

CONVEXIDAD Y SIMETRÍA DE LA J -DIVERGENCIA GENERALIZADA

M. SALICRU PAGÉS
Departamento de Estadística
Universidad de Barcelona

RESUMEN

En este trabajo, se caracteriza la simetría de la J -divergencia generalizada en términos del parámetro y de la función que la determina. Se plantea seguidamente la convexidad y simetrización en función del parámetro, atendiendo a la forma de la función $\phi(t)$ que la determina. Finalmente, se revisa la convexidad en función de las variables atendiendo a la concavidad y convexidad, de las funciones $\phi(t)$ y $1/\phi''(t)$.

Palabras clave: J -divergencias, análisis de convexidad, análisis de datos.
Clasificación AMS: 62H30, 62-07.

SUMMARY

In this work the symmetry of the generalized J -divergence is characterized by its parameter and function.

The convexity and symmetrization are studied as a function of the parameter, according to the shape of the function $\phi(t)$ that determines this generalized J -divergence.

Finally, the convexity as a function of the variables, according to the convexity of the functions $\phi(t)$ and $1/\phi''(t)$ is revised.

Key words: J -divergence, convex analysis, data analysis.

AMS Classification: 62H30, 62-07.

Title: Convexity and symmetry of some generalized J -divergence.

1. INTRODUCCION

Un problema interesante que se plantea en análisis de datos proviene de la elección adecuada de medidas que nos permitan cuantificar las diferencias entre poblaciones o entre individuos de una misma población. En este sentido, las J -divergencias generalizadas pueden entenderse como medidas que cuantifican analogías y diferencias entre distribuciones o poblaciones.

Como una aproximación a la caracterización de las divergencias, analizamos en este trabajo las condiciones para la convexidad, simetría y simetrización de las J -divergencias generalizadas, completando y extendiendo los aspectos relativos a J -divergencias presentados por Burbea y Rao (1982).

Estudios en este sentido resultan muy adecuados para abordar aspectos relacionados con la teoría de la información e inferencia estadística, siendo destacables, entre otros, los trabajos de Matusita (1955, 1964), Pitman (1979), Wald (1950) y Shaked (1977) y en otro orden, Burbea y Rao (1987) y Salicrú y Calvo (1988) obtienen relaciones con las ϕ -entropías.

2. DEFINICIONES PREVIAS

Dada una medida positiva μ , σ -aditiva y σ finita definida en una σ -álgebra de subconjuntos de un espacio medible X , y una función a valores reales $\phi(t)$, dos veces diferenciable con continuidad y definida en un intervalo T_ϕ , con $[0, 1] \subset T_\phi \subset [0, \infty)$, se define el espacio de las funciones ϕ -integrables como el conjunto

$$L_\phi^1 = \left\{ p; p: X \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{t.q.} \quad \begin{array}{l} 1) \int_X |p(x)| d\mu(x) < +\infty \\ 2) p(x) \in T_\phi \quad \text{para todo } x \in X \end{array} \right\}$$

Para diferenciar dos funciones ϕ -integrables $p(x)$ y $q(x)$, se define la J -divergencia generalizada a partir de la expresión

$$J_\phi^\lambda(p, q) = \int_X [\lambda\phi(p) + (1-\lambda)\phi(q) - \phi(\lambda p + (1-\lambda)q)] d\mu(x) \quad \text{para } \lambda \in (0, 1)$$

donde si $\mu(x)$ es una medida atómica, la J -divergencia generalizada se reduce a la igualdad

$$J_{\phi}^{\lambda}(p, q) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i [\lambda\phi(x_i) + (1 - \lambda)\phi(y_i) - \phi(\lambda x_i + (1 - \lambda)y_i)]$$

3. PROPIEDADES PREVIAS

De sencillos cálculos y particularizaciones con la definición de la J -divergencia generalizada, se obtienen de forma inmediata los siguientes resultados.

Proposición 3.1

$$J_{\phi}^{\lambda}(f(p), f(q)) = \lambda(1 - \lambda) \int_x |f(p) - f(q)|^2 d\mu(x) \text{ para } \phi(x) = x^2 - x.$$

Obsérvese, que al particularizar a $f(p) = \sqrt{p}$, la expresión anterior se reduce a

$$J_{\phi}^{\lambda}(\sqrt{p}, \sqrt{q}) = 2\lambda(1 - \lambda) \left(1 - \int_x \sqrt{pq} d\mu(x) \right) = 2\lambda(1 - \lambda)(1 - \cos(p, q))$$

siendo $p(x)$, $q(x)$ funciones de densidad de probabilidad, en las que se ha definido el producto escalar

$$\langle p, q \rangle = \int_x \sqrt{p(x)q(x)} d\mu(x)$$

Así, en este caso la J -divergencia se expresa en función de la distancia Hellinger y de la distancia Bhattacharyya.

Proposición 3.2

$J_{\phi}^{\lambda}(p, q) \geq 0$ para todas las funciones $p(x)$, $q(x)$ de L^1_{ϕ} si y sólo si la función $\phi(t)$ es convexa en T_{ϕ} .

Demostración

Si $\phi(x)$ no fuera convexa en un punto $x_0 \in T_{\phi}$, entonces existiría otro punto $x_1 \in T_{\phi}$ que cumpliría

$$\lambda\phi(x_0) + (1 - \lambda)\phi(x_1) < \phi(\lambda x_0 + (1 - \lambda)x_1)$$

para los que al considerar las funciones

$$p(x) = \begin{cases} x_0 & \text{para } x \in K \\ 0 & \text{para } x \notin K \end{cases} \quad q(x) = \begin{cases} x_1 & \text{para } x \in K \\ 0 & \text{para } x \notin K \end{cases}$$

con K subconjunto de X de medida finita, se tendría que $J_\phi^\lambda(p, q) < 0$.

El recíproco resulta evidente al reducirse la J -divergencia a la integral de una función positiva.

4. CONDICIONES PARA LA SIMETRÍA DE LA J -DIVERGENCIA GENERALIZADA

Estudiada la no negatividad de la J -divergencia generalizada, resulta interesante el estudio de las condiciones que debemos imponer al parámetro λ para que fijada una función $\phi(t)$, la J -divergencia generalizada resulte simétrica. En este sentido, estudiaremos previamente las funciones que cumplen la condición $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) = f(\lambda y + (1 - \lambda)x)$ para todo $x, y \in T_\phi$ siendo $T_\phi = [a, b] \subset \mathbb{R}$.

Lema 4.1

Fijado un valor de λ , las únicas funciones continuas $f: T_\phi \rightarrow \mathbb{R}$ que cumplen la condición, $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) = f(\lambda y + (1 - \lambda)x)$ para todo $x, y \in T_\phi$ son las de la forma $f(x) = \text{cte}$ para todo $x \in T_\phi$.

Demostración

Dados $x_0 \in (a, b)$ y λ fijos, $\lambda \in (0, 1/2)$, existen dos puntos de (a, b)

$$\hat{x}_0 = \left[\frac{\lambda(k+1) - k}{2\lambda - 1} (x_0 - a) \right] + a \quad , \quad \hat{y}_0 = \left[\frac{\lambda(k+1) - 1}{2\lambda - 1} (x_0 - a) \right] + a$$

para valores de k cumpliendo

$$k > \frac{x_0 + 2\lambda - 1}{\lambda x_0} - 1 \quad \text{y} \quad \frac{\lambda}{1 - \lambda} < k < 1$$

Para tales valores, al aplicarles la condición

$$f(\lambda \hat{x}_0 + (1 - \lambda)\hat{y}_0) = f(\lambda \hat{y}_0 + (1 - \lambda)\hat{x}_0) \quad (1)$$

se obtiene

$$f(x_0) = f(a + k(x_0 - a))$$

y al aplicar de forma recurrente la expresión anterior

$$f(x_0) = f(a + k^n(x_0 - a))$$

con lo que al tomar límites

$$f(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(a + k^n(x_0 - a)) = f(a)$$

Así, las únicas funciones que cumplen la condición (1) son las funciones de la forma $f(x) = \text{cte}$ en T_ϕ .

De aplicar al lema anterior a las J -divergencias generalizadas, hemos obtenido una caracterización de la simetría que se expresa en los términos siguientes

Teorema 4.1

- a) Las J -divergencias $J_\phi^\lambda(p, q)$ son simétricas p y q para toda función de la forma $\phi(x) = ax^2 + bx + c$.
- b) Las J -divergencias $J_\phi^\lambda(p, q)$ son simétricas en p y q para las funciones $\phi(x) \neq ax^2 + bx + c$ dos veces diferenciables con continuidad si y sólo si $\lambda = \frac{1}{2}$.

Demostración a)

Para $\phi(x) = ax^2 + bx + c$, $J_\phi^\lambda(p, q) = \int_x a\lambda(1-\lambda)(p-q)^2 d\mu(x)$ que es simétrica en p y q .

Demostración b)

De $J_\phi^\lambda(p, q)$ simétrica para toda $p(x), q(x) \in L_\phi^1$ y de tomar

$$p(x) = \begin{cases} s & \text{para } x \in K \\ 0 & \text{para } x \notin K \end{cases} \quad q(x) = \begin{cases} s & \text{para } x \in K \\ 0 & \text{para } x \notin K \end{cases} \quad \text{con } 0 \neq \mu(K) < +\infty$$

se tendrá para todo $s, t \in T_\phi$.

$$\begin{aligned} [\lambda\phi(s) + (1-\lambda)\phi(t) - \phi(\lambda s + (1-\lambda)t)]\mu(K) &= \\ &= [(1-\lambda)\phi(s) + \lambda\phi(t) - \phi((1-\lambda)s + \lambda t)]\mu(K) \end{aligned}$$

Simplificando la expresión anterior, se obtiene

$$(2\lambda - 1)[\phi(s) - \phi(t)] = \phi(\lambda s + (1 - \lambda)t) - \phi((1 - \lambda)s + \lambda t) = F(s, t)$$

y derivando respecto de s y t

$$0 = [\phi''(\lambda s + (1 - \lambda)t) - \phi''((1 - \lambda)s + \lambda t)](1 - \lambda)\lambda = \frac{\partial^2 F(s, t)}{\partial s \partial t}$$

Así, para $\phi''(x)$ se cumple la condición del lema 4.1.

$$\phi''(\lambda s + (1 - \lambda)t) = \phi''((1 - \lambda)s + \lambda t) \quad \text{para todo } s, t \in T_\phi$$

de la que resulta $\phi''(x) = \text{cte}$ para todo $x \in T_\phi$ cuando $\lambda \neq \frac{1}{2}$, y por ello, se obtiene la simetría para funciones con $\phi''(x) \neq \text{cte}$ sólo para el valor de $\lambda = \frac{1}{2}$.

5. CONVEXIDAD DE LA J -DIVERGENCIA GENERALIZADA RESPECTO DEL PARAMETRO

Prosiguiendo con el estudio de la J -divergencia generalizada atendiendo a los valores que toma el parámetro, analizamos seguidamente las condiciones exigibles a la función $\phi(t)$ para que J -divergencia sea convexa en función del parámetro. En este sentido, con el supuesto que $J_\phi^\lambda(p, q)$ es dos veces derivable bajo el signo integral y que el soporte de $\lambda\phi(p) + (1 - \lambda)\phi(q) - \phi(\lambda p + (1 - \lambda)q)$ no depende del parámetro, hemos obtenido

Proposición 5.1

$J_\phi^\lambda(p, q)$ es convexa (cóncava) en $(0, 1)$ respecto de λ para todas las posibles parejas $p(x), q(x) \in L_\phi^1$ si y sólo si $\phi(t)$ es cóncava (convexa) en T_ϕ .

Demostración

De la convexidad de $J_\phi^\lambda(p, q)$ respecto del parámetro λ resulta para toda $p(x), q(x) \in L_\phi^1$

$$\int_x \phi''[\lambda p(x) + (1 - \lambda)q(x)][p(x) - q(x)]^2 d\mu(x) < 0 \quad \text{para } \lambda \in (0, 1) \quad (2)$$

Por otro lado, si $\phi''(t)$ fuera positiva en un punto "a" de T_ϕ , existiría un entorno de "a" en T_ϕ cumpliendo $\phi''(t) > 0$ para $t \in (a - \delta, a + \delta)$, y al tomar

$$p(x) = \begin{cases} a & \text{si } x \in K \\ 0 & \text{si } x \notin K \end{cases} \quad q(x) = \begin{cases} a + \frac{\delta}{2} & \text{si } x \in K \\ 0 & \text{si } x \notin K \end{cases}$$

con $0 \neq \mu(K) < +\infty$, resultaría

$$\int_x \phi''[\frac{1}{2}p(x) + \frac{1}{2}q(x)][p(x) - q(x)]^2 d\mu(x) = \int_x \phi''\left(a + \frac{\delta}{4}\right) \frac{\delta^2}{4} d\mu(x) > 0$$

que contradice (2) en el valor $\lambda = \frac{1}{2}$.

El recíproco es evidente, pues de la concavidad de $\phi(t)$ se deduce (2) y a su vez la convexidad de $J_\phi^\lambda(p, q)$.

Proposición 5.2

$\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} J_\phi^\lambda(p, q)\right)(\lambda) = K(p, \lambda p + (1 - \lambda)q) - K(q, \lambda p + (1 - \lambda)q)$ siendo $\phi(t) = t \log t$, $K(p, q)$ la diferencia de información entre $p(x)$ en el sentido de Kullback-Leibler y las funciones $p(x)$ y $q(x)$ cumpliendo la condición $\|p\| = \|q\| = 1$ para el producto escalar $\langle p, q \rangle$, $\langle p, q \rangle = \int_x \sqrt{p(x) \cdot q(x)} d\mu(x)$.

Demostración

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} J_\phi^\lambda(p, q)\right)(\lambda) = \\ & = \int_x [p \log p - q \log q - p \log (\lambda p + (1 - \lambda)q) + q \log (\lambda p + (1 - \lambda)q)] d\mu = \\ & = K(p, \lambda p + (1 - \lambda)q) - K(q, \lambda p + (1 - \lambda)q) \end{aligned}$$

Corolario 5.1

En las condiciones de la proposición 5.2, se tiene de forma inmediata los resultados siguientes:

a) $\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} J_\phi^\lambda(p, q)\right)(0) = K(p, q)$

$$b) \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} J_{\phi}^{\lambda}(p, q) \right)(1) = -K(q, p)$$

Corolario 5.2

En las condiciones de la proposición 5.2, existe un único λ_0 tal que cumple la condición:

$$K(p, \lambda_0 p + (1 - \lambda_0)q) = K(q, \lambda_0 p + (1 - \lambda_0)q)$$

Demostración

Al ser la función $\frac{\partial}{\partial \lambda} J_{\phi}^{\lambda}(p, q)$ una función decreciente en λ y tomar distintos signos en los extremos del intervalo $[0, 1]$, resulta inmediata la existencia de un único $\lambda_0 \in (0, 1)$ cumpliendo

$$\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} J_{\phi}^{\lambda}(p, q) \right)(\lambda_0) = 0$$

condición que equivale a

$$K(p, \lambda_0 p + (1 - \lambda_0)q) = K(q, \lambda_0 p + (1 - \lambda_0)q)$$

Proposición 5.3

La simetrización ${}^s J_{\phi}^{\lambda}(p, q) = J_{\phi}^{\lambda}(p, q) + J_{\phi}^{1-\lambda}(p, q)$ alcanza el máximo en $\lambda = \frac{1}{2}$ cuando $\phi(t)$ es una función estrictamente convexa.

Demostración

Cuando la función $\phi(t)$ es convexa estricta, las funciones $J_{\phi}^{\lambda}(p, q)$ y $J_{\phi}^{1-\lambda}(p, q)$ son cóncavas en $(0, 1)$. Así, la función simetrizada es también cóncava estricta en $(0, 1)$ y el máximo respecto de λ es único.

Por otro lado, al cumplirse las condiciones

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} ({}^s J_{\phi}^{\lambda}(p, q))\left(\frac{1}{2}\right) = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} ({}^s J_{\phi}^{\lambda}(p, q))\left(\frac{1}{2}\right) < 0$$

el máximo de ${}^s J_{\phi}^{\lambda}(p, q)$ se alcanza en $\lambda = \frac{1}{2}$.

6. CONVEXIDAD DE LA J-DIVERGENCIA GENERALIZADA RESPECTO DE $p(x), q(x)$

De forma paralela al estudio de la convexidad de la diferencia de Jensen realizado por Burbea y Rao (1982), hemos obtenido para la J -divergencia generalizada el siguiente resultado.

Proposición 6.1

$J_\phi^\lambda(p, q)$ es convexa (cóncava en $L_\phi^1 \times L_\phi^1$ si y sólo si $\phi(t)$ es convexa (cóncava) en T_ϕ y $\frac{1}{\phi''}(t)$ es cóncava (convexa) en T_ϕ .

Demostración

Para que $J_\phi^\lambda(p, q)$ sea convexa en $L_\phi^1 \times L_\phi^1$, la matriz de la forma cuadrática que define el Hessiano debe ser semidefinida positiva. En nuestro caso, el cálculo se reduce a

$$\begin{aligned} d^2 J_\phi((p, q); (f, g), (f, g)) &= \\ &= \int_x [a_1(p, q)f^2 + a_2(p, q)g^2 + 2b(p, q)f \cdot g] d\mu(x) \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} a_1(p, q) &= \lambda\phi''(p) - \lambda^2\phi''(\lambda p + (1 - \lambda)q) \\ a_2(p, q) &= (1 - \lambda)\phi''(q) - (1 - \lambda)^2\phi''(\lambda p + (1 - \lambda)q) \\ b(p, q) &= \lambda(1 - \lambda)\phi''(\lambda p + (1 - \lambda)q) \end{aligned}$$

y

$$M(p, q) = \begin{pmatrix} a_1(p, q) & b(p, q) \\ b(p, q) & a_2(p, q) \end{pmatrix} \text{ semidefinida positiva.}$$

Al tomar $p = q$ se tiene

$$0 \leq a_1(p, q) = \lambda\phi''(p) - \lambda^2\phi''(p) = (\lambda - \lambda^2)\phi''(p) \text{ para todo } p(x) \in L_\phi^1$$

de donde resulta $\phi''(t) \geq 0$ para todo t .

Por otro lado, de $a_1(p, q)a_2(p, q) - (b(p, q))^2 \geq 0$, se obtiene

$$\lambda(1 - \lambda)\phi''(p)\phi''(q)\phi''(\lambda p + (1 - \lambda)q)[(\phi'')^{-1}(\lambda p + (1 - \lambda)q) -$$

$$- (\phi'')^{-1}(p) - (1 - \lambda)(\phi'')^{-1}(q)] \geq 0$$

y de la convexidad de $\phi''(t)$ es inmediata la concavidad de $\frac{1}{\phi''}(t)$.

Recíprocamente, de la concavidad de $\frac{1}{\phi''}(t)$ y la convexidad de ϕ se obtiene de forma inmediata

$$a_1(p, q)a_2(p, q) - (b(p, q))^2 \geq 0$$

Por otro lado, al considerar los valores,

$$r_1 = \left(\frac{\lambda}{\phi''(p)} \right)^{1/2}, \quad r_2 = \left(\frac{1-\lambda}{\phi''(q)} \right)^{1/2}, \quad s_1 = (\lambda\phi''(p))^{1/2}, \quad s_2 = 0$$

se tiene

$$r_1^2 + r_2^2 = \frac{\lambda}{\phi''(p)} + \frac{1-\lambda}{\phi''(q)} \leq \frac{1}{\phi''(\lambda p + (1-\lambda)q)}$$

y sustituyendo en la desigualdad de Cauchy

$$\frac{1}{\phi''(\lambda p + (1-\lambda)q)} \cdot \lambda\phi''(p) \geq \lambda^2$$

de donde

$$a_1(p, q) = \lambda\phi''(p) - \lambda^2\phi''(\lambda p + (1-\lambda)q) \geq 0$$

Corolario 6.1

La diferencia de Jensen definida por

$$J_\phi(p, q) = \int_X \left(\frac{1}{2} [\phi(p) + \phi(q)] - \phi\left(\frac{p+q}{2}\right) \right) d\mu$$

es convexa (cóncava) $L_\phi^1 \times L_\phi^1$ si y sólo si $\phi(t)$ es convexa (cóncava) y $\frac{1}{\phi''}(t)$ es cóncava (convexa) en T_ϕ .

Corolario 6.2

$J_{\phi_\alpha}^\lambda(p, q)$ es convexa en $L_{\phi_\alpha}^1 \times L_{\phi_\alpha}^1$ si y sólo si $\alpha \in [1, 2] \cup \{0\}$ y no es nunca cóncava en $L_{\phi_\alpha}^1 \times L_{\phi_\alpha}^1$ para

$$\phi_\alpha(x) = \begin{cases} (\alpha - 1)^{-1}(x^\alpha - x) & \text{para } \alpha \neq 1 \\ x \log x & \text{para } \alpha = 1 \end{cases}$$

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a los referees de este trabajo las valiosas sugerencias que han servido para la mejora en los contenidos de este escrito.

BIBLIOGRAFIA

- BURBEA, J., y RAO, C. R. (1982): «Entropy differential metric, distance and divergence measures in probability spaces: a unified approach», *J. Multivariate Anal.*, 12, 757-596.
- BURBEA, J., y RAO, C. R. (1984): «Differential metrics in probability spaces», *Probability and Mathematical Statistics*, 3, 241-258.
- MATUSITA, K. (1955): «Decision rules, based on the distance, for problems of fit, two samples, and estimation», *Annals Math. Stat.*, 26, 631-640.
- MATUSITA, K. (1964): «Distance and decision rules», *Annals of the Inst. Statistica Math.*, 14, 305-315.
- PITMAN, E. J. G. (1979): «Some basic theory for statistical inference», *John Wiley and Sons.*, New York.
- SALICRU, M., y CUADRAS, C. M. (1987): «Funciones de entropía asociadas a medidas de Csiszar», *Qüestió*, 11(3), 3-12.
- SALICRU, M., y CALVO, M. (1988): «Medidas de incertidumbre asociadas a J-divergencias», *Trabajos de Estadística* (pendiente de publicación).
- SHAKES, M. (1977): «Statistical inference for a class of life distribution-», *Com. Stat. Theo. Math.*, A 6(13), 1323-1339.
- WALD, A. (1950): *Statistical decision functions*, Wiley, New York.