CC0293 - Análise Multivariada

Notas de aula sobre formas quadráticas

Prof. Gualberto Agamez Montalvo

1 Formas quadráticas

1.1 Conceitos básicos e propriedades

Definição 1.1. A forma quadrática associada a uma matriz $\mathbf{A}_n$ é dada por

$$Q(\mathbf{x}_n) = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{A}_n \mathbf{x}_n = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j$$

em que $\mathbf{x}_n \neq \mathbf{0}$ é um vetor de tamanho n definido em $\mathbb{R}^n$ e a matriz $\mathbf{A}_n$ é dada por

$$\mathbf{A}_n = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Exemplo 1.1. A expressão geral de uma forma quadrática associado ao vetor $\mathbf{x}_3^\top = (x_1, x_2, x_3)^\top$ é dada por

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}_3) = {} & a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + \\ & + a_{21}x_2x_1 + a_{22}x_2^2 + a_{23}x_2x_3 + \\ & + a_{31}x_1x_3 + a_{32}x_3x_2 + a_{33}x_3^2. \end{aligned}$$

Exemplo 1.2. A forma quadrática $Q(\mathbf{x}_2) = 5x_1^2 - 10x_1x_2 + 3x_2^2$ pode ser representada pela matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ -5 & 3 \end{bmatrix},$$

dado que

$$
\begin{aligned}
Q\left(\mathbf{x}_2\right) &= a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + a_{21}x_2x_1 + a_{22}x_2^2 \\
&= 5x_1^2 - 5x_1x_2 - 5x_2x_1 + 3x_2^2 \\
&= 5x_1^2 - 10x_1x_2 + 3x_2^2.
\end{aligned}
$$

Exemplo 1.3. A forma quadrática $Q\left(\mathbf{x}_2\right) = 5x_1^2 - 10x_1x_2 + 3x_2^2$ também pode ser reescrita como:

- $Q\left(\mathbf{x}_2\right) = 5x_1^2 - x_1x_2 - 9x_1x_2 + 3x_2^2$;
- $Q\left(\mathbf{x}_2\right) = 5x_1^2 - 2x_1x_2 - 8x_1x_2 + 3x_2^2$;
- $Q\left(\mathbf{x}_2\right) = 5x_1^2 - 4x_1x_2 - 6x_1x_2 + 3x_2^2$.

Portanto, a forma quadrática $Q\left(\mathbf{x}_2\right) = 5x_1^2 - 10x_1x_2 + 3x_2^2$ também pode ser representada pelas matrizes

$$
\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 5 & -1 \\ -9 & 3 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 5 & -2 \\ -8 & 3 \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 5 & -4 \\ -6 & 3 \end{bmatrix}.
$$

Observação: No Exemplo 1.3 podemos observar que uma forma quadrática pode ser representada por diversas matrizes, entretanto, só existe uma única representação composta por uma matriz simétrica (neste caso quando $a_{12} = a_{21}$).

Observação: É importante ressaltar que qualquer forma quadrática pode ser representada por uma matriz simétrica. Considere o caso geral em que $Q\left(\mathbf{x}_n\right) = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{A}_n \mathbf{x}_n$ e $\mathbf{B}_n$ é uma matriz assimétrica dada por

$$
\mathbf{B}_n = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix}.
$$

Então, vamos definir a matriz os $\mathbf{A}_n$ conformada pelos elementos a_{ij} tais que

$$a_{ij} = \begin{cases} a_{ii} = b_{ii}, & \text{para} i = j; \\ a_{ij} = a_{ji} = \frac{b_{ij}+b_{ji}}{2} & \text{para} i \neq j. \end{cases} \tag{1}$$

Resultando assim numa matriz simétrica, dado que

$$\mathbf{A}_n = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Exemplo 1.4. Vamos considerar as matrizes $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ e $\mathbf{D}$, apresentadas no Exemplo 1.3. Então, usando o resultado apresentado na Equação (1) temos que

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ -5 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & \dfrac{-1-9}{2} \\ \dfrac{-1-9}{2} & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & \dfrac{b_{12}+b_{21}}{2} \\ \dfrac{b_{12}+b_{21}}{2} & b_{22} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ -5 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & \dfrac{-2-8}{2} \\ \dfrac{-2-8}{2} & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & \dfrac{c_{12}+c_{21}}{2} \\ \dfrac{c_{12}+c_{21}}{2} & c_{22} \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ -5 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & \dfrac{-4-6}{2} \\ \dfrac{-4-6}{2} & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & \dfrac{d_{12}+d_{21}}{2} \\ \dfrac{d_{12}+d_{21}}{2} & d_{22} \end{bmatrix}$$

Observação: A Equação (1) pode ser representada matricialmente como:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\left[\mathbf{B} + \mathbf{B}^\top\right]. \tag{2}$$

Note que

$$a_{ij} = \begin{cases} a_{ii} = \frac{1}{2}\left[b_{ii} + b_{ii}^{\top}\right] = \frac{1}{2}\left[b_{ii} + b_{ii}\right] = b_{ii}, & \text{para} \quad i = j; \\ a_{ij} = \frac{1}{2}\left[b_{ij} + b_{ji}^{\top}\right] = \frac{1}{2}\left[b_{ij} + b_{ji}\right] = \frac{1}{2}\left[b_{ji} + b_{ij}\right] = a_{ji} & \text{para} \quad i \neq j. \end{cases}$$

Exercício 1.1. Usar o resultado apresentado na Equação (2) para obter a matriz simétrica associada as matrizes $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ e $\mathbf{D}$, apresentadas no Exemplo 1.3.

Observação: Quando a matriz que representa uma forma quadrática é simétrica, temos que

$$\begin{aligned} Q\left(\mathbf{x}_n\right) &= \mathbf{x}_n^{\top} \mathbf{A}_n \mathbf{x}_n \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j \\ &= \sum_{i=1}^{n} a_{ii} x_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1 \\ j>i}}^{n} a_{ij} x_i x_j. \end{aligned}$$

Exemplo 1.5. Retomando o Exemplo 1.1, temos que a forma quadrática

$$\begin{aligned} Q\left(\mathbf{x}_3\right) = a_{11} x_1^2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{13} x_1 x_3 + \\ + a_{21} x_2 x_1 + a_{22} x_2^2 + a_{23} x_2 x_3 + \\ + a_{31} x_1 x_3 + a_{32} x_3 x_2 + a_{33} x_3^2, \end{aligned}$$

pode ser reescrita como

$$Q\left(\mathbf{x}_3\right) = a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + a_{33} x_3^2 + 2\left(a_{12} x_1 x_2 + a_{13} x_1 x_3 + a_{23} x_2 x_3\right),$$

quando a matriz $\mathbf{A}_3$ é simétrica.

1.2 Classificação das formas quadráticas

Definição 1.2. Considere a forma quadrática $Q\left(\mathbf{x}_n\right) = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{A}_n \mathbf{x}_n$. Então, $Q\left(\mathbf{x}_n\right)$ é dita

- definida positiva se $Q\left(\mathbf{x}_n\right) > 0$ para qualquer vetor de tamanho n (exceto $\mathbf{x}_n = 0$);
- semi-definida positiva se $Q\left(\mathbf{x}_n\right) \geq 0$ para qualquer vetor de tamanho n (exceto $\mathbf{x}_n = 0$);
- definida negativa se $Q\left(\mathbf{x}_n\right) < 0$ para qualquer vetor de tamanho n (exceto $\mathbf{x}_n = 0$);
- semi-definida negativa se $Q\left(\mathbf{x}_n\right) \leq 0$ para qualquer vetor de tamanho n (exceto $\mathbf{x}_n = 0$);
- indefinida se $Q\left(\mathbf{x}_n\right) > 0$ para algum $\mathbf{x}_n$ e $Q\left(\mathbf{x}_n\right) < 0$ para algum outro $\mathbf{x}_n$.

Exemplo 1.6. Vamos considerar alguns casos particulares com $n = 2$. Então, A forma quadrática:

- $Q(\mathbf{x}_2) = x_1^2 + x_2^2$ é definida positiva, dado que $Q(\mathbf{x}_2) > 0$ para todo $\mathbf{x}_2 \neq 0$;
- $Q(\mathbf{x}_2) = (x_1 + x_2)^2$ é semi-definida positiva, dado que $Q(\mathbf{x}_2) \geq 0$ para todo $\mathbf{x}_2 \neq 0$;
- $Q(\mathbf{x}_2) = -x_1^2 - x_2^2$ é definida negativa, dado que $Q(\mathbf{x}_2) < 0$ para todo $\mathbf{x}_2 \neq 0$;
- $Q(\mathbf{x}_2) = -(x_1 + x_2)^2$ é semi-definida positiva, dado que $Q(\mathbf{x}_2) \leq 0$ para todo $\mathbf{x}_2 \neq 0$;
- $Q(\mathbf{x}_2) = x_1^2 - x_2^2$ é indefinida, dado que $Q(\mathbf{x}_2) = 3 > 0$ para $\mathbf{x}_2 = (2, 1)^\top$, e $Q(\mathbf{x}_2) = -3 < 0$ para $\mathbf{x}_2 = (1, 2)^\top$.

Exemplo 1.7. Considere a matriz

$$\mathbf{A} = \left[\begin{array}{cc} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{array}\right].$$

Então, a forma quadrática associada à matriz $\mathbf{A}$ é dada por

$$\begin{aligned}
Q(\mathbf{x}_2) &= \mathbf{x}_2^\top \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2 \\
&= \left[\begin{array}{cc} x_1 & x_2 \end{array}\right] \left[\begin{array}{cc} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \end{array}\right] \\
&= 2x_1^2 + 3x_2^2
\end{aligned}$$

Neste caso, $Q(\mathbf{x}_2) > 0$ para todo $\mathbf{x}_2 \neq (0,0)$. Portanto, a forma quadrática é definida positiva.

Exemplo 1.8. Seja

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

Então:

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}_2) &= \mathbf{x}_2^\top \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2 \\ &= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\ &= 4x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2 \\ &= (x_1 + x_2)^2 + 3x_1^2 + x_2^2. \end{aligned}$$

Portanto, $\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ para todo $\mathbf{x} \neq 0$. Assim $\mathbf{A}$ é positiva definida.

Exemplo 1.9. Considere a matriz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}.$$

Então, a forma quadrática associada à matriz $\mathbf{A}$ é dada por

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}_2) &= \mathbf{x}_2^\top \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2 \\ &= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\ &= 5x_1^2 - 2x_2^2 \end{aligned}$$

Neste caso, $Q(\mathbf{x}_2) = 3 > 0$ para $\mathbf{x}_2 = (1,1)$, e $Q(\mathbf{x}_2) = -3 < 0$ para $\mathbf{x}_2 = (1,2)$. Portanto, a forma quadrática é indefinida ou indeterminada.

Exemplo 1.10. Seja

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Então, a forma quadrática associada à matriz $\mathbf{A}$ é dada por

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}_3) &= \mathbf{x}_3^\top \mathbf{A}_3 \mathbf{x}_3 \\ &= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ &= 2x_1^2 + 5x_2^2 + 2x_3^2 + 2\left(2x_1x_2 + x_1x_3 + x_2x_3\right) \\ &= 2x_1^2 + 5x_2^2 + 2x_3^2 + 4x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3. \end{aligned}$$

Então, temos que

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}_3) &= \left(x_1^2 + 4x_1x_2 + 4x_2^2\right) + \left(x_1^2 + 2x_1x_3 + x_3^2\right) + \left(x_2^2 + 2x_2x_3 + x_3^2\right) \\ &= \left(x_1 + 2x_2\right)^2 + \left(x_1 + x_3\right)^2 + \left(x_2 + x_3\right)^2. \end{aligned}$$

Portanto, $Q(\mathbf{x}_3) > 0$ para todo $\mathbf{x}_3 \neq (0, 0)$. Consequentemente, a forma quadrática é definida positiva.

1.3 Relação das formas quadráticas e os valores próprios

Resultado 1.1. Considere a forma quadrática $Q\left(\mathbf{x}_n\right) = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{A}_n \mathbf{x}_n$, em que $\mathbf{A}_n$ é uma matriz simétrica. Então, todos os autovalores $(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ de $\mathbf{A}_n$ são

- positivos, se $\mathbf{A}_n$ é definida positiva;

- não negativos, se $\mathbf{A}_n$ é semi-definida positiva;
- negativos, se $\mathbf{A}_n$ é definida negativa;
- não positivos, se $\mathbf{A}_n$ é semi-definida negativa.

Observação: se alguns valores próprios são positivos e outros são negativos, $\mathbf{A}_n$ é indefinida.

Observação: essas classificações e relações valem para matrizes *simétricas* (ou hermitianas, no caso de matrizes complexas), pois, para essas matrizes, os valores próprios são sempre reais, o que torna essas classificações aplicáveis de forma direta. Para matrizes *não simétricas*, a classificação é mais complexa e não se baseia apenas nos valores próprios, mas em outros critérios, como a análise da matriz de Jordan ou do seu espectro.

Exemplo 1.11. Vamos considerar as matrizes dos Exemplos 1.8 e 1.10:

- Exemplo 1.8: os valores próprios da matriz

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

são $\lambda_1 \approx 4,4142$ e $\lambda_2 \approx 1,5858$. Como ambos são maior de zero, a forma quadrática associada é definida positiva.

```r
> A <- matrix(c(4, 1, 1, 2),ncol=2, byrow = TRUE)
> eigen(A)$values
[1] 4.414214 1.585786
```

- Exemplo 1.10: os valores próprios da matriz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix},$$

são aproximadamente $\lambda_1 \approx 6,4115$, $\lambda_2 \approx 1,8152$ e $\lambda_3 \approx 0,7733$. Como todos são maior de zero, a forma quadrática associada é definida positiva.

```
> A <- matrix(c(2, 2, 1, 2, 5, 1, 1, 1, 2),ncol=3, byrow = TRUE)
> eigen(A)$values
[1] 6.4114741 1.8152075 0.7733184
```

Observação: No Exemplo 1.7 os autovalores são $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 3$, confirmando que a forma quadrática é definida positiva. Enquanto, no Exemplo 1.9 os autovalores são $\lambda_1 = 5$ e $\lambda_2 = -2$, portanto a forma quadrática associada é indeterminada.

Exemplo 1.12. Os valores próprios das matrizes dos Exemplos 1.2 e 1.3 são:

$$\lambda_1 \approx 9,0990 \quad \text{e} \quad \lambda_2 \approx -1,0990 \qquad \text{para} \qquad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & -5 \\ -5 & 3 \end{bmatrix},$$

$$\lambda_1 \approx 7,1623 \quad \text{e} \quad \lambda_2 \approx 0,8377 \qquad \text{para} \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 5 & -1 \\ -9 & 3 \end{bmatrix},$$

$$\lambda_1 \approx 8,1231 \quad \text{e} \quad \lambda_2 \approx -0,1231 \qquad \text{para} \qquad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 5 & -2 \\ -8 & 3 \end{bmatrix},$$

$$\lambda_1 = 9 \quad \text{e} \quad \lambda_2 = -1 \qquad \text{para} \qquad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 5 & -4 \\ -6 & 3 \end{bmatrix}.$$

Este exemplo é muito importante, dado que no caso da matriz $\mathbf{B}$ os dois autovalores são maiores de zero, entretanto, não podemos fazer conclusões com matrizes que não sejam simétricas. Portanto, só podemos concluir com o resultado da matriz $\mathbf{A}$, consequentemente, temos que a forma quadrática associada é indeterminada.

1.4 Relação das formas quadráticas e determinantes

Definição 1.3. Uma *submatriz principal* de ordem k de uma matriz $\mathbf{A}_n$ é a submatriz formada pelos primeiros k elementos das primeiras k linhas e k colunas de $\mathbf{A}_n$.

Exemplo 1.13. Considere a matriz $\mathbf{A}_3$ dada por:

$$\mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix}$$

As submatrizes principais de ordem 1, 2 e 3 de $\mathbf{A}_3$ são:

- A submatriz principal de ordem 1: é simplesmente o elemento a_{11}, isto é,

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} a_{11} \end{bmatrix}$$

- A submatriz principal de ordem 2: é formada pelos primeiros dois elementos das primeiras duas linhas e colunas, isto é,

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix}$$

- A submatriz principal de ordem 3: é a própria matriz $\mathbf{A}_3$.

Resultado 1.2. Considere a forma quadrática $Q(\mathbf{x}_n) = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{A}_n \mathbf{x}_n$, em que $\mathbf{A}_n$ é uma matriz simétrica. Então, a forma quadrática é definida positiva se o determinante de cada submatriz principal de ordem k da matriz $\mathbf{A}_n$ é *estritamente positivo* para $k = 1, 2, \ldots, n$. Isto é, se

$$\mathbf{A}_n = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix},$$

a forma quadrática $Q(\mathbf{x}_n)$ (ou simplesmente a matriz $\mathbf{A}_n$) é definida positiva, se

$$\det\left(\mathbf{A}_k\right) > 0 \quad \text{para todo} \quad k = 1, 2, \ldots, n,$$

em que $\mathbf{A}_k$ é a *submatriz principal* de ordem k.

Exemplo 1.14. Considere

$$\mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Neste caso temos que:

1. Para a submatriz principal de ordem 1.

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} 4 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \det(\mathbf{A}_1) = 4 > 0$$

2. Para a submatriz principal de ordem 2 temos que

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \det(\mathbf{A}_2) = (4)(3) - (1)(1) = 12 - 1 = 11 > 0$$

3. Para a submatriz principal de ordem 3 temos que

$$\mathbf{A}_3 = \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \det(\mathbf{A}_3) = 10 > 0$$

Portanto, como todos os determinantes das submatrizes principais são positivos, a matriz $\mathbf{A}_3$ é definida positiva.

Referências

[1] Harville, David A. *Matrix Algebra From a Statistician's Perspective*, Springer Science & Business Media, 2008.

[2] Ortega, James M. *Matrix Theory: A Second Course*, University Series in Mathematics, 1987. ISBN 10: 0306424339 ISBN 13: 9780306424335. Publisher: Springer.

[3] Searle, Shayle R. *Matrix Algebra Useful for Statistics*, New York: Wiley, 1982.

[4] Searle, Shayle R. *Matrix Algebra Useful for Statistics*, Second edition. New York: Wiley, 2017.