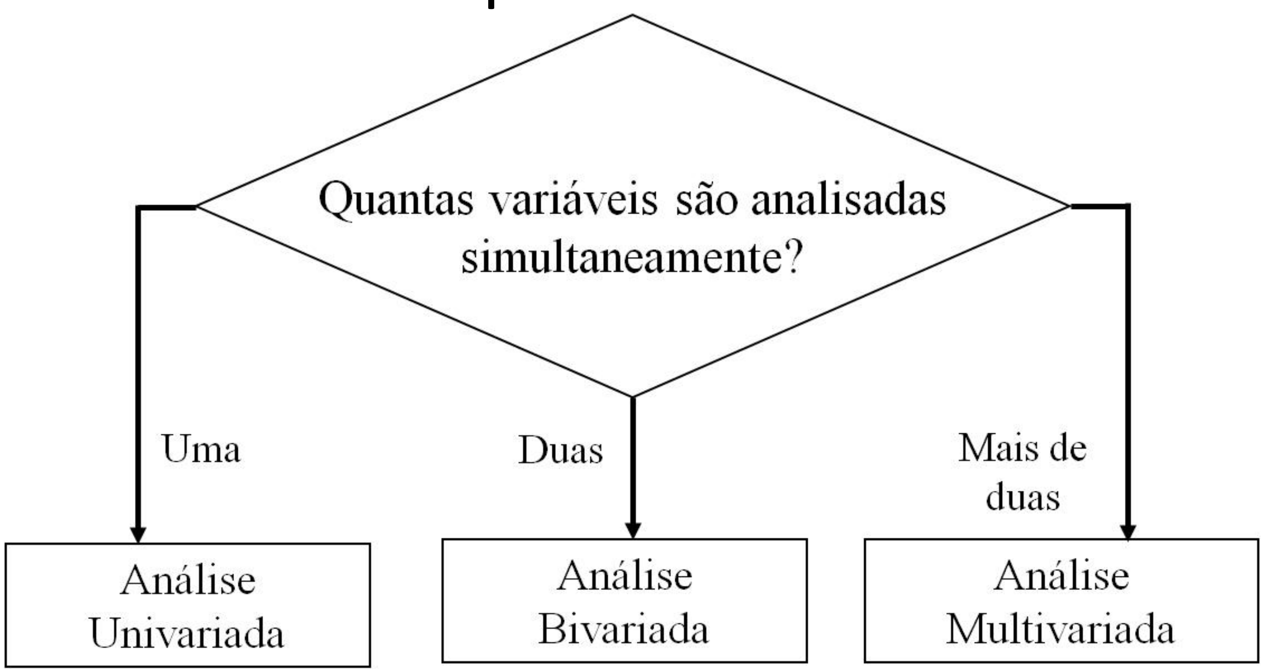
Introdução à Análise Multivariada

Análise multivariada: De um modo geral, refere-se a todos os métodos estatísticos que simultaneamente analisam múltiplas medidas sobre cada indivíduo ou objeto sob investigação. Qualquer análise simultânea de mais de duas variáveis de certo modo pode ser considerada análise multivariada



Utilização de computação

- Possibilita a análise de grande quantidade de dados
- "Pacotes estatísticos" são acessíveis a não-especialistas
- A organização dos dados para acesso deve ser feita de forma apropriada. Neste contexto os dados devem ser organizados na forma matricial:

Observação	variável 1	variável 2	variável 3	...	variável k
Obs$_1$	x_{11}	x_{12}	x_{13}	$\cdots$	x_{1k}
Obs$_2$	x_{21}	x_{22}	x_{23}	$\cdots$	x_{2k}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
Obs$_n$	x_{n1}	x_{n2}	x_{n3}	$\cdots$	x_{nk}

x_{ij} é a medida da **variável j** sobre o item ou **indivíduo i**

A álgebra matricial é fundamental para desenvolver métodos de estatística multivariada.

As observações x_{ij} podem ser tratadas como uma matriz $\mathbf{X}$:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{j1} & x_{j2} & \cdots & x_{jk} & \cdots & x_{jp} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}.$$

Matrizes e vetores: conceitos básicos

- **Vetor**: arranjo de números ou variáveis dispostos em uma coluna (ou em linha). Matriz de uma coluna (ou uma linha):

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \qquad \text{ou} \qquad \mathbf{x}' = [x_1, x_2, \ldots, x_n]$$

Onde $\mathbf{x}'$ denota transposto (coluna vira linha)

Representaremos vetores por letras minúsculas em negrito (Ex: $\mathbf{x}$, $\mathbf{x}'$,)

Matrizes e vetores: conceitos básicos

- **Matriz**: arranjo retangular de números ou variáveis dispostos em linhas e colunas

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

n: número de linhas

p: número de colunas

Representaremos matrizes por letras maiúsculas em negrito e seus elementos por letras minúsculas com dois índices, onde:

- o primeiro índice representa a linha e

- o segundo índice representa a coluna.

Matrizes e vetores: conceitos básicos

Exemplos de matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -7 & 2 \\ 0 & 1 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} x & 3 & 0 \\ 4 & -2 & 1/x \end{bmatrix}, \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{E} = [e_1]$$

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & .7 & -.3 \\ .7 & 2 & 1 \\ -.3 & 1 & 8 \end{bmatrix}$$

Dimensão de uma matriz: é o par "i linhas x j colunas"

Dimensão da matriz $\mathbf{A}$: 3 x 2, $\mathbf{B}$: 2 x 3, $\mathbf{I}$ e $\mathbf{\Sigma}$: 3 x 3, $\mathbf{E}$: 1 x 1

Matriz quadrada: número de linhas = número de colunas

$\mathbf{I}$ e $\mathbf{\Sigma}$ são matrizes quadradas de dimensão 3x3

Matriz identidade ($\mathbf{I}$): Elementos da diagonal principal com valores 1 e zero nos outros elementos. A matriz $\mathbf{I}$ acima é uma matriz identidade 3x3.

Matrizes e vetores: conceitos básicos

Matriz diagonal: uma matriz quadrada é uma matriz diagonal se os elementos fora da diagonal principal são nulos.

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

É uma matriz diagonal

Matriz transposta: A transposta $\mathbf{A'}$ de uma matriz $\mathbf{A}$ é obtida mudando-se as linhas para colunas

$$\underset{(2\times 3)}{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{bmatrix} \qquad \underset{(3\times 2)}{\mathbf{A}'} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ -1 & 5 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Matrizes e vetores: conceitos básicos

Multiplicação de matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -2 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}, \quad \text{and} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\underset{(2\times3)(3\times1)}{\mathbf{A}\ \mathbf{B}} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3(-2) + (-1)(7) + 2(9) \\ 1(-2) + 5(7) + 4(9) \end{bmatrix} = \underset{(2\times1)}{\begin{bmatrix} 5 \\ 69 \end{bmatrix}}$$

$$\underset{(2\times2)(2\times3)}{\mathbf{C}\ \mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 2(3) + 0(1) & 2(-1) + 0(5) & 2(2) + 0(4) \\ 1(3) - 1(1) & 1(-1) - 1(5) & 1(2) - 1(4) \end{bmatrix} = \underset{(2\times3)}{\begin{bmatrix} 6 & -2 & 4 \\ 2 & -6 & -2 \end{bmatrix}}$$

Em geral, multiplicação de matriz não é comutativa. Ou seja, em geral, $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$.

Matrizes e vetores: conceitos básicos

Matriz simétrica: uma matriz quadrada é simétrica se $\mathbf{A} = \mathbf{A}'$ ou $a_{ij} = a_{ji}$ para todo i e j

Por exemplo, a matriz $\begin{bmatrix} 3 & 5 \\ 5 & -2 \end{bmatrix}$ é simétrica

enquanto que a matriz $\begin{bmatrix} 3 & 6 \\ 4 & -2 \end{bmatrix}$ não é simétrica

O determinante $|\mathbf{A}|$ (ou det) é um número associado a uma matriz quadrada $\mathbf{A}$.

Lembrando para matriz 2 x 2:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

Traço de uma matriz (Tr): é a soma dos elementos da diagonal principal

$$Tr\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 1 & -5 \end{bmatrix} = 3 + (-5) = -2$$

Matrizes e vetores: conceitos básicos

Matriz inversa: a matriz inversa de uma matriz $\mathbf{A}$ (se existir) é a matriz $\mathbf{A}^{-1}$ tal que $\mathbf{A}\,\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\,\mathbf{A} = \mathbf{1}$

Exemplo:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} -.2 & .4 \\ .8 & -.6 \end{bmatrix}$$

Pois:

$$\begin{bmatrix} -.2 & .4 \\ .8 & -.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (-.2)3 + (.4)4 & (-.2)2 + (.4)1 \\ (.8)3 + (-.6)4 & (.8)2 + (-.6)1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Determinação da Matriz inversa: pela matriz Adjunta

$$\mathbf{A}^{-1} = (1/\det(\mathbf{A}))\ \mathrm{adj}(\mathbf{A})$$

Matriz adjunta: matriz dos cofatores transposta

Exemplo:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \qquad \mathrm{adj}(\mathbf{A}) = \begin{bmatrix} +\begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} b & c \\ h & i \end{vmatrix} & +\begin{vmatrix} b & c \\ e & f \end{vmatrix} \\ -\begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} & +\begin{vmatrix} a & c \\ g & i \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a & c \\ d & f \end{vmatrix} \\ +\begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a & b \\ g & h \end{vmatrix} & +\begin{vmatrix} a & b \\ d & e \end{vmatrix} \end{bmatrix}$$

Determinação da Matriz inversa: Eliminação de Gauss-Jordan

Opere na matriz $[\mathbf{A}\ \mathbf{I}]$

$$[\mathrm{A}\quad \mathrm{I}] \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Obtenha uma matriz na forma:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & b_{21} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b_{n1} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix}.$$

A matriz $\mathrm{B} \equiv \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix}$ é a inversa da matriz $\mathbf{A}$

Condição para a existência da inversa de uma matriz: A inversa de uma matriz existe se as k colunas de uma matriz são linearmente independentes. Exemplo:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 1 \end{bmatrix} \qquad c_1 \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} + c_2 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

A solução é $c_1 = c_2 = 0$ e portanto as colunas da matriz $\mathbf{A}$ são linearmente independentes. Assim, existe a inversa de $\mathbf{A}$.

Matriz ortogonal: Uma matriz quadrada é ortogonal se a transposta é igual a inversa, ou seja:

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

Matrizes e vetores: conceitos básicos

Inversa de uma matriz diagonal

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{55} \end{bmatrix}$$

Se todos $a_{ii} \neq 0$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{22}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_{33}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a_{44}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{a_{55}} \end{bmatrix}$$