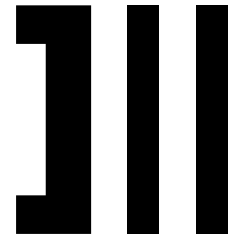


# 2

## Álgebra vetorial e matricial



### 2.1. Introdução

É desejável que as  $p$  respostas multivariadas sejam representadas por uma notação concisa. Os dados multivariados podem ser dispostos convenientemente como um arranjo de números, como foi apresentado no capítulo 1. Em geral, um arranjo retangular destes números, com  $n$  linhas e  $p$  colunas, por exemplo, é chamada de matriz de dimensões  $n \times p$ . Se por outro lado, o arranjo consiste em  $n$  mensurações em apenas 1 variável, ou ainda, de uma observação multivariada em  $p$  variáveis, esses arranjos são denominados de vetores.

Com esse arranjo bidimensional, não só, a notação fica mais concisa, mas os muitos resultados matemáticos de álgebra vetorial e matricial facilitam a derivação e exposição dos métodos estatísticos multivariados. Neste material, os elementos de álgebra vetorial e matricial, serão considerados como conhecidos. Nesse capítulo, no entanto, para os estudantes não familiarizados com o assunto, será apresentado uma breve revisão.

## 2.2. Elementos de álgebra vetorial

De um ponto de vista geométrico, as observações multivariadas, podem ser consideradas como pontos no espaço  $p$ -dimensional, cujas coordenadas são dadas por  $(x_1, x_2, \dots, x_p)$ . Esse ponto pode ser visto como o final de um segmento de reta da origem  $(0, 0, \dots, 0)$  ao ponto  $(x_1, x_2, \dots, x_p)$ . Tal segmento de reta é denominado de vetor de posição e pode ser denotado simplesmente por  $\underline{X}$ . O vetor de posições é apenas um exemplo de vetor, para os quais pode ser elaborada a álgebra, baseada nos seguintes postulados.

### POSTULADOS

1. Para qualquer vetor  $\underline{X}$  dado um número escalar  $c$ , a multiplicação do escalar pelo vetor, resulta em outro vetor  $\underline{Y}$ , definido por:

$$\underline{Y} = c\underline{X}$$

$c$  será considerado um número real;

2. A adição de dois vetores conduz a um único vetor definido como:

$$\underline{Z} = \underline{X} + \underline{Y}$$

3. A adição de vetores é:

$$\text{Comutativa: } \underline{X} + \underline{Y} = \underline{Y} + \underline{X}$$

$$\text{Associativa: } \underline{X} + (\underline{Y} + \underline{Z}) = (\underline{X} + \underline{Y}) + \underline{Z}$$

4. Se  $\underline{0}$  é o vetor nulo, então:

$$\underline{X} + \underline{0} = \underline{X}$$

$$\underline{0} \cdot \underline{X} = \underline{0}$$

### **COMPRIMENTO, ÂNGULO E DISTÂNCIA**

Inicialmente, é definido produto interno entre dois vetores, que representa a soma de produtos de pares de coordenadas correspondentes. Para dois vetores  $(n \times 1)$  de posição  $\underline{X}$  e  $\underline{Y}$ , o produto interno será o escalar, dado por:

$$\underline{X} \cdot \underline{Y} = \sum_{i=1}^n x_i y_i = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

É fácil verificar que  $\underline{X} \cdot \underline{Y} = \underline{Y} \cdot \underline{X}$ . Por meio, do produto interno é possível generalizar o teorema de Pitágoras para o espaço euclidiano n-dimensional:

$$|\underline{X}|^2 = \underline{X} \cdot \underline{X} = \sum_{i=1}^n x_i^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = d^2(P, O) \quad (2.1)$$

em que P, é o ponto do espaço n-dimensional, definido pelas coordenadas do vetor  $\underline{X}$ . A expressão (2.1) é o comprimento ao quadrado do vetor  $\underline{X}$ . A expressão entre módulo  $|\underline{X}|$  indica a norma de  $\underline{X}$ .

Dessa forma o comprimento do vetor é definido por:

$$|\underline{X}| = \sqrt{\underline{X} \cdot \underline{X}} \quad (2.2)$$

O ângulo  $\theta$  entre dois vetores ( $\underline{X}$  e  $\underline{Y}$ ) pode ser expresso em função do produto interno e do comprimento dos vetores, obtido através da lei dos cosenos, por:

$$\text{Cos}(\theta) = \frac{\underline{X} \cdot \underline{Y}}{\sqrt{\underline{X} \cdot \underline{X}} \sqrt{\underline{Y} \cdot \underline{Y}}} \quad (2.3)$$

As distâncias apresentadas no capítulo 1, entre os pontos coordenados dos vetores  $\underline{X}$  e  $\underline{Y}$ , podem ser expressos agora como o comprimento do vetor diferença das coordenadas de  $\underline{X}$  e  $\underline{Y}$ . A distância entre  $\underline{X}$  e  $\underline{Y}$  é:

$$d(\underline{X}, \underline{Y}) = |\underline{X} - \underline{Y}| = \sqrt{(\underline{X} - \underline{Y}) \cdot (\underline{X} - \underline{Y})} \quad (2.4)$$

Além de ser não negativa, essa distância entre os dois vetores é independente da direção das medidas e satisfaz a desigualdade triangular:

$$d(\underline{X}, \underline{Y}) \leq d(\underline{X}, \underline{Z}) + d(\underline{Y}, \underline{Z}) \quad (2.5)$$

Derivada a partir da desigualdade de Cauchy-Schwars:

$$|\underline{a} \cdot \underline{b}| \leq |\underline{a}| \cdot |\underline{b}| \quad (2.6)$$

O que implica, no fato, que o valor do coseno do ângulo entre  $\underline{a}$  e  $\underline{b}$  não pode exceder a unidade.

## **ORTOGONALIDADE**

Dois vetores não nulos são denominados ortogonais, se o coseno do ângulo entre eles for zero. Isto indica que:

$$\underline{X} \cdot \underline{Y} = 0 \quad (2.7)$$

Muitas vezes é desejável (em sistemas de equações lineares) construir uma base ortonormal de vetores, isto é, cada vetor da base possui comprimento unitário ( $\vec{x}_i \cdot \vec{x}_i = 1$ ) e cada par de vetor da base são ortogonais ( $\vec{x}_i \cdot \vec{x}_j = 0, i \neq j$ ). Para um conjunto de vetores arbitrários pode-se empregar a “construção de Gram-Schmidt”. O algoritmo está apresentado a seguir, considerando o conjunto  $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$  de vetores:

Passo 1: normalize  $\vec{x}_1$ :

$$\vec{x}_1^* = \frac{\vec{x}_1}{\sqrt{\vec{x}_1 \cdot \vec{x}_1}}; \vec{x}_1 \cdot \vec{x}_1 \neq 0$$

Passo 2: Ortonormalize  $\vec{x}_2$  calculando o produto interno entre  $\vec{x}_1^*$  e  $\vec{x}_2$ , e subtraindo de  $\vec{x}_2$  os componentes de  $\vec{x}_1^*$ :

Ortogonalizando  $\vec{x}_1$  e  $\vec{x}_2$ :

$$\vec{x}_2^\perp = \vec{x}_2 - (\vec{x}_2 \cdot \vec{x}_1^*) \vec{x}_1^*$$

Então, normalizando-se  $\vec{x}_2^\perp$ :

$$\tilde{X}_2^* = \frac{1}{\sqrt{\tilde{X}_2^\perp \cdot \tilde{X}_2^\perp}} \tilde{X}_2^\perp; \quad \tilde{X}_2^\perp \cdot \tilde{X}_2^\perp \neq 0$$

Passo 3: Calcule o produto interno de  $\tilde{X}_3$  com  $\tilde{X}_1^*$  e  $\tilde{X}_2^*$ , e subtraia de  $\tilde{X}_3$  os componentes de  $\tilde{X}_1^*$  e  $\tilde{X}_2^*$ ,

$$\tilde{X}_3^\perp = \tilde{X}_3 - (\tilde{X}_3 \cdot \tilde{X}_1^*) \tilde{X}_1^* - (\tilde{X}_3 \cdot \tilde{X}_2^*) \tilde{X}_2^*$$

Então, normalizando-se  $\tilde{X}_3^\perp$ :

$$\tilde{X}_3^* = \frac{1}{\sqrt{\tilde{X}_3^\perp \cdot \tilde{X}_3^\perp}} \tilde{X}_3^\perp; \quad \tilde{X}_3^\perp \cdot \tilde{X}_3^\perp \neq 0$$

E assim por diante, até o n-ésimo estágio, quando todos vetores entrarem na construção. Se o i-ésimo vetor for linearmente dependente dos vetores anteriores, então  $\tilde{X}_i^\perp$  será igual ao vetor nulo,  $\tilde{X}_i^\perp = \underline{0}$ , devendo ser eliminado do conjunto e o processo deve continuar com o vetor  $\tilde{X}_{i+1}$ . O número de vetores não nulos remanescentes no conjunto, constituem a dimensão do espaço vetorial original.

## Exemplo 2.1

Dado o conjunto de vetores, a seguir, utilizar como ilustração a construção de Gram-Schmidt.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Os vetores de  $\mathbf{X}$  são dados por:

$$\mathbf{X} = [ \tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \tilde{X}_3 ]$$

Passo 1. Normalize  $\tilde{X}_1$ :

$$\tilde{X}_1^* = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Ortonormalize  $\tilde{X}_2$ :

Produto interno:  $\tilde{X}_2 \cdot \tilde{X}_1^* = 1$



$$\text{ortogonalização: } \underline{X}_2^\perp = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - 1 \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\text{Normalização: } \underline{X}_2^* = \frac{1}{1} \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Passo 3: Ortonormalização de  $\underline{X}_3$

Produto interno:  $\underline{X}_3 \cdot \underline{X}_1^* = 1$  e  $\underline{X}_3 \cdot \underline{X}_2^* = -1$

$$\text{ortogonalização: } \underline{X}_3^\perp = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - 1 \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - (-1) \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \\ 0 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \\ 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \\ 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Verifica-se neste passo que  $\underline{X}_3$  é linearmente dependente dos vetores  $\underline{X}_1$  e  $\underline{X}_2$ , e deve ser eliminado da base vetorial. É fácil verificar que  $\underline{X}_3 = \underline{X}_1 - \underline{X}_2$ . Agrupando os vetores linearmente independentes ortonormalizados obtém-se a base vetorial de Gram-Schmidt.

$$\mathbf{X}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Pode ser observado facilmente que o produto interno dos vetores em  $\mathbf{X}_2$ , é igual a zero.

Um importante tipo de matriz inversa, denominado de inversa de Moore-Penrose, é obtido de uma base ortonormal das colunas de uma matriz para a qual se deseja obter a inversa generalizada de Moore-Penrose. Seja  $A$  uma matriz de dimensão qualquer  $n \times p$  e seja  $U$  a base ortonormal de vetores obtida da ortonormalização das colunas de  $A$ , então, defini-se  $T$  por:

$$T = U'A$$

Logo, a inversa generalizada de Moore-Penrose ( $A^+$ ) é definida por:

$$A^+ = T'(TT')^{-1}U'$$

### **2.3. Elementos de álgebra matricial**

Na álgebra matricial as relações e operações são definidas através de operações em arranjos retangulares dos elementos, denominados de matrizes. Um exemplo de matriz é:

$$A_{n \times p} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{np} \end{bmatrix}$$

O número de linhas de uma matriz é denominado de ordem de linha e o número de colunas, ordem de colunas. Se o número de linhas é  $n$  e o número de colunas é  $p$ , diz-se que a matriz possui ordem  $n \times p$ . Pode-se representar a matriz por:

$$A=[a_{ij}] \quad i=1, 2, \dots, n \quad j=1, 2, \dots, p \quad (2.8)$$

Nas análises multivariadas, muitas vezes, será feita referências a matriz de dados, a qual consiste de  $p$  respostas de  $n$  observações ou unidades experimentais, e terá ordem  $n \times p$ .

## POSTULADOS

1. Igualdade: Duas matrizes necessariamente com o mesmo número de linhas e colunas são iguais, se e somente se os elementos correspondentes, forem iguais:

$$A=B \quad \Leftrightarrow \quad a_{ij}=b_{ij} \quad i=1, 2, \dots, n \text{ e } j=1, 2, \dots, p$$

2. Adição: A soma de duas matrizes de mesma ordem é obtida pela soma dos elementos correspondentes:

$$\mathbf{A+B} = [a_{ij}] + [b_{ij}] = [a_{ij} + b_{ij}]$$

A adição com matriz nula  $\mathbf{0}$ , contendo elementos iguais a zero é:

$${}_n\mathbf{A}_p + {}_n\mathbf{0}_p = {}_n\mathbf{A}_p$$

3. Multiplicação por escalar: o produto de um escalar e uma matriz é obtido pela multiplicação de cada elemento da matriz pelo número escalar:

$$c\mathbf{A} = c[a_{ij}] = [ca_{ij}]$$

4. Multiplicação de matriz: a multiplicação de matrizes é definida para aquelas em que a ordem coluna do fator que pré multiplica é igual a ordem linha do fator que pós multiplica. Tais matrizes são denominadas conformáveis para multiplicação. O elemento (i, k) da matriz resultante do produto é a soma dos produtos dos elementos correspondentes, da i-ésima linha do fator que pré multiplica com os da k-ésima coluna do fator que pós multiplica.

$${}_n\mathbf{A}_{q \times p} \mathbf{B}_p = \mathbf{AB} = \left[ \sum_{j=1}^q \mathbf{a}_{ij} \mathbf{b}_{jk} \right] = [a_{i1}b_{1k} + a_{i2}b_{2k} + \dots + a_{iq}b_{qk}] = [c_{ik}] = \mathbf{C}$$

Em geral  $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$ .

A matriz quadrada com unidades na diagonal e zero nas demais partes é denominada de matriz unitária ou identidade:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} \end{bmatrix}$$

Verifica-se que:

$${}_n \mathbf{A}_p \cdot {}_p \mathbf{I}_p = {}_n \mathbf{A}_p$$

$${}_n \mathbf{I}_n \cdot {}_n \mathbf{A}_p = {}_n \mathbf{A}_p$$

A matriz quadrada cujos elementos fora da diagonal principal são iguais a zero é denominada matriz diagonal:

$$\mathbf{D} = \text{diag}[d_1, d_2, \dots, d_n] = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{d}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{d}_n \end{bmatrix}$$

A pré-multiplicação por uma matriz diagonal, simplesmente reescala as linhas do fator que pós multiplica, e a pós-multiplicação reescala as colunas do pré-fator.

5. Inversão de matriz: a inversa de uma matriz quadrada  $\mathbf{A}$ ,  $n \times n$ , é chamada de  $\mathbf{A}^{-1}$  e é definida de tal forma que  $\mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{I}$ .

A inversa de um produto de matrizes é o produto do inverso dos fatores em ordem inversa a ordem de multiplicação original:

$$(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}^{-1}$$

$$\text{Pois, } \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{AB} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{B} = \mathbf{I} \text{ e } \mathbf{AB} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}$$

6. Matriz transposta: uma matriz obtida pela troca de linhas por colunas a partir de uma matriz específica é denominada de matriz transposta. É denotada por  $\mathbf{A}'$ .

$${}_n \mathbf{A}_p = [a_{ij}], \text{ então, } {}_n \mathbf{A}'_p = [a_{ij}]' = [a_{ji}]$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})' = \mathbf{A}' + \mathbf{B}'$$

$$(\mathbf{AB})' = \mathbf{B}' \mathbf{A}'$$

$$(\mathbf{A}^{-1})' = (\mathbf{A}')^{-1}$$

7. Matrizes particionadas: deixe as  $r$  linhas de uma matriz  $\mathbf{A}$  ( $m \times n$ ) ser particionada das restantes  $s=m-r$  linhas, e as  $p$  colunas particionadas das remanescentes  $q=n-p$  colunas. Então,  $\mathbf{A}$  pode ser representada por submatrizes, como a seguir:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} r \\ s \end{matrix} \begin{matrix} p \\ q \end{matrix}$$

## Método prático para cálculo de matrizes inversas

As rotinas para computadores usualmente fazem uso da versão compacta do método de Gauss, denominado de método de Gauss-Jordan (Householder, 1953, 1964).

Os cálculos do método de Gauss-Jordan são recursivos, sendo que os elementos da matriz no estágio  $i+1$  são trocados pelos resultados da chamada operação pivotante dos elementos do estágio  $i$ , por:

$$\mathbf{a}_{k\ell}^{(i+1)} = \mathbf{a}_{k\ell}^{(i)} - \frac{\mathbf{a}_{kj}^{(i)} \times \mathbf{a}_{j\ell}^{(i)}}{\mathbf{a}_{jj}^{(i)}} \quad \mathbf{k} \text{ e } \ell \neq \mathbf{j}$$

$$\mathbf{a}_{j\ell}^{(i+1)} = \frac{\mathbf{a}_{j\ell}^{(i)}}{\mathbf{a}_{jj}^{(i)}} \quad \ell \neq j$$

$$\mathbf{a}_{kj}^{(i+1)} = \frac{-\mathbf{a}_{kj}^{(i)}}{\mathbf{a}_{jj}^{(i)}} \quad k \neq j$$

$$\mathbf{a}_{jj}^{(i+1)} = \frac{1}{\mathbf{a}_{jj}^{(i)}}$$

O elemento  $\mathbf{a}_{jj}^{(i)}$  é chamado de pivô, e sua linha e coluna são chamados de linha e coluna pivotais. Após  $n$  operações pivotantes, a matriz original é substituída pela sua inversa, garantindo-se que cada linha e coluna seja pivotada somente uma vez.

## Exemplo 2.2

Use o algoritmo de Gauss-jordan para inverter a matriz  $\mathbf{A}$  (2x2) a seguir:

$$\mathbf{A}^{(0)} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Passo 1. Um bom compromisso com a precisão é pivotar a linha e coluna cujo elemento da diagonal seja o maior de todos os não pivotados. Assim o elemento escolhido para pivô é o elemento  $a_{11}=4$ . A matriz após a primeira ação pivotante é:



$$\mathbf{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{2}{4} \\ -\frac{2}{4} & 2 - \frac{2 \times 2}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

Passo 2. Neste passo, a única coluna ou linha não pivotada é a 2. Portanto o pivô é  $a_{22}=1$ , e a matriz resultante da operação pivotante é:

$$\mathbf{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} - \frac{\frac{1}{2}(-\frac{1}{2})}{1} & \frac{-\frac{1}{2}}{1} \\ \frac{-\frac{1}{2}}{1} & \frac{1}{1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Ao final da operação pivotante, a matriz resultante,  $\mathbf{A}^{(2)}$ , é a matriz inversa de  $\mathbf{A}$ .

## Matrizes ortogonais

Uma classe especial de matrizes, que será utilizada rotineiramente nas técnicas multivariadas, são denominadas de matrizes ortogonais, sendo simbolizada por  $\mathbf{Q}$  e caracterizada por:

$$\mathbf{Q}'\mathbf{Q} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}' = \mathbf{I} \text{ ou } \mathbf{Q}' = \mathbf{Q}^{-1}$$

O nome deriva da propriedade de que se  $\mathbf{Q}$  tem  $i$ -ésima linha  $\mathbf{q}_i'$ , então, se  $\mathbf{Q}\mathbf{Q}' = \mathbf{I}$  implica que  $\mathbf{q}_i'\mathbf{q}_i = 1$  e  $\mathbf{q}_i'\mathbf{q}_j = 0$  para  $i \neq j$ , sendo que as linhas possuem tamanho

unitário e são mutuamente ortogonais (perpendiculares). De acordo com a condição de que  $\mathbf{Q}'\mathbf{Q} = \mathbf{I}$ , as colunas têm a mesma propriedade.

### Exemplo 2.3

Dado a matriz  $\mathbf{Q}$ , a seguir, verifique sua ortogonalidade:

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

A transposta de  $\mathbf{Q}$  é dada por:

$$\mathbf{Q}' = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

então,

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}' = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e,

$$\mathbf{Q}'\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

sendo,  $\mathbf{Q}'\mathbf{Q} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}' = \mathbf{I}$  ou  $\mathbf{Q}' = \mathbf{Q}^{-1}$ , verificou-se que  $\mathbf{Q}$  é ortogonal.

## Determinantes

Uma função escalar importante de uma matriz  $\mathbf{A}$  quadrada  $n \times n$ , é o determinante da mesma. O determinante da matriz  $\mathbf{A}$  é simbolizado por  $|\mathbf{A}|$  e é definido por:

$$\begin{aligned} |\mathbf{A}| &= a_{11} && \text{se } n = 1 \\ |\mathbf{A}| &= \sum_{j=1}^n a_{ij} |\mathbf{A}_{ij}| (-1)^{i+j} && \text{se } n > 1 \end{aligned} \quad (2.9)$$

em que  $\mathbf{A}_{ij}$  é a matriz quadrada  $(n-1) \times (n-1)$  obtida deletando-se a  $i$ -ésima linha e a  $j$ -ésima coluna de  $\mathbf{A}$ , para qualquer escolha arbitrária de  $i=1, 2, \dots, n$ .

### Exemplo 2.4

Para ilustrar a definição (2.9) será considerado as seguintes matrizes:

$$\mathbf{A} = [4] \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$$|A| = 4;$$

$$|B| = 4 \times |2| \times (-1)^2 + 1 \times |1| \times (-1)^3 = 4 \cdot 2 \cdot 1 - 1 \times 1 \times 1 = 7;$$

$$\begin{aligned} |C| &= 4 \times \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} \times (-1)^2 + 2 \times \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 2 & 2 \end{vmatrix} \times (-1)^3 + 2 \times \begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 0 \end{vmatrix} \times (-1)^4 \\ &= 4 \times [2 \times 2 \times (-1)^2 + 0 \times 0 \times (-1)^3] \times (-1)^2 + 2 \times [2 \times 2 \times (-1)^2 + 0 \times 2 \times (-1)^3] \times (-1)^3 + \\ &\quad + 2 \times [2 \times 0 \times (-1)^2 + 2 \times 2 \times (-1)^3] \times (-1)^4 = 16 - 8 - 8 = 0 \\ \therefore |C| &= 0 \end{aligned}$$

## Propriedades dos determinantes

1.  $|A'| = |A|$ ;
2. Se uma linha ou coluna de  $A$  for multiplicada por uma constante  $k$ , o determinante ficará multiplicado pela constante;
3. Se  $A$  é multiplicada por uma constante  $k$ , o determinante resultante ficará multiplicado por  $k^n$ ;

$$|kA| = k^n |A|$$

4. Se duas linhas ou duas colunas são trocadas de posição, então o determinante muda de sinal;

5. Se duas linhas ou duas colunas são proporcionais, então o determinante de  $\mathbf{A}$  será igual a zero;

6. O determinante obtido deletando a  $i$ -ésima linha e  $j$ -ésima coluna de  $\mathbf{A}$  é denominado menor de  $\mathbf{A}$ , e denotado por  $|\mathbf{A}_{ij}|$ . A relação entre  $|\mathbf{A}|$  e  $|\mathbf{A}_{ij}|$  foi apresentada na definição de determinante (2.9);

$$7. |\mathbf{A}^{-1}| = \frac{1}{|\mathbf{A}|} = |\mathbf{A}|^{-1};$$

$$8. |\mathbf{AB}| = |\mathbf{A}| \times |\mathbf{B}|.$$

## **Determinante e posto (rank)**

Se  $|\mathbf{A}| \neq 0$ , então,  $\mathbf{A}$  é denominada de posto completo, ou como é mais comum dizer,  $\mathbf{A}$  é não-singular e  $\mathbf{A}^{-1}$  existe. Uma condição necessária e suficiente para a existência da inversa de  $\mathbf{A}$  é que  $|\mathbf{A}| \neq 0$ .

## **Formas quadráticas**

Definindo  $\mathbf{A}$  como uma matriz simétrica não nula ( $n \times n$ ), e o vetor  $\mathbf{x}' = [x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_n]$  a expressão:

$$Q = \underline{x}' A \underline{x} = \sum_{i=1}^n a_{ii} X_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n a_{ij} X_i X_j$$

é dita forma quadrática, pois só contém termos quadrados ( $x_i^2$ ) e de produtos ( $x_i x_j$ ).

### Exemplo 2.5

Obtenha a expansão da forma quadrática, dado o vetor  $\underline{x}$  e a matriz  $\mathbf{A}$ , a seguir:

$$\underline{x} = [x_1 \quad x_2] \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Q} = [x_1 \quad x_2] \times \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = [4x_1 + x_2 \quad x_1 + 2x_2] \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \mathbf{Q} = 4x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2$$

Assumindo, para o momento, que  $p$  elementos  $x_1, x_2, \dots, x_p$ , de um vetor  $\mathbf{x}$  são realizações de  $p$  variáveis aleatórias  $X_1, X_2, \dots, X_p$ , pode-se considerá-los como coordenadas de um ponto no espaço  $p$ -dimensional. A distância desse ponto  $[x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_p]$  da origem pode e deve, nesse caso, ser interpretada em termos de unidades de desvio padrão. Desse modo, pode-se considerar a incerteza inerente (variabilidade) às observações. Pontos com a mesma incerteza associada são

considerados de mesma distância da origem. Introduzindo agora uma fórmula geral de distância mais apropriada têm-se:

$$d^2(O, P) = \sum_{i=1}^n a_{ii} x_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_i x_j \quad (2.10)$$

e garantindo que  $d^2 > 0$  para todo ponto  $P \neq 0$ , e fazendo  $a_{ij} = a_{ji}$ , têm-se:

$$0 < d^2 = \underline{x}' A \underline{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 & \cdots & \mathbf{X}_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} & \cdots & \mathbf{a}_{1p} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} & \cdots & \mathbf{a}_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}_{p1} & \mathbf{a}_{p2} & \cdots & \mathbf{a}_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{X}_p \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Verifica-se que (2.11) é uma forma quadrática, o que permite que a interprete como uma distância. A determinação, dos coeficientes da matriz  $\mathbf{A}$  de (2.11) será apresentada oportunamente.

## Classificação de formas quadráticas

As formas quadráticas podem ser classificadas, quanto aos resultados que produzem. Nesta seção, o interesse residirá nas formas quadráticas não negativas e nas matrizes associadas (denominadas positivas definidas). Uma condição

necessária e suficiente para que  $\mathbf{A}$  seja positiva definida (pd) é que esta possa ser fatorada por:

$$\underset{n \times n}{\mathbf{A}} = \underset{n \times n}{\mathbf{S}} \underset{n \times n}{\mathbf{S}'}$$

e que o posto de  $\mathbf{S}$  seja  $n$ , em que  $\mathbf{S}$  é uma matriz triangular, denominada fator de Cholesky de  $\mathbf{A}$  (Bock, 1975). Portanto, se uma matriz admite o fator de Cholesky, ela é positiva definida.

$$\begin{aligned} Q &= \underline{\underline{x}}' \mathbf{A} \underline{\underline{x}} = \underline{\underline{x}}' (\mathbf{S} \mathbf{S}') \underline{\underline{x}} = (\mathbf{S}' \underline{\underline{x}})' (\mathbf{S}' \underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{z}}' \underline{\underline{z}} \\ &= Z_1^2 + Z_2^2 + \cdots + Z_n^2 \end{aligned}$$

Devido a  $\mathbf{S}$  ter posto coluna completo, não existe  $\underline{\underline{x}}$  não nulo, tal que  $\underline{\underline{z}} = \mathbf{S}' \underline{\underline{x}} = 0$ . Portanto, a forma quadrática  $\mathbf{Q}$  é sempre positiva, como foi afirmado. Se por outro lado, o posto de  $\mathbf{S}$  for  $r \leq n$ , então o posto de  $\mathbf{A}$  será  $r$ , e a forma quadrática  $Q = \underline{\underline{x}}' \mathbf{A} \underline{\underline{x}} \geq 0$ , é denominada positiva semidefinida (psd). Isso se deve ao fato de que para algum vetor  $\underline{\underline{x}} \neq 0$ , a igualdade  $\mathbf{Q} = 0$ , acontece. O algoritmo para obtenção do fator de Cholesky de uma matriz pd, está apresentado a seguir.



## Algoritmo para obtenção do fator de Cholesky de uma matriz positiva definida

1. Dada uma matriz  $\mathbf{A}$  ( $n \times n$ ), com elementos  $a_{ij}$ .
2. Obtenção da transposta do fator de Cholesky  $\mathbf{S}'$ , é dada pelo algoritmo abaixo, sendo que os elementos desta matriz não contemplados pelo método devem ser considerados iguais a zero:

$$1^{\text{a}} \text{ linha:} \quad \mathbf{s}_{11} = \sqrt{\mathbf{a}_{11}} \quad \mathbf{s}_{1j} = \frac{\mathbf{a}_{1j}}{\mathbf{s}_{11}} \quad j > 1$$

i-ésima linha:

$$\mathbf{s}_{ii} = \left( \mathbf{a}_{ii} - \sum_{r=1}^{i-1} \mathbf{s}_{ri}^2 \right)^{1/2}$$

$$\mathbf{s}_{ij} = \frac{1}{\mathbf{s}_{ii}} \left( \mathbf{a}_{ij} - \sum_{r=1}^{i-1} \mathbf{s}_{ri} \mathbf{s}_{rj} \right)$$

$$i \geq 2 \quad j > i$$

3. A obtenção de  $\mathbf{S}^{-1}$ , inversa de  $\mathbf{S}$ , com elementos  $\mathbf{S}^{ij}$ , é dada por:

$$\mathbf{S}^{ii} = \frac{1}{\mathbf{S}_{ii}} \quad \mathbf{S}^{ij} = \frac{-1}{\mathbf{S}_{ii}} \sum_{r=1}^j \mathbf{S}_{ri} \mathbf{S}^{rj} \quad i > j$$

para  $i < j \quad \mathbf{S}^{ij} = 0$

4. A obtenção da  $\mathbf{A}^{-1}$ , inversa de  $\mathbf{A}$ , com elementos  $a^{ij}$ , em que  $a^{ij}=a^{ji}$ , é dada por:

$$a^{ii} = \sum_{r=i}^n (\mathbf{S}^{ri})^2 \quad a^{ij} = \sum_{r=i}^n \mathbf{S}^{ri} \mathbf{S}^{rj} \quad i > j$$

### Exemplo 2.6

Obtenha o fator de Cholesky ( $\mathbf{S}$ ), sua inversa ( $\mathbf{S}^{-1}$ ) e a matriz inversa ( $\mathbf{A}^{-1}$ ), a partir da matriz  $\mathbf{A}$ , apresentada a seguir:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Obtenção de  $\mathbf{S}$ :

Primeira linha:

$$\mathbf{S}_{11} = \sqrt{4} = 2; \quad \mathbf{S}_{12} = \frac{2}{2} = 1; \quad \mathbf{S}_{13} = \frac{0}{2} = 0$$

Segunda linha:

$$S_{22} = [2 - 1^2]^{\frac{1}{2}} = 1$$

$$S_{23} = \frac{1}{1}[1 - 1 \times 0] = 1$$

Terceira linha:

$$S_{33} = [2 - (0^2 + 1^2)]^{\frac{1}{2}} = 1$$

Logo,

$$S' = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad S = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

A matriz  $S^{-1}$  é obtida por:

Linha 1:

$$S^{11} = \frac{1}{2}; \quad S^{12} = S^{13} = 0 \quad i < j$$

Linha 2:

$$S^{22} = \frac{1}{1} = 1; \quad S^{21} = -1 \times \left(1 \times \frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2}; \quad S^{12} = 0 \quad i < j$$

linha 3:

$$\mathbf{s}^{33} = \frac{1}{1} = 1; \quad \mathbf{s}^{31} = -1 \times \left( 0 \times \frac{1}{2} + 1 \times \left( \frac{-1}{2} \right) \right) = \frac{1}{2} \quad \mathbf{s}^{32} = -1 \times (1 \times 1) = -1$$

logo,

$$\mathbf{S}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

A matriz  $\mathbf{A}^{-1}$  é obtida por:

Diagonal principal:

$$\mathbf{a}^{11} = \left( \frac{1}{2} \right)^2 + \left( -\frac{1}{2} \right)^2 + \left( \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{3}{4}$$

$$\mathbf{a}^{22} = 1^2 + (-1)^2 = 2$$

$$\mathbf{a}^{33} = 1^2 = 1$$

Demais elementos:

$$\mathbf{a}^{21} = 1 \times \left( -\frac{1}{2} \right) + (-1) \times \frac{1}{2} = -1; \quad \mathbf{a}^{31} = 1 \times \frac{1}{2};$$

$$\mathbf{a}^{31} = 1 \times \frac{1}{2} = \frac{1}{2}; \quad \mathbf{a}^{32} = 1 \times (-1) = -1;$$

$$\mathbf{a}^{12} = \mathbf{a}^{21} = -1; \quad \mathbf{a}^{13} = \mathbf{a}^{31} = \frac{1}{2}; \quad \mathbf{a}^{23} = \mathbf{a}^{32} = -1$$

Logo,

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & -1 & \frac{1}{2} \\ -1 & 2 & -1 \\ \frac{1}{2} & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

O fator de Cholesky  $\mathbf{S}$  e sua inversa têm as seguintes propriedades:

1.  $\mathbf{S}\mathbf{S}' = \mathbf{A}$

2.  $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{S} = \mathbf{S}'(\mathbf{S}^{-1})' = \mathbf{I}$

3.  $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{S}'$

4.  $\mathbf{A}(\mathbf{S}^{-1})' = \mathbf{S}$

5.  $(\mathbf{S}^{-1})\mathbf{A}(\mathbf{S}^{-1})' = \mathbf{I}$

6.  $(\mathbf{S}^{-1})'(\mathbf{S}^{-1}) = \mathbf{A}^{-1}$

## Maximização de formas quadráticas

Na estatística multivariada e em outras áreas aplicadas, é muitas vezes necessária a maximização de uma forma quadrática. Devido à forma quadrática  $Q = \underline{x}'A\underline{x}$  poder ser feita arbitrariamente grande tomando-se os valores dos elementos de  $\underline{x}$  grandes, é necessário maximizar  $Q$  condicionada a alguma restrição no comprimento de  $\underline{x}$ . Uma conveniente alternativa é tomar uma solução normalizada de  $\underline{x}$ , ou seja, uma solução tal que  $\underline{x}$  tenha comprimento unitário. Então a maximização da forma quadrática  $Q$  pode ser transformada na maximização da razão:

$$\lambda = \frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'\underline{x}}$$

para toda matriz  $A$  simétrica real. Para a maximização deve-se tomar a derivada em relação a  $\underline{x}$  e igualar a zero, resolvendo o sistema obtido, como demonstrado a seguir.

$$\frac{\partial Q}{\partial \underline{x}} = \frac{\partial \underline{x}'A\underline{x}}{\partial \underline{x}} = 2A\underline{x} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \underline{x}'\underline{x}}{\partial \underline{x}} = 2\underline{x}$$

usando a regra do quociente:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \underline{x}} = \frac{2A\underline{x}(\underline{x}'\underline{x}) - 2(\underline{x}'A\underline{x})\underline{x}}{(\underline{x}'\underline{x})^2} = \frac{2}{\underline{x}'\underline{x}} \left( A - \frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'\underline{x}} I \right) \underline{x}$$

igualando a zero essa derivada e dividindo-a por  $2/\underline{x}'\underline{x}$ , é obtido o sistema homogêneo de equações:

$$\left( A - \frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'\underline{x}} I \right) \underline{x} = \underline{0}$$

Desde que  $\frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'\underline{x}} = \lambda$ , então para um ponto estacionário qualquer  $i$ ,

$$(A - \lambda_i I) \underline{x}_i = \underline{0} \tag{2.12}$$

Para que o sistema de equações em (2.12) não possua apenas a solução trivial,  $A - \lambda_i I$  não pode ter posto completo. Isto significa que seu determinante deve ser zero:

$$|A - \lambda_i I| = 0 \tag{2.13}$$

A equação polinomial em  $\lambda$ , resultado da expansão dos termos a esquerda na equação (2.13) através do uso da definição (2.9), é chamada de equação característica de  $A$ . A  $i$ -ésima raiz da equação ( $\lambda_i$ ) é denominada de valor característico de  $A$ ;  $\underline{x}_i$  é denominado vetor característico de  $A$  associado a  $\lambda_i$ . Outras terminologias

podem ser empregadas, tais como, autovalores e autovetores, ou, valores e vetores próprios, ou ainda, raiz e vetor latente.

## Pares de formas quadráticas

É de fundamental importância na análise multivariada o problema de maximizar razão entre duas formas quadráticas:

$$\lambda = \frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'B\underline{x}} \quad |B| \neq 0$$

em que **B** é uma matriz pd. O máximo é dado da mesma forma que apresentado anteriormente, a partir da derivada em relação a  $\underline{x}$ , igualando-a a zero, como apresentado a seguir:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \underline{x}} \times \frac{\underline{x}'B\underline{x}}{2} = A\underline{x} - \frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'B\underline{x}} B\underline{x} = (A - \lambda B)\underline{x} = \underline{0} \quad (2.14)$$

O sistema homogêneo de equações (2.14) terá solução não trivial ( $\underline{x} \neq \underline{0}$ ), se e somente se,

$$|A - \lambda B| = 0 \quad (2.15)$$



Os autovalores ( $\lambda$ ) de  $\mathbf{A}$  em relação a  $\mathbf{B}$  são denominados de valores próprios, raízes características, e os autovetores de vetores característicos ou próprios. Desde que  $\mathbf{B}$  seja pd, é possível fatorá-la através do fator de Cholesky, por:

$$\mathbf{B} = \mathbf{S}_B \mathbf{S}_B'$$

Então definindo-se  $\tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{S}_B' \mathbf{x}$  e usando as propriedades do fator de Cholesky tem-se que  $\mathbf{x} = (\mathbf{S}_B^{-1})' \tilde{\mathbf{z}}$ . Agora, se (2.14) for pré multiplicada por  $\mathbf{S}_B^{-1}$  e  $\mathbf{x} = (\mathbf{S}_B^{-1})' \tilde{\mathbf{z}}$  for substituído na expressão, têm-se:

$$\begin{aligned} & \left[ \mathbf{S}_B^{-1} \mathbf{A} - \lambda \mathbf{S}_B^{-1} \mathbf{B} \right] (\mathbf{S}_B^{-1})' \tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{0} \\ & \left[ \mathbf{S}_B^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{S}_B^{-1})' - \lambda \mathbf{I} \right] \tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{0} \end{aligned} \tag{2.16}$$

desde que  $\mathbf{S}_B^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{S}_B^{-1})' = \mathbf{I}$

A solução de (2.16) é a mesma da obtida pela maximização de uma forma quadrática, apresentada em (2.12), exceto que  $\mathbf{x} = (\mathbf{S}_B^{-1})' \tilde{\mathbf{z}}$  deve ser recuperado, uma vez que  $\tilde{\mathbf{z}}$  é obtido. Os autovalores, no entanto, são invariantes à transformação não-singular realizada.

## **Cálculo prático dos autovalores e autovetores**

Será apresentado aqui o método denominado “Power method” derivado por Hotelling (1936). Esse método é apropriado para problemas em que somente  $r$  autovalores de maior magnitude e os seus respectivos autovetores são necessários ( $r \leq n$ ). O método é iterativo, dado um vetor inicial arbitrário  $\underline{y}^{(0)}$ . O vetor do estágio  $i$  será representado por  $\underline{y}^{(i)}$  e o da próxima iteração será obtido por:

$$\underline{y}^{(i+1)} = A\underline{y}^{(i)}$$

Usualmente um vetor de elementos iguais a  $\pm 1$  é usado como vetor inicial. Os vetores característicos devem ser normalizados em cada estágio, para que o critério de convergência seja verificado. Quando uma aproximação desejada para  $\lambda_1$  e  $\underline{x}_1$  sejam alcançados, o segundo autovalor e autovetor devem ser encontrados na matriz  $A_2$ , definida por:

$$A_2 = A - \lambda_1 \underline{x}_1 \underline{x}_1' \quad (2.17)$$

E assim o processo é repetido até que um número  $r \leq n$  de pares de autovalores e autovetores sejam obtidos.

### **Exemplo 2.7**

aplique o “power method” e determine os autovalores e autovetores da matriz apresentada a seguir:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

### 1. Determinação de $\lambda_1$ e $\underline{x}_1$

O vetor  $\underline{y}^{(0)}$  será considerado como:  $\underline{y}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

Na avaliação da convergência, o autovetor em cada estágio será padronizado através da divisão pelo elemento de maior valor do mesmo.

$$(i) \quad \underline{V}^{(1)} = A \underline{V}^{(0)} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Normalizando  $\underline{y}^{(1)}$ :

$$\underline{V}^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{6}{6} \\ \frac{3}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Para avaliar a convergência, os vetores  $\underline{y}^{(0)}$  e  $\underline{y}^{(1)}$  devem ser comparados. Será considerado, convergente se todos os elementos de  $\underline{y}^{(1)}$  forem semelhantes aos elementos correspondentes de  $\underline{y}^{(0)}$ , para uma precisão pré estipulada, ou seja, de  $1 \times 10^{-8}$ . Neste caso, os vetores diferem consideravelmente.

$$(ii) \quad \tilde{y}^{(2)} = A\tilde{y}^{(1)} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2.5 \end{bmatrix} \quad \text{normalizando,}$$

$$\tilde{y}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Comparando-se  $\tilde{y}^{(2)}$  com  $\tilde{y}^{(1)}$ , padronizados, verifica-se que são idênticos, indicando que o critério de convergência foi alcançado.

O autovetor  $\tilde{x}_1$  é obtido pela normalização de  $\tilde{y}^{(2)}$  e o primeiro autovalor  $\lambda_1$ , por  $\lambda_1 = \tilde{x}_1' A \tilde{x}_1$ .

$$\tilde{x}_1 = \frac{\tilde{y}^{(2)}}{\sqrt{\tilde{y}^{(2)'} \tilde{y}^{(2)}}} = \begin{bmatrix} 0,8944 \\ 0,4472 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_1 = \tilde{x}_1' A \tilde{x}_1 = [4,4721 \quad 2,2361] \times \begin{bmatrix} 0,8944 \\ 0,4472 \end{bmatrix} = 5$$

2. determinação de  $\lambda_2$  e  $\tilde{x}_2$

$$A_2 = A - \lambda_1 \tilde{x}_1 \tilde{x}_1' = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} - 5 \times \begin{bmatrix} 0,8944 \\ 0,4472 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0,8944 & 0,4472 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Portanto os demais autovalores e autovetores de **A** são nulos ( $\lambda_2=0$  e  $\tilde{x}_2 = \vec{0}$ ).

Os autovalores da matriz da forma quadrática podem servir para classificação das mesmas. Demonstra-se que se todos os autovalores da matriz  $\mathbf{A}$ , dado  $Q = \underline{x}' \mathbf{A} \underline{x}$ , forem positivos e maiores que zero a matriz  $\mathbf{A}$  é positiva definida e a forma quadrática é positiva. Se  $\mathbf{A}$  possui autovalores positivos e nulos a matriz será psd, e a forma quadrática poderá ser nula para um vetor  $\underline{x} \neq \underline{0}$ .

Os resultados apresentados até agora, a respeito de formas quadráticas, são conseqüências da expansão de matrizes simétricas em um processo denominado de decomposição espectral. A decomposição espectral de uma matriz  $\mathbf{A}$  ( $n \times n$ ), simétrica, é dada por:

$$\mathbf{A} = \lambda_1 \underline{e}_1 \underline{e}_1' + \lambda_2 \underline{e}_2 \underline{e}_2' + \dots + \lambda_n \underline{e}_n \underline{e}_n' \quad (2.18)$$

em que  $\lambda_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) são os autovalores de  $\mathbf{A}$  e  $\underline{e}_i$  são os autovetores normalizados associados.

## Exemplo 2.8

Considere a matriz simétrica:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

com os autovalores e autovetores normalizados, apresentados a seguir:

$$\lambda_1 = 5,2361 \quad \underline{e}_1 = \begin{bmatrix} 0,8507 \\ 0,5257 \end{bmatrix} \quad \lambda_2 = 0,7639 \quad \underline{e}_2 = \begin{bmatrix} -0,5257 \\ 0,8507 \end{bmatrix}$$

Obtenha a decomposição espectral de **A**.

$$\lambda_1 \underline{e}_1 \underline{e}_1' = \begin{bmatrix} 3,7893 & 2,3417 \\ 2,3417 & 1,4471 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_2 \underline{e}_2 \underline{e}_2' = \begin{bmatrix} 0,2111 & -0,3416 \\ -0,3416 & 0,5528 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3,7893 & 2,3417 \\ 2,3417 & 1,4471 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0,2111 & -0,3416 \\ -0,3416 & 0,5528 \end{bmatrix}$$

A expressão da distância como raiz quadrada de uma forma quadrática positiva definida permite que se obtenha a interpretação geométrica baseada nos autovalores e autovetores de uma matriz. Dada uma matriz **A**,  $p \times p$ , e suponha que  $p=2$ , os pontos  $\underline{x}' = [x_1, x_2]$  de distância constante  $c$  da origem satisfazem a:

$$\underline{x}' A \underline{x} = a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + 2a_{12} x_1 x_2 = c^2$$

pela decomposição espectral de **A**, como no exemplo 2.8, tem-se:

$$A = \lambda_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1' + \lambda_2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2'$$

$$\therefore \mathbf{x}' A \mathbf{x} = \lambda_1 (\mathbf{x}' \mathbf{e}_1)^2 + \lambda_2 (\mathbf{x}' \mathbf{e}_2)^2$$

Fazendo  $y_i = \mathbf{x}' \mathbf{e}_i$ , obtém-se:  $c^2 = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2$  que é uma elipse, pois  $\lambda_i > 0$ . Verifica-se que  $\mathbf{x} = c \lambda_1^{-1/2} \mathbf{e}_1$ , satisfaz  $\mathbf{x}' A \mathbf{x} = \lambda_1 (c \lambda_1^{-1/2} \mathbf{e}_1' \mathbf{e}_1)^2 = c^2$  e  $\mathbf{x} = c \lambda_2^{-1/2} \mathbf{e}_2$  dá a apropriada distância na direção de  $\mathbf{e}_2$ . Portanto, os pontos de distância  $c$  pertencem a uma elipse cujos eixos são dados pelos autovetores de  $\mathbf{A}$  com tamanhos proporcionais ao recíproco da raiz quadrada dos autovalores. A constante de proporcionalidade é  $c$ . A situação é ilustrada na Figura 2.1. Se  $p > 2$  os pontos pertencem a uma hiperelipsóide de distância  $c$  constante da origem, cujos eixos são dados pelos autovetores de  $\mathbf{A}$ . O semi eixo na direção  $i$  tem comprimento de  $\frac{c}{\sqrt{\lambda_i}}$ .

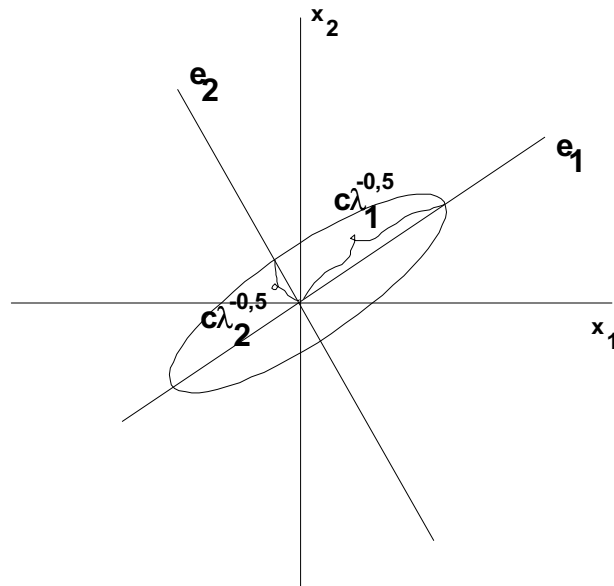


Figura 2.1. Pontos de distância  $c$  constante da origem ( $\lambda_1 < \lambda_2$ ).

## Matriz raiz quadrada

A partir da decomposição espectral, é possível definir uma categoria de matriz, em função dos autovalores e autovetores, denominada de matriz raiz quadrada.

Sendo  $\mathbf{A}$  ( $n \times n$ ), uma matriz com decomposição espectral dada por

$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i'$ , pode-se construir uma matriz  $\mathbf{P}$ , cujas colunas são os autovetores

normalizados de  $\mathbf{A}$ , tal que,  $\mathbf{P} = [\mathbf{e}_1 \quad \mathbf{e}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{e}_n]$ , e uma matriz  $\Lambda$  diagonal, como os

autovalores de  $\mathbf{A}$ , tal que,  $\Lambda = \text{diag}[\lambda_i]$ . É fácil verificar que:

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\Lambda\mathbf{P}'$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}' = \sum_{i=1}^n \left( \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i' \right) \quad (2.19)$$

Definindo,  $\Lambda^{1/2}$  como uma matriz diagonal com  $\sqrt{\lambda_i}$  como elemento da  $i$ -ésima diagonal, então, a matriz a seguir é definida como matriz raiz quadrada de  $\mathbf{A}$  e é simbolizada por  $\mathbf{A}^{1/2}$ .

$$\mathbf{A}^{1/2} = \sum_{i=1}^n \sqrt{\lambda_i} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i' = \mathbf{P}\Lambda^{1/2}\mathbf{P}' \quad (2.20)$$

As suas propriedades são:

$$1. (\mathbf{A}^{1/2})' = \mathbf{A}^{1/2} \quad (\mathbf{A}^{1/2} \text{ é simétrica})$$



$$2. \mathbf{A}^{1/2} \mathbf{A}^{1/2} = \mathbf{A}$$

$$3. (\mathbf{A}^{1/2})^{-1} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i' = \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^{-1/2} \mathbf{P}'$$

$$4. \mathbf{A}^{1/2} \mathbf{A}^{-1/2} = \mathbf{A}^{-1/2} \mathbf{A}^{1/2} = \mathbf{I} \quad \text{e} \quad \mathbf{A}^{-1/2} \mathbf{A}^{-1/2} = \mathbf{A}^{-1}$$

$$\text{em que } \mathbf{A}^{-1/2} = (\mathbf{A}^{1/2})^{-1}$$

### Exemplo 2.9

Obtenha a matriz raiz quadrada e a inversa da matriz utilizada no exemplo (2.8), usando (2.19) e (2.20):

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

com autovalores e autovetores normalizados, apresentados a seguir:

$$\lambda_1 = 5,2361 \quad \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 0,8507 \\ 0,5257 \end{bmatrix} \quad \lambda_2 = 0,7639 \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} -0,5257 \\ 0,8507 \end{bmatrix}$$

As matrizes  $\mathbf{P}$  e  $\Lambda$  foram obtidas pelos autovalores e autovetores, e estão apresentadas a seguir:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0,8507 & -0,5257 \\ 0,5257 & 0,8507 \end{bmatrix} \quad \Lambda = \begin{bmatrix} 5,2361 & 0 \\ 0 & 0,7639 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}' = \begin{bmatrix} 0,8507 & -0,5257 \\ 0,5257 & 0,8507 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1/5,2361 & 0 \\ 0 & 1/0,7639 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0,8507 & 0,5257 \\ -0,5257 & 0,8507 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{1/2} = \mathbf{P}\Lambda^{1/2}\mathbf{P}' = \begin{bmatrix} 0,8507 & -0,5257 \\ 0,5257 & 0,8507 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sqrt{5,2361} & 0 \\ 0 & \sqrt{0,7639} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0,8507 & 0,5257 \\ -0,5257 & 0,8507 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,8975 & 0,6324 \\ 0,6324 & 1,2649 \end{bmatrix}$$

A seguir, um programa SAS é apresentado contendo os principais comandos para a realização das várias operações matriciais e vetoriais descritas nesse capítulo.

```
/* Capitulo 2 de multivariada - principais operações matriciais descritas */
/* por meio do proc iml. Rotinas de inversão, multiplicação, transposição */
options nodate nonumber ps=1000 ls=76;
proc iml;
  /* elementos de algebra vetorial*/
  x1={1,1,1,1};
  x2={1,1,0,0};
  x3={0,0,1,1};
  print x1 x2 x3;
  y=4*x1;
  z=x1+x2;
  print y z;
  yz=y`*z;
  yy=y`*y; /*distancia quadratica*/
  dy=sqrt(yy); /* distancia da origem*/
  zz=z`*z;
  dz=sqrt(zz);
  costeta=yz/(dy*dz);
  print yz yy zz dy dz costeta;
```

```

/* elementos de algebra matricial*/
x=x1||x2||x3;/* concatenando vetores para obter uma matriz*/
xpx=x`*x;
xx=xpx#xpx; /* produto de xpx elemento a elemento por xpx*/
print x xpx xx;
/*calculo da base ortonormal de Gramshimidt - a matriz p contém as colunas ortonormalizadas de X*/
Call Gsort(p, t, lindep, X);
print lindep p t;
/* calculo de autovalores e autovetores */
pu=eigvec(xpx); /* pu matriz de autovetores */
au=eigval(xpx); /* au vetor de autovalores */
print pu; print au;
a={4 2,2 2}; /* matriz A*/
ainv=inv(a); /* inversa de A*/
deta=det(a); /* determinante de A*/
print a ainv deta;
c={4 2 2,2 2 0, 2 0 2};
detc=det(c);
print c detc;
/* fator de Cholesky A=S`S em que S e uma matriz triangular superior */
/* S e a transposta do fator de Cholesky */
Sc=root(c);
/* matriz c e singular, porem o SAS calcula assim mesmo o fator de Cholesky */
/* pode-se observar que a ultima linha, da matriz Sc e nula devido a isso*/
Sa=root(a);
b={4 2 0,2 2 1,0 1 2};
print b;
sb=root(b);
print Sc Sa sb;
/*maximização de pares de formas quadráticas */
/* resolver (D - IG)e=0 */
D={4 2,2 2};
G={7 1,1 4};
print D G;
Sg=root(G); /* transposta do fator de Cholesky de G */
Sginv=inv(Sg); /* inversa da transposta do fator de Cholesky de G */
print Sg Sginv;
I=Sginv`G*Sginv; /* mostrar que é igual a identidade */
print ii;
H=Sginv`D*Sginv; /* operar D, e em seguida extrair auto valores e vetores */
print H; /* D transformada */
zh=eigvec(H); /* zh matriz de autovetores */
auh=eigval(H); /* auh vetor de autovalores */
xh=Sginv*zh; /* matriz de autovetores recuperados */
teste=xh`g*xh;
print teste;/*mostrar que resulta na identidade*/
print xh;
print auh;
/* obtencao de matriz raiz quadrada - exemplificar com a matriz D */
aud=eigval(D); /* autovalores de D*/
lamb=diag(aud); /* diagonalizando aud e resultado em lamb */
print lamb;
lambS=root(lamb); /* achando a raiz quadrada de lamb */
avd=eigvec(D); /* autovetores de D em avd */
Droot=avd*lambS*avd`;

```

```

/* usando a definição para encontrar a matriz raiz quadrada de D */
print Droot;
DD=avd*lamb*avd'; /* checando propriedades */
print DD; /* deve ser igual a D */
quit;

```

## 2.4. Exercícios

2.1. Sejam os vetores  $\underline{x}' = [3, 2, 4]$  e  $\underline{y}' = [-1, 2, 2]$

(a) plote os dois vetores

(b) encontre (i) o comprimento de  $\underline{x}$ , (ii) o ângulo entre  $\underline{x}$  e  $\underline{y}$ , e (iii) a distância entre  $\underline{x}$  e  $\underline{y}$ .

(c) plote os vetores  $\underline{x} - \bar{x} \cdot \underline{1}$  e  $\underline{y} - \bar{y} \cdot \underline{1}$  ( $\bar{x} = 3$  e  $\bar{y} = 1$ ).

2.2. Dada a matriz

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

(a) Ortonormalize as colunas de  $\mathbf{X}$ , usando a construção de Gram-Schmidt.

(b) Determine o vetor (coluna de  $\mathbf{x}$ ) linearmente dependente.

(c) Determine o posto coluna de  $\mathbf{X}$ , a partir da construção de Gram-Schmidt realizada em (a).

2.3. Dadas as matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & 2 \\ 4 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 6 \end{bmatrix}$$

(a) Obtenha a inversa de  $\mathbf{A}$  e de  $\mathbf{B}$ , usando o algoritmo de Gauss-Jordan.

(b) Verifique usando o processo de Gauss-Jordan que  $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ .

2.4. Verifique se a matriz

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0,8507 & -0,5257 \\ 0,5257 & 0,8507 \end{bmatrix}$$

é uma matriz ortogonal.

2.5. Seja

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

- (a) Calcule o determinante de  $\mathbf{A}$ .
- (b) Com base em (a) a matriz  $\mathbf{A}$  pode ser considerada positiva definida? Porque?
- (c) Obtenha o fator de Cholesky, e confirme a resposta dada em (b).
- (d) Determine os autovalores e autovetores de  $\mathbf{A}$ .
- (e) Obtenha a decomposição espectral de  $\mathbf{A}$ .
- (f) Encontre  $\mathbf{A}^{-1}$ .
- (g) Encontre os autovalores e autovetores de  $\mathbf{A}^{-1}$ . Verifique que relação tem como os valores encontrados em (d).

2.6. Considere as matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 4,001 \\ 4,001 & 4,002 \end{bmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 4 & 4,001 \\ 4,001 & 4,002001 \end{bmatrix}$$

As matrizes são idênticas, exceto por pequenas diferenças no elemento,  $a_{22}$  e  $b_{22}$  devida a arredondamentos. Mostre que  $\mathbf{A}^{-1} = -3\mathbf{B}^{-1}$  (pequenas mudanças, talvez devido a arredondamentos, podem causar substanciais diferenças na inversa).

2.7. Verifique se a forma quadrática

$$Q = 2x_1^2 - 2x_1x_2 + 4x_2^2$$

é positiva definida.

Sugestão: Verificar se  $Q = \underline{x}'A\underline{x}$  é positiva, pode ser feita verificando se **A** é pd.

2.8. Dada as matrizes

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

(a) determine os autovalores e autovetores que maximizam a razão

$$\lambda = \frac{\underline{x}'A\underline{x}}{\underline{x}'B\underline{x}} \quad |B| \neq 0$$

Obs. O que é equivalente a resolver o sistema determinantal dado por (2.15)

$$|A - \lambda B| = 0.$$

(b) Determine a matriz raiz quadrada de **A** e de **B**.

2.9. Dada a matriz de covariância amostral ( $\mathbf{S}$ )

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 25 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}$$

(a) Determine  $\mathbf{R}$ , dada  $\mathbf{V}^{1/2}$ , definida por:

$$\mathbf{V}^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{\mathbf{S}_{11}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\mathbf{S}_{22}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\mathbf{S}_{pp}} \end{bmatrix}$$

Sendo  $\mathbf{R} = (\mathbf{V}^{1/2})^{-1} \mathbf{S} (\mathbf{V}^{1/2})^{-1}$

(b) Verifique a relação

$$\mathbf{S} = (\mathbf{V}^{1/2}) \mathbf{R} (\mathbf{V}^{1/2})$$

## 2.5. Referências



- BOCK, R.D. **Multivariate statistical methods in behavioral research.** McGraw-Hill, 1975.
- HOUSEHOLDER, A.S. **Principles of numerical analysis.** McGraw-Hill, New York, 1953.
- HOUSEHOLDER, A.S. **The theory of matrices in numerical analysis.** Blarsdell, Waltham, Mass., 1964.
- JOHNSON, R.A.; WICHERN, D.W. **Applied multivariate statistical analysis.** 4th edition. Prentice Hall, New Jersey, 1998. 816p.
- SEARLE, S.R. **Matrix algebra for the biological sciences.** Wiley, New York, 1966.