Álgebra Matricial

Prof. Wagner Hugo Bonat

Vetores e escalares

Vetores e escalares

- Um vetor é uma lista de n números escritos em linha ou coluna.
- Notação

$$\mathrm{a} = \begin{pmatrix} a_1 & \dots & a_n \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \mathrm{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

- Vetor **linha** e vetor **coluna**.
- Um elemento do vetor é chamado de a_i, sendo i a sua posição.

- O **tamanho de um vetor** é o seu número de elementos.
- O **módulo de um vetor** é o seu comprimento

$$|\mathrm{a}| = \sqrt{a_1^2 + \dots + a_n^2}.$$

- Vetor unitário é aquele que tem tamanho 1. Vetor padronizado

$$\hat{\mathrm{a}} = \frac{\mathrm{a}}{|\mathrm{a}|}.$$

- Dois vetores são iguais se tem o mesmo tamanho e os seus elementos em posições equivalentes são iguais.

Operações com vetores

Operações com vetores

1. Soma $\mathrm{a} + \mathrm{b} = (a_i + b_i) = (a_1 + b_1, \ldots, a_n + b_n)$.
2. Subtração $\mathrm{a} - \mathrm{b} = (a_i - b_i) = (a_1 - b_1, \ldots, a_n - b_n)$.
3. Multiplicação por escalar $\alpha\mathrm{a} = (\alpha a_1, \ldots, \alpha a_n)$.
4. Transposta de um vetor:

$$\mathrm{a} = \begin{pmatrix} a_1 & \ldots & a_n \end{pmatrix} \qquad \mathrm{a}^\top = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

5. Produto interno ou escalar entre dois vetores resulta em um escalar

$$\mathrm{a} \cdot \mathrm{b} = (a_1 b_1 + a_2 b_2 + \ldots + a_n b_n).$$

- **Condições:** os vetores devem ser do mesmo tipo e tamanho.

Vetores ortogonais

- Dois vetores são **ortogonais** entre si se o ângulo θ entre eles é de 90°.
- Implicações: $\cos(\theta) = 0$ e $\mathrm{a}^\top \mathrm{b} = 0$.
- O co-seno do ângulo θ entre os vetores é dado por:

$$\cos(\theta) = \frac{\mathrm{a}^\top \mathrm{b}}{\sqrt{\mathrm{a}^\top \mathrm{a}}\sqrt{\mathrm{b}^\top \mathrm{b}}}.$$

Operações com vetores em R

- Declarando vetores

```
a <- c(4,5,6)
b <- c(1,2,3)
```

- Sendo a e b compatíveis

```
#### Soma
a + b
```

```
## [1] 5 7 9
```

```
#### Substração
a - b
```

```
## [1] 3 3 3
```

- Multiplicação por escalar

```
alpha = 10
alpha*a
```

```
## [1] 40 50 60
```

- Produto de Hadamard

```
a*b
```

```
## [1]  4 10 18
```

- Produto vetorial

```
a%*%b
```

```
##      [,1]
## [1,]   32
```

- Co-seno do ângulo entre dois vetores

```
cos <- t(a)%*%b/(sqrt(t(a)%*%a)*sqrt(t(b)%*%b))
```

- Lei da reciclagem

```
a <- c(4,5,6,5,6,7)
b <- c(1,2,3)
a + b
```

```
## [1]  5  7  9  6  8 10
```

Matrizes

Matriz

- Uma **matriz** é um arranjo retangular ou quadrado de números ou variáveis.
- Uma matriz $(n \times m)$ tem n linhas e m colunas:

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & \dots & a_{nm} \end{pmatrix}.$$

- O primeiro subscrito representa **linha** e o segundo representa **coluna**.
- A **dimensão** de uma matriz é o seu número de linhas e colunas.
- Duas matrizes são iguais se tem a mesma dimensão e se os elementos das correspondentes posições são iguais.

Matriz transposta

- A operação de transposição rearranja uma matriz de forma que suas linhas são transformadas em colunas e vice-versa.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix}^\top = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6 \end{pmatrix}.$$

- Note que $(A^\top)^\top = A$.

- Computacionalmente
- Declarando matrizes

```
a <- c(1,2,3,4,5,6)
A <- matrix(a, nrow = 3, ncol = 2)
A
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]    1    4
## [2,]    2    5
## [3,]    3    6
```

- O *default* preenche por colunas.
- Transposta de uma matriz

```
t(A)
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    1    2    3
## [2,]    4    5    6
```

Operações com matrizes

Operações com matrizes

- Multiplicação matriz por escalar.

$$\alpha \mathrm{A} = \begin{pmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} & \dots & \alpha a_{1m} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} & \ddots & \alpha a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha a_{n1} & \dots & \dots & \alpha a_{nm} \end{pmatrix}.$$

- Computacionalmente

```
A <- matrix(c(1,2,3,4,5,6),
            nrow = 3, ncol = 2)
alpha <- 10
alpha*A
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]   10   40
## [2,]   20   50
## [3,]   30   60
```

Operações com matrizes

- Duas matrizes podem ser somadas ou subtraídas somente se tiverem o mesmo tamanho.

1. Soma $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$.
2. Subtração $c_{ij} = a_{ij} - b_{ij}$.

- Exemplo

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 10 & 20 \\ 30 & 40 \\ 50 & 60 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 & 22 \\ 33 & 44 \\ 55 & 66 \end{pmatrix}.$$

- Soma de duas matrizes

```
A <- matrix(c(1,2,3,4,5,6),
            nrow = 3, ncol = 2)
B <- matrix(c(10,20,30,40,50,60),
            nrow = 3, ncol = 2)
C = A + B
C
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]   11   44
## [2,]   22   55
## [3,]   33   66
```

Operações com matrizes

- Condição para multiplicar matrizes

$$\underset{m\times n}{\mathrm{C}} = \underset{m\times qq\times n}{\mathrm{A}\ \mathrm{B}}.$$

- Cada elemento $c_{ij} = \sum_{k=1}^{q} a_{ik}b_{kj}$.

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 8 & 3 \\ 6 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 9 & 1 & -3 \\ -5 & 2 & 4 & 6 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} ((2\cdot 4)+(-1\cdot -5)) & ((2\cdot 9)+(-1\cdot 2)) & ((2\cdot 1)+(-1\cdot 4)) & ((2\cdot -3)+(-1\cdot 6)) \\ ((8\cdot 4)+(3\cdot -5)) & ((8\cdot 9)+(3\cdot 2)) & ((8\cdot 1)+(3\cdot 4)) & ((8\cdot -3)+(3\cdot 6)) \\ ((6\cdot 4)+(7\cdot -5)) & ((6\cdot 9)+(7\cdot 2)) & ((6\cdot 1)+(7\cdot 4)) & ((6\cdot -3)+(7\cdot 6)) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 13 & 16 & -2 & -12 \\ 17 & 78 & 20 & -6 \\ -11 & 68 & 34 & 24 \end{pmatrix}.$$

Operações com matrizes

- Computacionalmente.
- Matrizes compatíveis

```
A <- matrix(c(2,8,6,-1,3,7),
            nrow = 3, ncol = 2)
B <- matrix(c(4,-5,9,2,1,4,-3,6),
            nrow = 2, ncol = 4)
C = A%*%B
C
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]   13   16   -2  -12
## [2,]   17   78   20   -6
## [3,]  -11   68   34   24
```

- Matrizes não compatíveis

```
B %*% A
```

```
## Error in B %*% A: argumentos não compatíveis
```

Produto de Hadamard

- Produto simples ou de Hadamard

$$\mathrm{A} \odot \mathrm{B} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{12}b_{12} & \cdots & a_{1m}b_{1m} \\ a_{21}b_{21} & a_{22}b_{22} & \cdots & a_{2m}b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}b_{n1} & a_{n2}b_{n2} & \cdots & a_{nm}b_{nm} \end{pmatrix}$$

- Computacionalmente

```
A <- matrix(c(1,2,3,4),
            nrow = 2, ncol = 2)
B <- matrix(c(10,20,30,40),
            nrow = 2, ncol = 2)
A*B
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]   10   90
## [2,]   40  160
```

Propriedades envolvendo operações com matrizes

- Sendo A, B, C e D compatíveis temos,
  1. $A + B = B + A$.
  2. $(A + B) + C = A + (B + C)$.
  3. $\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B$.
  4. $(\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A$.
  5. $\alpha(AB) = (\alpha A)B = A(\alpha B)$.
  6. $A(B \pm C) = AB \pm AC$.
  7. $(A \pm B)C = AC \pm BC$.
  8. $(A-B)(C-D) = AC-BC-AD+BD$.

- Propriedades envolvendo transposta e multiplicação
  1. Se A é $n \times m$ e B é $m \times n$, então
  $$(AB)^\top = B^\top A^\top.$$
  2. Se A, B e C são compatíveis
  $$(ABC)^\top = C^\top B^\top A^\top.$$

Matrizes de formas especiais

Matrizes de formas especiais

- Matriz quadrada

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}.$$

- a_{ii} são os elementos da **diagonal.**
- a_{ij} para $i \neq j \rightarrow$ **fora da diagonal.**
- a_{ij} para $j > i \rightarrow$ **acima da diagonal.**
- a_{ij} para $i > j \rightarrow$ **abaixo da diagonal.**

- Matriz diagonal

$$\mathrm{D} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{pmatrix}.$$

- Matriz identidade

$$\mathrm{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matrizes de formas especiais

- Triangular superior

$$\mathrm{U} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{pmatrix}.$$

- Triangular inferior

$$\mathrm{L} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}.$$

- Matriz nula

$$0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- Matriz quadrada simétrica

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0.8 & 0.6 & 0.4 \\ 0.8 & 1 & 0.2 & 0.4 \\ 0.6 & 0.2 & 1 & 0.1 \\ 0.4 & 0.4 & 0.1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Combinações lineares

- Um conjunto de vetores $\mathrm{a}_1, \mathrm{a}_2, \ldots, \mathrm{a}_n$ é dito ser **linearmente dependente** se puderem ser encontrados escalares $c_1, c_2, \ldots, c_n$ e estes escalares não sejam todos iguais a 0 de tal forma que

$$c_1\mathrm{a}_1 + c_2\mathrm{a}_2 + \ldots + c_n\mathrm{a}_n = 0.$$

- Caso contrário é dito ser **linearmente independente**.
- Notação matricial

$$\mathrm{Ac} = 0.$$

- As colunas de A são linearmente independentes se $\mathrm{Ac} = 0$ implicar que $\mathrm{c} = 0$.

Rank e inversa de uma matriz

Rank ou posto de uma matriz

- O *rank* ou **posto** de qualquer matriz quadrada ou retangular A é definido como

  $$\text{rank}(\text{A}) = \text{número de colunas ou linhas linearmente independentes em A.}$$

- Sendo A uma matriz retangular $n \times m$ o maior *rank* possível para A é o $\min(n,m)$.
- O rank da matrix nula é 0.
- Se o *rank* da matriz é o $\min(n,m)$ dizemos que a matriz tem *rank* completo.

Matriz não singular e matriz inversa

- Uma matriz quadrada de **posto completo** é chamada de **não singular**.
- Sendo A quadrada de posto completo a **matriz inversa** de A é única tal que

$$AA^{-1} = I.$$

- Não quadrada (posto incompleto) $\rightarrow$ não terá inversa e é dita ser **singular**.
- Note que $(A^{-1})^{-1} = A$.

Matriz inversa

- Computacionalmente

```
A <- matrix(c(4, 2, 7, 6), 2, 2)
A_inv <- solve(A)
A_inv
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]  0.6 -0.7
## [2,] -0.2  0.4
```

- Verificando

```
A%*%A_inv
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]    1    0
## [2,]    0    1
```

- Propriedades envolvendo inversas
  1. Se A é não singular, então $A^\top$ é não singular e sua inversa é dada por
  $$(A^\top)^{-1} = (A^{-1})^\top.$$
  2. Se A e B são matrizes não singulares de mesmo tamanho, então o produto AB é não singular e
  $$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}.$$

Inversa generalizada

- A **inversa generalizada** de uma matriz A $n \times p$ é qualquer matriz A^- que satisfaça

$$AA^-A = A.$$

- Não é única exceto quando A é não-singular (inversa usual).
- Exemplo,

$$a = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

- $a^- = (1, 0, 0, 0)$

- Verificando

```
a <- matrix(c(1, 2, 3, 4), 4, 1)
a_invg <- matrix(c(1,0,0,0), 1, 4)
a%*%a_invg%*%a
```

```
##      [,1]
## [1,]    1
## [2,]    2
## [3,]    3
## [4,]    4
```

- Moore-Penrose *generalized inverse*

```
#### Matriz singular (col 3 = col 2 + col 1)
A <- matrix(c(2, 1, 3, 2, 0,
              2, 3, 1, 4), 3, 3)
library(MASS)
A_ginv <- ginv(A)
A%*%A_ginv%*%A ## Verificando
```

Matrizes positivas definidas

Formas quadráticas

- Soma de quadrados são importantes em ciência de dados.
- Considere uma matriz A simétrica e y um vetor, o produto

$$\mathrm{y}^\top \mathrm{Ay} = \sum_i a_{ij} y_i^2 + \sum_{i \neq j} a_{ij} y_i y_j,$$

  é chamado de **forma quadrática**.
- Sendo y de dimensão $n \times 1$, $\mathrm{y}^\top \mathrm{Iy} = y_1^2 + y_2^2 + \ldots, y_n^2$.
- Consequentemente, $\mathrm{y}^\top \mathrm{y}$ é a soma de quadrados dos elementos do vetor y.
- A raiz quadrada da soma de quadrados é o comprimento de y.

Matriz positiva definida

- Sendo A uma matriz simétrica com a propriedade $y^\top Ay > 0$ para todos os possíveis y exceto para quando $y = 0$, então a forma quadrática $y^\top Ay$ é chamada **positiva definida**, e A é dita ser uma **matriz positiva definida**.
- Exemplo

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}.$$

A forma quadrática associada é dada por

$$y^\top Ay = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = 2y_1^2 - 2y_1y_2 + 3y_2^2,$$

que é claramente positiva, desde que y_1 e y_2 sejam diferentes de zero.

Propriedades de matrizes positivas definidas

1. Se A é positiva definida, então todos os valores da diagonal de A são positivos.
2. Se A é positiva semi-definida, então os elementos da diagonal de A são maiores ou iguais a zero.
3. Sendo P uma matriz não-singular e A uma matriz positiva definida, o produto $P^\top AP$ é positiva definida.
4. Sendo P uma matriz não-singular e A uma matriz positiva semi-definida, o produto $P^\top AP$ é positiva semi-definida.
5. Uma matriz positiva definida é não-singular.

Determinante e traço de uma matriz

Determinante de uma matriz

- O **determinante** de uma matriz A é o escalar

$$|\mathrm{A}| = \sum_{j} (-1)^k a_{1j_1} a_{2j_2}, \ldots, a_{nj_n},$$

onde a soma é realizada para todas as $n!$ permutações de grau n, e k é o número de mudanças necessárias para que os segundos subscritos sejam colocados na ordem $1,2,\ldots,n$.

- Considere a matriz

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}.$$

$$|\mathrm{A}| = (-1)^0 a_{11} a_{22} + (-1)^1 a_{12} a_{21} = 1 \cdot (3 \cdot 4) - (-2 \cdot -2) = 12 - 4 = 8.$$

Determinante de uma matriz

- Computacionalmente.

```
A <- matrix(c(3,-2,-2,4),2,2)
determinant(A, logarithm = FALSE)$modulus
```

```
## [1] 8
## attr(,"logarithm")
## [1] FALSE
```

- Determinante em escala log.

```
determinant(A, logarithm = TRUE)$modulus
```

```
## [1] 2.079442
## attr(,"logarithm")
## [1] TRUE
```

- Alguns aspectos interessantes sobre determinantes são:
  1. Se A é singular, $|A| = 0$.
  2. Se A é não singular, $|A| \neq 0$.
  3. Se A é positiva definida, $|A| > 0$.
  4. $|A^\top| = |A|$.
  5. Se A é não singular, $|A^{-1}| = \frac{1}{|A|}$.

Traço de uma matriz

- O **traço** de uma matriz A $n \times n$ é um escalar definido como a soma dos elementos da diagonal, $\text{tr}(\text{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$.
- Propriedades
  1. Se A e B são $n \times n$, então

$$\text{tr}(\text{A} + \text{B}) = \text{tr}(\text{A}) + \text{tr}(\text{B}).$$

  2. Se A é $n \times p$ e B e $p \times n$, então

$$\text{tr}(\text{AB}) = \text{tr}(\text{BA}).$$

- Computacionalmente

```
A <- matrix(c(3,-2,-2,4),2,2)
sum(diag(A))
```

```
## [1] 7
```

Cálculo vetorial e matricial

Cálculo vetorial

- Seja $y = f(\mathrm{x})$ uma função das variáveis $x_1, x_2, \ldots, x_p$ e $\frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial y}{\partial x_p}$ as respectivas derivadas parciais.
- Assim,

$$\frac{\partial y}{\partial \mathrm{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_p} \end{pmatrix}.$$

Cálculo vetorial

- Sendo $\mathrm{a}^\top = (a_1, a_2, \ldots, a_p)$ um vetor de constantes e A uma matriz simétrica de constantes.

1. Seja $y = \mathrm{a}^\top \mathrm{x} = \mathrm{x}^\top \mathrm{a}$. Então,

$$\frac{\partial y}{\partial \mathrm{x}} = \frac{\partial (\mathrm{x}^\top \mathrm{a})}{\partial \mathrm{x}} = \mathrm{a}.$$

2. Seja $y = \mathrm{x}^\top \mathrm{Ax}$. Então,

$$\frac{\partial y}{\partial \mathrm{x}} = \frac{\partial (\mathrm{x}^\top \mathrm{Ax})}{\partial \mathrm{x}} = 2\mathrm{Ax}.$$

- Se $y = f(\mathrm{X})$ onde X é uma matriz $p \times p$. As derivadas parciais de y em relação a cada x_{ij} são organizadas em uma matriz.

$$\frac{\partial y}{\partial \mathrm{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{1p}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_{p1}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{pp}} \end{pmatrix}.$$

Cálculo Matricial

- Algumas derivadas importantes envolvendo matrizes são apresentadas abaixo.

1. Seja $y = \text{tr}(\text{XA})$ sendo X $p \times p$ e definida positiva e A $p \times p$ constantes. Então,

$$\frac{\partial y}{\partial \text{X}} = \frac{\partial \text{tr}(\text{XA})}{\partial \text{X}} = \text{A} + \text{A}^\top - \text{diag}(\text{A}).$$

2. Sendo A não singular com derivadas $\frac{\partial \text{A}}{\partial x}$. Então,

$$\frac{\partial \text{A}^{-1}}{\partial x} = -\text{A}^{-1}\frac{\partial \text{A}}{\partial x}\text{A}^{-1}.$$

3. Sendo A $n \times n$ positiva definida. Então,

$$\frac{\partial \log|\text{A}|}{\partial x} = \text{tr}\left(\text{A}^{-1}\frac{\partial \text{A}}{\partial x}\right).$$

Regressão linear múltipla

Regressão linear múltipla: especificação usual

- Regressão linear simples

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i.$$

- Regressão linear múltipla

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + ... + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i.$$

- Modelo para cada observação

$$\begin{aligned} y_1 &= \beta_0 + \beta_1 x_{11} + \beta_2 x_{12} + ... \beta_p x_{1p} + \epsilon_1 \\ y_2 &= \beta_0 + \beta_1 x_{21} + \beta_2 x_{22} + ... \beta_p x_{2p} + \epsilon_2 \\ &\vdots \\ y_n &= \beta_0 + \beta_1 x_{n1} + \beta_2 x_{n2} + ... \beta_p x_{np} + \epsilon_n \end{aligned}$$

Regressão linear múltipla: especificação matricial

- Notação matricial

$$\underset{n\times 1}{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}} = \underset{n\times p}{\begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}} \underset{p\times 1}{\begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}} + \underset{n\times 1}{\begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}}$$

- Notação mais compacta

$$\underset{n\times 1}{\mathrm{y}} = \underset{n\times p}{\mathrm{X}} \underset{p\times 1}{\beta} + \underset{n\times 1}{\epsilon}.$$

Regressão linear múltipla: estimação (treinamento)

- Objetivo: encontrar o vetor $\hat{\beta}$, tal que

$$SQ(\beta) = (\mathrm{y} - \mathrm{X}\beta)^\top (\mathrm{y} - \mathrm{X}\beta),$$

seja a menor possível.

Regressão linear múltipla: estimação

1. Passo 1: encontrar o vetor gradiente. Derivando em β, temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial SQ(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta}(\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta)^\top(\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta) \\
&= \frac{\partial}{\partial \beta}\left((\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta)^\top\right)(\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta) + (\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta)^\top\frac{\partial}{\partial \beta}(\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta) \\
&= -\mathrm{X}^\top(\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta) + (\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta)^\top(-\mathrm{X}) \\
&= -2\mathrm{X}^\top(\mathrm{y}-\mathrm{X}\beta).
\end{aligned}$$

Regressão linear múltipla: estimação

2. Passo 2: resolver o sistema de equações lineares

$$
\begin{aligned}
\mathbf{X}^\top(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}) &= 0 \\
\mathbf{X}^\top\mathbf{y} - \mathbf{X}^\top\mathbf{X}\hat{\beta} &= 0 \\
\mathbf{X}^\top\mathbf{X}\hat{\beta} &= \mathbf{X}^\top\mathbf{y} \\
\hat{\beta} &= (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\mathbf{y}
\end{aligned}
$$

Regressão linear múltipla: exemplo

Regressão linear múltipla: exemplo

- Conjunto de dados `Boston` disponível no pacote `MASS`.
- Cinco primeiras **covariáveis** disponíveis:
  - crim: taxa de crimes per capita.
  - zn: proporção de terrenos residenciais zoneados para lotes com mais de 25.000 pés quadrados.
  - indus: proporção de acres de negócios não varejistas por cidade.
  - chas: variável dummy de Charles River (1 se a área limita o rio; 0 caso contrário).
  - nox: concentração de óxido de nitrogênio (parte por 10 milhões).
- **Variável resposta**: `medv` valor mediano das casas ocupadas em $1000.

Regressão linear múltipla: implementação computacional

- Carregando a base de dados

```
require(MASS)
```

```
## Carregando pacotes exigidos: MASS
```

```
data(Boston)
head(Boston[, c(1:5,14)])
```

```
##      crim zn indus chas   nox medv
## 1 0.00632 18  2.31    0 0.538 24.0
## 2 0.02731  0  7.07    0 0.469 21.6
## 3 0.02729  0  7.07    0 0.469 34.7
## 4 0.03237  0  2.18    0 0.458 33.4
## 5 0.06905  0  2.18    0 0.458 36.2
## 6 0.02985  0  2.18    0 0.458 28.7
```

- Matriz de delineamento (X).

```
X <- model.matrix(~ crim + zn + indus +
                    chas + nox, data = Boston)
head(X)
```

```
##   (Intercept)    crim zn indus chas   nox
## 1           1 0.00632 18  2.31    0 0.538
## 2           1 0.02731  0  7.07    0 0.469
## 3           1 0.02729  0  7.07    0 0.469
## 4           1 0.03237  0  2.18    0 0.458
## 5           1 0.06905  0  2.18    0 0.458
## 6           1 0.02985  0  2.18    0 0.458
```

- Variável resposta

```
y <- Boston$medv
```

Regressão linear múltipla: implementação computacional

- Estimadores de mínimos quadrados:

$$\hat{\beta} = (\mathrm{X}^\top \mathrm{X})^{-1} \mathrm{X}^\top \mathrm{y}.$$

- Computacionalmente: versão ingênua

```
round(solve(t(X)%*%X)%*%t(X)%*%y, 2)
```

```
##              [,1]
## (Intercept) 29.49
## crim        -0.22
## zn           0.06
## indus       -0.38
## chas         7.03
## nox         -5.42
```

- Computacionalmente: versão eficiente

```
round(solve(t(X)%*%X, t(X)%*%y), 2)
```

```
##              [,1]
## (Intercept) 29.49
## crim        -0.22
## zn           0.06
## indus       -0.38
## chas         7.03
## nox         -5.42
```

- Função nativa do R

```
t(round(coef(lm(medv ~ crim + zn + indus +
                chas + nox, data = Boston)), 2))
```

```
##      (Intercept)  crim   zn indus chas   nox
## [1,]       29.49 -0.22 0.06 -0.38 7.03 -5.42
```

Matrizes esparsas

Matrizes esparsas (tópico adicional)

- Matrizes aparecem em todos os tipos de aplicação em ciência de dados.
- Modelos estatísticos, *machine learning*, análise de texto, análise de *cluster*, etc.
- Muitas vezes as matrizes usadas têm uma grande quantidade de zeros.
- Quando uma matriz tem uma quantidade considerável de zeros, dizemos que ela é **esparsa**, caso contrário dizemos que a matriz é **densa**.
- Todas as propriedades que vimos para matrizes em geral valem para matrizes esparsas.
- O `R` tem um conjunto de métodos altamente eficiente por meio do pacote `Matrix`.
- Saber que uma matriz é esparsa é útil pois permite:
  - Planejar formas de armazenar a matriz em memória.
  - Economizar cálculos em algoritmos numéricos (multiplicação, inversa, determinante, decomposições, etc).

Matrizes esparsas

- Comparando a quantidade de memória utilizada.

```
library('Matrix')
m1 <- matrix(0, nrow = 1000, ncol = 1000)
m2 <- Matrix(0, nrow = 1000, ncol = 1000, sparse = TRUE)
object.size(m1)
```

```
## 8000216 bytes
```

```
object.size(m2)
```

```
## 9240 bytes
```

Comparando o tempo computacional

- Matriz esparsa

```
y <- rnorm(1000)
X <- Matrix(NA, ncol = 100, nrow = 1000)
for(i in 1:1000) {X[i,] <- rbinom(100, size = 1, p = 0.1)}
X <- Matrix(X, sparse = TRUE)
system.time(replicate(100, solve(t(X)%*%X, t(X)%*%y)))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     0.218     0.000     0.220
```

- Matriz densa

```
y <- rnorm(1000)
X <- matrix(NA, ncol = 100, nrow = 1000)
for(i in 1:1000) {X[i,] <- rbinom(100, size = 1, p = 0.1)}
system.time(replicate(100, solve(t(X)%*%X, t(X)%*%y)))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     0.814     0.004     0.818
```

Diferentes formas de implementar as operações matriciais

- Criando a base de dados para a comparação

```
library(Matrix)
n <- 10000; p <- 500
x <- matrix(rbinom(n*p, 1, 0.01), nrow=n, ncol=p)
X <- Matrix(x)
object.size(x)
```

```
## 20000216 bytes
```

```
object.size(X)
```

```
## 602928 bytes
```

Diferentes formas de implementar as operações matriciais

- Diferentes implementações

```
y <- rnorm(n)
system.time(solve(t(x)%*%x, t(x)%*%y))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     1.957     0.032     1.988
```

```
system.time(solve(crossprod(x), crossprod(x, y)))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##      1.70      0.02      1.72
```

```
system.time(solve(t(X)%*%X, t(X)%*%y))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     0.166     0.000     0.167
```

```
system.time(solve(crossprod(X), crossprod(X,y)))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     0.030     0.000     0.033
```

Pacote adicional `glmnet`

- Implementação eficiente do modelo de regressão linear múltipla.

```
library(glmnet)
```

```
## Loaded glmnet 4.1-6
```

```
system.time(b <- coef(lm(y~x)))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     2.351     0.040     2.391
```

```
system.time(g1 <-glmnet(x, y, nlambda=1, lambda=0, standardize=FALSE))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     0.073     0.016     0.108
```

```
system.time(g2 <- glmnet(X, y, nlambda=1, lambda=0, standardize=FALSE))
```

```
##   usuário   sistema decorrido
##     0.006     0.000     0.006
```

Sistemas lineares

Sistemas lineares

- Sistema com duas equações:

$$\begin{aligned} f_1(x_1,x_2) &= 0 \\ f_2(x_1,x_2) &= 0. \end{aligned}$$

- Solução numérica consiste em encontrar $\hat{x}_1$ e $\hat{x}_2$ que satisfaça o sistema de equações.
- Sistema com n equações

$$\begin{aligned} f_1(x_1,\ldots,x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1,\ldots,x_n) &= 0. \end{aligned}$$

- Genericamente, tem-se

$$\mathrm{f}(x) = 0.$$

- Equações podem ser lineares ou não-lineares.

Sistemas de equações lineares

- Cada equação é linear na incógnita.
- Solução analítica em geral é possível.
- Exemplo:

$$\begin{aligned} 7x_1 + 3x_2 &= 45 \\ 4x_1 + 5x_2 &= 29. \end{aligned}$$

- Solução analítica: $\hat{x}_1 = 6$ e $\hat{x}_2 = 1$.
- Resolver (tedioso!!).
- Três possíveis casos:
  1. Uma única solução (sistema não singular).
  2. Infinitas soluções (sistema singular).
  3. Nenhuma solução (sistema impossível).

Sistemas de equações lineares

- Representação matricial do sistema de equações lineares:

$$\mathrm{A} = \begin{bmatrix} 7 & 3 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}, \quad \mathrm{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathrm{b} = \begin{bmatrix} 45 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

- De forma geral, tem-se

$$\mathrm{Ax} = \mathrm{b}.$$

Operações com linhas

- Sem qualquer alteração na relação linear, é possível

1. Trocar a posição de linhas:

$$\begin{aligned} 4x_1 + 5x_2 &= 29 \\ 7x_1 + 3x_2 &= 45. \end{aligned}$$

2. Multiplicar qualquer linha por uma constante, aqui $4x_1 + 5x_2$ por $\frac{1}{4}$, obtendo

$$\begin{aligned} x_1 + \frac{5}{4}x_2 &= \frac{29}{4} \quad (1) \\ 7x_1 + 3x_2 &= 45. \quad (2) \end{aligned}$$

Operações com linhas

3. Subtrair um múltiplo de uma linha de uma outra, aqui $7 * Eq.(1)$ menos Eq. (2), obtendo

$$\begin{aligned} x_1 + \frac{5}{4}x_2 &= \frac{29}{4} \\ 0x_1 + (\frac{35}{4} - 3)x_2 &= \frac{203}{4} - 45. \end{aligned}$$

- Fazendo as contas, tem-se

$$0x_1 + \frac{23}{4}x_2 = \frac{23}{4}.$$

Solução de sistemas lineares

- Forma geral de um sistema com n equações lineares:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ... + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

- Matricialmente, tem-se

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & ... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & ... & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & ... \\ a_{n1} & a_{n2} & ... & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

- Métodos diretos e métodos iterativos.

Métodos diretos

Métodos diretos

- O sistema de equações é manipulado até se transformar em um sistema equivalente de fácil resolução.
- Triangular superior:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}.$$

- Substituição regressiva

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \quad x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{j=n} a_{ij} x_j}{a_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1.$$

Métodos diretos

- Triangular inferior:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}.$$

- Substituição progressiva

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \quad x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i}^{j=i-1} a_{ij} x_j}{a_{ii}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n.$$

- Diagonal:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}.$$

Eliminação de Gauss

Métodos diretos: Eliminação de Gauss

- Método de Eliminação de Gauss consiste em manipular o sistema original usando operações de linha até obter um sistema triangular superior.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{24} & a_{34} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a'''_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ b''_3 \\ b'''_4 \end{bmatrix}$$

- Usar eliminação regressiva no novo sistema para obter a solução.
- Resolva o seguinte sistema usando Eliminação de Gauss.

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 2 & 4 & 3 \\ 5 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 23 \\ 33 \end{bmatrix}$$

Métodos diretos: Eliminação de Gauss

- Passo 1: encontrar o pivô e eliminar os elementos abaixo dele usando operações de linha.

$$\begin{bmatrix} [3] & 2 & 6 \\ 2-\frac{2}{3}3 & 4-\frac{2}{3}2 & 3-\frac{2}{3}6 \\ 5-\frac{5}{3}3 & 3-\frac{5}{3}2 & 4-\frac{5}{3}6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 23-\frac{2}{3}24 \\ 33-\frac{5}{3}24 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} [3] & 2 & 6 \\ 0 & [\frac{8}{3}] & -1 \\ 0 & -\frac{1}{3} & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 7 \\ -7 \end{bmatrix}$$

- Passo 2: encontrar o segundo pivô e eliminar os elementos abaixo dele usando operações de linha.

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 0 & [\frac{8}{3}] & -1 \\ 0 & -\frac{1}{3}-\left(-\frac{3}{24}\right)\left(\frac{8}{3}\right) & -6-(-\frac{3}{24})(-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 7 \\ -7-(-\frac{3}{24})(7) \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 0 & [\frac{8}{3}] & -1 \\ 0 & 0 & -\frac{147}{24} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 7 \\ -\frac{147}{24} \end{bmatrix}$$

- Passo 3: substituição regressiva.

Métodos diretos: Eliminação de Gauss

- Usando a fórmula de substituição regressiva temos:
  - $x_3 = \frac{b_3}{a_{33}} = 1.$
  - $x_2 = \frac{b_2 - a_{23}x_3}{a_{22}} = 3.$
  - $x_1 = \frac{(b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3)}{a_{11}} = 4.$
- A extensão do procedimento para um sistema com n equações é trivial.
  1. Transforme o sistema em triangular superior usando operações linhas.
  2. Resolva o novo sistema usando substituição regressiva.
- Potenciais problemas do método de eliminação de Gauss:
  - O elemento pivô é zero.
  - O elemento pivô é pequeno em relação aos demais termos.

Eliminação de Gauss com pivotação

Eliminação de Gauss com pivotação

- Considere o sistema

$$\begin{aligned} 0x_1 + 2x_2 + 3x_2 &= 46 \\ 4x_1 - 3x_2 + 2x_3 &= 16 \\ 2x_1 + 4x_2 - 3x_3 &= 12 \end{aligned}$$

- Neste caso o pivô é zero e o procedimento não pode começar.
- Pivotação - trocar a ordem das linhas.
  1. Evitar pivôs zero.
  2. Diminuir o número de operações necessárias para triangular o sistema.

$$\begin{aligned} 4x_1 - 3x_2 + 2x_3 &= 16 \\ 2x_1 + 4x_2 - 3x_3 &= 12 \\ 0x_1 + 2x_2 + 3x_2 &= 46 \end{aligned}$$

Eliminação de Gauss com pivotação

- Se durante o procedimento uma equação pivô tiver um elemento nulo e o sistema tiver solução, uma equação com um elemento pivô diferente de zero sempre existirá.
- Cálculos numéricos são menos propensos a erros e apresentam menores erros de arredondamento se o elemento pivô for grande em valor absoluto.
- É usual ordenar as linhas para que o maior valor seja o primeiro pivô.

Passo 1: obtendo uma matriz triangular superior.

```
gauss <- function(A, b) {
  Ae <- cbind(A, b) ## Sistema aumentado
  rownames(Ae) <- paste0("x", 1:length(b))
  n_row <- nrow(Ae)
  n_col <- ncol(Ae)
  SOL <- matrix(NA, n_row, n_col) ## Matriz para receber os resultados
  SOL[1,] <- Ae[1,]
  pivo <- matrix(0, n_col, n_row)
  for(j in 1:c(n_row-1)) {
    for(i in c(j+1):c(n_row)) {
      pivo[i,j] <- Ae[i,j]/SOL[j,j]
      SOL[i,] <- Ae[i,] - pivo[i,j]*SOL[j,]
      Ae[i,] <- SOL[i,]
    }
  }
  return(SOL)
}
```

Eliminação de Gauss sem pivotação

- Passo 2: substituição regressiva

```
sub_reg <- function(SOL) {
  n_row <- nrow(SOL)
  n_col <- ncol(SOL)
  A <- SOL[1:n_row,1:n_row]
  b <- SOL[,n_col]
  n <- length(b)
  x <- c()
  x[n] <- b[n]/A[n,n]
  for(i in (n-1):1) {
    x[i] <- (b[i] - sum(A[i,c(i+1):n]*x[c(i+1):n] ))/A[i,i]
  }
  return(x)
}
```

Eliminação de Gauss sem pivotação

- Resolva o sistema:

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 2 & 4 & 3 \\ 5 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 23 \\ 33 \end{bmatrix}.$$

```
A <- matrix(c(3,2,5,2,4,3,6,3,4),3,3)
b <- c(24,23,33)
S <- gauss(A, b) ## Passo 1: Triangularização
sol = sub_reg(SOL = S) ## Passo 2: Substituição regressiva
sol
```

```
## [1] 4 3 1
```

```
A%*%sol ## Verificando a solução
```

```
##      [,1]
## [1,]   24
## [2,]   23
## [3,]   33
```

Eliminação de Gauss com pivotação

- Resolva o seguinte sistema usando Eliminação de Gauss com pivotação.

$$\begin{aligned} 0x_1 + 2x_2 + 3x_2 &= 46 \\ 4x_1 - 3x_2 + 2x_3 &= 16 \\ 2x_1 + 4x_2 - 3x_3 &= 12 \end{aligned}$$

```
## Entrando com o sistema original
A <- matrix(c(0,4,2,2,-3,4,3,2,-3), 3,3)
b <- c(46,16,12)

## Pivoteamento
A_order <- A[order(A[,1], decreasing = TRUE),]
b_order <- b[order(A[,1], decreasing = TRUE)]
```

```
#### Triangulação
S <- gauss(A_order, b_order)
S
```

```
##      [,1] [,2]      [,3]     [,4]
## [1,]    4 -3.0  2.000000 16.00000
## [2,]    0  5.5 -4.000000  4.00000
## [3,]    0  0.0  4.454545 44.54545
```

```
#### Substituição regressiva
sol <- sub_reg(SOL = S)
sol
```

```
## [1]  5  8 10
```

```
#### Solução
A_order%*%sol
```

```
##      [,1]
## [1,]   16
## [2,]   12
## [3,]   46
```

Eliminação de Gauss-Jordan

Métodos diretos: Eliminação de Gauss-Jordan

- O sistema original é manipulado até obter um sistema equivalente na forma diagonal.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{24} & a_{34} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ b'_4 \end{bmatrix}$$

- Algoritmo Gauss-Jordan
  1. Normalize a equação pivô com a divisão de todos os seus termos pelo coeficiente pivô.
  2. Elimine os elementos fora da diagonal principal em TODAS as demais equações usando operaçõs de linha.
- O método de Gauss-Jordan pode ser combinado com pivotação igual ao método de eliminação de Gauss.

Métodos iterativos

Métodos iterativos

- Nos métodos iterativos, as equações são colocadas em uma forma explícita onde cada incógnita é escrita em termos das demais, i.e.

$$\begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{array} \rightarrow \begin{array}{l} x_1 = [b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3)]/a_{11} \\ x_2 = [b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3)]/a_{22}. \\ x_3 = [b_3 - (a_{31}x_1 + a_{32}x_2)]/a_{33} \end{array}$$

- Dado um valor inicial para as incógnitas estas serão atualizadas até a convergência.
- Atualização: Método de Jacobi

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \left(\sum_{j=1; j \neq i}^{j=n} a_{ij} x_j \right) \right] \quad i = 1, \ldots, n.$$

- Atualização: Método de Gauss-Seidel

$$x_1^{k+1} = \frac{1}{a_{11}} \left[b_1 - \sum_{j=2}^{j=n} a_{1j} x_j^{(k)} \right],$$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \left(\sum_{j=1}^{j=i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^{j=n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \right] \quad i = 2, 3, \ldots, n-1 \quad \text{e}$$

$$x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}} \left[b_n - \sum_{j=1}^{j=n-1} a_{nj} x_j^{(k+1)} \right].$$

Método iterativo de Jacobi

- Implementação computacional

```
jacobi <- function(A, b, inicial, max_iter = 10, tol = 1e-04) {
  n <- length(b)
  x_temp <- matrix(NA, ncol = n, nrow = max_iter)
  x_temp[1,] <- inicial
  x <- x_temp[1,]
  for(j in 2:max_iter) { #### Equação de atualização
    for(i in 1:n) {
      x_temp[j,i] <- (b[i] - sum(A[i,1:n][-i]*x[-i]))/A[i,i]
    }
    x <- x_temp[j,]
    if(sum(abs(x_temp[j,] - x_temp[c(j-1),])) < tol) break #### Critério de parada
  }
  return(list("Solucao" = x, "Iteracoes" = x_temp))
}
```

Método iterativo de Jacobi

- Resolva o seguinte sistema de equações lineares usando o método de Jacobi.

$$
\begin{aligned}
9x_1 - 2x_2 + 3x_3 + 2x_4 &= 54.5 \\
2x_1 + 8x_2 - 2x_3 + 3x_4 &= -14 \\
-3x_1 + 2x_2 + 11x_3 - 4x_4 &= 12.5 \\
-2x_1 + 3x_2 + 2x_3 - 10x_4 &= -21
\end{aligned}
$$

- Computacionalmente

```
A <- matrix(c(9,2,-3,-2,-2,8,2,
              3,3,-2,11,2,2,3,-4,10),4,4)
b <- c(54.5, -14, 12.5, -21)
ss <- jacobi(A = A, b = b,
             inicial = c(0,0,0,0),
             max_iter = 15)
## Solução aproximada
ss$Solucao
```

```
## [1]  4.999502 -1.999771  2.500056 -1.000174
```

```
## Solução exata
solve(A, b)
```

```
## [1]  5.0 -2.0  2.5 -1.0
```

Métodos iterativo de Jacobi e Gauss-Seidel

- Em R o pacote Rlinsolve fornece implementações eficientes dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel.
- Rlinsolve inclui suporte para matrizes esparsas via Matrix.
- Rlinsolve é implementado em C++ usando o pacote Rcpp.

```
A <- matrix(c(9,2,-3,-2,-2,8,2,3,3,-2,11,
              2,2,3,-4,10),4,4)
b <- c(54.5, -14, 12.5, -21)
## pacote extra
require(Rlinsolve)
lsolve.jacobi(A, b)$x ## Método de jacobi
```

```
##             [,1]
## [1,]  4.9999612
## [2,] -2.0000853
## [3,]  2.5000228
## [4,] -0.9999298
```

```
lsolve.gs(A, b)$x ## Método de Gauss-Seidell
```

```
##             [,1]
## [1,]  4.9999847
## [2,] -2.0000242
## [3,]  2.5000062
## [4,] -0.9999891
```

Decomposição LU

Decomposição LU

- Nos métodos de eliminação de Gauss e Gauss-Jordan resolvemos sistemas do tipo

$$\mathrm{A}x = b.$$

- Sendo dois sistemas

$$\mathrm{A}x = b_1, \quad \text{e} \quad \mathrm{A}x = b_2.$$

- Cálculos do primeiro não ajudam a resolver o segundo.
- IDEAL! - Operações realizadas em A fossem dissociadas das operações em b.

Decomposição LU

- Suponha que precisamos resolver vários sistemas do tipo

$$\mathrm{A}x = b.$$

  para diferentes $b's$.
- Opção 1 - calcular a inversa A^{-1}, assim a solução

$$x = \mathrm{A}^{-1}b.$$

- Cálculo da inversa é computacionalmente ineficiente.

Decomposição LU: algoritmo

- Decomponha (fatore) a matriz A em um produto de duas matrizes

$$\mathrm{A} = \mathrm{LU},$$

  onde L é triangular inferior e U é triangular superior.

- Baseado na decomposição o sistema tem a forma:

$$\mathrm{LU}x = b. \tag{3}$$

- Defina $\mathrm{U}x = y$.
- Substituindo em 3 tem-se

$$\mathrm{L}y = b. \tag{4}$$

- Solução é obtida em dois passos
  - Resolva Eq.(4) para obter y usando substituição progressiva.
  - Resolva Eq.(3) para obter x usando substituição regressiva.

Obtendo as matrizes L e U

- Método de eliminação de Gauss e método de Crout.
- Dentro do processo de eliminação de Gauss as matrizes L e U são obtidas como um subproduto, i.e.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{41} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ m_{21} & 1 & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} \\ 0 & 0 & a'_{33} & a'_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a'_{44} \end{bmatrix}.$$

- Os elementos $m'_{ij}s$ são os multiplicadores que multiplicam a equação pivô.

Obtendo as matrizes L e U

- Relembre o exemplo de eliminação de Gauss.

$$\begin{bmatrix} [3] & 2 & 6 \\ 2-\frac{2}{3}3 & 4-\frac{2}{3}2 & 3-\frac{2}{3}6 \\ 5-\frac{5}{3}3 & 3-\frac{5}{3}2 & 4-\frac{5}{3}6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 23-\frac{2}{3}24 \\ 33-\frac{5}{3}24 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} [3] & 2 & 6 \\ 0 & \frac{8}{3} & -1 \\ 0 & -\frac{1}{3} & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 7 \\ -7 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 0 & [\frac{8}{3}] & -1 \\ 0 & -\frac{1}{3}-\left(-\frac{3}{24}\right)\left(\frac{8}{3}\right) & -6-(-\frac{3}{24})(-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 7 \\ -7-(-\frac{3}{24})(7) \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 0 & [\frac{8}{3}] & -1 \\ 0 & 0 & -\frac{147}{24} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 24 \\ 7 \\ -\frac{147}{24} \end{bmatrix}$$

- Neste caso, tem-se

$$\mathrm{L} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ \frac{2}{3} & 1 & \\ \frac{5}{3} & -\frac{3}{24} & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathrm{U} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{8}{3} & -1 \\ 0 & 0 & -\frac{147}{24} \end{bmatrix}.$$

Decomposição LU com pivotação

Decomposição LU com pivotação

- O método de eliminação de Gauss foi realizado sem pivotação.
- Como discutido a pivotação pode ser necessária.
- Quando realizada a pivotação as mudanças feitas devem ser armazenadas, tal que

$$\mathrm{PA} = \mathrm{LU}.$$

- P é uma matriz de permutação.
- Se as matrizes LU forem usadas para resolver o sistema

$$\mathrm{A}x = b,$$

então a ordem das linhas de b deve ser alterada de forma consistente com a pivotação, i.e. Pb.

Implementação: Decomposição LU

- Podemos facilmente modificar a função `gauss()` para obter a decomposição LU.

```
my_lu <- function(A) {
  n_row <- nrow(A)
  n_col <- ncol(A)
  SOL <- matrix(NA, n_row, n_col) ## Matriz para receber os resultados
  SOL[1,] <- A[1,]
  pivo <- matrix(0, n_col, n_row)
  for(j in 1:c(n_row-1)) {
    for(i in c(j+1):c(n_row)) {
      pivo[i,j] <- A[i,j]/SOL[j,j]
      SOL[i,] <- A[i,] - pivo[i,j]*SOL[j,]
      A[i,] <- SOL[i,]
    }
  }
  diag(pivo) <- 1
  return(list("L" = pivo, "U" = SOL))  }
```

Aplicação: Decomposição LU

- Fazendo a decomposição.

```
LU <- my_lu(A) ## Decomposição
LU
```

```
## $L
##            [,1]      [,2]     [,3] [,4]
## [1,]  1.0000000 0.0000000 0.000000    0
## [2,]  0.2222222 1.0000000 0.000000    0
## [3,] -0.3333333 0.1578947 1.000000    0
## [4,] -0.2222222 0.3026316 0.279661    1
##
## $U
##      [,1]          [,2]      [,3]      [,4]
## [1,]    9 -2.000000e+00  3.000000  2.000000
## [2,]    0  8.444444e+00 -2.666667  2.555556
## [3,]    0  0.000000e+00 12.421053 -3.736842
## [4,]    0 -4.440892e-16  0.000000 10.716102
```

```
LU$L %*% LU$U ## Verificando a solução
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    9   -2    3    2
## [2,]    2    8   -2    3
## [3,]   -3    2   11   -4
## [4,]   -2    3    2   10
```

Aplicação: Decomposição LU

- Resolvendo o sistema de equações.

```
## Passo 1: Substituição progressiva
y = forwardsolve(LU$L, b)
## Passo 2: Substituição regressiva
x = backsolve(LU$U, y)
x
```

```
## [1]  5.0 -2.0  2.5 -1.0
```

```
A%*%x ## Verificando a solução
```

```
##       [,1]
## [1,]  54.5
## [2,] -14.0
## [3,]  12.5
## [4,] -21.0
```

- Função `lu()` do `Matrix` fornece a decomposição LU.

```
require(Matrix)
## Calcula mas não retorna
LU_M <- lu(A)
## Captura as matrizes L U e P
LU_M <- expand(LU_M)
## Substituição progressiva.
y <- forwardsolve(LU_M$L, LU_M$P%*%b)
## Substituição regressiva
x = backsolve(LU_M$U, y)
x
```

```
## [1]  5.0 -2.0  2.5 -1.0
```

Obtendo a inversa

Obtendo a inversa via decomposição LU

- O método LU é especialmente adequado para o cálculo da inversa.
- Lembre-se que a inversa de A é tal que

$$AA^{-1} = I.$$

- O procedimento de cálculo da inversa é essencialmente o mesmo da solução de um sistema de equações lineares, porém com mais incognitas.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- Três sistemas de equações diferentes, em cada sistema, uma coluna da matriz X é a incognita.

Implementação: inversa via decomposição LU

- Função para resolver o sistema usando decomposição LU.

```
solve_lu <- function(LU, b) {
  y <- forwardsolve(LU_M$L, LU_M$P%*%b)
  x = backsolve(LU_M$U, y)
  return(x)
}
```

- Resolvendo vários sistemas

```
my_solve <- function(LU, B) {
  n_col <- ncol(B)
  n_row <- nrow(B)
  inv <- matrix(NA, n_col, n_row)
  for(i in 1:n_col) {
    inv[,i] <- solve_lu(LU, B[,i])
  }
  return(inv)
}
```

Aplicação: inversa via decomposição LU

- Calcule a inversa de

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 6 \\ 2 & 4 & 3 \\ 5 & 3 & 4 \end{bmatrix}$$

```
A <- matrix(c(3,2,5,2,4,3,6,3,4),3,3)
I <- Diagonal(3, 1)
## Decomposição LU
LU <- my_lu(A)
## Obtendo a inversa
inv_A <- my_solve(LU = LU, B = I)
inv_A
## Verificando o resultado
A%*%inv_A
```

Cálculo da inversa via método de Gauss-Jordan

- Procedimento Gauss-Jordan:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & 1 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & 0 & 1 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & a'_{11} & a'_{21} & a'_{31} \\ 0 & 1 & 0 & a'_{21} & a'_{22} & a'_{32} \\ 0 & 0 & 1 & a'_{31} & a'_{32} & a'_{33} \end{bmatrix}.$$

- Função `solve()` usa a decomposição LU com pivotação.
- `R` básico é construído sobre a biblioteca `lapack` escrita em `C`.
- Veja documentação em http://www.netlib.org/lapack/lug/node38.html.

Autovalores e autovetores

Autovalores e autovetores

- Redução de dimensionalidade é fundamental em ciência de dados.
- Análise de componentes principais (PCA)
- Análise fatorial (AF).
- Decompor grandes e complicados relacionamentos multivariados em simples componentes não relacionados.
- Vamos discutir apenas os aspectos matemáticos.

Intuição

- Podemos decompor um vetor v em duas informações separadas: direção d e tamanho λ, i.e

$$\lambda = ||v|| = \sqrt{\sum_j \nu_j^2}, \quad \text{e} \quad d = \frac{v}{\lambda}.$$

- É mais fácil interpretar o tamanho de um vetor enquanto ignorando a sua direção e vice-versa.
- Esta ideia pode ser estendida para matrizes.
- Uma matriz nada mais é do que um conjunto de vetores.
- IDEIA - decompor a informação de uma matriz em outros componentes de mais fácil interpretação/representação matemática.

Autovalores e Autovetores

- Autovalores e autovetores são definidos por uma simples igualdade

$$Av = \lambda v. \tag{5}$$

- Os vetores v's que satisfazem Eq. (5) são os autovetores.
- Os valores λ's que satisfazem Eq. (5) são os autovalores.
- Vamos considerar o caso em que A é simétrica.
- A ideia pode ser estendida para matrizes não simétricas.

Autovalores e Autovetores

- Se A é uma matriz simétrica $n \times n$, então existem exatamente n pares (λ_j, v_j) que satisfazem a equação:

$$\mathrm{A}v = \lambda v.$$

- Se A tem autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, então:
- $\mathrm{tr}(\mathrm{A}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$.
- $\det(\mathrm{A}) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i$.
- A é positiva definida, se e somente se todos $\lambda_j > 0$.
- A é semi-positiva definida, se e somente se todos $\lambda_j \geq 0$.
- A ideia do PCA é decompor/fatorar a matriz A em componentes mais simples de interpretar.

Decomposição em autovalores e autovetores

- Teorema: qualquer matriz simétrica A pode ser fatorada em

$$A = Q\Lambda Q^\top,$$

  onde Λ é diagonal contendo os autovalores de A e as colunas de Q contêm os autovetores ortonormais.
- Vetores ortonormais: são mutuamente ortogonais e de comprimento unitário.
- Teorema: se A tem autovetores Q e autovalores λ_j. Então A^{-1} tem autovetores Q e autovalores λ_j^{-1}.
- Implicação: se $A = Q\Lambda Q^\top$ então $A^{-1} = Q\Lambda^{-1}Q^\top$.

Diagonalização

- Autovalores são utéis porque eles permitem lidar com matrizes da mesma forma que lidamos com números.
- Todos os cálculos são feitos na matriz diagonal Λ.
- Este processo é chamado de diagonalização.
- Um dos resultados mais poderosos em Álgebra Linear é que qualquer matriz pode ser diagonalizada.
- O processo de diagonalização é chamado de Decomposição em valores singulares.

Decomposição em valores singulares (SVD)

Decomposição em valores singulares (SVD)

- Teorema: qualquer matriz A pode ser decomposta em,

$$A = UDV^\top,$$

  onde D é diagonal com entradas não negativas e U e V são ortogonais, i.e. $U^\top U = V^\top V = I$.
- Matrizes não quadradas não tem autovalores.
- Os elementos de D são chamados de valores singulares.
- Os valores singulares são os autovalores de $A^\top A$.

Dimensão da SVD

- Se A é $n \times n$, então U, D e V são $n \times n$.
- Se A é $n \times p$, sendo $n > p$, então U é $n \times p$, D e V são $p \times p$.
- Se A é $n \times p$, sendo $n < p$, então $\mathrm{V}^\top$ é $n \times p$, D e U são $n \times n$.
- D será sempre quadrada com dimensão igual ao mínimo entre p e n.

Decomposição em autovalores e autovetores em R

- Função `eigen()` fornece a decomposição

```
A <- matrix(c(1,0.8, 0.3, 0.8, 1,
              0.2, 0.3, 0.2, 1),3,3)
isSymmetric.matrix(A)
```

```
## [1] TRUE
```

```
out <- eigen(A)
Q <- out$vectors ## Autovetores
D <- diag(out$values) ## Autovalores
Q
```

```
##            [,1]       [,2]        [,3]
## [1,] -0.6712373 -0.1815663  0.71866142
## [2,] -0.6507744 -0.3198152 -0.68862977
## [3,] -0.3548708  0.9299204 -0.09651322
```

- Verificando a solução

```
D
```

```
##          [,1]      [,2]      [,3]
## [1,] 1.934216 0.0000000 0.0000000
## [2,] 0.000000 0.8726419 0.0000000
## [3,] 0.000000 0.0000000 0.1931419
```

```
Q%*%D%*%t(Q) ## Verificando
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]  1.0  0.8  0.3
## [2,]  0.8  1.0  0.2
## [3,]  0.3  0.2  1.0
```

Decomposição em valores singulares em R

- Função svd() fornece a decomposição

```
svd(A)
```

```
## $d
## [1] 1.9342162 0.8726419 0.1931419
##
## $u
##            [,1]       [,2]        [,3]
## [1,] -0.6712373  0.1815663  0.71866142
## [2,] -0.6507744  0.3198152 -0.68862977
## [3,] -0.3548708 -0.9299204 -0.09651322
##
## $v
##            [,1]       [,2]        [,3]
## [1,] -0.6712373  0.1815663  0.71866142
## [2,] -0.6507744  0.3198152 -0.68862977
## [3,] -0.3548708 -0.9299204 -0.09651322
```

Regressão ridge

Regressão ridge

- Relembrando: regressão linear múltipla

$$\underset{n\times 1}{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}} = \underset{n\times p}{\begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{p1} \\ 1 & x_{12} & \dots & x_{p1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & \dots & x_{pn} \end{bmatrix}} \underset{p\times 1}{\begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}}$$

- Usando uma notação mais compacta,

$$\underset{n\times 1}{\mathrm{y}} = \underset{n\times p}{\mathrm{X}} \underset{p\times 1}{\beta}.$$

- Minimiza a perda quadrática:

$$\hat{\beta} = (\mathrm{X}^\top \mathrm{X})^{-1} \mathrm{X}^\top \mathrm{y}.$$

Regressão ridge

- Se $p > n$ o sistema é singular (múltiplas soluções)!
- Como podemos ajustar o modelo?
- Introduzir uma penalidade pela complexidade.
- Soma de quadrados penalizada

$$PSQ(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_i^\top \beta)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2.$$

- Matricialmente, tem-se

$$PSQ(\beta) = (y - \mathbf{X}\beta)^\top (y - \mathbf{X}\beta) + \lambda \beta^\top \beta.$$

  - IMPORTANTE !!
    - y centrado (média zero).
    - X padronizada por coluna (média zero e variância um).

Regressão ridge

- Objetivo: minizar a soma de quadrados penalizada.
- Derivada

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial PQS(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta}\left[(y-\mathrm{X}\beta)^\top (y-\mathrm{X}\beta) + \lambda \beta^\top \beta\right] \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial \beta}(y-\mathrm{X}\beta)^\top\right](y-\mathrm{X}\beta) + (y-\mathrm{X}\beta)^\top \left[\frac{\partial}{\partial \beta}(y-\mathrm{X}\beta)\right] + \\
\lambda\left\{\left[\frac{\partial \beta^\top}{\partial \beta}\right]\beta + \beta^\top\left[\frac{\partial \beta}{\partial \beta}\right]\right\} & \\
&= -2\mathrm{X}^\top(y-\mathrm{X}\beta) + 2\lambda\beta \\
&= -\mathrm{X}^\top(y-\mathrm{X}\beta) + \lambda\beta.
\end{aligned}
$$

Aplicação: regressão ridge

- Resolvendo o sistema linear, tem-se

$$\begin{aligned} -\mathrm{X}^\top(y - \mathrm{X}\hat{\beta}) + \lambda \mathrm{I}\hat{\beta} &= 0 \\ -\mathrm{X}^\top y + \mathrm{X}^\top \mathrm{X}\hat{\beta} + \lambda \mathrm{I}\hat{\beta} &= 0 \\ \mathrm{X}^\top \mathrm{X}\hat{\beta} + \lambda \mathrm{I}\hat{\beta} &= \mathrm{X}^\top y \\ (\mathrm{X}^\top \mathrm{X} + \lambda \mathrm{I})\,\hat{\beta} &= \mathrm{X}^\top y \\ \hat{\beta} &= (\mathrm{X}^\top \mathrm{X} + \lambda \mathrm{I})^{-1}\,\mathrm{X}^\top y. \end{aligned}$$

- Solução depende de λ.
- A inclusão de λ faz o sistema ser não singular.
- Na verdade quando fixamos λ selecionamos uma solução em particular.

Aplicação: regressão ridge

- Calcular $\hat{\beta}$ envolve a inversão de uma matriz $p \times p$ potencialmente grande.

$$\hat{\beta} = \left(\mathrm{X}^\top \mathrm{X} + \lambda \mathrm{I}\right)^{-1} \mathrm{X}^\top y.$$

- Usando a decomposição SVD, tem-se

$$\mathrm{X} = \mathrm{U}\mathrm{D}\mathrm{V}^\top.$$

- É possível mostrar que,

$$\hat{\beta} = \mathrm{V}\,\mathrm{diag}\left(\frac{d_j}{d_j^2 + \lambda}\right)\mathrm{U}^\top y.$$

Implementação computacional: regressão ridge

Implementação: regressão ridge

- Simulando o conjunto de dados $(n = 100, p = 200)$.

```
set.seed(123)
X <- matrix(NA, ncol = 200, nrow = 100)
X[,1] <- 1 ## Intercepto
for(i in 2:200) {
  X[,i] <- rnorm(100, mean = 0, sd = 1)
  X[,i] <- (X[,i] - mean(X[,i]))/var(X[,i])
}
## Parâmetros
beta <- rbinom(200, size = 1, p = 0.1)*rnorm(200, mean = 10)
mu <- X%*%beta
## Observações
y <- rnorm(100, mean = mu, sd = 10)
```

Implementando o modelo.

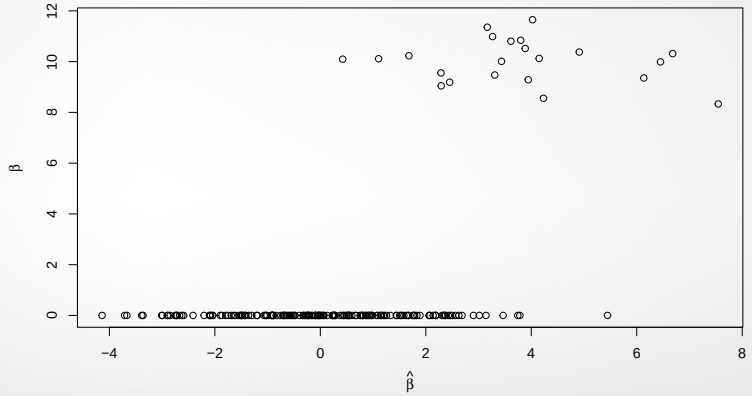
- Modelo passo-a-passo

```
y_c <- y - mean(y)
X_svd <- svd(X) ## Decomposição svd
lambda = 0.5 ## Penalização
DD <- Diagonal(100, X_svd$d/(X_svd$d^2 + lambda))
DD[1] <- 0 ## Não penalizar o intercepto
beta_hat = as.numeric(X_svd$v%*%DD%*%t(X_svd$u)%*%y_c)
```

Resultados: regressão ridge

- Ajustados versus verdadeiros.

```
plot(beta ~ beta_hat, xlab = expression(hat(beta)), ylab = expression(beta))
```



Resultados: regressão ridge

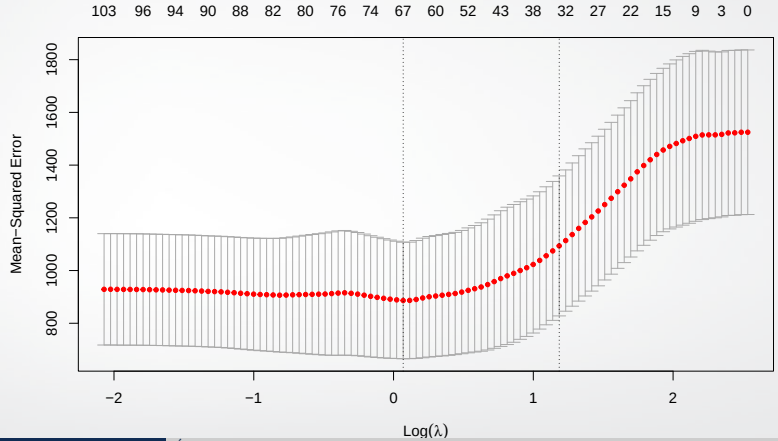
- Regressão com penalização ridge, bem como, outras penalizações são eficientemente implementadas em `R` via pacote `glmnet`.
- IMPORTANTE! A penalização no `glmnet` é ligeiramente diferente, por isso os $\widehat{\beta}$'s não são idênticos a nossa implementação `naive`.
- O `glmnet` oferece opções para selecionar λ via validação cruzada.

```
require(glmnet)
beta_glm <- cv.glmnet(X[,-1], y_c, nlambda = 100)
```

Resultados: regressão ridge

- Validação cruzada.

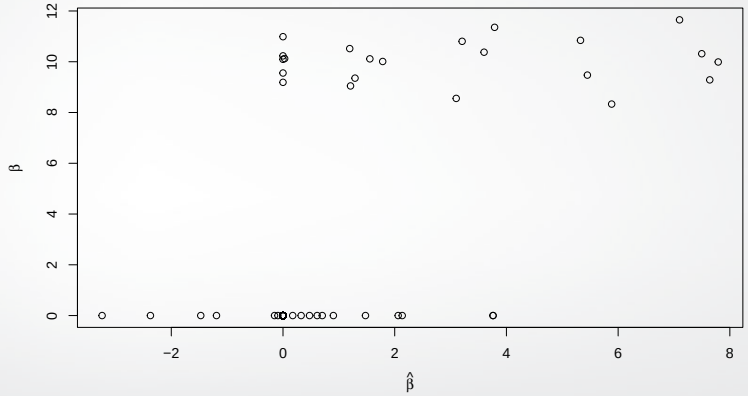
```
plot(beta_glm)
```



Resultados: regressão ridge

- Ajustados (glmnet) versus verdadeiros.

```
plot(beta ~ as.numeric(coef(beta_glm)), xlab = expression(hat(beta)), ylab = expression(beta))
```



Comentários

Comentários

- Solução de sistemas lineares:
  - Métodos diretos: Eliminação de Gauss e Gauss-Jordan.
  - Métodos iterativos: Jacobi e Gauss-Seidel.
  - Inversa de matrizes.
- Decomposição ou fatorização
  - LU resolve sistema lineares pode ser usada para obter inversas.
  - Autovalores e autovetores.
  - Valores singulares.
  - Existem muitas outras fatorizações: QR, Cholesky, Cholesky modificadas, etc.