}$ , y supongamos que  $\Lambda(A)$  está en el dominio de la función simétrica  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Entonces  $f$  es dos veces diferenciable en  $\Lambda(A)$  si y sólo si  $f \circ \Lambda$  es dos veces diferenciable en  $A$ , y en ese caso se tiene que:*

$$d^2(f \circ \Lambda)(A; H) = \text{diag}(\bar{H})^T (\nabla^2 f(\Lambda(A))) \text{diag}(\bar{H}) + \text{tr}(\mathcal{A}(H \odot H))$$

donde  $\odot$  denota el producto de Hadamard elemento a elemento de matrices,  $U$  es una matriz ortogonal tal que  $A = U(\text{diag}(\Lambda(A)))U^T$ ,  $\bar{H} = U^T H U$  y  $\mathcal{A}$  es la matriz definida por:

$$\mathcal{A}_{i,j} = \begin{cases} 0 & si \quad i = j \\ f''_{ii}(\Lambda(A)) - f''_{ij}(\Lambda(A)) & si \quad i \neq j, \lambda_i = \lambda_j \\ \frac{f'_i(\Lambda(A)) - f'_j(\Lambda(A))}{\lambda_i - \lambda_j} & si \quad i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j \end{cases}$$

## 5. Medida de diagonalidad

Utilizando ideas relacionadas con la distancia de Wasserstein, en esta sección vamos a proponer una medida de aproximación a la diagonalidad de una matriz simétrica definida positiva, y vamos a estudiar su comportamiento asintótico en el caso en que estamos trabajando con distribuciones Gaussianas.

### 5.1. Definición de la medida

La idea de la medida que vamos a proponer a continuación se basa en las consecuencias que obtuvimos de la cota de Gelbrich. Dadas dos matrices  $A = (a_{ij})_{i,j}$  y  $B = (b_{ij})_{i,j} \in \mathbb{S}_{>0}^d$ , vimos que:

$$W_2^2(A, B) \geq \sum_{i=1}^d (a_i^{1/2} - b_i^{1/2})^2 \quad (12)$$

y se da la igualdad si y sólo si las distribuciones  $N(0, A)$  y  $N(0, B)$  tienen la misma estructura de dependencia. En particular, hemos visto que si  $B$  es una matriz diagonal, entonces la igualdad se da si y sólo si  $A$  también es diagonal. Supongamos que tenemos una matriz de covarianzas  $\Sigma \in \mathbb{S}_{>0}^d$  dada por:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & * & \cdots & * \\ * & \sigma_2 & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \cdots & \sigma_d \end{pmatrix}$$

Sea  $D_\Sigma$  es la matriz que resulta al quedarnos con la diagonal de  $\Sigma$ :

$$D_\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_d \end{pmatrix}$$

Y sea  $\Lambda = U^T \Sigma U$  es la matriz de autovalores que resulta de escribir  $\Sigma$  en la base en que diagonaliza, y viene dada por:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_d \end{pmatrix}$$

Vamos a utilizar la siguiente notación para denotar a la suma de las raíces de los elementos diagonales, en la base dada y en la base en la que diagonaliza la matriz  $\Sigma$ :

$$\lambda(\Sigma) = \sum_{i=1}^d \lambda_i^{1/2} = \text{tr}(\Sigma^{1/2})$$

$$\sigma(\Sigma) = \sum_{i=1}^d \sigma_i^{1/2} = \text{tr}(D_\Sigma^{1/2})$$

Con esta notación,  $\sigma(\Sigma)$  se corresponde con la suma de las desviaciones típicas de las distribuciones marginales de la distribución  $N(0, \Sigma)$ , mientras que  $\lambda(\Sigma)$  se corresponde con la suma de las desviaciones típicas de dicha distribución escrita en la base de autovectores de  $\Sigma$ .

Calculamos la distancia de Wasserstein a la distribución isotrópica  $p^2 I$ , para algún  $p > 0$ , que es una distribución que se escribe igual en todas las bases, y por tanto va a ser diagonal en todas las bases. Por la proposición [4] y la propiedad (12) se cumple que:

$$\begin{aligned} W_2^2(\Sigma, p^2 I) &= W_2^2(U \Lambda U^T, U p^2 I U^T) = W_2^2(\Lambda, p^2 I) = \\ &= \sum_{i=1}^d (\lambda_i^{1/2} - p)^2 \end{aligned}$$

y de nuevo por la propiedad (12) deducimos que:

$$\sum_{i=1}^d (\lambda_i^{1/2} - p)^2 = W_2^2(\Sigma, p^2 I) \geq \sum_{i=1}^d (\sigma_i^{1/2} - p)^2$$

y la igualdad se da si y sólo si  $\Sigma$  es diagonal. Desarrollando ambas expresiones, tenemos que:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\Sigma) + p^2 d - 2p\lambda(\Sigma) &\geq \text{tr}(\Sigma) + p^2 d - 2p\sigma(\Sigma) \quad \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \lambda(\Sigma) &\leq \sigma(\Sigma) \end{aligned}$$

y sabemos que dicha desigualdad es una igualdad si y sólo si la matriz  $\Sigma$  es diagonal. Con esta idea, vamos a definir una medida de diagonalidad  $\mathcal{D}$  tal que si:

$$\Sigma = U \Lambda U^T \quad \Sigma^* = V \Lambda V^T$$

son dos formas de escribir la matriz  $\Lambda$  diagonal en distintas bases, entonces:

$$\mathcal{D}(\Sigma) \geq \mathcal{D}(\Sigma^*) \Leftrightarrow \sigma(\Sigma) \leq \sigma(\Sigma^*)$$

y por tanto, el mejor valor de esta medida de diagonalización se alcanzará únicamente cuando tomamos la base de autovectores de la matriz  $\Sigma$ . Buscamos una normalización adecuada que nos permita definir una medida de diagonalización coherente. Para ello, vamos a utilizar la relación entre  $\|\cdot\|_1$  y  $\|\cdot\|_2$  de  $\mathbb{R}^d$ :

$$\sqrt{x_1^2 + \dots + x_d^2} \leq |x_1| + \dots + |x_d|$$

Sabemos que la desigualdad es estricta si existen dos índices  $i, j$  con  $i \neq j$  y tales que  $x_i \neq 0$  y  $x_j \neq 0$ . Aplicando esta desigualdad al vector  $(\lambda_1^{1/2}, \dots, \lambda_d^{1/2})$ , como  $d > 1$  y  $\lambda_i > 0$  para todo  $i$  por ser  $\Sigma$  definida positiva, tenemos que:

$$\text{tr}(\Sigma)^{1/2} = \sqrt{\lambda_1 + \dots + \lambda_d} < \lambda_1^{1/2} + \dots + \lambda_d^{1/2} = \lambda(\Sigma) \quad (13)$$

Tenemos entonces la siguiente cadena de desigualdades:

$$\text{tr}(\Sigma)^{1/2} < \lambda(\Sigma) \leq \sigma(\Sigma)$$

Utilizando estas desigualdades definimos una medida de diagonalidad para matrices a partir del siguiente cociente:



$$\mathcal{D}(\Sigma) = \frac{\lambda(\Sigma) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{\sigma(\Sigma) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} = \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}$$

Vamos a enumerar ahora algunas propiedades de este cociente:

- Es invariante por cambios de escala:  $\mathcal{D}(a\Sigma) = \mathcal{D}(\Sigma) \quad \forall a > 0$
- Cuando el número de condición de la matriz tiende a 1, el cociente tiende a 1.
- Cuando el mayor de los ángulos entre la base en la que está escrita  $\Sigma$  y la base de autovectores de  $\Sigma$  tiende a 0, el cociente tiende a 1.
- Para una matriz  $\Sigma$  fija, este cociente está acotado inferiormente por una constante que dependerá de los autovalores.
- Aunque el valor 0 en el cociente no se alcance para ninguna matriz, si podemos alcanzarlo como límite. Podemos alcanzar valores arbitrariamente bajos del cociente tomando matrices con su primer autovalor positivo, y haciendo el resto arbitrariamente pequeños.

¿Qué sentido tiene este cociente? Para matrices muy “estiradas en una dirección”, el cociente tomará valores prácticamente entre 0 y 1 en las diferentes bases. Cuanto más “redondeada” sea una matriz, los valores que tomará el cociente tendrán una cota superior más elevada, y el cociente tomará valores más altos aunque las diferencias en los ángulos entre los ejes dados y los ejes los ejes en los que la matriz es diagonal sean los mismos.

Vamos a ver de forma gráfica cómo se comporta el cociente en dimensión 2. Para ello, vamos a calcular el valor de la medida de diagonalización  $\mathcal{D}$  para diferentes valores del ángulo  $\alpha$  en la matriz:

$$U(\alpha)^T \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma^2 \end{pmatrix} U(\alpha)$$

donde  $U(\alpha)$  representa el giro de ángulo  $\alpha$  dado por:

$$U(\alpha)^T = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix}$$

y  $\gamma \in (0, 1)$ . El gráfico queda:

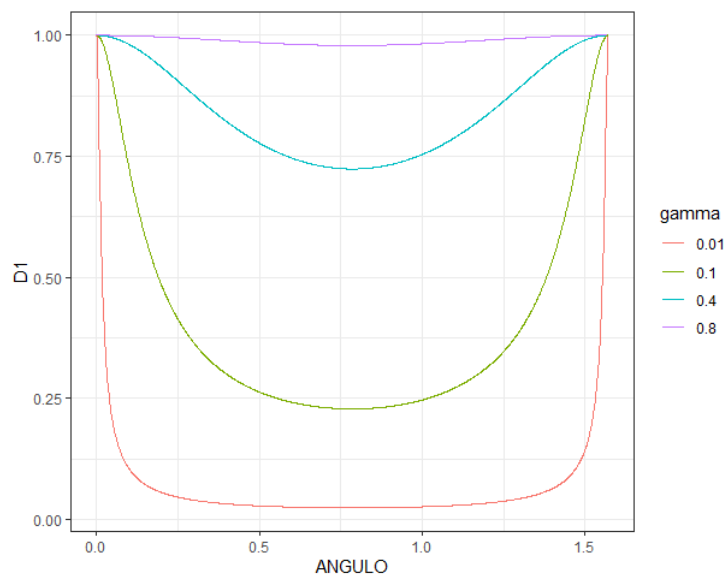


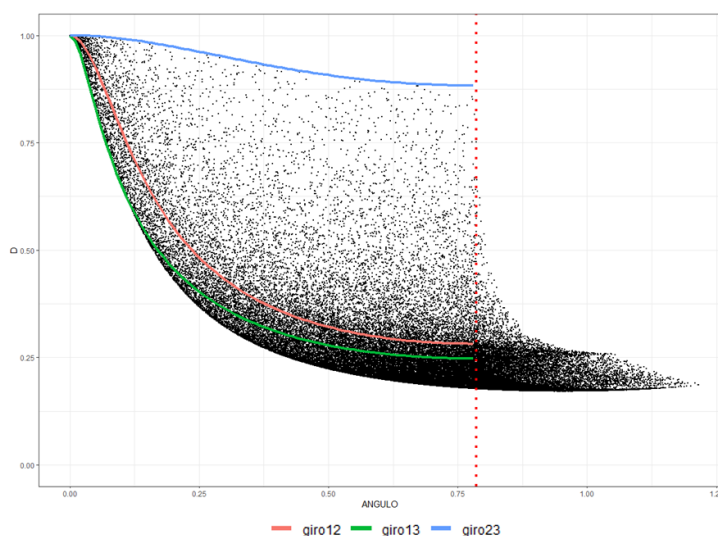
Figura 1: Valor de  $\mathcal{D}$  en función de  $\alpha \in [0, \pi/2]$  para diferentes valores de  $\gamma \in (0, 1)$

En dimensión mayor, la medida de diagonalidad que hemos definido tiene una interpretación parecida. Vamos a intentar ilustrar con varias gráficas el comportamiento de la medida. Cada una de las gráficas se ha hallado siguiendo el siguiente procedimiento.

- En primer lugar, fijamos una matriz  $\Sigma$  diagonal de dimensión mayor que 2.
- Mediante la función *randortho()* de R, hallamos M matrices ortogonales de forma aleatoria que nos dan M bases ortonormales de  $\mathbb{R}^d$ .
- Para cada una de las bases:
  - Calculamos la medida de diagonalidad de la matriz  $\Sigma$  en esa base.
  - Hallamos el mayor de los ángulos entre los ejes canónicos de  $\mathbb{R}^d$  y los ejes de la base dada. Para llevar a cabo la asignación uno a uno de los ejes, el método que utilizamos consiste en emparejar progresivamente a los ejes de las dos bases que formen un menor ángulo.
  - Representamos en el eje de abscisas el mayor de los ángulos, y en el eje de ordenadas el valor de la medida de diagonalización.
- Finalmente, hemos hallado el valor de la medida de diagonalización cuando tomamos como base la correspondiente a girar dos ejes. Estos valores aparecen representados por las líneas de colores, en función del ángulo de giro  $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$

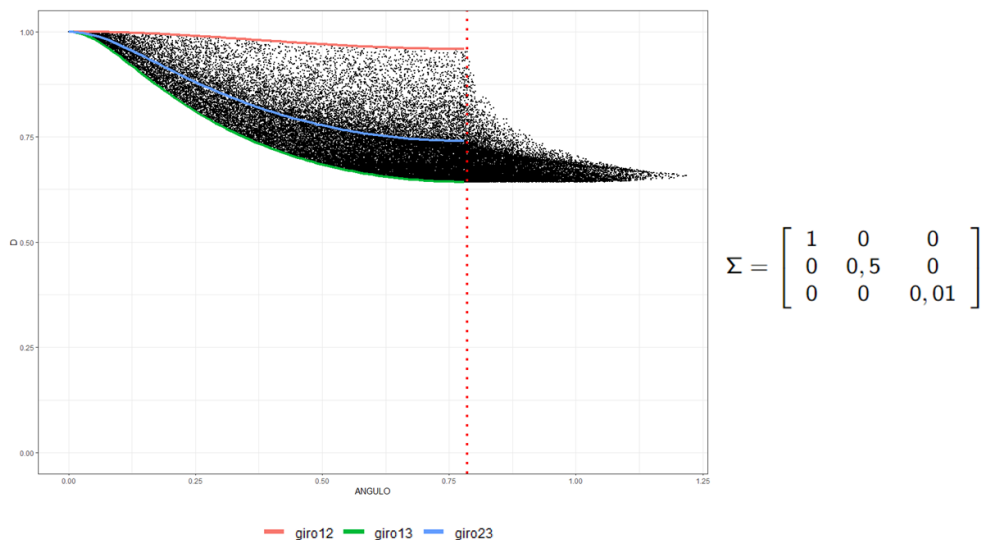
Veamos algunas gráficas para distintos valores de la matriz  $\Sigma$ :

1. En el primer gráfico, observando los posibles valores que toma la medida de diagonalización en función del ángulo mayor entre los ejes, vemos que cuando aumenta este ángulo, la medida toma valores más pequeños. Además, se ve que hay bases cuyo mayor ángulo a los ejes canónicos es similar, pero que unas afectan mucho más al valor de la medida que otras. Viendo las líneas dibujadas para los giros, vemos que entre los 3 giros que estamos considerando, el que más afecta es el correspondiente a girar las direcciones del autovalor más grande y el más pequeño (esto siempre va a ser así) y el que menos afecta en este caso es el correspondiente a los dos autovalores más pequeños.

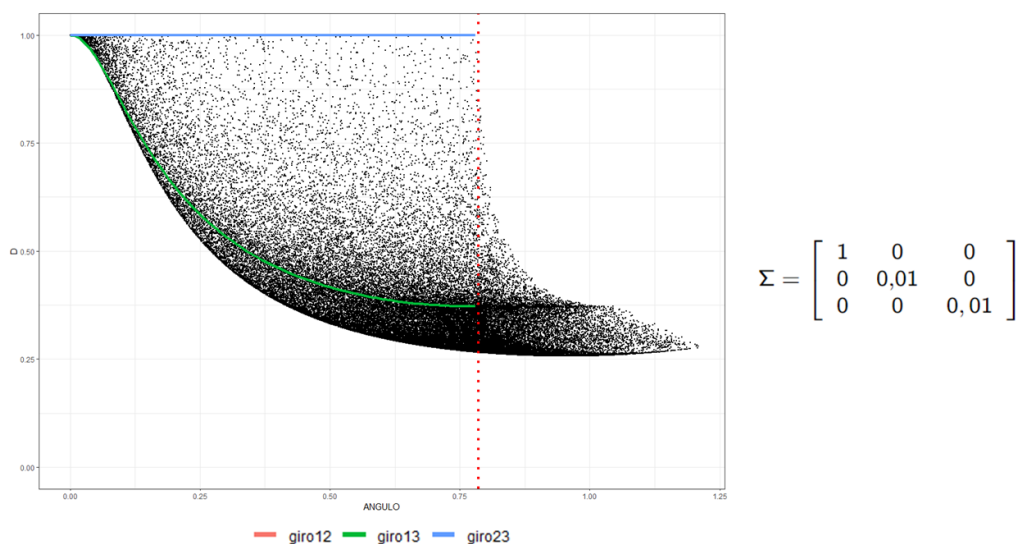


$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0,01 & 0 \\ 0 & 0 & 0,001 \end{bmatrix}$$

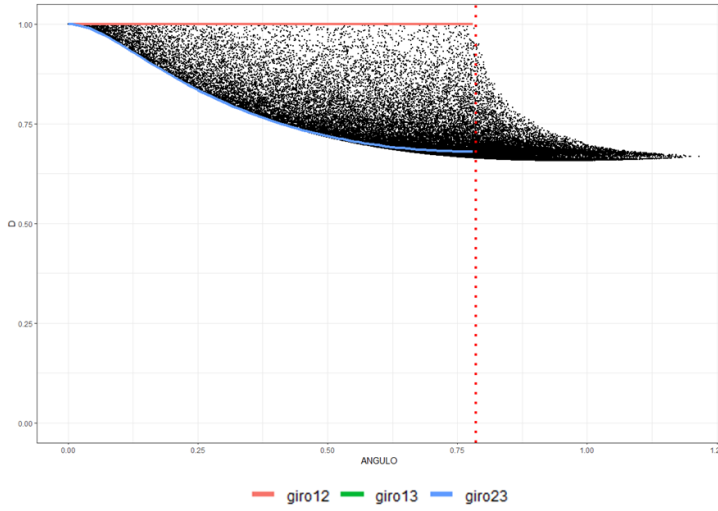
2. En este segundo ejemplo, vemos en primer lugar que las diferencias entre los valores son más pequeñas, y por tanto la medida ahora toma valores más próximos a 1. Además, ahora el giro de los ejes canónicos que menos afecta al valor de la medida es el giro en las direcciones de los dos primeros autovalores.



3. Mostramos ahora un ejemplo en el que los dos autovalores más pequeños coinciden. En esta situación, el giro de las componentes 1 y 2 y el giro de las componentes 1 y 3 tiene el mismo resultado.



4. En este último ejemplo estudiamos el caso en el que son los dos autovalores mayores los que coinciden. En esta situación, el giro de las componentes 1 y 2 y el giro de las componentes 2 y 3 tiene el mismo resultado. Por otra parte, podemos observar que en este ejemplo, los valores que toma la medida son mayores que en el ejemplo previo. Esto nos da una idea de cómo funciona la medida: penaliza más las desviaciones de la diagonalidad en distribuciones cuyas direcciones correspondientes a los primeros autovalores aparecen claramente separadas del resto.



$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0,01 \end{bmatrix}$$

Por tanto, la medida de diagonalidad que hemos definido tiene una interpretación razonable, tal y como acabamos de ilustrar. Sin embargo, a la hora de trabajar con ella en los ejemplos, va a ser interesante conocer algunas propiedades de la medida, como el comportamiento asintótico. En el siguiente apartado nos centramos en estudiar la diferenciabilidad de la medida de diagonalidad, que será la base para hallar posteriormente el comportamiento asintótico.

## 5.2. Diferenciales de la función de diagonalidad

Para calcular las diferenciales de primer y segundo orden de la función, vamos a hacerlo por pasos, teniendo en cuenta que si definimos la función  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  por:

$$f(x, y, z) = \frac{x - z}{y - z}$$

y las funciones  $x, y, z$  definidas en  $\mathbb{S}_{\geq 0}^d$  por:

$$x(\Sigma) = \lambda(\Sigma) = \text{tr}(\Sigma^{1/2}) = \sum_{i=1}^d \lambda_i^{1/2}$$

$$y(\Sigma) = \sigma(\Sigma) = \text{tr}(D_{\Sigma}^{1/2}) = \sum_{i=1}^d \sigma_i^{1/2}$$

$$z(\Sigma) = \text{tr}(\Sigma)^{1/2} = \left( \sum_{i=1}^d \sigma_i \right)^{1/2} = \left( \sum_{i=1}^d \lambda_i \right)^{1/2}$$

Entonces se tiene que:

$$\mathcal{D}(\Sigma) = \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{\text{tr}(D_{\Sigma}^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} = f(x(\Sigma), y(\Sigma), z(\Sigma))$$

En esta parte vamos a utilizar la notación y la teoría sobre el cálculo diferencial matricial presentada en la sección anterior. En primer lugar, vamos a calcular las diferenciales de primer y segundo orden de las funciones  $x(\Sigma)$ ,  $y(\Sigma)$  y  $z(\Sigma)$ .

■ **Diferenciales de  $x(\Sigma)$**

La función  $x(\Sigma) = \text{tr}(\Sigma^{1/2}) = \sum_{i=1}^d \lambda_i^{1/2}$  se trata de una función espectral, ya que cumple la propiedad:

$$x(\Sigma) = x(U^T \Sigma U)$$

para toda matrix  $U$  ortonormal, y para toda matriz  $\Sigma$  simétrica. Por tanto, vamos a utilizar los resultados de la sección 4.3. Por ser  $x(\Sigma)$  una función espectral, sabemos que podemos descomponer la función como composición de la función  $\Lambda$ , que envía a una matriz simétrica en sus autovalores, y una función simétrica  $g$ , que en nuestro caso es la función:

$$g(x_1, \dots, x_d) = \sum_{i=1}^d x_i^{1/2}$$

Es decir:

$$x(\Sigma) = (g \circ \Lambda)(\Sigma)$$

para toda matriz simétrica  $\Sigma$ . Es importante tener en cuenta que nosotros vamos a trabajar sólo con matrices simétricas y definidas positivas, luego todos los autovalores serán estrictamente positivos, y  $g$  va a ser dos veces diferenciable en  $\Lambda(\Sigma)$  para toda  $\Sigma$  definida positiva.

Para el cálculo de la primera derivada, utilizamos el teorema [12]. En nuestro caso, se tiene que si  $U$  es la matriz ortogonal tal que  $\Sigma = U(\text{diag}(\Lambda(\Sigma)))U^T$ , entonces la matriz diferencial de  $x$  en  $\Sigma$  viene dada por:

$$Dx(\Sigma) = U \text{diag}(\nabla g(\Lambda(\Sigma)))U^T = U \begin{pmatrix} \frac{1}{2\lambda_1^{1/2}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\lambda_2^{1/2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{2\lambda_d^{1/2}} \end{pmatrix} U^T = \frac{1}{2} \Sigma^{-1/2}$$

y por tanto se tiene que:

$$dx(\Sigma; H) = \text{tr}(Dx(\Sigma)H) = \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1/2}H)$$

Para el cálculo de la segunda diferencial, utilizamos el teorema [13], que afirma que que  $x$  es dos veces diferenciable en cualquier  $\Sigma$  definida positiva, por serlo  $g$ , y además:

$$d^2x(\Sigma, H) = d^2(g \circ \Lambda)(\Sigma; H) = \text{diag}(\bar{H})^T (\nabla^2 g(\Lambda(\Sigma))) \text{diag}(\bar{H}) + \text{tr}(\mathcal{A}(H \odot H))$$

donde  $U$  es una matriz ortogonal tal que  $\Sigma = U(\text{diag}(\Lambda(\Sigma)))U^T$ ,  $\bar{H} = U^T H U$  y  $\mathcal{A}$  es la matriz definida por:

$$\mathcal{A}_{i,j} = \begin{cases} 0 & si \quad i = j \\ g''_{ii}(\Lambda(\Sigma)) - g''_{ij}(\Lambda(\Sigma)) & si \quad i \neq j, \lambda_i = \lambda_j \\ \frac{g'_i(\lambda(\Sigma)) - g'_j(\lambda(\Sigma))}{\lambda_i - \lambda_j} & si \quad i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j \end{cases}$$

Por tanto, en nuestro caso se tiene que:

$$\mathcal{A}_{i,j} = \begin{cases} 0 & si \quad i = j \\ \frac{-1}{4} \lambda_i^{-3/2} & si \quad i \neq j, \lambda_i = \lambda_j \\ \frac{1}{2} \frac{\lambda_i^{-1/2} - \lambda_j^{-1/2}}{\lambda_i - \lambda_j} & si \quad i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j \end{cases}$$

$$\nabla^2 g(\Lambda(\Sigma)) = \begin{pmatrix} \frac{-1}{4\lambda_1^{3/2}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{-1}{4\lambda_2^{3/2}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{-1}{4\lambda_d^{3/2}} \end{pmatrix}$$

### ■ Diferenciales de $y(\Sigma)$

Vamos ahora a calcular la diferencial primera y segunda de la aplicación:

$$y(\Sigma) = \text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) = \sum_{i=1}^d \sigma_i^{1/2}$$

En primer lugar,  $y$  es diferenciable en  $\Sigma$ , ya que por ser  $\Sigma$  definida positiva,  $\sigma_i = e_i^T \Sigma e_i > 0$ . Utilizando la igualdad (11), es sencillo ver que la matriz diferencial de la aplicación  $y$  viene dada por:

$$Dy(\Sigma) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sigma_1^{-1/2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \sigma_2^{-1/2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{2} \sigma_d^{-1/2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} D_\Sigma^{-1/2}$$

Y por tanto se tiene que para cada  $H \in \mathbb{S}^d$ :

$$dy(\Sigma; H) = \frac{1}{2} \text{tr}(D_\Sigma^{-1/2} H) = \sum_{i=1}^d \frac{1}{2} \sigma_i^{-1/2} h_{ii}$$

Como  $\Sigma$  es definida positiva, existe un entorno  $B$  de  $\Sigma$  en  $\mathbb{S}^d$  tal que  $B \subset \mathbb{S}_{>0}^d$ . La función  $y$  es diferenciable en  $B$ , y a partir de la expresión de  $dy(\Sigma; H)$  se ve que las derivadas parciales son diferenciables en  $\Sigma$ , luego  $y$  es dos veces diferenciable en  $\Sigma$ . Para calcular su segunda diferencial en la dirección de  $H \in \mathbb{S}^d$ , definimos:

$$G(X) = dy(X; H) = \sum_{i=1}^d \frac{1}{2} x_{ii}^{-1/2} h_{ii}$$

$G$  es diferenciable en  $\Sigma$ , su matriz diferencial en  $\Sigma$  viene dada por:

$$DG(\Sigma) = \begin{pmatrix} \frac{-1}{4} \sigma_1^{-3/2} h_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{-1}{4} \sigma_2^{-3/2} h_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{-1}{4} \sigma_d^{-3/2} h_{dd} \end{pmatrix} = \frac{-1}{4} D_\Sigma^{-3/2} \odot H$$

Por tanto:

$$dy^2(\Sigma; H) = \frac{-1}{4} \operatorname{tr}((D_\Sigma^{-3/2} \odot H)H) = \frac{-1}{4} \operatorname{tr}(D_\Sigma^{-3/2}(H \odot H)) = \sum_{i=1}^d \frac{-1}{4} \sigma_i^{-3/2} h_{ii}^2$$

■ **Diferenciales de  $z(\Sigma)$**

Podemos escribir  $z = z_2 \circ z_1$ , siendo  $z_1, z_2$  las funciones dadas por  $z_1(\Sigma) = \operatorname{tr}(\Sigma)$  y  $z_2(t) = t^{1/2}$ . La matriz diferencial de  $z_1$  en cualquier punto es  $I_d$ . Por tanto:

$$dz_1(\Sigma; H) = \operatorname{tr}(H)$$

que no depende de  $\Sigma$ , luego la función  $G(X) = dz(X; H)$  es constante, y se tiene que:

$$d^2 z_1(\Sigma; H) = 0$$

y por tanto, aplicando la regla de la cadena [3] y [4] tenemos que:

$$dz(\Sigma; H) = z'_2(z_1(\Sigma))dz_1(\Sigma; H) = \frac{1}{2\operatorname{tr}(\Sigma)^{1/2}} \operatorname{tr}(H)$$

$$dz^2(\Sigma; H) = z''_2(z_1(\Sigma))(dz_1(\Sigma; H))^2 + z'_2(z_1(\Sigma))dz_1^2(\Sigma; H) = \frac{-1}{4\operatorname{tr}(\Sigma)^{3/2}} \operatorname{tr}(H)^2$$

■ **Diferenciales de  $f(x, y, z)$**

Es sencillo calcular el gradiente y la matriz hessiana (en la región  $y > z$ )

$$\nabla f(x, y, z) = \left( \frac{1}{y-z}, \frac{-(x-z)}{(y-z)^2}, \frac{x-y}{(y-z)^2} \right)$$

$$\nabla^2 f(x, y, z) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{(y-z)^2} & \frac{1}{(y-z)^2} \\ \frac{-1}{(y-z)^2} & \frac{2(x-z)}{(y-z)^3} & \frac{-2x+y+z}{(y-z)^3} \\ \frac{1}{(y-z)^2} & \frac{-2x+y+z}{(y-z)^3} & \frac{2(x-y)}{(y-z)^3} \end{pmatrix}$$

y por tanto para cada vector  $\underline{v} \in \mathbb{R}^3$ :

$$df((x, y, z); \underline{v}) = \left( \frac{1}{y-z}, \frac{-(x-z)}{(y-z)^2}, \frac{x-y}{(y-z)^2} \right) \cdot \underline{v}$$

$$df^2((x, y, z); \underline{v}) = \underline{v}^T \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{(y-z)^2} & \frac{1}{(y-z)^2} \\ \frac{-1}{(y-z)^2} & \frac{2(x-z)}{(y-z)^3} & \frac{-2x+y+z}{(y-z)^3} \\ \frac{1}{(y-z)^2} & \frac{-2x+y+z}{(y-z)^3} & \frac{2(x-y)}{(y-z)^3} \end{pmatrix} \underline{v}$$

■ **Diferenciales de  $\mathcal{D}(\Sigma)$**

Para hallar la primera diferencial, utilizamos la expresión de la regla de la cadena que aparece en el corolario [3]:

$$d\mathcal{D}(\Sigma; H) = df\left((x(\Sigma), y(\Sigma), z(\Sigma)); (dx(\Sigma; H), dy(\Sigma; H), dz(\Sigma; H))\right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} (1, -\mathcal{D}(\Sigma), \mathcal{D}(\Sigma) - 1) \cdot \left( \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1/2} H), \frac{1}{2} \text{tr}(D_\Sigma^{-1/2} H), \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma)^{-1/2} \text{tr}(H) \right)^T = \\
&= \text{tr} \left( \frac{1}{2(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})} \left( \Sigma^{-1/2} - \mathcal{D}(\Sigma) D_\Sigma^{-1/2} + \frac{\mathcal{D}(\Sigma) - 1}{\text{tr}(\Sigma)^{1/2}} I \right) H \right) = \text{tr}(M_\Sigma H)
\end{aligned}$$

si denotamos:

$$M_\Sigma = \frac{1}{2(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})} \left( \Sigma^{-1/2} - \mathcal{D}(\Sigma) D_\Sigma^{-1/2} + \frac{\mathcal{D}(\Sigma) - 1}{\text{tr}(\Sigma)^{1/2}} I \right)$$

La segunda diferencial de la función de diagonalidad se calcula utilizando la regla de la cadena para la segunda diferencial, que aparece en [4].

$$\begin{aligned}
d^2 \mathcal{D}(\Sigma; H) &= d^2 f \left( (x(\Sigma), y(\Sigma), z(\Sigma)); (dx(\Sigma; H), dy(\Sigma; H), dz(\Sigma; H)) \right) + \\
&+ df \left( (x(\Sigma), y(\Sigma), z(\Sigma)); (dx^2(\Sigma; H), dy^2(\Sigma; H), dz^2(\Sigma; H)) \right) = \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1/2} H) \\ \frac{1}{2} \text{tr}(D_\Sigma^{-1/2} H) \\ \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma)^{-1/2} \text{tr}(H) \end{pmatrix}^T \nabla^2 f(\Lambda(\Sigma)) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1/2} H) \\ \frac{1}{2} \text{tr}(D_\Sigma^{-1/2} H) \\ \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma)^{-1/2} \text{tr}(H) \end{pmatrix} + \\
&+ \frac{1}{2(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})} (1, -\mathcal{D}(\Sigma), \mathcal{D}(\Sigma) - 1) \cdot \begin{pmatrix} \text{diag}(\bar{H})^T (\nabla^2 g(\Lambda(\Sigma))) \text{diag}(\bar{H}) + \text{tr}(\mathcal{A}(H \odot H)) \\ \frac{-1}{4} \text{tr}(D_\Sigma^{-3/2} (H \odot H)) \\ \frac{-1}{4 \text{tr}(\Sigma)^{3/2}} \text{tr}(H)^2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

donde :

$$\nabla^2 f(\Lambda(\Sigma)) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^2} & \frac{1}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^2} \\ \frac{-1}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^2} & \frac{2(\text{tr}(\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^3} & \frac{-2 \text{tr}(\Sigma^{1/2}) + \text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) + \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^3} \\ \frac{1}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^2} & \frac{-2 \text{tr}(\Sigma^{1/2}) + \text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) + \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^3} & \frac{2(\text{tr}(\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(D_\Sigma^{1/2}))}{(\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2})^3} \end{pmatrix}$$

### 5.3. Comportamiento asintótico

Para hallar la distribución asintótica, vamos a utilizar siguiente lema que nos da el comportamiento asintótico de la matriz de covarianzas cuando los datos provienen de una distribución normal centrada y con matriz de covarianzas  $I_d$ . A lo largo de todo este apartado, suponemos que las variables aleatorias que aparecen están definidas en un espacio probabilístico  $(\Omega, \sigma, \mathbb{P})$ .

**Lema 1.** Si  $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$  son v.a.i.i.d  $N(0, I_d)$ , entonces:

$$W_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \left( \sum_{i=1}^n (\epsilon_i \epsilon_i^T - I_d) \right) = \sqrt{n} \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \epsilon_i \epsilon_i^T - I_d \right) \rightarrow_d W$$



con  $W$  una matriz simétrica aleatoria tal que:

$$W_{jk} =_d \begin{cases} N(0, 2) & \text{si } j = k \\ N(0, 1) & \text{si } j \neq k \end{cases}$$

con todas sus entradas independientes. Además, si  $A, B \in \mathbb{S}^d$ , entonces:

$$E(\text{tr}(AW) \text{tr}(BW)) = 2 \text{tr}(AB) \quad (14)$$

*Demostración.* Si denotamos  $\epsilon_i = (\epsilon_i^1, \dots, \epsilon_i^d)$ , entonces:

$$\epsilon_i \epsilon_i^T = \begin{pmatrix} (\epsilon_i^1)^2 & \epsilon_i^1 \epsilon_i^2 & \dots & \epsilon_i^1 \epsilon_i^d \\ \epsilon_i^1 \epsilon_i^2 & (\epsilon_i^2)^2 & \dots & \epsilon_i^2 \epsilon_i^d \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \epsilon_i^1 \epsilon_i^d & \epsilon_i^2 \epsilon_i^d & \dots & (\epsilon_i^d)^2 \end{pmatrix}$$

El resultado se deduce de aplicar el teorema central del límite al vector  $\text{vec}(\epsilon_i \epsilon_i^T)$ , teniendo en cuenta que por los momentos de la distribución  $N(0, 1)$ , se tiene que:

$$E(\epsilon_i^j \epsilon_i^k) = \begin{cases} 1 & \text{si } j = k \\ 0 & \text{si } j \neq k \end{cases}$$

$$\text{Cov}(\epsilon_i^{j_1} \epsilon_i^{k_1}, \epsilon_i^{j_2} \epsilon_i^{k_2}) = \begin{cases} 2 & \text{si } j_1 = j_2 = k_1 = k_2 \\ 1 & \text{si } j_1 = j_2 \neq k_1 = k_2 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Por la simetría de  $W$ , se tiene que:

$$\text{tr}(AW) = \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d A_{jk} W_{jk} = \sum_{j=1}^d A_{jj} W_{jj} + 2 \sum_{1 \leq j < k \leq d} A_{jk} W_{jk}$$

Las variables que aparecen son independientes y tienen media 0. Se deduce que si  $A, B \in \mathbb{S}^d$ , entonces:

$$\begin{aligned} E(\text{tr}(AW) \text{tr}(BW)) &= \\ &= E \left( \left( \sum_{j=1}^d A_{jj} W_{jj} + 2 \sum_{1 \leq j < k \leq d} A_{jk} W_{jk} \right) \left( \sum_{j=1}^d B_{jj} W_{jj} + 2 \sum_{1 \leq j < k \leq d} B_{jk} W_{jk} \right) \right) = \\ &= \sum_{j=1}^d A_{jj} B_{jj} E(W_{jj}^2) + 4 \sum_{1 \leq j < k \leq d} A_{jk} B_{jk} E(W_{jk}^2) = 2 \sum_{j=1}^d A_{jj} B_{jj} + 4 \sum_{1 \leq j < k \leq d} A_{jk} B_{jk} = \\ &= 2 \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d A_{jk} B_{jk} = 2 \text{tr}(AB) \end{aligned}$$

□

Sea ahora  $\Sigma \in \mathbb{S}_{>0}^d$ . Sabemos que existe una descomposición  $\Sigma = U \Lambda U^T$ , con  $U$  una matriz ortogonal y  $\Lambda$  la matriz diagonal con los autovalores. Tomando  $Z_i = U \Lambda^{1/2} \epsilon_i$ , tenemos que  $Z_1, \dots, Z_n$  son v.a.i.i.d.  $N(0, \Sigma)$ . Además:

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^T - \Sigma \right) &= \sqrt{n} \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (U \Lambda^{1/2} \epsilon_i) (\epsilon_i \Lambda^{1/2} U^T) - U \Lambda U^T \right) = \\ &= U \Lambda^{1/2} \left( \sqrt{n} \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \epsilon_i \epsilon_i^T - I_d \right) \right) \Lambda^{1/2} U^T = U \Lambda^{1/2} W_n \Lambda^{1/2} U^T \rightarrow_d U \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2} U^T \end{aligned}$$

En general, el estimador de la matriz de covarianzas que se utiliza dadas  $Z_1, \dots, Z_n$  v.a.i.i.d.  $N(0, \Sigma)$  es:

$$S_n = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^T$$

Se tiene que:

$$\sqrt{n} \left( S_n - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^T \right) = \frac{\sqrt{n}}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^T = \frac{1}{n-1} \left( \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n Z_i Z_i^T \right) \rightarrow_p 0$$

y por tanto:

$$\sqrt{n} (S_n - \Sigma) \rightarrow_d U \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2} U^T$$

### 5.3.1. Matriz $\Sigma$ no diagonal

Utilizando la aproximación a  $\mathcal{D}$  por la primera derivada, sabemos que:

$$\lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathcal{D}(\Sigma + tH) - \mathcal{D}(\Sigma)}{t} = d\mathcal{D}(\Sigma; H)$$

Por tanto, tenemos que:

$$\begin{aligned} \sqrt{n} (\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) &= \frac{\mathcal{D} \left( \Sigma + \frac{1}{\sqrt{n}} (\sqrt{n} (S_n - \Sigma)) \right) - \mathcal{D}(\Sigma)}{\frac{1}{\sqrt{n}}} = \\ &= \text{tr} \left( M_\Sigma (\sqrt{n} (S_n - \Sigma)) \right) + o_p(1) \end{aligned}$$

y podemos concluir aplicando el delta método que:

$$\sqrt{n} (\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) \rightarrow_d \text{tr} (M_\Sigma U \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2} U^T)$$

Por la propiedad cíclica de la traza ( $\text{tr}(ABC) = \text{tr}(BCA) = \text{tr}(CAB)$ ) se tiene que:

$$\text{tr} (M_\Sigma U \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2} U^T) = \text{tr} (\Lambda^{1/2} U^T M_\Sigma U \Lambda^{1/2} W)$$

Por la linealidad de la traza se deduce que esta variable será suma de las componentes  $W_{jk}$ , que son normales independientes y centradas, y por tanto será una variable aleatoria normal centrada. Además, por la propiedad (14) del lema [1]:

$$\begin{aligned} \text{Var} \left( \text{tr} (\Lambda^{1/2} U^T M_\Sigma U \Lambda^{1/2} W) \right) &= E \left( \text{tr} (\Lambda^{1/2} U^T M_\Sigma U \Lambda^{1/2} W)^2 \right) = \\ &= 2 \text{tr} \left( (\Lambda^{1/2} U^T M_\Sigma U \Lambda^{1/2})^2 \right) = 2 \text{tr} ((M_\Sigma \Sigma)^2) \end{aligned}$$

Y hemos visto entonces que:

$$\sqrt{n}(\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) \rightarrow_d N\left(0, 2 \operatorname{tr}((M_\Sigma \Sigma)^2)\right)$$

Cuando  $\Sigma$  no es diagonal, entonces  $\operatorname{tr}(M_\Sigma) \neq 0$ , y lo que hemos probado en ese caso es:

$$\sqrt{\frac{n}{2 \operatorname{tr}((M_\Sigma \Sigma)^2)}} (\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) \rightarrow_d N(0, 1)$$

Cuando  $\Sigma$  es diagonal, nos queda una distribución degenerada. Para estudiar el comportamiento asintótico en ese caso, tenemos que utilizar la segunda diferencial.

### 5.3.2. Matriz $\Sigma$ diagonal

Suponemos en este caso que  $\Sigma$  es diagonal, y por tanto  $\mathcal{D}(\Sigma) = 1$ ,  $U = I$  y  $d\mathcal{D}(\Sigma; H) = 0$ , para toda matriz  $H \in \mathbb{S}^d$ . Entonces:

$$\sqrt{n}(S_n - \Sigma) \rightarrow_d \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2}$$

Por la propiedad de aproximación a partir de la segunda diferencial del teorema [10] sabemos que:

$$\lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathcal{D}(\Sigma + tH) - \mathcal{D}(\Sigma) - t d\mathcal{D}(\Sigma; H)}{t^2} = \frac{d^2 \mathcal{D}(\Sigma; H)}{2}$$

y por tanto:

$$\begin{aligned} n(\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) &= \frac{\mathcal{D}\left(\Sigma + \frac{1}{\sqrt{n}}(\sqrt{n}(S_n - \Sigma))\right) - \mathcal{D}(\Sigma)}{\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)^2} = \\ &= \frac{\mathcal{D}\left(\Sigma + \frac{1}{\sqrt{n}}(\sqrt{n}(S_n - \Sigma))\right) - \mathcal{D}(\Sigma) - \frac{1}{\sqrt{n}} d\mathcal{D}(\Sigma; (\sqrt{n}(S_n - \Sigma)))}{\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)^2} = \\ &= \frac{d^2 \mathcal{D}(\Sigma; \sqrt{n}(S_n - \Sigma))}{2} + o_p(1) \end{aligned}$$

Por tanto, aplicando el delta método:

$$n(\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) \rightarrow_d \frac{1}{2} d^2 \mathcal{D}(\Sigma; \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2})$$

Cuando  $\Sigma$  es una matriz diagonal, se puede comprobar que en ese caso la mayoría de sumandos de la segunda diferencial se anulan, y queda la expresión:

$$\begin{aligned} d^2 \mathcal{D}(\Sigma; H) &= \frac{1}{\operatorname{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \operatorname{tr}(\Sigma)^{1/2}} \operatorname{tr}(\mathcal{A}(H \odot H)) = \\ &= \frac{1}{\operatorname{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \operatorname{tr}(\Sigma)^{1/2}} \left( \sum_{i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j} \frac{\lambda_i^{-1/2} - \lambda_j^{-1/2}}{\lambda_i - \lambda_j} H_{ij}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \lambda_i = \lambda_j} \lambda_i^{-3/2} H_{ij}^2 \right) \end{aligned}$$

y por tanto tenemos que:

$$\begin{aligned}
& n(\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) \rightarrow_d \\
& \rightarrow_d \frac{1}{2} \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \left( \sum_{i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j} \frac{\lambda_i^{-1/2} - \lambda_j^{-1/2}}{\lambda_i - \lambda_j} \lambda_i \lambda_j W_{ij}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \lambda_i = \lambda_j} \lambda_i^{-3/2} \lambda_i \lambda_j W_{ij}^2 \right) = \\
& = \frac{1}{2} \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \left( \sum_{i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j} \frac{\lambda_i^{-1/2} - \lambda_j^{-1/2}}{\lambda_i - \lambda_j} \lambda_i \lambda_j W_{ij}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j, \lambda_i = \lambda_j} \lambda_i^{1/2} W_{ij}^2 \right) = \\
& = \sum_{i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \frac{\lambda_i^{-1/2} - \lambda_j^{-1/2}}{\lambda_i - \lambda_j} \lambda_i \lambda_j \right) W_{ij}^2 + \sum_{i \neq j, \lambda_i = \lambda_j} \left( \frac{-1}{4} \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \lambda_i^{1/2} \right) W_{ij}^2
\end{aligned}$$

Como  $W_{ij}$  sigue una distribución  $N(0, 1)$  para cada  $i \neq j$ , entonces  $W_{ij}^2$  sigue una distribución  $\chi^2$  con 1 grado de libertad para cada  $i \neq j$ . De aquí se deduce que:

$$n(1 - \mathcal{D}(S_n)) = -n(\mathcal{D}(S_n) - \mathcal{D}(\Sigma)) \rightarrow_d \quad (15)$$

$$\rightarrow_d \sum_{i \neq j, \lambda_i \neq \lambda_j} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \frac{\lambda_i^{1/2} \lambda_j^{1/2}}{\lambda_i^{1/2} + \lambda_j^{1/2}} \right) W_{ij}^2 + \sum_{i \neq j, \lambda_i = \lambda_j} \left( \frac{1}{4} \frac{1}{\text{tr}(D_\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \lambda_i^{1/2} \right) W_{ij}^2$$

que sigue una distribución  $\chi^2$  generalizada. La distribución  $\chi^2$  generalizada es la distribución de una forma cuadrática de un vector aleatorio normal, y se puede describir a partir de una variable aleatoria:

$$X = \sum_{i=1}^r \alpha_i X_i + \sigma(X_0 - \mu)$$

donde  $X_0 \sim N(0, 1)$ ,  $X_i \sim \chi^2(n_i, \mu_i)$  siendo  $n_i$  los grados de libertad y  $\mu_i$  el parámetro de descentramiento. En nuestro caso, la distribución que nos queda se trata de una  $\chi^2$  generalizada muy sencilla:

$$X = \sum_{i=1}^r \alpha_i Y_i^2$$

donde  $r = d(d-1)/2$ ,  $\{Y_i\}_{i=1}^r$  son v.a. independientes y con distribución  $N(0, 1)$ , y los pesos  $\{\alpha_i\}_{i=1}^r$  son las expresiones que aparecen entre paréntesis en la ecuación (15).

## 5.4. Test de diagonalidad

Hemos probado que si  $\Sigma$  es una matriz diagonal, se tiene que:

$$n(1 - \mathcal{D}(S_n)) \rightarrow_d Z_\Sigma = \sum_{i=1}^m c_i(\Sigma) Z_i \quad (16)$$

siendo  $m = \frac{d(d-1)}{2}$ ,  $c_i(\Sigma)$  los coeficientes que habíamos calculado antes y  $\{Z_i\}_{i=1}^m$  v.a.i.i.d con distribución  $\chi_1^2$ . Se cumple entonces que:

1. La función de distribución de  $Z_\Sigma$  es continua. Por tanto, por el teorema de Polya:

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |\mathbb{P}(n(1 - \mathcal{D}(S_n)) \leq x) - \mathbb{P}(Z_\Sigma \leq x)| \rightarrow_{c.s} 0$$

2.  $Z_{S_n} \rightarrow_d Z_\Sigma$ . Esto es consecuencia de que si  $\{Z_i\}_{i=1}^m$  son v.a.i.i.d con distribución  $\chi_1^2$ , como:

$$c_i(S_n) \rightarrow_{c.s.} c_i(\Sigma) \quad i = 1, 2, \dots, m$$

entonces se tiene que:

$$c_i(S_n)Z_i \rightarrow_d c_i(\Sigma)Z_i \quad i = 1, 2, \dots, m$$

y por tanto, como  $\{Z_i\}_{i=1}^m$  son independientes:

$$Z_{S_n} = \sum_{i=1}^m c_i(S_n)Z_i \rightarrow_d Z_\Sigma = \sum_{i=1}^m c_i(\Sigma)Z_i$$

3. De nuevo por el teorema de Polya, como la función de distribución de  $Z_\Sigma$  es continua, se tiene que:

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |\mathbb{P}(Z_{S_n} \leq x) - \mathbb{P}(Z_\Sigma \leq x)| \rightarrow_{c.s.} 0$$

De todo esto podemos obtener un contraste de hipótesis para  $H_0 : \mathcal{D}(\Sigma) = 1$ , o lo que es equivalente,  $H_0 : \Sigma$  es diagonal. Por lo visto antes, sabemos que bajo  $H_0$ :

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |\mathbb{P}(n(1 - \mathcal{D}(S_n)) \leq x) - \mathbb{P}(Z_{S_n} \leq x)| \rightarrow_{c.s.} 0$$

Si queremos obtener un test asintótico de nivel  $\alpha$ , consideramos para cada  $n \in \mathbb{N}$  el valor  $x_n \in \mathbb{R}$  tal que  $\mathbb{P}(Z_{S_n} \leq x_n) = 1 - \alpha$ . Como la convergencia anterior es uniforme en  $\mathbb{R}$  se tiene que:

$$\mathbb{P}\left(\mathcal{D}(S_n) \geq 1 - \frac{x_n}{n}\right) \rightarrow_{c.s.} 1 - \alpha$$

Por tanto, el test rechazará la hipótesis si  $\mathcal{D}(S_n) < 1 - \frac{x_n}{n}$ . Equivalentemente, rechazará la hipótesis nula si:

$$\begin{aligned} n(1 - \mathcal{D}(S_n)) \geq x_n &\Leftrightarrow \mathbb{P}(Z_{S_n} \leq n(1 - \mathcal{D}(S_n))) > 1 - \alpha \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \mathbb{P}(Z_{S_n} > n(1 - \mathcal{D}(S_n))) < \alpha \end{aligned}$$

y el lado izquierdo en la última expresión nos da un p-valor para el contraste de hipótesis. El objetivo ahora va ser comparar el contraste de hipótesis creado con el test de Bartlett sobre la matriz de correlación, realizado mediante la función `cortest.bartlett()` en R. Si  $X$  es un vector aleatorio con matriz de covarianzas  $\Sigma$ , y denotamos por  $R$  a la matriz de correlación, el test de Bartlett contrasta la hipótesis:

$$H_0 : R = I_d$$

que es equivalente a que  $\Sigma$  sea diagonal. Para realizar la comparación de los dos test:

- Fijamos  $\Sigma \in \mathbb{S}_{>0}^d$  y  $p \in (0, 1)$
- Simulamos  $M$  muestras de  $N$  observaciones  $X_1, \dots, X_N \stackrel{d}{\sim} N(0, \Sigma)$ , obtenemos así  $M$  matrices de covarianzas muestrales:

$$\Rightarrow S_N^1, \dots, S_N^M$$

- Aproximamos  $p$  por el valor de:

$$\frac{\#\{i \in \{1, \dots, M\} : \text{p-valor}(S_N^i) < p\}}{M}$$

Vamos a tomar  $M = 10000$ , y el resto de parámetros los vamos a ir modificando para ilustrar diferentes situaciones. En primer lugar, vamos a mostrar el comportamiento cuando estamos bajo la hipótesis nula, y las muestras provienen de una distribución normal con matriz de covarianzas:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \gamma^2 \end{pmatrix}$$

Vamos a estudiar las aproximaciones a  $p$  que obtenemos para distintos valores de  $\gamma$ ,  $N$  y  $p$ . Los pares de valores que aparecen se corresponden con las aproximaciones a  $p$  mediante el test de diagonalidad que hemos definido, y el test de Bartlett, respectivamente.

$p$	N	$\gamma$			
		1	0.9	0.5	0.1
0.01	25	0.012 - 0.009	0.012 - 0.01	0.013 - 0.01	0.014 - 0.01
	50	0.011 - 0.009	0.011 - 0.011	0.012 - 0.011	0.012 - 0.011
	100	0.009 - 0.008	0.011 - 0.011	0.011 - 0.011	0.01 - 0.012
	250	0.01 - 0.01	0.012 - 0.012	0.01 - 0.011	0.011 - 0.01
	1000	0.009 - 0.01	0.009 - 0.009	0.01 - 0.009	0.01 - 0.009
0.02	25	0.025 - 0.02	0.024 - 0.018	0.026 - 0.021	0.024 - 0.02
	50	0.021 - 0.019	0.022 - 0.02	0.023 - 0.021	0.023 - 0.021
	100	0.019 - 0.018	0.021 - 0.019	0.022 - 0.021	0.021 - 0.022
	250	0.02 - 0.02	0.023 - 0.023	0.023 - 0.021	0.022 - 0.022
	1000	0.02 - 0.02	0.02 - 0.02	0.019 - 0.018	0.02 - 0.02
0.05	25	0.059 - 0.045	0.061 - 0.047	0.065 - 0.052	0.06 - 0.05
	50	0.054 - 0.048	0.056 - 0.051	0.06 - 0.051	0.058 - 0.052
	100	0.048 - 0.045	0.051 - 0.049	0.054 - 0.052	0.052 - 0.052
	250	0.053 - 0.051	0.053 - 0.053	0.057 - 0.055	0.053 - 0.054
	1000	0.051 - 0.051	0.05 - 0.049	0.049 - 0.048	0.053 - 0.051

Tabla 1: Tanto por uno de veces que rechazamos  $H_0$  cuando los datos provienen de un modelo normal con matriz diagonal, a partir del contraste de diagonalidad y del test de Bartlett.

A partir de los valores de la tabla, deducimos que el cuando  $N$  es pequeño el test que hemos definido está ligeramente sesgado, se trata de un test conservador, ya que rechaza más de lo que debería. Cuando aumentamos  $N$ , este sesgo disminuye, y ambos test funcionan de forma muy similar. Tanto el valor de  $p$  como el valor de  $\gamma$  no tienen mucha influencia en los resultados.

En segundo lugar, vamos a comparar los resultados de ambos test cuando nos alejamos de  $H_0$ . Vamos a considerar una matriz con autovalores fijos sobre la que realizamos giros de ángulo  $\alpha$ .

$$\Sigma = U(\alpha)^T \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} U(\alpha)$$

Al cambiar los autovalores, la potencia de los dos test sería similar, el único cambio significativo está en que si la diferencia entre los autovalores es mayor, las direcciones están mejor determinadas y necesitaremos valores de  $\alpha$  más pequeños para rechazar  $H_0$ . Comparamos los valores fijando  $p = 0,05$ , y cambiando el valor de  $N$ :

N	$\alpha$				
	0	0.01	0.03	0.05	0.1
25	0.059 - 0.05	0.058 - 0.051	0.057 - 0.048	0.058 - 0.05	0.076 - 0.067
50	0.054 - 0.051	0.054 - 0.05	0.057 - 0.054	0.059 - 0.056	0.084 - 0.079
100	0.05 - 0.048	0.056 - 0.054	0.059 - 0.057	0.068 - 0.065	0.104 - 0.101
250	0.053 - 0.052	0.055 - 0.054	0.066 - 0.066	0.082 - 0.082	0.191 - 0.189
1000	0.049 - 0.049	0.059 - 0.059	0.106 - 0.106	0.212 - 0.212	0.598 - 0.597

Tabla 2: Tanto por uno de veces que se rechaza  $H_0$ , cuando tenemos simulaciones de una distribución normal con un giro de ángulo  $\alpha$  en los ejes.

Los resultados son de nuevo muy parecidos. Para valores pequeños de  $N$ , habíamos visto que el test que hemos definido a partir de la medida de diagonalidad era conservador. Esta propiedad se mantiene, y por tanto para valores pequeños de  $N$  tiene más potencia en la hipótesis alternativa.

Finalmente, vamos a estudiar el comportamiento en un ejemplo con datos que no provienen de una distribución normal. Para ello, vamos a trabajar con una mixtura de normales, en la que los datos provienen de una distribución  $N(0, \Sigma_1)$  con probabilidad 0.8, y de una  $N(0, \Sigma_2)$  con probabilidad 0.2, siendo:

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0,1 \end{pmatrix} \quad \Sigma_2 = c \cdot I_d$$

En esta situación, la matriz de covarianza de los datos va a ser diagonal. Vamos a estudiar el comportamiento de los test cuando cambiamos el valor de  $c$ , para diferente tamaño  $N$ . Fijamos de nuevo  $p = 0,05$ .

N	$c$				
	1	5	10	20	50
25	0.061 - 0.054	0.228 - 0.213	0.326 - 0.31	0.386 - 0.373	0.432 - 0.418
50	0.058 - 0.053	0.229 - 0.22	0.315 - 0.307	0.363 - 0.355	0.391 - 0.384
100	0.05 - 0.049	0.225 - 0.222	0.306 - 0.303	0.354 - 0.351	0.39 - 0.387
250	0.052 - 0.052	0.229 - 0.228	0.303 - 0.302	0.355 - 0.354	0.378 - 0.377
1000	0.054 - 0.054	0.223 - 0.222	0.294 - 0.294	0.342 - 0.342	0.375 - 0.375

Tabla 3: Tanto por uno de veces que rechazamos  $H_0$ , cuando los datos provienen de una mixtura de normales con matriz de covarianzas diagonal.

Llegamos a la misma conclusión que antes. Para valores pequeños de  $N$ , el test que hemos definido es más conservador, mientras que cuando aumentamos  $N$  los dos test funcionan de forma análoga.

Finalmente, a partir de estas ideas, podemos definir también un test para la hipótesis:

$$H_0 : \Sigma_i \text{ es diagonal} \quad \forall i = 1, \dots, k$$

Utilizando el comportamiento asintótico (16), supongamos que ahora tenemos muestras aleatorias simples de tamaño  $n_1, \dots, n_k$  de distribuciones  $N(0, \Sigma_1), \dots, N(0, \Sigma_k)$  independientes. Si denotamos por  $S_{1,n_1}, \dots, S_{k,n_k}$  a las matrices de covarianzas muestrales obtenidas a partir de esas muestras, tenemos que bajo  $H_0$ :

$$n_1(1 - \mathcal{D}(S_{1,n_1})) + \dots + n_k(1 - \mathcal{D}(S_{k,n_k})) \xrightarrow[n_1, \dots, n_k \rightarrow \infty]{d} Z_{\Sigma_1} + \dots + Z_{\Sigma_k} \quad (17)$$

que es una suma de  $\chi^2$  generalizadas independientes, y por tanto es también una distribución  $\chi^2$  generalizada. A partir de toda la teoría desarrollada, es sencillo comprobar que bajo la hipótesis alternativa, la velocidad de convergencia es  $\sqrt{n}$ . Con las mismas ideas que antes, se define un contraste para la hipótesis  $H_0 : \Sigma_i$  es diagonal  $\forall i = 1, \dots, k$ .

## 6. Medida de esfericidad

De forma análoga a la sección anterior, ahora vamos a utilizar ideas relacionadas con la distancia de Wasserstein para proponer una medida de aproximación a la esfericidad de una matriz simétrica definida positiva, y vamos a estudiar su comportamiento asintótico en el caso en que estamos trabajando con distribuciones Gaussianas. La notación a lo largo de esta sección será la misma que hemos venido utilizando hasta ahora.

### 6.1. Definición de la medida

Dada una matriz de covarianzas definida positiva  $\Sigma$ , parece razonable pensar que si  $\Sigma$  está “próxima” a la esfericidad, existirá una matriz isotrópica  $p^2 I_d$ , con  $p > 0$ , tal que la distancia de Wasserstein a esa matriz sea pequeña. Con esta idea, nos planteamos buscar la matriz isotrópica que minimiza:

$$W_2^2(\Sigma, p^2 I) = \sum_{i=1}^d (\lambda_i^{1/2} - p)^2$$

Utilizando la caracterización de la media como el valor que minimiza la suma de cuadrados, tenemos que el valor de  $p > 0$  que minimiza la distancia a la isotropía es:

$$p = \frac{\sum_{i=1}^d \lambda_i^{1/2}}{d} = \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2})}{d} = \frac{\lambda(\Sigma)}{d}$$

Con esta notación, se tiene que:

$$\Sigma \text{ es esférica} \Leftrightarrow \Sigma = \left(\frac{\lambda(\Sigma)}{d}\right)^2 I \Leftrightarrow W_2^2\left(\Sigma, \left(\frac{\lambda(\Sigma)}{d}\right)^2 I\right) = 0$$

Por tanto, hemos visto que dada una matriz  $\Sigma \in \mathbb{S}^d$ :

$$W_2^2\left(\Sigma, \left(\frac{\lambda(\Sigma)}{d}\right)^2 I\right) \geq 0$$

y se da la igualdad si y sólo si  $\Sigma$  es esférica. Desarrollando la expresión para la distancia de Wasserstein, se tiene que:

$$\begin{aligned} W_2^2\left(\Sigma, \left(\frac{\lambda(\Sigma)}{d}\right)^2 I\right) &= \text{tr}(\Sigma) + \frac{\lambda^2(\Sigma)}{d^2} \text{tr}(I) - 2\frac{\lambda(\Sigma)}{d} \text{tr}(\Sigma^{1/2}) = \\ &= \text{tr}(\Sigma) - \frac{\lambda^2(\Sigma)}{d} \geq 0 \end{aligned}$$

Y se tiene por tanto que  $\lambda(\Sigma) \leq \sqrt{d} \text{tr}(\Sigma)^{1/2}$  y además:

$$\lambda(\Sigma) = \sqrt{d} \text{tr}(\Sigma)^{1/2} \Leftrightarrow \Sigma \text{ es esférica}$$

Uniando esta desigualdad a la desigualdad (13), obtenemos la siguiente cadena de desigualdades:

$$\text{tr}(\Sigma)^{1/2} < \lambda(\Sigma) = \text{tr}(\Sigma)^{1/2} \leq \sqrt{d} \text{tr}(\Sigma)^{1/2}$$

La medida de esfericidad que vamos a tomar viene dada por:

$$\mathcal{E}(\Sigma) = \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{(\sqrt{d} - 1) \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}$$



que por lo visto antes, tomará valores en  $(0, 1]$  y cumple que  $\mathcal{E}(\Sigma) = 1$  si y sólo si  $\Sigma$  es esférica. Aunque el valor 0 no se alcance para ninguna matriz  $\Sigma$  simétrica y definida positiva, podemos alcanzar valores arbitrariamente bajos del cociente tomando matrices con su primer autovalor positivo, y haciendo el resto arbitrariamente pequeños.

Vamos a ver de forma gráfica cómo se comporta el cociente en dimensión 2. Para ello, vamos a calcular el valor de la medida de diagonalización  $\mathcal{E}$  para la matriz:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma^2 \end{pmatrix}$$

donde  $\gamma \in (0, 1)$ . El gráfico queda:

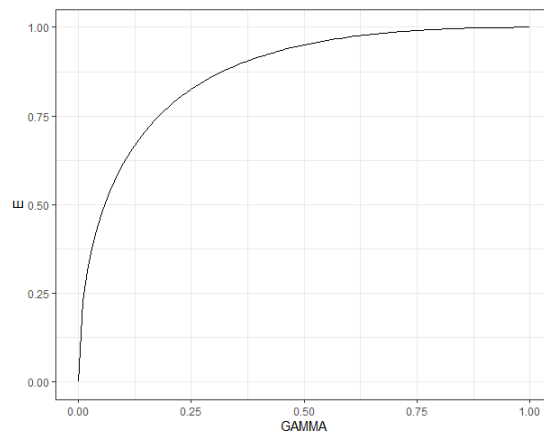


Figura 2: Valor de  $\mathcal{E}$  en función de  $\gamma \in (0, 1)$

En dimensión 3 ocurre algo similar. En la siguiente gráfica representamos el valor de la medida de esfericidad para la matriz:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma^2 & 0 \\ 0 & 0 & \delta^2 \end{pmatrix}$$

en función de  $\gamma, \delta \in (0, 1)$ .

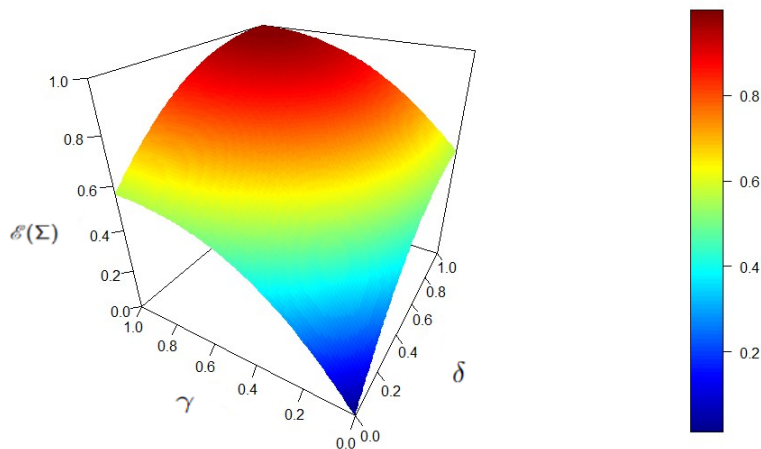


Figura 3: Valor de  $\mathcal{E}$  en función de  $\gamma, \delta \in (0, 1)$

## 6.2. Diferenciales de la función de esfericidad

Al igual que para la medida de diagonalidad, podemos plantearnos hallar el comportamiento asintótico a partir de las diferenciales de la función de esfericidad. Considerando al igual que antes las funciones:

$$x(\Sigma) = \text{tr}(\Sigma^{1/2}) = \sum_{i=1}^d \lambda_i^{1/2}$$

$$z(\Sigma) = \text{tr}(\Sigma)^{1/2} = \left( \sum_{i=1}^d \lambda_i \right)^{1/2}$$

Entonces si ahora consideramos la función:

$$f(x, z) = \frac{x - z}{(\sqrt{d} - 1)z}$$

definida en los puntos  $(x, z)$  con  $z > 0$ , se tiene que:

$$\mathcal{E}(\Sigma) = \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2}) - \text{tr}(\Sigma)^{1/2}}{(\sqrt{d} - 1) \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} = f(x(\Sigma), z(\Sigma))$$

En la sección 5.2 ya habíamos calculado las diferenciales de primer y segundo orden para las funciones  $x(\Sigma)$  y  $z(\Sigma)$ . Por otra parte, es sencillo calcular el gradiente y la matriz Hessiana de  $f$  en la región  $z > 0$ .

$$\nabla f(x, z) = \frac{1}{d^{1/2} - 1} \left( \frac{1}{z}, \frac{-x}{z^2} \right)$$

$$\nabla^2 f(x, z) = \frac{1}{d^{1/2} - 1} \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{z^2} \\ \frac{-1}{z^2} & \frac{2x}{z^3} \end{pmatrix}$$

y por tanto: si  $\underline{v} \in \mathbb{R}^2$ :

$$df((x, z); \underline{v}) = \frac{1}{d^{1/2} - 1} \left( \frac{1}{z}, \frac{-x}{z^2} \right) \cdot \underline{v}$$

$$df^2((x, z); \underline{v}) = \underline{v}^T \frac{1}{d^{1/2} - 1} \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{z^2} \\ \frac{-1}{z^2} & \frac{2x}{z^3} \end{pmatrix} \underline{v}$$

Para hallar la primera diferencial, utilizamos la expresión de la regla de la cadena que aparece en el corolario [3]:

$$\begin{aligned} d\mathcal{E}(\Sigma; H) &= df\left((x(\Sigma), z(\Sigma)); (dx(\Sigma; H), dz(\Sigma; H))\right) = \\ &= \frac{1}{(d^{1/2} - 1) \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \left( \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma^{-1/2} H) - \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2})}{\text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \frac{1}{2} \text{tr}(\Sigma)^{-1/2} \text{tr}(H) \right) = \\ &= \text{tr} \left( \frac{1}{2} \frac{1}{(d^{1/2} - 1) \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \left( \Sigma^{-1/2} - \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2})}{\text{tr}(\Sigma)} I \right) H \right) = \text{tr}(L_\Sigma G) \end{aligned}$$

si denotamos

$$L_\Sigma = \frac{1}{2} \frac{1}{(d^{1/2} - 1) \text{tr}(\Sigma)^{1/2}} \left( \Sigma^{-1/2} - \frac{\text{tr}(\Sigma^{1/2})}{\text{tr}(\Sigma)} I \right)$$

La segunda diferencial de la función de esfericidad se calcula utilizando la regla de la cadena para la segunda diferencial, que aparece en [4].

$$\begin{aligned}
d^2 \mathcal{E}(\Sigma; H) &= df^2\left((x(\Sigma), z(\Sigma)); (dx(\Sigma; H), dz(\Sigma; H))\right) + \\
&\quad + df\left((x(\Sigma), z(\Sigma)); (dx^2(\Sigma; H), dz^2(\Sigma; H))\right) = \\
&= \left(\frac{1}{2} \operatorname{tr}(\Sigma^{-1/2} H), \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\Sigma)^{-1/2} \operatorname{tr}(H)\right) \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{\operatorname{tr}(\Sigma)} \\ \frac{-1}{\operatorname{tr}(\Sigma)} & \frac{2 \operatorname{tr}(\Sigma^{1/2})}{\operatorname{tr}(\Sigma)^{3/2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\Sigma^{-1/2} H) \\ \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\Sigma)^{-1/2} \operatorname{tr}(H) \end{pmatrix} + \\
&+ \frac{1}{(d^{1/2} - 1) \operatorname{tr}(\Sigma)^{1/2}} \begin{pmatrix} 1, -\frac{\operatorname{tr}(\Sigma^{1/2})}{\operatorname{tr}(\Sigma)^{1/2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \operatorname{diag}(\bar{H})^T (\nabla^2 g(\Lambda(A))) \operatorname{diag}(\bar{H}) + \operatorname{tr}(\mathcal{A}(H \odot H)) \\ \frac{-1}{4 \operatorname{tr}(\Sigma)^{3/2}} \operatorname{tr}(H)^2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

### 6.3. Comportamiento asintótico

Para hallar la distribución asintótica, vamos a seguir el mismo razonamiento que utilizamos para hallar el comportamiento asintótico de la medida de diagonalidad en la sección 5.3. Recordemos que habíamos probado que:

$$\sqrt{n}(S_n - \Sigma) \rightarrow_d U \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2} U^T$$

#### 6.3.1. Matriz $\Sigma$ no esférica

Al igual que en 5.3.1, aplicando el delta método llegamos de forma sencilla a que:

$$\sqrt{n}(\mathcal{E}(S_n) - \mathcal{E}(\Sigma)) \rightarrow_d \operatorname{tr}(L_\Sigma U \Lambda^{1/2} W \Lambda^{1/2} U^T)$$

que sigue una distribución normal, centrada y con varianza dada por:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Var}\left(\operatorname{tr}(\Lambda^{1/2} U^T L_\Sigma U \Lambda^{1/2} W)\right) &= \mathbb{E}\left(\operatorname{tr}(\Lambda^{1/2} U^T L_\Sigma U \Lambda^{1/2} W)^2\right) = \\
&= 2 \operatorname{tr}\left((\Lambda^{1/2} U^T L_\Sigma U \Lambda^{1/2})^2\right) = 2 \operatorname{tr}\left((L_\Sigma \Sigma)^2\right)
\end{aligned}$$

Y hemos visto entonces que:

$$\sqrt{n}(\mathcal{E}(S_n) - \mathcal{E}(\Sigma)) \rightarrow_d N(0, 2 \operatorname{tr}((L_\Sigma \Sigma)^2)) \quad (18)$$

Cuando  $\Sigma$  no es esférica, entonces  $\operatorname{tr}(L_\Sigma) \neq 0$ , y lo que hemos probado en ese caso es:

$$\sqrt{\frac{n}{2 \operatorname{tr}((L_\Sigma \Sigma)^2)}} (\mathcal{E}(S_n) - \mathcal{E}(\Sigma)) \rightarrow_d N(0, 1) \quad (19)$$

Cuando  $\Sigma$  es esférica, nos queda una distribución degenerada. Para estudiar el comportamiento asintótico en ese caso, tenemos que utilizar la segunda diferencial.

### 6.3.2. Matriz $\Sigma$ esférica

Suponemos en este caso que  $\Sigma$  es esférica,  $\Sigma = \sigma I$ , y por tanto  $\mathcal{E}(\Sigma) = 1$ ,  $U = I$ ,  $\Lambda = \sigma I$  y  $d\mathcal{E}(\Sigma; H) = 0$ .

$$\sqrt{n}(S_n - \Sigma) \rightarrow_d \sigma W$$

Utilizando la aproximación por la segunda diferencial:

$$\begin{aligned} n(\mathcal{E}(S_n) - \mathcal{E}(\Sigma)) &= \frac{\mathcal{E}\left(\Sigma + \frac{1}{\sqrt{n}}(\sqrt{n}(S_n - \Sigma))\right) - \mathcal{E}(\Sigma)}{\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)^2} = \\ &= \frac{\mathcal{E}\left(\Sigma + \frac{1}{\sqrt{n}}(\sqrt{n}(S_n - \Sigma))\right) - \mathcal{E}(\Sigma) - \frac{1}{\sqrt{n}}d\mathcal{E}(\Sigma; (\sqrt{n}(S_n - \Sigma)))}{\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)^2} = \\ &= \frac{d^2\mathcal{E}(\Sigma; \sqrt{n}(S_n - \Sigma))}{2} + o_p(1) \end{aligned}$$

y por el delta método:

$$n(\mathcal{E}(S_n) - \mathcal{E}(\Sigma)) \rightarrow_d \frac{1}{2}d^2\mathcal{E}(\Sigma; \sigma W)$$

Cuando  $\Sigma = \sigma I$ , se puede comprobar que en ese caso la mayoría de sumandos de la segunda diferencial se anulan, y queda la expresión:

$$\begin{aligned} d^2\mathcal{E}(\Sigma; H) &= \\ &= \frac{1}{(d^{1/2} - 1)\sigma^{1/2}d^{1/2}} \left(1, -d^{1/2}\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^n \frac{-1}{4}\sigma^{-3/2}h_{ii}^2 + \text{tr}(\mathcal{A}(H \odot H))\right) = \\ &= \frac{1}{(d^{1/2} - 1)\sigma^{1/2}d^{1/2}} \left(\frac{-1}{4}\sigma^{-3/2}\left(\sum_{i=1}^n h_{ii}^2 + \sum_{i \neq j} h_{ij}^2\right) + \frac{1}{4\sigma^{3/2}d}\left(\sum_{i=1}^n h_{ii}\right)^2\right) = \\ &= \frac{-1}{4(d^{1/2} - 1)\sigma^2 d^{1/2}} \left(\sum_{i=1}^n h_{ii}^2 + 2\sum_{i < j} h_{ij}^2 - \frac{1}{d}\left(\sum_{i=1}^n h_{ii}\right)^2\right) = \end{aligned}$$

y por tanto tenemos que:

$$n(1 - \mathcal{E}(S_n)) \rightarrow_d \frac{1}{2} \frac{1}{4(d^{1/2} - 1)d^{1/2}} \left(\sum_{i=1}^n W_{ii}^2 + 2\sum_{i < j} W_{ij}^2 - \frac{1}{d}\left(\sum_{i=1}^n W_{ii}\right)^2\right)$$

O lo que es equivalente:

$$8n(d - d^{1/2})(1 - \mathcal{E}(S_n)) \rightarrow_d \sum_{i=1}^n W_{ii}^2 + 2\sum_{i < j} W_{ij}^2 - \frac{1}{d}\left(\sum_{i=1}^n W_{ii}\right)^2 \quad (20)$$

La distribución límite se trata de una  $\chi^2$  generalizada, y es la distribución de una forma cuadrática asociada a un vector normal. En particular, es la distribución de  $X^T A X$  si  $X$  es un vector aleatorio normal  $\frac{d(d+1)}{2}$ -dimensional con matriz de covarianzas:

$$\text{Cov}(X) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 2 \end{pmatrix}$$

y la matriz A es:

$$A = \left[ \begin{array}{c|c} A_0 & 0 \\ \hline 0 & I_{d(d-1)/2} \end{array} \right]$$

siendo  $A_0$  la matriz de tamaño  $d \times d$  dada por:

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{d} & -\frac{1}{2d} & \cdots & -\frac{1}{2d} \\ -\frac{1}{2d} & 1 - \frac{1}{d} & \cdots & -\frac{1}{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{2d} & -\frac{1}{2d} & \cdots & 1 - \frac{1}{d} \end{pmatrix}$$

#### 6.4. Test de esfericidad

A partir del comportamiento asintótico, podemos llevar a cabo de forma sencilla un test de esfericidad asintótico sobre una matriz de covarianzas  $\Sigma$  definida positiva. Hemos probado que:

$$8n(d - d^{1/2})(1 - \mathcal{E}(S_n)) \rightarrow_d V_d := \sum_{i=1}^n W_{ii}^2 + 2 \sum_{i < j} W_{ij}^2 - \frac{1}{d} \left( \sum_{i=1}^n W_{ii} \right)^2 \quad (21)$$

La distribución límite es una distribución  $\chi^2$  generalizada, que sólo depende de la dimensión  $d$  y no de la matriz  $\Sigma$ . Sea  $V_d$  una variable aleatoria con dicha distribución. Podemos realizar un test sobre la hipótesis

$$H_0 : \Sigma \text{ es esférica}$$

de manera sencilla. Si queremos obtener un test de nivel  $\alpha$ , hallamos el valor  $x_\alpha$  tal que:

$$P(V_d \leq x_\alpha) = 1 - \alpha$$

y rechazamos la hipótesis  $H_0$  si:

$$8n(d - d^{1/2})(1 - \mathcal{E}(S_n)) > x_\alpha$$

Vamos a comparar el test de esfericidad definido con el test de Mauchly [16]. La comparación se realiza de forma análoga a la del test de esfericidad, simulando  $M = 10000$  matrices de covarianzas muestrales a partir de muestras de tamaño  $N$  en diferentes situaciones, y viendo el tanto por uno de veces que el test de nivel  $p = 0,05$  rechaza. Comenzamos mostrando el comportamiento cuando los datos vienen de una distribución normal con matriz de covarianzas:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix}$$

para diferentes valores de  $\gamma \in (0, 1)$ . Cuando  $\gamma = 0$ , nos encontramos bajo la hipótesis nula, y cuando disminuimos el valor de  $\gamma$  nos alejamos progresivamente de  $H_0$ . Los resultados que aparecen se corresponden con el test de esfericidad definido, y el test de Mauchly, en ese orden.

N	$\gamma$				
	1	0.95	0.9	0.8	0.5
25	0.056 - 0.065	0.056 - 0.064	0.057 - 0.069	0.076 - 0.084	0.306 - 0.33
50	0.052 - 0.056	0.057 - 0.062	0.06 - 0.063	0.106 - 0.112	0.564 - 0.576
100	0.05 - 0.052	0.052 - 0.054	0.07 - 0.073	0.15 - 0.153	0.88 - 0.882
250	0.05 - 0.051	0.063 - 0.063	0.105 - 0.106	0.325 - 0.327	0.999 - 0.999
1000	0.05 - 0.05	0.1 - 0.101	0.3 - 0.301	0.896 - 0.896	1 - 1

Tabla 4: Tanto por uno de veces que rechazamos  $H_0$  para diferentes valores de  $\gamma \in (0, 1)$

Viendo los resultados de la tabla, se ve que para valores pequeños de  $N$ , el test que hemos definido está menos sesgado que el test de Mauchly, que es más conservador. Esto hace que cuando nos alejamos de la hipótesis nula, el test de Mauchly también rechaza más para valores pequeños de  $N$ , tiene más potencia en la hipótesis alternativa en esa situación. Cuando aumentamos en valor de  $N$ , el comportamiento de los dos test es muy similar.

Para terminar la comparación, vamos a estudiar el comportamiento en el caso en que los datos no provienen de una distribución normal. Simulamos una mixtura de normales, donde los datos van a venir de una distribución  $N(0, I_d)$  con probabilidad 0.8, y de una  $N(0, c \cdot I_d)$  con probabilidad 0.2, y por tanto la matriz de covarianzas de la distribución va a ser esférica. Vamos a estudiar el comportamiento de los test cuando cambiamos el valor de  $c$ , para diferente tamaño  $N$ , y fijando  $p = 0,05$ .

N	$c$				
	1	5	10	20	50
25	0.056 - 0.064	0.161 - 0.178	0.296 - 0.313	0.428 - 0.445	0.538 - 0.555
50	0.052 - 0.056	0.173 - 0.181	0.311 - 0.319	0.438 - 0.444	0.528 - 0.536
100	0.052 - 0.053	0.185 - 0.188	0.323 - 0.326	0.429 - 0.433	0.504 - 0.509
250	0.048 - 0.049	0.19 - 0.191	0.324 - 0.325	0.426 - 0.428	0.506 - 0.508
1000	0.051 - 0.051	0.19 - 0.19	0.326 - 0.326	0.425 - 0.425	0.495 - 0.495

Tabla 5: Tanto por uno de veces que rechazamos  $H_0$  para diferentes valores de  $c$

Las conclusiones en este caso son las mismas. Para valores pequeños de  $N$ , el test de Mauchly es más conservador, mientras que para valores grandes de  $N$  ambos funcionan de forma muy similar.

Al igual que para el test de diagonalidad, podemos generalizar el resultado para cuando tenemos muestras aleatorias simples de tamaño  $n_1, \dots, n_k$  de distribuciones  $N(0, \Sigma_1), \dots, N(0, \Sigma_k)$  independientes. Denotando por  $S_{1, n_1}, \dots, S_{k, n_k}$  a las matrices de covarianzas muestrales obtenidas a partir de esas muestras, tenemos que bajo  $H_0$ :

$$8(d - d^{1/2}) \left( n_1(1 - \mathcal{E}(S_{1, n_1})) + \dots + n_k(1 - \mathcal{E}(S_{k, n_k})) \right) \xrightarrow[n_1, \dots, n_k \rightarrow \infty]{d} V_d^1 + \dots + V_d^k \quad (22)$$

donde  $V_d^1, \dots, V_d^k$  son v.a.i.i.d. con  $V_d^i = V_d$ , siendo  $V_d$  la variable aleatoria definida en (21). Por tanto,  $V_d^1 + \dots + V_d^k$  es una suma de  $\chi^2$  generalizadas independientes, y por tanto es también una distribución  $\chi^2$  generalizada. A partir de toda la teoría desarrollada, es sencillo comprobar que bajo la hipótesis alternativa, la velocidad de convergencia es  $\sqrt{n}$ . Con las mismas ideas que antes, se define un contraste para la hipótesis

$$H_0 : \Sigma_i \text{ es esférica} \quad \forall i = 1 \dots, k$$

## 7. Medida de proporcionalidad

A partir de la medida de esfericidad de la sección anterior, utilizando ideas sencillas podemos definir medidas sobre otras características de una matriz de covarianzas  $\Sigma$  definida positiva. Por ejemplo, supongamos que queremos estudiar la hipótesis de que una matriz de covarianzas  $\Sigma$  sea proporcional a otra matriz de covarianzas  $\Sigma_0$ . Se cumple que:

$$\Sigma = c\Sigma_0 \Leftrightarrow \Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2} = cI \Leftrightarrow \Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2} \text{ es esférica} \quad (23)$$

Por tanto, podemos tomar como medida de proporcionalidad a la matriz  $\Sigma_0$  la función definida por:

$$\mathcal{P}_{\Sigma_0}(\Sigma) = \mathcal{E}(\Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2})$$

Sabemos que si  $\{Z_n\}_{n=1}^{\infty}$  son v.a.i.i.d.  $N(0, \Sigma)$ , entonces  $\{\Sigma_0^{-1/2}Z_n\}_{n=1}^{\infty}$  son v.a.i.i.d.  $N(0, \Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2})$ . Además, si denotamos por  $S_n$  a la matriz de covarianzas muestral de  $Z_1, \dots, Z_n$ , entonces la matriz de covarianzas muestral de  $\Sigma_0^{-1/2}Z_1, \dots, \Sigma_0^{-1/2}Z_n$  es  $\Sigma_0^{-1/2}S_n\Sigma_0^{-1/2}$ . Por tanto, utilizando la propiedad (23) tenemos que:

- Si  $\Sigma$  no es proporcional a  $\Sigma_0$ , entonces  $\Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2}$  no es esférica, y por la propiedad (18) tenemos que utilizando la notación de la sección anterior:

$$\begin{aligned} \sqrt{n}(\mathcal{P}_{\Sigma_0}(S_n) - \mathcal{P}_{\Sigma_0}(\Sigma)) &= \sqrt{n}\left(\mathcal{E}(\Sigma_0^{-1/2}S_n\Sigma_0^{-1/2}) - \mathcal{E}(\Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2})\right) \rightarrow_d \\ &\rightarrow_d N\left(0, 2 \operatorname{tr}\left(\left(L_{\Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2}}\Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2}\right)^2\right)\right) \end{aligned}$$

- Si  $\Sigma$  es proporcional a  $\Sigma_0$ , entonces  $\Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2}$  es esférica, y por la propiedad (20) tenemos que

$$8n(d - d^{1/2})(1 - \mathcal{P}_{\Sigma_0}(S_n)) = 8n(d - d^{1/2})\left(1 - \mathcal{E}(\Sigma_0^{-1/2}S_n\Sigma_0^{-1/2})\right) \rightarrow_d \quad (24)$$

$$\rightarrow_d \sum_{i=1}^n W_{ii}^2 + 2 \sum_{i < j} W_{ij}^2 - \frac{1}{d} \left(\sum_{i=1}^n W_{ii}\right)^2$$

Utilizando el comportamiento asintótico, se puede realizar un contraste sobre la hipótesis:

$$H_0 : \Sigma = c\Sigma_0 \quad \text{para algún } c > 0$$

simplemente realizando un test sobre la hipótesis:

$$H_0 : \Sigma_0^{-1/2}\Sigma\Sigma_0^{-1/2} \quad \text{es esférica}$$

El comportamiento del test va a ser análogo al comportamiento del test de esfericidad. De la misma forma, si tenemos muestras aleatorias simples de tamaño  $n_1, \dots, n_k$  de distribuciones  $N(0, \Sigma_1), \dots, N(0, \Sigma_k)$  independientes, podemos realizar un contraste sobre la hipótesis:

$$H_0 : \Sigma_i = c_i\Sigma_0 \quad \text{para algún } c_i > 0, \forall i = 1, \dots, k$$

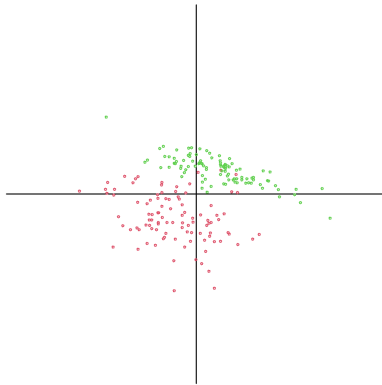
a partir del contraste sobre:

$$H_0 : \Sigma_0^{-1/2}\Sigma_i\Sigma_0^{-1/2} \quad \text{es esférica } \forall i = 1, \dots, k$$

## 8. Aplicaciones

Al trabajar con datos multivariantes, generalmente aparecen distintas relaciones entre las variables involucradas en el problema. Estas relaciones hacen que los resultados de los análisis que se hacen sobre datos multivariantes no sean tan sencillos de interpretar como en el caso univariante, lo que motiva la utilización de técnicas para hallar unas variables adecuadas en las que los problemas se expliquen de forma más sencilla, como es el Análisis de Componentes Principales (PCA).

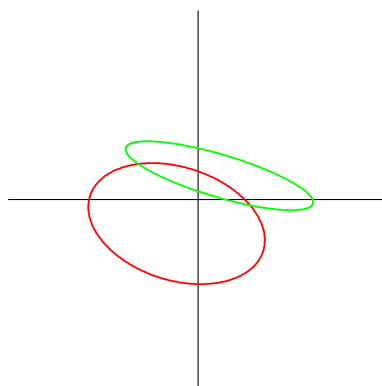
En muchos ejemplos, tenemos datos que provienen de individuos de varios grupos, y por tanto el problema de encontrar unas variables que nos permitan explicar de forma sencilla los datos se vuelve aún más complicado.



Esta situación aparece frecuentemente en muchas áreas. En los datos que aparecen arriba hay dos grupos, se podrían corresponder con un estudio realizado sobre hombres y mujeres. En numerosos campos aparecen situaciones de este tipo:

- En taxonomía, si realizamos mediciones sobre individuos de distintas especies.
- En medicina, estudiando individuos con diferentes variedades de una enfermedad

En esta situación, parece razonable pensar que las matrices de covarianza de cada uno de los grupos, representadas en el gráfico a partir de sus elipses de confianza, guarden alguna relación entre sí.



Se pueden plantear muchos modelos distintos para intentar explicar la relación existente en la estructura de las matrices de covarianzas de los distintos grupos. En [10], Flury define una jerarquía entre las distintas relaciones que pueden verificar las matrices de covarianzas. Supongamos que tenemos datos de  $d$  variables, medidos en  $k$  grupos, que provienen de distribuciones de una misma familia de localización y escala con matrices de covarianzas  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k \in \mathbb{S}_{>0}^d$ . En esta situación, podemos plantear las siguientes hipótesis:



1. Las matrices de covarianzas son iguales:

$$H_0 : \Sigma_1 = \dots = \Sigma_k$$

2. Las matrices de covarianzas son proporcionales:

$$H_{PROP} : \Sigma_i = a_i \Sigma_1 \text{ para algún } a_i > 0 \quad \forall i = 2, \dots, k$$

3. Modelo de Componentes Principales Comunes(CPC). Se quiere estudiar la hipótesis de que todas las matrices de covarianzas tengan los mismo ejes principales, es decir:

$$H_{CPC} : \Sigma_i = U \Lambda_i U^T \quad i = 1, \dots, k$$

donde:

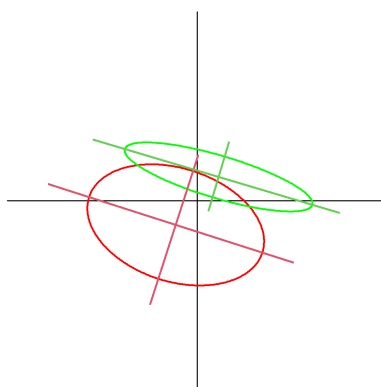
- $U$  es una matriz ortogonal  $d \times d$ .
  - $\Lambda_i$  es la matriz diagonal con los autovalores de  $\Sigma_i$ .
4. Modelo de Componentes Principales Comunes Parcial (CPC(q)). Se quiere estudiar la hipótesis de que todas las matrices de covarianzas compartan  $q$  direcciones principales, con  $1 \leq q < d$ , permitiendo que el resto de direcciones principales varíen entre los grupos.

$$H_{CPC(q)} : \Sigma_i = U_i \Lambda_i U_i^T \quad i = 1, \dots, k$$

donde:

- $U_i = (V_0, V_i)$  es una matriz ortogonal  $d \times d$  tal que  $V_0$  es una matriz  $d \times q$  que contiene por columnas las  $q$  direcciones principales comunes, y  $V_i$  es una matriz  $d \times (d - q)$  que contiene las direcciones principales que van cambiando en los distintos grupos.
  - $\Lambda_i$  es la matriz diagonal con los autovalores de  $\Sigma_i$ .
5. No existe ninguna relación entre  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$

La jerarquía de modelos explicada comienza por los modelos más restrictivos, y va avanzando hacia modelos menos restrictivos. Por ejemplo, en el ejemplo gráfico que estamos tratando, las hipótesis de igualdad y de proporcionalidad de las matrices de covarianzas parecen difíciles de asumir. Podríamos intentar estudiar la hipótesis de CPC.



Viendo la gráfica, esta hipótesis parece bastante más razonable que las anteriores, y podría ser más interesante trabajar con nuestros datos asumiendo esta hipótesis. En esta sección, nos vamos a centrar principalmente en estudiar los niveles 2) y 3) de la jerarquía de modelos, es decir, la hipótesis de proporcionalidad de las matrices de covarianza y la hipótesis de componentes principales comunes, aunque nos centraremos más en esta última. En el trabajo, vamos a tratar de ver cómo podemos aplicar las ideas del transporte óptimo a este problema, y cómo podemos establecer comparaciones entre los distintos modelos.

## 8.1. Componentes Principales Comunes

A lo largo de todo este apartado vamos a utilizar la siguiente notación. Tenemos vectores aleatorios independientes  $X_1, \dots, X_k$  con distribuciones en una misma familia de localización y escala, tales que  $\mathcal{L}(X_i) = P_{\mu_i, \Sigma_i}$ , siendo  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k \in \mathbb{S}_{>0}^d$  sus matrices de covarianza. Asumimos que para cada  $i = 1 \dots, k$  tenemos una muestra aleatoria simple de tamaño  $N_i = n_i + 1$ . Denotamos por  $S_1, \dots, S_k$  a las matrices de covarianza muestrales insesgadas.

### 8.1.1. Método de Flury: Máxima verosimilitud

El modelo de componentes principales comunes fue planteado inicialmente por Flury en [9], y propuso una solución bajo la hipótesis de que los datos provienen además de un modelo normal:

$$X_i \stackrel{d}{\sim} N(\mu_i, \Sigma_i)$$

Bajo esta situación, las matrices  $n_i S_i$  siguen una distribución Wishart  $W(d, n)$ . Podemos entonces hallar  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  que maximicen la función de verosimilitud:

$$L(\Sigma_1, \dots, \Sigma_k) = C \times \prod_{i=1}^k \exp\left(\text{tr}\left(-\frac{n_i}{2} \Sigma_i^{-1} \mathbf{S}_i\right) |\Sigma_i|^{-n_i/2}\right)$$

entre todas las matrices  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  definidas positivas que cumplen:

$$H_{CPC} : \Sigma_i = U \Lambda_i U^T \quad i = 1 \dots, k$$

La solución se halla mediante el algoritmo propuesto por Flury en [11], conocido como algoritmo FG (Flury-Gautschi). Uno de los problemas de este método es el elevado coste computacional. Sin embargo, tiene la ventaja de que cuando los datos provienen realmente de un modelo normal, si  $\hat{\Sigma}_1, \dots, \hat{\Sigma}_k$  es la solución del problema de maximización, utilizando la teoría de máxima verosimilitud podemos dar un estadístico para comparar  $H_{CPC}$ :

$$X_{CPC}^2 = -2 \log \frac{L(\hat{\Sigma}_1, \dots, \hat{\Sigma}_k)}{L(\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_k)} = \sum_{i=1}^k n_i \log \frac{|\hat{\Sigma}_i|}{|\mathbf{S}_i|} \sim \chi_{\frac{(k-1)p(p-1)}{2}}^2 \text{ bajo } H_{CPC} \quad (25)$$

### 8.1.2. Método de Krzanowski: Media muestral

Krzanowski propuso en [12] un método alternativo para estimar las componentes principales comunes, basado en una idea muy sencilla. Si se cumple la hipótesis de componentes principales comunes:

$$H_{CPC} : \Sigma_i = U \Lambda_i U^T \quad i = 1 \dots, k$$

donde  $U$  es una matriz ortogonal  $d \times d$ , entonces se verifica que:

$$\Sigma_1 + \dots + \Sigma_k = U(\Lambda_1 + \dots, \Lambda_k)U^T$$

Es decir, si todas las matrices  $\Sigma_i, i = 1 \dots, k$  diagonalizan en la base dada por las columnas de  $U$  (que son las componentes principales comunes), entonces la matriz  $\Psi = \Sigma_1 + \dots + \Sigma_k$  también diagonaliza en la misma base. Se puede obtener de forma sencilla un estimador de la matriz  $\Psi$  a partir de las matrices de covarianza muestrales:

$$T = S_1 + \dots + S_k$$

y podemos estimar las componentes principales comunes a partir de las componentes principales de la matriz  $T$ . Si hallamos una matriz  $L$  ortogonal tal que:

$$T = L \Lambda_T L^T$$

siendo  $\Lambda_T$  la matriz ortogonal que contiene los autovalores de  $T$ , entonces  $L$  nos dará una estimación de la matriz  $U$ , y las columnas de  $L$  nos darán una aproximación a las componentes principales comunes. Además, Krzanowski sugiere en [12], la posibilidad de trabajar con distintos pesos. Dados unos pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$ , si todas las matrices de covarianza diagonalizan en una misma base, entonces la matriz  $\lambda_1 \Sigma_1 + \dots + \lambda_k \Sigma_k$  también, y por tanto podríamos tomar como estimación de las CPC los ejes principales de la matriz:

$$\lambda_1 S_1 + \dots + \lambda_k S_k$$

Por otra parte, la principal idea del artículo reside en utilizar la aproximación a las componentes principales comunes halladas mediante la media para dar una estimación del estadístico de Flury (25), estimando las matrices  $\Lambda_i$  a partir de  $\bar{\Lambda}_i = \text{diag}(L^T S_i L)$ . Comentaremos esta idea más adelante, y veremos que existen situaciones en las que esta aproximación puede dar errores muy grandes.

### 8.1.3. Método alternativo: Baricentro

En este trabajo, vamos a proponer un método nuevo para la estimación de las componentes principales comunes. La idea es la misma que la que utiliza Krzanowski, pero ahora utilizando el baricentro en vez de la media muestral.

**Teorema 14.** Sean  $P_{\mu_1, \Sigma_1}, \dots, P_{\mu_k, \Sigma_k}$  probabilidades  $\mathbb{R}^d$  de una misma familia de localización y escala, con matrices de covarianzas  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$ , y sea  $\bar{P}$  el baricentro asociado a dichas probabilidades con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$ , que es una distribución de la misma familia de localización y escala con matriz de covarianzas  $\bar{\Sigma}$ . Si  $\{e_i\}_{i=1}^d$  es una base ortonormal en la cual las matrices de covarianzas de  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  son diagonales, entonces  $\bar{\Sigma}$  en esa base también es diagonal.

Por las propiedades de la distancia de Wasserstein, la matriz  $\bar{\Sigma}$  no depende de la familia de localización y escala a la que pertenezcan las distribuciones, tan sólo depende de  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$ . Por tanto, a partir de ahora hablaremos del baricentro de  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$  para referirnos a la matriz  $\bar{\Sigma}$ , que va a ser la matriz que verifique:

$$\sum_{i=1}^k \lambda_i W_2^2(\bar{\Sigma}, \Sigma_i) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^k \lambda_i W_2^2(\Sigma, \Sigma_i) : \Sigma \in \mathbb{S}_{>0}^d \right\}$$

De forma análoga al método propuesto por Krzanowski, la idea va a ser utilizar como aproximación a  $\bar{\Sigma}$  la matriz asociada al baricentro de las matrices  $S_1, \dots, S_k$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$ , y tomar sus ejes principales como aproximación a componentes principales comunes. Vamos a ver ahora cómo podemos dar una elección adecuada de los pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$ .

- Una propiedad interesante de las CPC halladas por Flury es que los ejes estimados se mantienen invariantes cuando aplicamos alguna homotecia a alguna de las matrices  $\Sigma_i$ , y por tanto no aumenta la importancia de una matriz en los ejes estimados al aumentar su tamaño. Vamos a intentar extender esta propiedad a los ejes estimados mediante los baricentros. Sabemos que si las matrices  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  se escriben:

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_{i,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_{i,d} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{i,d} \end{pmatrix}$$

Entonces la matriz del baricentro con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$  es:

$$\bar{\Sigma} = \begin{pmatrix} \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i \sigma_{i,1}^{1/2}\right)^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i \sigma_{i,2}^{1/2}\right)^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \left(\sum_{i=1}^k \lambda_i \sigma_{i,d}^{1/2}\right)^2 \end{pmatrix}$$

Si normalizamos las matrices para que la suma de las desviaciones típicas sea 1, es decir:

$$\Sigma_i^* = \frac{1}{\text{tr}(\Sigma_i^{1/2})^2} \Sigma_i = \frac{1}{\left(\sum_{j=1}^d \sigma_{i,j}^{1/2}\right)^2} \begin{pmatrix} \sigma_{i,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{i,d} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{i,d} \end{pmatrix}$$

entonces vamos a lograr que si  $H_{CPC}$  se verifica, el baricentro de  $\Sigma_1^*, \dots, \Sigma_k^*$  con pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$  cumple que la suma de sus desviaciones típicas también es 1.

- Por otra parte, parece interesante asignar los pesos  $\{\lambda_i\}_{i=1}^k$  en relación al tamaño de la muestra. Por ello, vamos a tomar:

$$\lambda_i = \frac{n_i}{\sum_{j=1}^k n_j} \quad i = 1 \dots, k \quad (26)$$

Por todo esto, vamos a proponer tomar como CPC las direcciones principales del baricentro de las matrices:

$$\frac{1}{\text{tr}(S_1^{1/2})^2} S_1, \dots, \frac{1}{\text{tr}(S_k^{1/2})^2} S_k$$

con los pesos dados por (26).

#### 8.1.4. Comparación de los distintos métodos

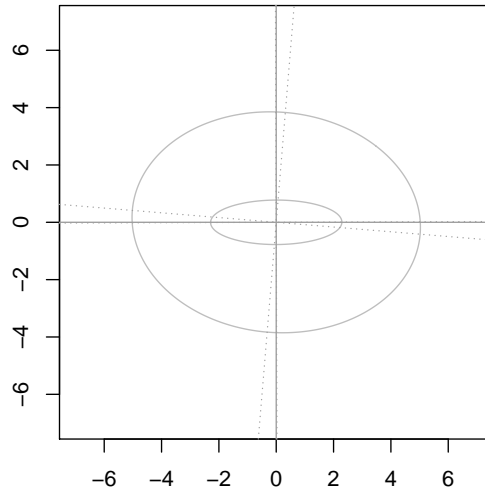
En este apartado, vamos a tratar de ilustrar con algunos ejemplos sencillos en dimensión 2 el comportamiento de los distintos métodos. Para ello, vamos a comenzar viendo que en general, cuando se verifica  $H_{CPC}$ , los tres métodos nos dan soluciones similares. En el siguiente ejemplo, se han obtenido 100 simulaciones de dos distribuciones normales con matrices de covarianza:

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0,1 \end{bmatrix} \quad \Sigma_2 = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2,8 \end{bmatrix}$$

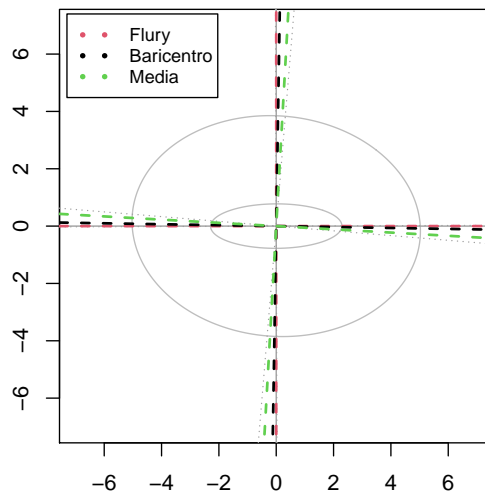
Las matrices de covarianzas muestrales que hemos obtenido son:

$$S_1 = \begin{bmatrix} 0,8756 & 0,0027 \\ 0,0027 & 0,1004 \end{bmatrix} \quad S_2 = \begin{bmatrix} 4,2219 & -0,1452 \\ -0,1452 & 2,4776 \end{bmatrix}$$

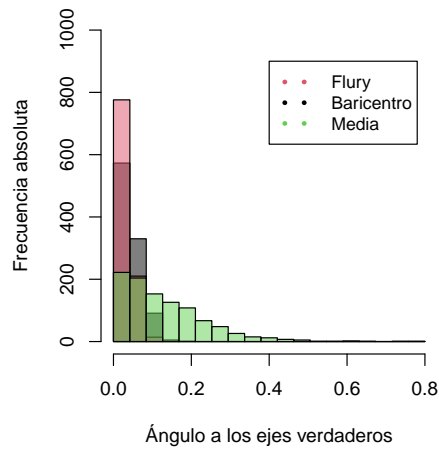
En la siguiente gráfica, representamos los elipses de confianza 95% asociados a las matrices de  $S_1$  y  $S_2$ . Los ejes discontinuos se corresponden con las direcciones principales de  $S_1$  y  $S_2$ , mientras que los ejes que aparecen representados con una línea continua se corresponden con las CPC teóricas.



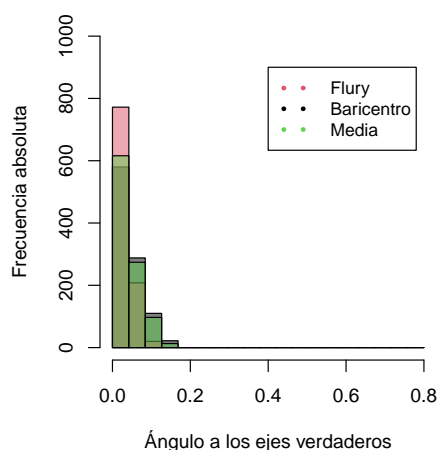
En esta situación, si calculamos los ejes estimados por los 3 métodos, nos quedan:



Repetiendo la simulación  $m = 1000$  veces, podemos estudiar en este ejemplo concreto la distribución del ángulo a las CPC verdaderas para cada uno de los métodos.



Observando la distribución de los ángulos, podemos observar que el método que mejor aproxima las CPC verdaderas es el método de Flury, seguido del baricentro, y la media nos da en este ejemplo los peores resultados. El mal comportamiento de la media en este ejemplo se debe fundamentalmente a que al no normalizar las matrices, da más importancia a la matriz cuya elipse tiene un tamaño mayor. Esta matriz está más próxima a la esfericidad, y por tanto al hacer simulaciones las componentes principales asociadas a este grupo tienen más variabilidad. Si nos planteamos estudiar la media de las matrices con la normalización utilizada para el baricentro, el histograma de variación de los ángulos para los tres métodos queda:



Con la normalización, la media muestral y el baricentro nos dan resultados muy similares, y muestran más variabilidad que el método de Flury. Además, existen más motivos para utilizar el método de Flury frente a los anteriores.

- Las CPC halladas por Flury tienen un significado estadístico claro, son la solución del problema de máxima verosimilitud.
- En [10], aparece el comportamiento asintótico de los autovectores y autovalores de las matrices que se estiman mediante máxima verosimilitud, cuando realmente se cumple  $H_{CPC}$  y los datos provienen de una distribución normal.
- Si los datos provienen realmente de una distribución normal, a partir de las CPC estimadas por Flury podemos calcular el valor del estadístico  $X_{CPC}^2$  y dar el p-valor para la hipótesis  $H_{CPC}$ . En el ejemplo de las gráficas con las matrices  $S_1$  y  $S_2$  nos queda:

$$X_{CPC}^2 = 0,2101$$

$$\text{p-valor} = 0,6466$$

y por tanto no podemos rechazar la hipótesis  $H_{CPC}$ .

En esta situación, el método propuesto por Flury parece el más indicado, y los otros dos métodos parece que podrían servirnos para dar una aproximación sencilla a la solución obtenida mediante el método de Flury. De hecho, la idea que defiende Krzanowski en [12] es utilizar la solución hallada mediante la media para dar una aproximación al estadístico  $X_{CPC}^2$ . Si calculamos en el ejemplo anterior esta aproximación, nos queda:

$$X_{CPC}^2 = 2,4261$$

$$\text{p-valor} = 0,1193$$

luego tampoco rechazaríamos la hipótesis. Podemos intentar hacer lo mismo a partir de los ejes estimados mediante el baricentro, y nos queda:

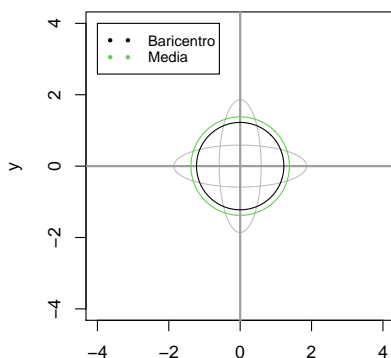
$$X_{CPC}^2 = 1,1230$$

$$p\text{-valor} = 0,2892$$

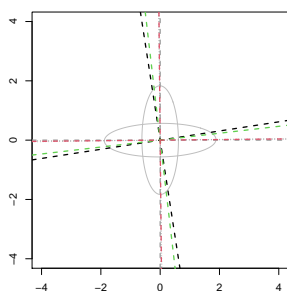
y por tanto tampoco se rechaza la hipótesis. En [12], se muestran varios ejemplos en los que esta aproximación funciona razonablemente bien. Sin embargo, este enfoque de aproximación del estadístico mediante la media y el baricentro presenta un grave problema: cuando se cumple  $H_{CPC}$  pero los autovalores aparecen en orden distinto en los grupos, podemos encontrar situaciones en las que la media o el baricentro sea prácticamente esférica. Por ejemplo, si consideramos las matrices:

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0,1 \end{bmatrix} \quad \Sigma_2 = \begin{bmatrix} 0,1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

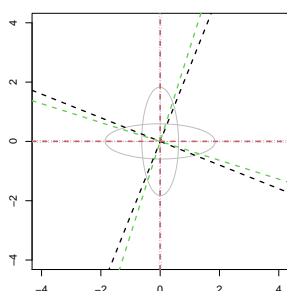
entonces tanto la media teórica de  $\Sigma_1$  y  $\Sigma_2$  como el baricentro teórico de las matrices normalizadas serán distribuciones esféricas.



En esta situación, si realizamos simulaciones de 100 muestras de cada grupo para hallar las matrices de covarianzas muestrales, los ejes que nos queden tanto a partir del baricentro como a partir de la media van a ser totalmente arbitrarios, mientras que los ejes obtenidos mediante el algoritmo de Flury están claramente determinados. En el siguiente gráfico, vemos los ejes obtenidos en 2 simulaciones distintas. Al lado, mostramos el valor del estadístico  $X_{CPC}^2$  y el p-valor para  $H_{CPC}$  dados por el modelo de Flury, y las aproximaciones a estos valores a partir de la media muestral y el baricentro.



	CPC	ESTADÍSTICO	P-VALOR
Flury		0.289	0.590
Media muestral		171.781	0
Baricentro		298.718	0



	CPC	ESTADÍSTICO	P-VALOR
Flury		0.872	0.350
Media muestral		951.80	0
Baricentro		1246.646	0

## ¿Cómo podemos justificar entonces el uso de la media y el baricentro para la elección de unas CPC?

En este trabajo, proponemos un razonamiento inverso al que propone Krzanowski en [12] para justificar el uso de la media. Es decir:

- Krzanowski intenta hallar unas CPC sencillas que intenten aproximar a las componentes de Flury, para intentar aproximar el estadístico  $X_{CPC}^2$  para la hipótesis  $H_{CPC}$ .
- Como el objetivo final de las CPC es hallar unas variables adecuadas para representar nuestros datos, en este trabajo vamos a intentar resolver el siguiente problema: dadas unas componentes principales comunes obtenidas por cualquier método (los que hemos presentado, o cualquier otro presente en la literatura), ¿cómo podemos valorar si esos ejes son adecuados para representar todos los grupos, o al menos para una parte de ellos?

Es decir, si la matriz  $U_0$  contiene por columnas unas CPC obtenidas por cualquier método, vamos a intentar contrastar la hipótesis de que todos los grupos tengan como direcciones principales unos ejes concretos:

$$H_{CPC,U_0} : \Sigma_i = U_0 \Lambda_i U_0^T \quad i = 1, \dots, k$$

y cuando esta hipótesis no se verifique, vamos a intentar estudiar las hipótesis individuales de que cada uno de los grupos tenga como direcciones principales unos ejes concretos:

$$H_{i,U_0} : \Sigma_i = U_0 \Lambda_i U_0^T$$

para cada  $i = 1, \dots, k$ , con el objetivo de intentar conocer la estructura subyacente de los datos. Cuando los datos provienen de una distribución normal, podemos realizar de forma sencilla un contraste sobre  $H_{i,U_0}$ , a partir del contraste:

$$H_0 : U_0^T \Sigma_i U_0 \text{ es diagonal}$$

Si  $S_i$  es una matriz de covarianzas obtenidas a partir de  $N_i$  muestras de una distribución  $N(0, \Sigma_i)$ , entonces  $U_0^T S_i U_0$  se puede ver como una matriz de covarianzas muestral obtenida a partir de  $N_i$  muestras de un vector aleatorio normal  $N(0, U_0^T \Sigma_i U_0)$ . Por tanto, se puede realizar de forma sencilla el contraste aplicando el test de diagonalidad definido a partir de (16) sobre la matriz de covarianzas muestral  $U_0^T S_i U_0$ . De forma análoga, se puede realizar un contraste sobre  $H_{CPC,U_0}$  a partir del contraste sobre:

$$H_0 : U_0^T \Sigma_i U_0 \text{ es diagonal } \forall i = 1, \dots, k$$

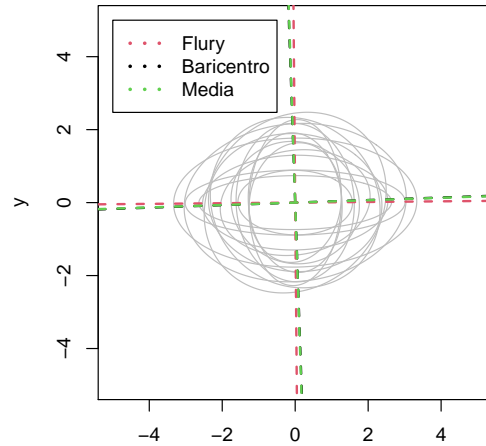
utilizando el contraste para la diagonalidad simultánea de varias matrices creado a partir del comportamiento asintótico (17).

- **Ejemplo 1:** Por la definición de los ejes de Flury, estos ejes van a ser los que asintóticamente maximicen el p-valor de la hipótesis:

$$H_{CPC,U_0} : \Sigma_i = U_0 \Lambda_i U_0^T \quad i = 1, \dots, k$$

Por tanto, es esperable que el p-valor para el test sea mayor cuando tomamos las componentes de Flury. En el siguiente ejemplo tenemos simulaciones de muestras de tamaño 200 de 15 distribuciones normales. Representamos las matrices de covarianza muestrales.



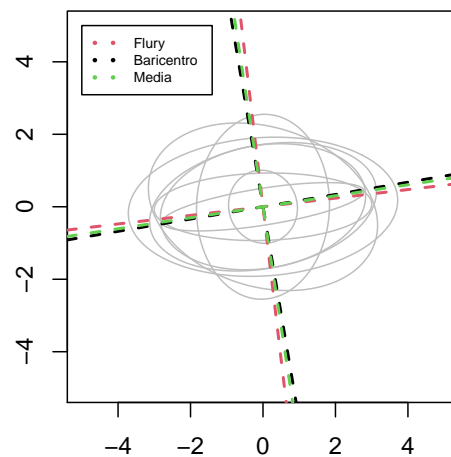


El p-valor para el test de que todas distribuciones provengan de unos ejes dados es:

EJES	Flury	Baricentro	Media
P-VALOR	0.632	0.336	0.370

El algoritmo de Flury tiene un gran coste computacional, comparado con los otros dos métodos que hemos presentado. Cuando trabajamos con datos de muchos grupos, y sobre todo en dimensiones altas, el algoritmo de Flury resulta ineficiente, y podemos tratar de buscar unas CPC aplicando algún método sencillo y calcular la adecuación de los ejes a partir del test sobre la hipótesis de que todas las matrices vengan de esos ejes concretos. En cualquier caso, siempre tendremos que tener presente los problemas presentes en el método que utilicemos. Si utilizamos la media o el baricentro, hay que ser consciente de que diferencias en el orden de los autovalores pueden llevar a que se produzcan situaciones de esfericidad, que nos oculten las estructuras presentes en los datos.

- Ejemplo 2:** Cuando estamos muy lejos de que  $H_{CPC}$  se verifique, entonces es razonable pensar que las hipótesis  $H_{CPC, U_0}$  tampoco se verifican, ya que son más restrictivas. En esta situación, podemos plantearnos hallar los p-valores individuales para la hipótesis de que cada uno de los grupos provenga de unos ejes concretos, e intentar analizar los resultados. En el siguiente ejemplo, representamos las matrices de covarianzas para simulaciones de muestras de tamaño 200 de 10 distribuciones normales, cuyos ejes principales teóricos se han obtenido mediante un giros de ángulo  $\alpha \sim U\left(\frac{-1}{4}, \frac{1}{4}\right)$  independientes.



El p-valor para  $H_{CPC}$  queda  $2,01 \cdot 10^{-7}$ , se rechaza la hipótesis de componentes principales comunes. Los p-valores para la hipótesis de que todas las distribuciones provengan de unos ejes concretos nos dan los siguientes valores, para las distintas CPC estimadas:

EJES	Flury	Baricentro	Media
P-VALOR	0	0	0

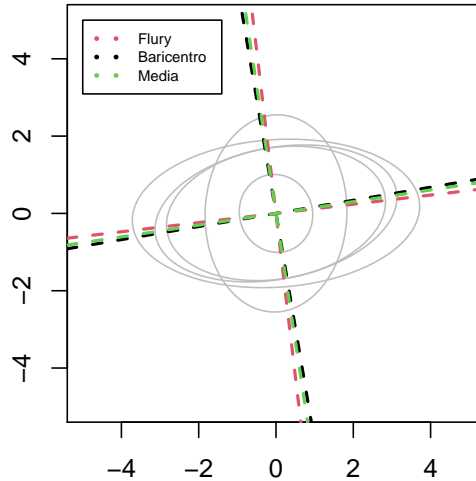
se rechazan todas las hipótesis, como era razonable esperar. Podemos entonces estudiar los p-valores individuales de las hipótesis

$$H_{i,U_0} : \Sigma_i = U_0 \Lambda_i U_0^T$$

para cada  $i = 1, \dots, 10$  y para cada estimación de las CPC que hemos hallado.

	Flury	Baricentro	Media
Grupo 1	0.251	0.068	0.032
Grupo 2	0.138	0.250	0.326
Grupo 3	0.540	0.240	0.148
Grupo 4	0.000	0.014	0.083
Grupo 5	0.685	0.634	0.610
Grupo 6	0.000	0.000	0.000
Grupo 7	0.234	0.658	0.941
Grupo 8	0.013	0.000	0.000

Vemos que en todos los ejes que hemos estimado, los grupos que nos dan un p-valor más bajo son los grupos 4, 6 y 8. Viendo esto, parece razonable plantearnos ahora estudiar las componentes principales comunes cuando nos quedamos con el resto de grupos. Las estimaciones de las CPC a partir de estos 5 grupos quedan:

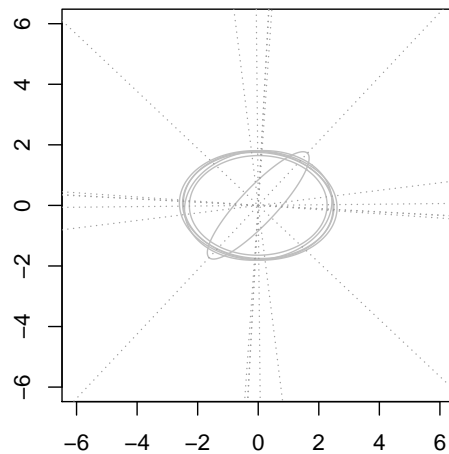


y ahora el p-valor para la hipótesis  $H_{CPC}$  es 0.243, no se rechaza la hipótesis. Además, los p-valores para la hipótesis de que todas las distribuciones provengan de las distintas CPC estimadas ahora a partir de estos 5 grupos nos quedan:

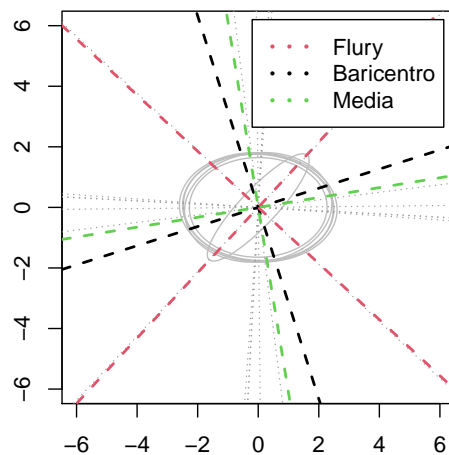
EJES	Flury	Baricentro	Media
P-VALOR	0.362	0.158	0.259

Por tanto, por cualquiera de los métodos presentados habríamos llegado a un resultado similar: encontrar unas CPC en las que 5 de los 8 grupos iniciales quedan bien representados, en el sentido de que es asumible que las distribuciones de esos 5 grupos tengan como direcciones principales las CPC estimadas.

- **Ejemplo 3:** En los ejemplos previos, existía una gran similitud entre los resultados dados por unos métodos y otros, y previamente hemos justificado que las componentes de Flury son la más adecuadas generalmente. Sin embargo, ahora vamos a mostrar uno de los inconvenientes del modelo de Flury y en general de la máxima verosimilitud: puede ser muy sensible a observaciones atípicas. En este ejemplo tenemos datos que provienen de distribuciones normales de 6 grupos distintos, y tenemos 200 observaciones de cada uno de los grupos. Las matrices de covarianzas muestrales que nos quedan tienen la forma:



Las CPC estimadas mediante los tres métodos quedan:



Por una parte, vemos que el algoritmo de Flury es muy sensible a el grado de “estiramiento” que tiene una matriz, es decir, a la diferencia entre sus autovalores. Si calculamos el estadístico de Flury para la hipótesis  $H_{CPC}$  nos queda:

$$X_{CPC}^2 = 108,66$$

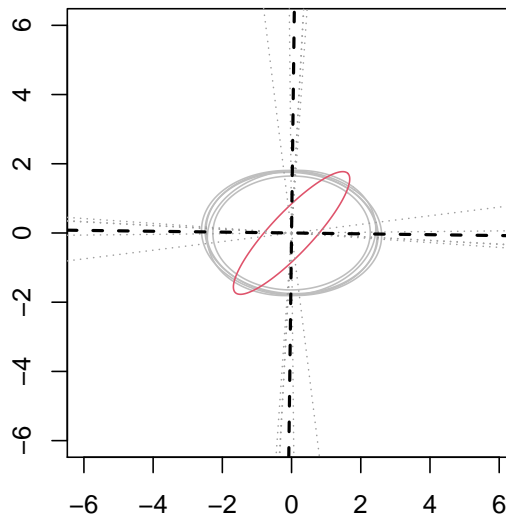
$$\text{p-valor} = 0$$

Se rechaza claramente la hipótesis. Lógicamente, si calculamos otros ejes alternativos, la hipótesis de que todas las matrices de covarianza vengan de esos ejes en concreto se rechaza también. Razonando como antes, los p-valores para la hipótesis que cada uno de los grupos provengan de unos ejes concretos quedan:

	Flury	Baricentro	Media
Grupo 1	0.000	0.002	0.036
Grupo 2	0.000	0.118	0.739
Grupo 3	0.000	0.010	0.166
Grupo 4	0.000	0.001	0.027
Grupo 5	0.000	0.001	0.033
Grupo 6	0.673	0.000	0.000

A partir de la tabla, no podemos deducir de forma clara cuál es la estructura de los diferentes grupos. Viendo los p-valores para las CPC de Flury, vemos que el último grupo va a tener CPC claramente distintas a los demás. A partir de la media, nos podemos hacer una idea de que los 5 primeros grupos tengan ejes principales similares, pero tampoco es muy claro.

Estas interpretaciones son mucho más complicadas cuando tenemos muchos grupos, y sobre todo cuando estamos en dimensiones más altas. Por ello, es interesante contar con otro tipo de técnicas para estimar CPC. La idea que vamos a aprovechar nosotros ahora es que las CPC dadas por el baricentro se basan en la distancia de Wasserstein, y por tanto podemos aplicar técnicas usuales del análisis de datos, como el recorte. Si calculamos el baricentro recortado de nivel  $\alpha = 1/6$ , y representamos en rojo la distribución a la que el baricentro recortado da peso 0, la estimación que nos queda de las CPC es:

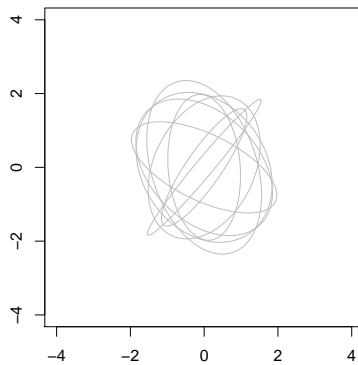


El p-valor para los distintos grupos en las CPC dadas por el baricentro recortado queda:

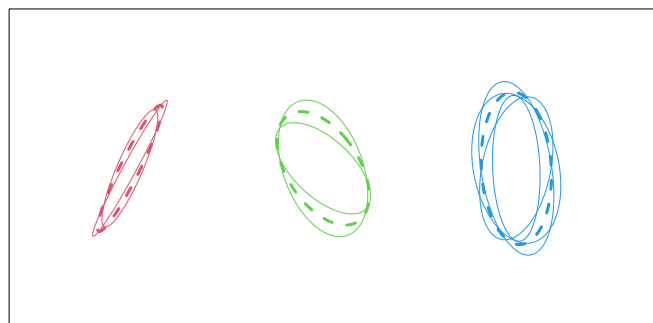
Grupo	p-valor
1	0.591
2	0.238
3	0.835
4	0.653
5	0.676
6	0.000

A partir de estas CPC se observa claramente que existe relación entre los ejes principales de las 5 primeras distribuciones. De hecho, si calculamos el p-valor de la hipótesis de que los 5 primeros grupos provengan de estas componentes, nos queda 0.835. Si calculamos el p-valor para  $H_{CPC}$  en estos 5 grupos, queda 0.718. Es decir, hemos visto que la hipótesis  $H_{CPC}$  es razonable cuando eliminamos el último grupo, y que las CPC dadas por el baricentro recortado nos dan una representación adecuada para los 5 grupos.

- Ejemplo 4.** En este último ejemplo, vamos simplemente a presentar una idea sencilla, que nos permite ver el potencial que pueden llegar a tener los baricentros para resolver este tipo de problemas. En situaciones en las que a priori no existe ninguna relación entre las matrices de covarianza de los diferentes grupos, el modelo de CPC no nos permite sacar información a partir de los datos.



Utilizando los baricentros recortados, podemos encontrar diferentes CPC que nos sirvan para dar una separación de los grupos, en aquellos que tengan CPC similares, y que sus autovalores aparezcan en el mismo orden.



En esta situación, podríamos desarrollar un análisis dentro de cada uno de los grupos del mismo modo que hemos hecho en los ejemplos anteriores, y determinar si son coherentes las 3 agrupaciones creadas, o habría que buscar un número distinto.

## 8.2. Proporcionalidad de las matrices de covarianza

En este apartado vamos a tratar el nivel (2) de la jerarquía de modelos dada por Flury. Con la misma notación que en la sección anterior, queremos estudiar la hipótesis:

$$H_{PROP} : \Sigma_i = a_i \Sigma_1 \text{ para algún } a_i > 0 \quad \forall i = 2, \dots, k$$

Las ideas y los razonamientos que vamos a utilizar son los mismos que para el modelo de componentes principales comunes, por lo que no vamos a entrar en mucho detalle. Las alternativas que vamos a utilizar para estimar la matriz de covarianzas común son las adaptaciones de las que utilizamos para estimar las CPC:

- **Método de Flury: Máxima verosimilitud.** Suponiendo que los datos provienen de distribuciones normales, se busca maximizar la verosimilitud:

$$L(\Sigma_1, \dots, \Sigma_k) = C \times \prod_{i=1}^k \exp\left(\text{tr}\left(-\frac{n_i}{2} \Sigma_i^{-1} \mathbf{S}_i\right) |\Sigma_i|^{-n_i/2}\right)$$

entre todas las matrices  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  definidas positivas que cumplen:

$$H_{PROP} : \Sigma_i = a_i \Sigma_1 \text{ para algún } a_i > 0 \quad \forall i = 2, \dots, k$$

Si  $\hat{\Sigma}_1, \dots, \hat{\Sigma}_k$  es la solución del problema de maximización, utilizando la teoría de máxima verosimilitud podemos dar un estadístico para comparar  $H_{CPC}$ :

$$X_{PROP}^2 = -2 \log \frac{L(\hat{\Sigma}_1, \dots, \hat{\Sigma}_k)}{L(\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_k)} = \sum_{i=1}^k n_i \log \frac{|\hat{\Sigma}_i|}{|\mathbf{S}_i|} \sim \chi_{(k-1)(p^2+p-2)}^2 \text{ bajo } H_{PROP} \quad (27)$$

- **Media.** Bajo la  $H_{PROP}$ , si  $\Sigma_i = a_i \Sigma_1$  para algún  $a_i > 0$  para cada  $i = 2, \dots, k$ , entonces:

$$\frac{\Sigma_1 + \dots + \Sigma_k}{k}$$

es proporcional a todas las matrices  $\Sigma_i, i = 1, \dots, k$ . Tomamos entonces como estimador la matriz:

$$\bar{S} = \frac{S_1 + \dots + S_k}{k}$$

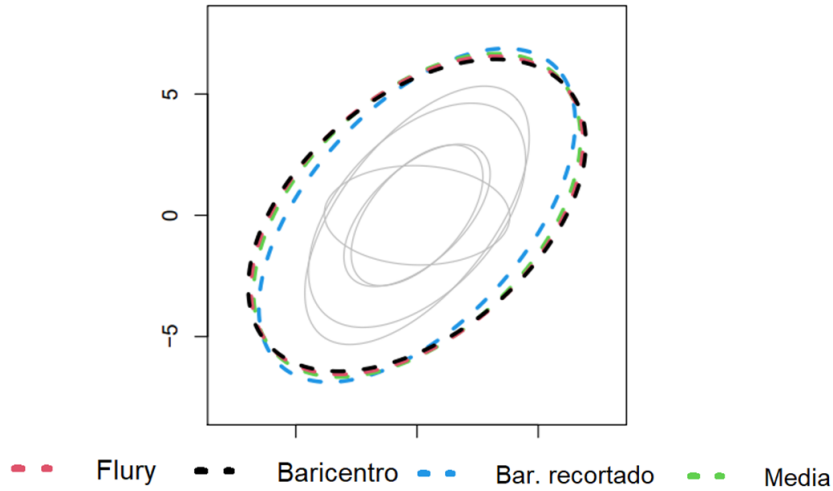
- **Baricentro.** Con la misma idea, bajo  $H_{PROP}$ , el baricentro de  $\Sigma_1, \dots, \Sigma_k$  es una matriz proporcional a todas ellas. Con el mismo razonamiento que para el modelo CPC, vamos a tomar como estimador de la matriz de covarianzas el baricentro de:

$$\frac{1}{\text{tr}(S_1^{1/2})^2} S_1, \dots, \frac{1}{\text{tr}(S_k^{1/2})^2} S_k$$

con pesos:

$$\lambda_i = \frac{n_i}{\sum_{j=1}^k n_j} \quad i = 1, \dots, k$$

Veamos un ejemplo con 5 distribuciones normales distintas, de las que realizamos simulaciones de muestras de tamaño 100. Las elipses grises representan las matrices de covarianza muestrales, mientras que en color mostramos las estimaciones de la matriz de covarianzas a la que son proporcional todos los grupos, según los diferentes métodos. Dichas estimaciones aparecen escaladas, para que la gráfica sea más interpretable.



Procedemos al igual que hicimos en los ejemplos de CPC. En primer lugar, si hallamos el p-valor para la diagonalidad de  $H_{PROP}$  dado por Flury, nos queda  $2,02 \cdot 10^{-12}$ , luego rechazamos claramente la hipótesis. Dada  $\Sigma_0 \in \mathbb{S}_{>0}^d$  partir del comportamiento asintótico visto en (24) vimos que podíamos definir un test para el contraste:

$$H_0 : \Sigma_i \text{ proporcional a } \Sigma_0$$

para un  $i$  concreto, y podíamos generalizarlo para realizar un contraste sobre la hipótesis:

$$H_0 : \Sigma_i \text{ proporcional a } \Sigma_0 \quad \forall i = 1, \dots, k$$

El p-valor para este test cuando tomamos como  $\Sigma_0$  cada una de las matrices de covarianzas estimadas por los distintos métodos nos queda:

$\Sigma_0$	Flury	Baricentro	B.R. (1/5)	Media
P-VALOR	$1,34 \cdot 10^{-6}$	$1,57 \cdot 10^{-6}$	$1,40 \cdot 10^{-6}$	$1,57 \cdot 10^{-6}$

Como era de esperar, se rechazan todas las hipótesis. Podemos entonces plantearnos hallar los p-valores individuales para  $H_0 : \Sigma_i$  proporcional a  $\Sigma_0$ . Nos quedan:

	Flury	Baricentro	B.R. (1/5)	Media
Grupo 1	0.056	0.019	0.854	0.180
Grupo 2	0.014	0.006	0.543	0.057
Grupo 3	0.193	0.086	0.996	0.451
Grupo 4	0.841	0.532	0.388	0.983
Grupo 5	0.000	0.000	0.000	0.000

A partir de la tabla, deducimos que en los 4 primeros grupos parece asumible la hipótesis de proporcionalidad al baricentro recortado. Si calculamos el p-valor para la hipótesis de que los 4 primeros grupos sean proporcionales al baricentro recortado, nos queda 0,903. De hecho, si calculamos el p-valor para  $H_{PROP}$  de los 4 primeros grupos, nos queda 0.759. Por tanto, hemos visto que:

- $H_{PROP}$  es asumible para los 4 primeros grupos.
- Además, la matriz estimada a partir del baricentro recortado de las 5 distribuciones originales es un buen representante de las matrices de covarianza de los 4 primeros grupos.

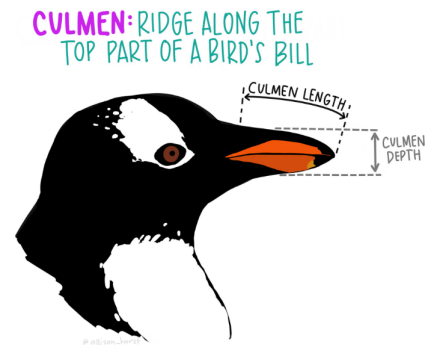
### 8.3. Ejemplo con datos reales: Penguin Dataset

Vamos a concluir con un ejemplo con un conjunto de datos reales, que contiene información sobre pingüinos de 3 especies distintas. Los datos se puede descargar en:

<https://www.kaggle.com/code/parulpandey/penguin-dataset-the-new-iris/notebook>

Aunque el conjunto de datos tiene más variables, para el análisis que vamos a realizar utilizamos únicamente las siguiente variables:

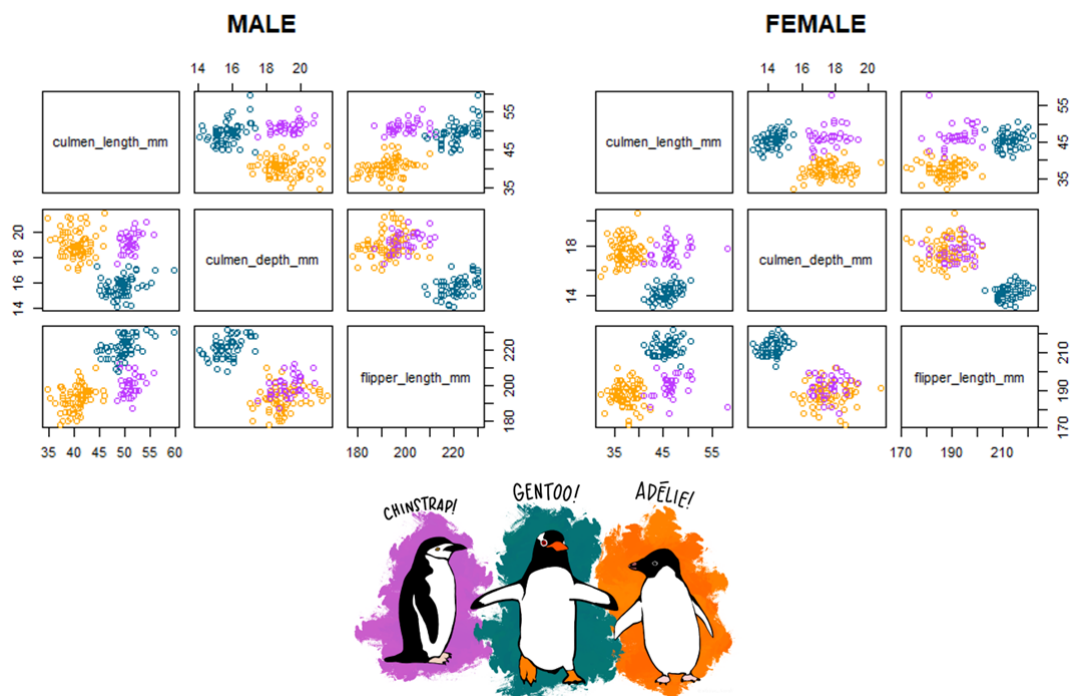
- **species.** Adelie, Chinstrap o Gentoo.
- **sex.** Male/Female.
- **culmen\_length\_mm.** Longitud del pico en mm.
- **culmen\_depth\_mm.** Altura del pico en mm.
- **flipper\_length\_mm.** Longitud de la aleta en mm.



Para trabajar con el conjunto de datos, eliminamos en primer lugar los individuos con valores *NA*. Eliminandolos, tenemos en total 333 individuos que se distribuyen por sexo y especie de acuerdo con la siguiente tabla:

	Male	Female
Adelie	73	73
Chinstrap	34	34
Gentoo	61	58

Separando por sexo y especie, tenemos 6 grupos distintos. Representamos los datos en un gráfico de pares por sexo y especie:





El objetivo va a ser estudiar las relaciones existentes entre las matrices de covarianza de los 6 grupos, utilizando todas la técnicas que hemos explicado a lo largo del trabajo. Para ello, comenzamos en primer lugar realizando un test para ver si es asumible la hipótesis de normalidad en cada uno de los grupos, utilizando la función *mvnorm.etest()* del paquete *energy* de R. Los p-valores que nos quedan para los distintos grupos son:

GRUPO	Adelie-M	Chinstrap-M	Gentoo-M	Adelie-F	Chinstrap-F	Gentoo-F
P-VALOR	0.029	0.888	0.552	0.364	0.023	0.7529

Viendo los valores de la tabla, no parece descabellado asumir que los datos realmente provienen de una distribución normal multivariante. Para estudiar los grupos, vamos a proceder de forma análoga a los ejemplos que hemos realizado con simulaciones. Para ello, hallamos en primer lugar los p-valores para las  $H_{CPC}$  y  $H_{PROP}$ .

- p-valor para  $H_{CPC} = 0,014$
- p-valor para  $H_{PROP} = 4,02 \cdot 10^{-5}$

Viendo los p-valores, vemos que  $H_{PROP}$  se rechaza claramente, mientras que  $H_{CPC}$  se rechazará o no dependiendo del nivel de significación del test que elijamos. Vamos a comenzar estudiando el modelo CPC más detalladamente, ya que es el menos restrictivo. En primer lugar, podemos plantearnos hallar los p-valores para la hipótesis de que todos los grupos tengan como CPC las estimadas mediante el algoritmo de Flury, la media, el baricentro o el baricentro recortado. Nos queda:

EJES	Flury	Media	Baricentro	B.R (1/6)	B.R (1/3)
P-VALOR	0.0143	0.0136	0.0124	0.0104	0.0072

Si tomamos como nivel de significación  $\alpha = 0,01$ , aceptamos  $H_{CPC}$  y además para ese nivel de significación, los ejes dados por el algoritmo de Flury, la media, el baricentro y el baricentro recortado de nivel 1/6 representan bien a todos los grupos, en el sentido de que no podemos rechazar la hipótesis de que todos los grupos tengan como direcciones principales las CPC estimadas por esos cuatro métodos. Si tomamos como nivel de significación  $\alpha = 0,05$ , se rechaza  $H_{CPC}$ . Podemos plantearnos estudiar los p-valores individuales para la hipótesis de que un grupo dado provenga de unos ejes concretos. Los datos que aparecen en morado se corresponden con los grupos que tienen peso 0 en cada uno de los baricentros recortados.

	Flury	Media	Baricentro	B.R (1/6)	B.R (1/3)
Adelie-M	0.357	0.481	0.504	0.579	0.316
Chinstrap-M	0.229	0.135	0.122	0.108	0.201
<b>Gentoo-M</b>	<b>0.002</b>	<b>0.004</b>	<b>0.004</b>	<b>0.003</b>	<b>0.001</b>
Adelie-F	0.040	0.021	0.019	0.024	0.128
Chinstrap-F	0.923	0.946	0.945	0.969	0.989
Gentoo-F	0.738	0.703	0.686	0.523	0.384

Viendo la tabla, vemos que todas las CPC estimadas nos dan resultados similares:

- Existe un grupo que está claramente peor representado que el resto en todos los ejes, los machos de la especie Gentoo, ya que tiene un p-valor muy bajo en todos los ejes. Vamos a ver qué ocurre cuando eliminamos este grupo.
- Podríamos plantearnos eliminar también el grupo formado por las hembras de la especie Adelie, ya que el p-valor es menor que  $\alpha = 0,05$  en casi todos los ejes. Sin embargo, como para los ejes dados por el baricentro recortado de nivel 1/3 nos queda el p-valor 0.128, vamos a conservar este grupo.

Realizamos el mismo análisis sobre los 5 grupos que hemos seleccionado. En primer lugar, mostramos los p-valores de máxima verosimilitud de Flury:

- p-valor para  $H_{CPC} = 0,2120$
- p-valor para  $H_{PROP} = 0,0007 \cdot 10^{-5}$

Seguimos rechazando la hipótesis de proporcionalidad, pero ahora ya no rechazamos la hipótesis de CPC para ningún nivel de significación de los habituales. Además, los p-valores para la hipótesis de que los 5 grupos tengan como direcciones principales las diferentes CPC estimadas son:

EJES	Flury	Media	Baricentro	B.R (1/5)
P-VALOR	0.4010	0.3830	0.3832	0.3466

y la tabla con los p-valores individuales de cada grupo a las diferentes CPC estimadas nos dice que todos los grupos quedan bien representados en todos los ejes estimados:

	Flury	Media	Baricentro	B.R (1/5)
Adelie-M	0.148	0.230	0.228	0.251
Chinstrap-M	0.385	0.291	0.284	0.222
Adelie-F	0.186	0.148	0.150	0.160
Chinstrap-F	0.915	0.967	0.971	0.990
Gentoo-F	0.574	0.503	0.510	0.420

Por tanto, hemos encontrado 5 grupos para los cuales es asumible  $H_{CPC}$ , y además hemos estimado por varios métodos distintas CPC en las que podemos representar bien los datos. Vamos ahora a centrarnos en la hipótesis de proporcionalidad de las matrices de covarianzas. Como es más restrictiva que  $H_{CPC}$ , vamos a partir de estos 5 grupos, para los que hemos visto que  $H_{PROP}$  se rechaza. Comenzamos mostrando los p-valores para la hipótesis de proporcionalidad de las matrices de covarianza de todos los grupos a una fija, estimada por diferentes métodos:

$\Sigma_0$	Flury	Media	Baricentro	B.R (1/5)
P-VALOR	0.0045	0.0043	0.0042	0.0035

Como era de esperar, se rechazan todas las hipótesis. Estudiamos ahora los p-valores individuales para la hipótesis de proporcionalidad de cada uno de los grupos a la matriz de covarianzas estimada por los diferentes métodos.

	Flury	Media	Baricentro	B.R (1/5)
Adelie-M	0.066	0.057	0.071	0.045
Chinstrap-M	0.064	0.060	0.070	0.024
Adelie-F	0.215	0.164	0.195	0.168
Chinstrap-F	0.260	0.309	0.254	0.437
Gentoo-F	0.024	0.031	0.021	0.046

Nos vamos a quedar con los 4 primeros grupos, ya que para los ejes estimados por Flury, la media y el baricentro, vemos que los 4 primeros grupos nos dan p-valores mayores que 0.05, y el último no. Al trabajar con esos 4 grupos, el p-valor para  $H_{PROP}$  queda 0.0116, estamos más cerca de la hipótesis de proporcionalidad de todas las matrices de covarianza. Además, los p-valores para la hipótesis de proporcionalidad de todos los grupos a la matriz de covarianzas estimada por los diferentes métodos quedan:

$\Sigma_0$	Flury	Media	Baricentro
P-VALOR	0.0564	0.0377	0.0553

Teniendo en cuenta estos p-valores y el p-valor para  $H_{CPC}$ , es asumible que los 4 grupos tengan matrices de covarianza proporcionales, y que sean proporcionales a alguna de las matrices de covarianza estimadas. Además, los p-valores para las hipótesis de proporcionalidad de cada uno de los grupos a las matrices estimadas nos muestran que todos los grupos quedan bien representados por las distintas estimaciones:

	Flury	Media	Baricentro
Adelie-M	0.280	0.127	0.268
Chinstrap-M	0.090	0.071	0.091
Adelie-F	0.528	0.285	0.506
Chinstrap-F	0.052	0.180	0.056

## 9. Anexo

**Lema 2.** Sea  $X$  es una variable aleatoria con función de distribución  $F$ , y  $V$  una variable aleatoria  $U(0, 1)$  e independiente de  $X$ , definidas en un espacio probabilístico  $(\Omega, \sigma, \mathbb{P})$ . Denotando:

$$F(x-) = \lim_{y \rightarrow x-} F(y) = \mathbb{P}(X < x)$$

entonces la variable aleatoria  $U$  definida por:

$$U = F(X-) + V(F(X) - F(X-))$$

sigue una distribución  $U(0, 1)$  y además  $X = F^{-1}(U)$  c.s.

*Demostración.* Dado  $t \in (0, 1)$ , veamos que  $\mathbb{P}(U \leq t) = t$ . Para ello, consideramos el conjunto:

$$D = \{\text{discontinuidades de } F\}$$

Sabemos que  $D$  es un conjunto a lo sumo numerable. Comenzamos descomponiendo la probabilidad  $\mathbb{P}(U \leq t)$ , a partir de la parte discreta de  $X$  y la parte no discreta de  $X$ :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(U \leq t) &= \mathbb{P}(U \leq t, X \in D) + \mathbb{P}(U \leq t, X \notin D) = \\ &= \sum_{d \in D} \mathbb{P}(U \leq t, X = d) + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D) = \\ &= \sum_{d \in D} \mathbb{P}\left(F(d-) + V(F(d) - F(d-)) \leq t, X = d\right) + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D) \end{aligned}$$

Sea  $p_d = P(X = d) = F(d) - F(d-) > 0$ . Utilizando que  $X$  y  $V$  son independientes:

$$\mathbb{P}(U \leq t) = \sum_{d \in D} p_d \mathbb{P}\left(V \leq \frac{t - F(d-)}{p_d}\right) + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D)$$

En esta situación:

- Si  $\frac{t - F(d-)}{p_d} \geq 1 \Leftrightarrow t \geq p_d + F(d-) = F(d)$ 

$$\Rightarrow \mathbb{P}\left(V \leq \frac{t - F(d-)}{p_d}\right) = 1$$
- Si  $\frac{t - F(d-)}{p_d} \leq 0 \Leftrightarrow t \leq F(d-)$ 

$$\Rightarrow \mathbb{P}\left(V \leq \frac{t - F(d-)}{p_d}\right) = 0$$
- Si  $0 \leq \frac{t - F(d-)}{p_d} \leq 1 \Leftrightarrow F(d-) \leq t \leq F(d)$ 

$$\Rightarrow \mathbb{P}\left(V \leq \frac{t - F(d-)}{p_d}\right) = \frac{t - F(d-)}{p_d}$$

Utilizando esto, vamos a hallar  $\mathbb{P}(U \leq t)$ . Para ello, distinguimos dos casos:

- Si existe  $d_0 \in D$  tal que  $t \in [F(d_0-), F(d_0))$ , entonces:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(U \leq t) &= p_{d_0} \frac{t - F(d_0-)}{p_0} + \sum_{d \in D: F(d) \leq t} p_d + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D) = \\ &= t - F(d_0-) + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \in D) + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D) = \\ &= t - F(d_0-) + \mathbb{P}(F(X) \leq t)\end{aligned}$$

Como  $t \in [F(d_0-), F(d_0))$ , se tiene que  $F(X) \leq t \Leftrightarrow X < d_0$ , y por tanto:

$$\mathbb{P}(U \leq t) = t - F(d_0-) + \mathbb{P}(X < d_0) = t - F(d_0-) + F(d_0-) = t$$

- Si  $\forall d \in D, t \notin [F(d-), F(d))$

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(U \leq t) &= \sum_{d \in D: F(d) \leq t} p_d + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D) = \\ &= \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \in D) + \mathbb{P}(F(X) \leq t, X \notin D) = P(F(X) \leq t) = \\ &= P(X \leq F^{-1}(t)) + P(X > F^{-1}(t), F(X) \leq t) = P(X \leq F^{-1}(t)) = \\ &= F(F^{-1}(t)) = t\end{aligned}$$

donde en la última igualdad hemos utilizado que  $F(F^{-1}(t)) = t \Leftrightarrow t \in \text{Im}(F)$ .

Veamos ahora la segunda igualdad:  $X = F^{-1}(U)$  c.s. Como  $U \stackrel{d}{\sim} U(0, 1)$ , sabemos que la función de distribución de  $X = F^{-1}(U)$  es  $F$ , y además por la construcción que hemos realizado para  $U$ , se cumple que:

$$F^{-1}(U) \leq F^{-1}(F(X)) \leq X$$

y por tanto  $\mathbb{P}(F^{-1}(U) \leq X) = 1$ . Para ver que  $\mathbb{P}(F^{-1}(U) = X) = 1$ , basta ver que:

$$\mathbb{P}(F^{-1}(U) < X) = \mathbb{P}\left(\bigcup_{q \in \mathbb{Q}} (F^{-1}(U) < q \leq X)\right) = 0$$

Utilizando que  $F^{-1}(U)$  y  $X$  están igualmente distribuidas, llegamos a que:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(F^{-1}(U) < q \leq X) &= \mathbb{P}\left((F^{-1}(U) < q \leq X) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right) = \\ &= \mathbb{P}\left(\left((F^{-1}(U) \geq q)^C \cap (X \geq q)\right) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right) = \\ &= \mathbb{P}\left(\left((X \geq q) \setminus (F^{-1}(U) \geq q)\right) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right) = \\ &= \mathbb{P}\left(\left((X \geq q) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right) \setminus \left((F^{-1}(U) \geq q) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right)\right) = \\ &= \mathbb{P}\left((X \geq q) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right) - \mathbb{P}\left((F^{-1}(U) \geq q) \cap (F^{-1}(U) \leq X)\right) = \\ &= \mathbb{P}(X \geq q) - \mathbb{P}(F^{-1}(U) \geq q) = 0\end{aligned}$$

de donde se deduce que  $\mathbb{P}(F^{-1}(U) < X) = 0$ , que es lo que queríamos ver. □

**Lema 3 (de Hoeffding).** Sean  $X, Y$  son dos variables aleatorias reales tales que:

$$E|X| < \infty \quad E|Y| < \infty \quad E|XY| < \infty$$

Si denotamos por  $F_{(X,Y)}$  a la función de distribución conjunta de  $(X, Y)$  y por  $F_X, F_Y$  a las funciones de distribución marginales, entonces:

$$E(XY) - E(X)E(Y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (F_X(x)F_Y(y) - F_{(X,Y)}(x, y)) dx dy$$

*Demostración.* Sean  $(X_1, Y_1)$  y  $(X_2, Y_2)$  independientes e igualmente distribuidas según  $F_{(X,Y)}$ . Se tiene que:

$$\begin{aligned} E\left((X_1 - X_2)(Y_1 - Y_2)\right) &= E(X_1Y_1) + E(X_2Y_2) - E(X_1Y_2) - E(X_2Y_1) = \\ &= 2\left(E(X_1Y_1) - E(X_1)E(X_2)\right) \end{aligned}$$

Por otra parte, dados  $x, y \in \mathbb{R}$ , si para cada  $A \subset \mathbb{R}$  denotamos por  $I_A$  la función indicadora del conjunto  $A$ , tenemos que:

$$x - y = - \int_{-\infty}^{\infty} (I_{[x, \infty)}(u) - I_{[y, \infty)}(u)) du$$

Utilizando esto, podemos escribir:

$$\begin{aligned} E\left((X_1 - X_2)(Y_1 - Y_2)\right) &= \\ &= E\left[\int_{-\infty}^{\infty} (I_{[X_1, \infty)}(x) - I_{[X_2, \infty)}(x)) dx \int_{-\infty}^{\infty} (I_{[Y_1, \infty)}(y) - I_{[Y_2, \infty)}(y)) dy\right] = \\ &= E\left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (I_{[X_1, \infty)}(x) - I_{[X_2, \infty)}(x))(I_{[Y_1, \infty)}(y) - I_{[Y_2, \infty)}(y)) dx dy\right] \end{aligned}$$

Para poder justificar la aplicación del teorema de Fubini e intercambiar el orden de la esperanza y la integral, aplicamos el criterio de Tonelli, que utilizando el mismo razonamiento:

$$\begin{aligned} E\left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |I_{[X_1, \infty)}(x) - I_{[X_2, \infty)}(x)| |I_{[Y_1, \infty)}(y) - I_{[Y_2, \infty)}(y)| dx dy\right] &= \\ &= E\left(|X_1 - X_2| |Y_1 - Y_2|\right) \leq 2\left(E|X_1Y_1| + E|X_1|E|X_2|\right) < \infty \end{aligned}$$

Por el teorema de Fubini:

$$\begin{aligned} E\left((X_1 - X_2)(Y_1 - Y_2)\right) &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E\left[(I_{[X_1, \infty)}(x) - I_{[X_2, \infty)}(x))(I_{[Y_1, \infty)}(y) - I_{[Y_2, \infty)}(y))\right] dx dy \end{aligned}$$

Utilizando entonces que:

$$E\left[(I_{[X_1, \infty)}(x) - I_{[X_2, \infty)}(x))(I_{[Y_1, \infty)}(y) - I_{[Y_2, \infty)}(y))\right] =$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \left[ E \left( I_{[X_1, \infty)}(x) I_{[Y_1, \infty)}(y) \right) - E \left( I_{[X_1, \infty)}(x) \right) E \left( I_{[Y_1, \infty)}(y) \right) \right] = \\
&= 2 \left[ E \left( I_{(-\infty, x] \times (-\infty, y]}(X_1, Y_1) \right) - E \left( I_{(-\infty, x]}(X_1) \right) E \left( I_{(-\infty, y]}(Y_1) \right) \right] = \\
&= 2 \left[ F_{(X, Y)}(x, y) - F_X(x) F_Y(y) \right]
\end{aligned}$$

llegamos a la expresión del lema de Hoeffding.  $\square$

**Lema 4 (Cotas de Fréchet).** Sean  $F_1$  y  $F_2$  funciones de distribución de dos variables aleatorias reales  $X$  e  $Y$ . La clase de las funciones de distribución  $F(x, y)$  con marginales  $F_1$  y  $F_2$  está acotada inferiormente y superiormente por:

$$\underline{F}(x, y) = (F_1(x) + F_2(y) - 1)_+ \leq F(x, y) \leq \bar{F}(x, y) = \min\{F_1(x), F_2(y)\}$$

donde además  $\underline{F}$  y  $\bar{F}$  pertenecen a dicha familia de funciones de distribución.

*Demostración.*

$$\begin{aligned}
F(x, y) &= \mathbb{P}((X \leq x) \cap (Y \leq y)) = \\
&= \mathbb{P}(X \leq x) + \mathbb{P}(Y \leq y) - \mathbb{P}((X \leq x) \cup (Y \leq y)) = \\
&= F_1(x) + F_2(x) - \mathbb{P}((X \leq x) \cup (Y \leq y))
\end{aligned}$$

Utilizando que  $\mathbb{P}((X \leq x) \cup (Y \leq y)) \leq 1$ , tenemos que:

$$F(x, y) \geq \underline{F}(x, y) = (F_1(x) + F_2(y) - 1)_+$$

Utilizando que  $\mathbb{P}((X \leq x) \cup (Y \leq y)) \geq \max\{F_1(x), F_2(y)\}$  tenemos que:

$$F(x, y) \leq \bar{F}(x, y) = \min\{F_1(x), F_2(y)\}$$

Falta comprobar que realmente  $\underline{F}$  y  $\bar{F}$  son funciones de distribución en  $\mathbb{R}^2$ . Para ello, vamos a construir parejas de variables aleatorias que tengan esas funciones de distribución. Consideramos el espacio probabilístico  $((0, 1), \sigma, \ell)$ , siendo  $\ell$  la medida de Lebesgue en  $(0, 1)$ .

- Consideramos en primer lugar el emparejamiento probabilístico dado por las variables comonótonas definidas por  $(X(t), Y(t)) = (F_1^{-1}(t), F_2^{-1}(t))$ . Se cumple que:

$$\ell(X \leq x) = \ell(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) \leq x\}) = \ell((0, F_1(x)]) = F_1(x)$$

$$\ell(Y \leq x) = \ell(\{t \in (0, 1) : F_2^{-1}(t) \leq x\}) = \ell((0, F_2(x)]) = F_2(x)$$

y la función de distribución conjunta viene dada por:

$$\begin{aligned}
\ell(X \leq t, Y \leq y) &= \ell(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) \leq x, F_2^{-1}(t) \leq y\}) = \\
&= \ell((0, F_1(x)] \cap (0, F_2(y)]) = \min\{F_1(x), F_2(y)\} = \bar{F}(x, y)
\end{aligned}$$

- En segundo lugar, consideramos el emparejamiento probabilístico dado por las variables anti-monótonas  $(X(t), Y(t)) = (F_1^{-1}(t), F_2^{-1}(1-t))$ . Se cumple que:

$$\begin{aligned}\ell(Y \leq x) &= \ell(\{t \in (0, 1) : F_2^{-1}(1-t) \leq x\}) = \ell(\{t \in (0, 1) : 1-t \leq F_2(x)\}) = \\ &= \ell(\{t \in (0, 1) : t \geq 1 - F_2(x)\}) = \ell([1 - F_2(x), 1]) = F_2(x)\end{aligned}$$

y la función de distribución conjunta viene dada por:

$$\begin{aligned}\ell(X \leq t, Y \leq y) &= \ell(\{t \in (0, 1) : F_1^{-1}(t) \leq x, F_2^{-1}(1-t) \leq y\}) = \\ &= \ell((0, F_1(x)] \cap [1 - F_2(y), 1]) = \begin{cases} 0 & \text{si } F_1(x) \leq 1 - F_2(y) \\ F_1(x) - (1 - F_2(y)) & \text{si } F_1(x) \geq 1 - F_2(y) \end{cases} = \\ &= (F_1(x) + F_2(y) - 1)_+ = \bar{F}(x, y)\end{aligned}$$

□



## Referencias

- [1] AGUEH, M., and CARLIER, G. (2011). *Barycenters in the Wasserstein space*. SIAM J. Math. Anal. 43(2): 904–924
- [2] ÁLVAREZ-ESTEBAN, P. C., DEL BARRIO, E., CUESTA-ALBERTOS, J. A. and MATRÁN, C. (2016). *A fixed-point approach to barycenters in Wasserstein space*. J. Math. Anal. Appl. 441: 744–762
- [3] ÁLVAREZ-ESTEBAN, P. C., DEL BARRIO, E., CUESTA-ALBERTOS, J. A. and MATRÁN, C. (2018). *Wide consensus aggregation in the Wasserstein space. Application to location-scatter families*. Bernoulli 24(4A): 3147–3179
- [4] BICKEL, P. J. and FREEDMAN, D. A. (1981). *Some asymptotic theory for the bootstrap*. Ann. Statist. 9: 1196-1217
- [5] BILLINGSLEY, P. (1995). *Probability and Measure, Third Edition*. Wiley Series in Probability and Statistics.
- [6] CUESTA-ALBERTOS, J. A., MATRÁN-BEA, C. and TUERO-DIAZ, A. (1996). *On lower bounds for the  $L^2$ -Wasserstein metric in a Hilbert space*. J. Theor. Prob., Vol. 9, 2
- [7] CUESTA-ALBERTOS, J. A., RUSCHENDORF, L. and TUERO-DIAZ, A. (1993). *Optimal coupling of multivariate distributions and stochastic processes*. J. Mult. Anal. 46: 335-361
- [8] DEL BARRIO, E., CUESTA-ALBERTOS, J. A., MATRÁN, C. and MAYO-ÍSCAR, A. (2019). *Robust clustering tools based on optimal transportation*. Statistics and Computing 29: 139–160
- [9] FLURY, B. N. (1984). *Common principal components in  $K$  groups*. J. Amer. Stat. Assoc. Vol. 79, 388: 892-898
- [10] FLURY, B. N. (1988). *Common Principal Components and Related Multivariate Models*. John Wiley And Sons, New York.
- [11] FLURY, B. N. and GAUTSCHI, W. (1986). *An algorithm for simultaneous orthogonal transformation of several positive definite symmetric matrices to nearly diagonal form*. SIAM J. Sci. Stat. Comput. Vol 7, No. 1.
- [12] KRZANOWSKI, W. J. (1984). *Principal Component Analysis in the Presence of Group Structure*. Appl. Statist., 33, No. 2, pp. 164-168.
- [13] LEWIS, A. S. (1996). *Derivatives of spectral functions*. Math. Oper. Res., 21, pp. 576–588.
- [14] LEWIS, A. S. and SENDOV, H. S. (2001). *Twice differentiable spectral functions*. SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 23, No. 2, pp. 368–386
- [15] MAGNUS, J. R. and NEUDECKER, H. (1999). *Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics*. Wiley Series in Probability and Statistics.
- [16] MAUCHLY, J. W. (1940). *Significance Test for Sphericity of a Normal  $n$ -Variate Distribution*. Ann. Math. Stat. Vol. 11, No. 2, pp. 204-209.
- [17] MORDANT, G. and SEGERS, J. (2022). *Measuring dependence between random vectors via optimal transport*. SIAM J. Mult. Anal., Vol. 189
- [18] RÜSCHENDORF, L. (1981). *Sharpness of Fréchet-Bounds*. Z. Wahrsch. Verw. Geb. 57, 293-302.
- [19] SCHMITZ, M. A., HEITZ, M., BONNEEL, N., NGOLÈ, F., COEURJOLLY, D., CUTURI, M., PEYRÉ, G. and STARCK, J. L. (2018) *Wasserstein Dictionary Learning: Optimal Transport-Based Unsupervised Nonlinear Dictionary Learning*. SIAM J. Imag. Scienc., Vol. 11, No. 1, pp. 643–678

- [20] TANAKA, H. (1973). *An Inequality for a Functional of Probability Distributions and Its Application to Kac's One-Dimensional Model of a Maxwellian Gas.* Z. Wahrsch. Verw. Geb. 27, 47 - 52
- [21] TRENDAFILOV, N. T. (2010). *Stepwise estimation of common principal components.* Comp. Stats. and Data Anal. 54 3446-3457
- [22] VILLANI, C. (2003). *Topics in Optimal Transportation.* American Mathematical Society.
- [23] VILLANI, C. (2006). *Optimal transport, old and new.* Springer.