



Estadística Multivariante

Complementos del álgebra matricial. Derivación matricial.

Trabajo B

Antonio R. Moya
Martín-Castaño
Elena Romero Contreras
Nuria Rodríguez
Barroso
Universidad de Granada
anmomar85@correo.ugr.es
elenaromeroc@correo.ugr.es
rbnuria6@gmail.com

Índice

1. Complementos del álgebra matricial.	2
1.1. Introducción	2
1.2. Operación Vec.	2
1.3. Producto Kronecker	3
1.3.1. Producto Kronecker y Vec. Relaciones de interés entre ambas operaciones.	5
1.3.2. Ejercicios	5
1.4. La matriz conmutación	6
1.4.1. Ejercicios	8
1.5. Producto * de dos matrices	9
1.5.1. Ejercicios	9
1.6. Operación Vech. Matrices de transición. La matriz duplicación	9
1.6.1. Ejercicios	11
2. Derivación matricial.	12
2.1. Introducción	12
2.2. Diferencial primera y jacobianos	12
2.2.1. Diferencial de una función vectorial	12
2.2.2. Diferencial de una función matricial	13
2.2.3. Ejercicios	14
2.3. Matrices jacobianas y derivadas matriciales	15
2.3.1. Ejercicios	17
2.3.2. Derivadas matriciales de funciones escalares de un vector	18
2.3.3. Derivadas matriciales de funciones escalares de matrices	18
2.3.4. Jacobianos de funciones vectoriales	20
2.4. Diferencial segunda y hessianos	20
2.4.1. Matriz hessiana para una función escalar de un vector	20
2.4.2. Matriz hessiana para una función vectorial de un vector	20
2.4.3. Diferencial segunda de una función escalar	20
2.4.4. Diferencial segunda de una función vectorial	21
2.4.5. Diferencial segunda de una función matricial	23

1. Complementos del álgebra matricial.

1.1. Introducción

A pesar de que la manipulación algebraica de vectores aleatorios puede ser abordada sin ninguna complicación, las matrices aleatorias suponen un esfuerzo extra ya que el resultado obtenido sobre las mismas debe generalizar al realizado sobre vectores. Además, el uso de matrices aleatorias en el Análisis Multivariante es muy importante dado que aparecen de forma natural, por ejemplo, al estimar la matriz de covarianzas de una población vectorial.

1.2. Operación Vec.

Para que el trato de las matrices aleatorias generalice a la manipulación de vectores aleatorios, debemos *vectorizar* las matrices, esto es, tratarlas como si se tratasen de vectores. Esta consideración se puede hacer teniendo en cuenta que los espacios $\mathbb{M}_{n \times q}$ y \mathbb{R}^{nq} son isomorfos.

Vemos que el objetivo puede ser muy cómodo a la hora de manipular matrices aleatorias, sin embargo, debemos entender primero bien las propiedades que unen las expresiones matriciales y las *vectorizadas*. Introducimos formalmente la definición de *Vec*

Definición 1.1. Sea \mathbf{X} una matriz de orden $n \times q$. Se define $\text{Vec}(\mathbf{X})$ como el vector de dimensión $nq \times 1$ formado al apilar las columnas de \mathbf{X} una tras otra, o sea, si notamos por columnas $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_q]$, entonces

$$\text{Vec}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_q \end{pmatrix}$$

Como ya habíamos comentado, la identificación entre matrices y las *vectorizadas* se basa en un resultado que formalizamos a continuación:

Teorema 1.1. La aplicación $\text{Vec}: \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{R}^{nq}$ es un isomorfismo de espacios vectoriales.

Este isomorfismo presentado en este teorema nos puede servir para calcular la esperanza matemática. Así, cuando sea más fácil calcular la esperanza de su vectorización, utilizando la propiedad que obtenemos el en ejemplo siguiente, bastaría con deshacer el cambio con el isomorfismo anterior.

EJEMPLO 1.1: Sean x_1, \dots, x_N vectores aleatorios p -dimensionales con igual media μ . Sea la matriz aleatoria $\mathbf{X}_{N \times p} = [x_1, \dots, x_N]^t$ y consideremos el vector

$$\text{Vec}(X^t) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_N \end{pmatrix}$$

Entonces, si notamos $\mathbf{1}_N$ al vector N dimensional cuyas componentes son todas iguales a uno, se verifica

$$E[\text{Vec}(X^t)] = \begin{pmatrix} \mu \\ \mu \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \mu \end{pmatrix} = \text{Vec}([\mu, \mu, \dots, \mu]) = \text{Vec}(\mu \mathbf{1}_N^t)$$

1.3. Producto Kronecker

Como ya hemos visto en el ejercicio anterior, utilizar la vectorización puede facilitar ciertos cálculos, como el de la esperanza de una matriz aleatoria. Sin embargo, hay ocasiones en las que es obligatorio usar la vectorización de matrices, como en el ejemplo siguiente:

EJEMPLO 1.2: En las hipótesis del ejercicio anterior, suponemos además que x_1, \dots, x_N son independientes y con igual matriz de covarianzas Σ . Entonces se define la matriz de covarianzas de \mathbf{X}^t como $\text{Cov}[\text{Vec}(X^t)]$ ya que dicha matriz contiene todas las matrices de covarianzas entre las columnas de \mathbf{X}^t . A partir de la definición de la matriz de covarianzas de un vector aleatorio, se verifica

***** (poner definición del apéndice B)

$$\text{Cov}[\text{Vec}(X^t)] = E[(\text{Vec}(X^t) - E[\text{Vec}(X^t)])(\text{Vec}(X^t) - E[\text{Vec}(X^t)])^t] =$$

$$= E \begin{bmatrix} X_1 - \mu \\ X_2 - \mu \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ X_N - \mu \\ \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (X_1 - \mu)^t & \dots & (X_N - \mu)^t \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Sigma & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \Sigma \mu \end{pmatrix}$$

A raíz de la expresión obtenida en el ejemplo, vamos a definir el producto de Kronecker de matrices:

Definición 1.2. Sean $A_{m \times n}$ y $B_{p \times q}$ dos matrices. Se define el **producto Kronecker** de ellas como la matriz de dimensiones $mp \times nq$ siguiente

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix} = (a_{ij}B)_{ij}; i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$$

Observamos la utilidad de la definición anterior obteniendo que en el ejemplo anterior se tiene $Cov[Vec(X^t)] = I_N \otimes \Sigma$.

Aunque hemos utilizado el resultado anterior para justificar la introducción del producto Kronecker, no es una justificación formal. Otra de las justificaciones que podríamos haber dado para introducirlo podría ser el resolver el sistema de ecuaciones $x = (A \otimes B)y$, que es no singular.

Ahora bien, una vez presentada esta nueva operación nos proponemos estudiar sus propiedades. Al igual que el producto usual matricial estaba relacionado con la composición de aplicaciones lineales, este nuevo producto lo estará con el producto tensorial. Vemos algunas propiedades en el siguiente teorema:

Teorema 1.2. *Se verifican las siguientes propiedades:*

1. Dados $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $A_{m \times n}$ y $B_{p \times q}$, entonces

$$(\alpha A) \otimes (\beta B) = \alpha\beta(A \otimes B) = \alpha\beta A \otimes B = A \otimes (\alpha\beta)B$$

2. Dadas $A_{m \times n}$, $B_{m \times n}$, $C_{p \times q}$ y $D_{p \times q}$, entonces

- a) $(A \otimes C) + (B \otimes C) = (A + B) \otimes C$

- b) $(A \otimes C) + (A \otimes D) = A \otimes (C + D)$

- c) $(A + B) \otimes (C + D) = (A \otimes C) + (A \otimes D) + (B \otimes C) + (B \otimes D)$

3. Dadas $A_{m \times n}$, $B_{p \times q}$, $C_{r \times s}$, entonces $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$

4. Dadas $A_{m \times n}$, $B_{n \times p}$, $C_{q \times r}$ y $D_{r \times s}$, entonces $(A \otimes C)(B \otimes D) = AB \otimes CD$

5. Dadas $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$ son no singulares entonces $(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$

6. Si $A_{m \times n}$ y $B_{p \times q}$, entonces $(A \otimes B)^t = A^t \otimes B^t$

7. Si $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$ son ortogonales, entonces $A \otimes B$ es ortogonal

8. Si $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$ son matrices triangulares (inferiores), entonces $A \otimes B$ es triangular superior (inferior).

9. Si $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$ son definidas positivas, entonces $A \otimes B$ es definida positiva

10. Dadas $A_{m \times n} = [A_1, \dots, A_k]$ y $B_{p \times q}$, entonces $A \otimes B = [A_1 \otimes B, \dots, A_k \otimes B]$. En particular, si $a_{m \times 1}$ y $b_{p \times 1}$ son dos vectores se tiene que $a \otimes b^t = ab^t = b^t \otimes a$

11. Dadas $A_{m \times n} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$ y $B_{p \times q}$, entonces $A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11} \otimes B & A_{12} \otimes B \\ A_{21} \otimes B & A_{22} \otimes B \end{pmatrix}$

12. Dadas $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$, entonces $tr[A \otimes B] = tr[A]tr[B]$

13. Sean $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$ matrices reales con autovalores reales respectivos $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ y μ_1, \dots, μ_n . Entonces $A \otimes B$ tiene como autovalores $\lambda_i \mu_j, i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n$. Como consecuencia $\text{rg}(A \otimes B) = \text{rg}(A)\text{rg}(B)$
14. Dadas $A_{m \times m}$ y $B_{n \times n}$, entonces $|A \otimes B| = |A|^n |B|^m$

1.3.1. Producto Kronecker y Vec. Relaciones de interés entre ambas operaciones.

En este apartado vamos a exponer varias propiedades que relacionan las dos operaciones recientemente introducidas.

Teorema 1.3. *Se verifican las siguientes afirmaciones:*

- Si $a_{n \times 1}$ y $b_{q \times 1}$ son dos vectores, entonces $\text{Vec}(ab^t) = b \otimes a$
- Sean $A_{n \times q}$, $B_{q \times p}$ y $C_{p \times r}$ tres matrices cualesquiera. Entonces $\text{Vec}(ABC) = (C^t \otimes A)\text{Vec}(B)$
- Sean $A_{n \times q}$ y $B_{q \times n}$. Entonces $\text{tr}[AB] = \text{Vec}'(A^t)\text{Vec}(B) = \text{Vec}'(B^t)\text{Vec}(A)$
- Sea $\{e_i : i = 1, \dots, n\}$ la base canónica de \mathbb{R}^n . Entonces

$$\text{Vec}(I_n) = \sum_{i=1}^n (e_i \otimes e_i)$$

- Sea $\{J_{ij} : i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, q\}$ la base canónica del espacio de matrices $\mathbb{M}_{n \times q}$. Entonces

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q (J_{ij} \otimes J_{ij}) = \text{Vec}(I_n)\text{Vec}'(I_q)$$

1.3.2. Ejercicios

EJERCICIO 1.1 Demostrar que la operación Vec define un isomorfismo de espacios vectoriales.

EJERCICIO 1.2 Verificar las siguientes igualdades:

- a) Sean $A_{m \times n}$ y $B_{n \times p}$. Entonces:

$$\text{Vec}(AB) = (B^t \otimes I_m)\text{Vec}(A) = (I_p \otimes A)\text{Vec}(B) = (B^t \otimes A)\text{Vec}(I_n).$$

- b) Sea $A_{m \times n}$. Entonces:

$$\text{Vec}(A) = (A^t \otimes I_m)\text{Vec}(I_m) = (I_n \otimes I_m)\text{Vec}(A) = (I_n \otimes A)\text{Vec}(I_n).$$

- c) Sean $A_{m \times n}$, $B_{n \times p}$ y $C_{p \times q}$. Entonces

$$\text{Vec}(ABC) = (C^t \otimes A)\text{Vec}(B) = (C^t B^t \otimes I_m)\text{Vec}(A) = (C^t \otimes I_m)\text{Vec}(AB) = (I_q \otimes AB)\text{Vec}(C).$$

- d) Sean $B_{m \times n}$, $C_{n \times p}$ y $D_{p \times m}$. Entonces

$$\text{tr}[BCD] = \text{Vec}'(B^t)(I_n \otimes C)\text{Vec}(D) = \text{Vec}'(D^t)(C^t \otimes I_m)\text{Vec}(B).$$

e) Sea $A_{n \times n}$. Entonces $\text{tr}[A] = \text{Vec}'(A^t)\text{Vec}(I_n) = \text{Vec}'(I_n)\text{Vec}(A)$.

f) Sean $A_{m \times n}$, $B_{m \times n}$, $C_{n \times p}$ y $D_{n \times p}$. Entonces

$$\text{Vec}((A+B)(C+D)) = [(I_p \otimes A) + (I_p \otimes B)][\text{Vec}(C) + \text{Vec}(D)] = [(C^t \otimes I_m) + (D^t \otimes I_m)][\text{Vec}(A) + \text{Vec}(B)].$$

EJERCICIO 1.3 Sea la matriz aleatoria $X_{N \times p}$ de los ejemplos 1.1 y 1.2. Sea $Y_{r \times s} = B_{r \times p} X^t C_{N \times s}$. Probar que

a) $E[\text{Vec}(Y)] = C^t 1_N \otimes B\mu$

b) $\text{Cov}[\text{Vec}(Y)] = C^t C \otimes B \Sigma B^t$

1.4. La matriz conmutación

En esta sección vamos a introducir un tipo de matriz que toma diversos nombres dado a que ha aparecido a lo largo de la historia de diferentes maneras. Nosotros tomaremos la notación de *matriz conmutación*.

Una característica común de todas las introducciones de esta matriz es la propiedad de reordenar los elementos de una matriz. Una propiedad importante es la de transformar $\text{Vec}(A)$ en $\text{Vec}(A^t)$ siendo A una matriz arbitraria. También sirve para invertir un producto Kronecker, siendo una propiedad muy utilizada en la derivación matricial.

Definamos formalmente lo que venimos introduciendo:

Definición 1.3. Sea $A_{n \times q}$. Se define la matriz de conmutación como la matriz de permutación, K_{nq} , de dimensión $nq \times nq$ tal que

$$K_{nq} \text{Vec}(A) = \text{Vec}(A^t)$$

Notar que dado que K_{nq} es una matriz de permutación, es ortogonal, esto es $K_{nq}^t = K_{nq}^{-1}$. Además, claramente se tiene que $K_{qn} K_{nq} \text{Vec}(A) = K_{qn} \text{Vec}(A^t) = \text{Vec}(A)$, por lo que se obtiene que $K_{qn} K_{nq} = I_{nq}$, por lo que $K_{nq}^{-1} = K_{qn} = K_{nq}^t$. Además, es fácilmente comprobable que $K_{n1} = I_n$ y $K_{1q} = I_q$.

Para saber cómo se expresa de forma explícita la matriz de conmutación introducimos el siguiente teorema.

Teorema 1.4. Sea $\{J_{ij} : i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, q\}$ la base canónica del espacio de matrices $\mathbb{M}_{n \times q}$. Entonces

$$K_{nq} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q J_{ij} \otimes J_{ij}^t$$

Otra introducción de la matriz de conmutación es de forma constructiva, es decir, introduciéndola como aquella matriz $A_{n \times q}$ que verifica que

$$\text{Vec}(A^t) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q (J_{ij} \otimes J_{ij}^t) \text{Vec}(A)$$

*****TENEMOS QUE PENSAR QUE EJEMPLOS PONEMOS *****

Tengamos en cuenta ahora que el resultado de $I_n \otimes I_q$ es I_{nq} . Así, podemos dar una nueva definición de la matriz de conmutación como la n-permutación por filas de la matriz $I_n \otimes I_q$, con lo que se asegura que $Vec(A^t) = K_{nq} Vec(A)$.

Notemos que con vistas a esta definición se puede usar la notación $I_{(q,n)}$ para hacer referencia a K_{nq} . Además se guarda cierta relación con K_{qn} que no deja de ser la q-permutación por filas de $I_n \otimes I_q$. Veamos ahora el siguiente teorema:

Teorema 1.5. Sean $\{e_i : i = 1 \dots n\}$ y $\{u_j : j = 1 \dots q\}$ las bases canónicas de \mathbb{R}^n y \mathbb{R}^q respectivamente. Entonces:

$$K_{nq} = \sum_{j=1}^q (u_j^t \otimes I_n \otimes u_j) = \sum_{i=1}^n e_i \otimes I_q \otimes e_i^t$$

Veamos ahora algunas propiedades de esta matriz:

Teorema 1.6. Consideramos las matrices $A_{m \times n}$, $B_{p \times q}$, $C_{q \times s}$, $D_{n \times t}$, $E_{m \times n}$ y los vectores $a_{m \times 1}$, $b_{p \times 1}$ y z un vector cualquiera. Entonces:

1. $K_{pm}(A \otimes B) = (B \otimes A)K_{qn}$
2. $z^t \otimes A \otimes B = K_{mp}(bz^t \otimes A)$.
3. $tr[K_{mn}(A^t \otimes E)] = tr[A^t E] = Vec'(A^t)K_{mn}Vec(E)$
4. $tr[K_{mn}] = 1 + f(m-1, n-1)$, donde:

$$f(m-1, n-1) = \begin{cases} m.c.d(m-1, n-1) \\ f(0, n) = f(n, 0) = n \end{cases}$$

5. Los autovalores de K_{nn} son 1 con multiplicidad $\frac{n(n+1)}{2}$ y -1 con multiplicidad $\frac{n(n-1)}{2}$.
6. $|K_{nn}| = (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}}$ y $|K_{mn}| = (-1)^{\frac{m(m-1)n(n-1)}{4}}$
7. Supongo que $rg(A) = r$ y $\lambda_1 \dots \lambda_r$ los autovalores de $A^t A$. Sea $P = K_{mn}(A^t \otimes A)$. Entonces P es una matriz simétrica con rango r^2 y que cumple: $tr[P] = tr[A^t A]$. Además se verifica que $P^2 = (AA^t) \otimes (A^t A)$ y sus autovalores son los anteriores más $\pm(\lambda_i \lambda_j)^{\frac{1}{2}}$ con $i \neq j$.

Ahora podemos plantearnos como realizar la vectorización de un producto de Kronecker. Para ello mostramos el siguiente resultado:

Teorema 1.7. Sean $A_{m \times n}$, $B_{p \times q}$. Entonces $Vec(A \otimes B) = [I_n \otimes K_{qm} I_p][Vec(A) \otimes Vec(B)]$.

Vamos a llevar la matriz de conmutación un paso más adelante. Para ello vamos a definirla para más de dos índices $K_{st,n}$ como se hacía anteriormente pero tomando $st = m$. Su actuación se ve como:

$$A \otimes B \otimes C = K_{ms,p}(C \otimes A \otimes B)K_{q,nt} = K_{m,sp}(B \otimes C \otimes A)K_{tq,n}$$

. Así, podemos mostrar el siguiente teorema en el que se muestran algunas propiedades:

Teorema 1.8. Se cumple:

1. $K_{mn,p} = K_{nm,p}$ y $K_{m,np} = K_{m,pn}$
2. $K_{mn,p} = (I_m \otimes K_{np})(K_{mp} \otimes I_n) = (I_n \otimes K_{mp})(K_{np} \otimes I_m)$
3. $K_{m,np} = (K_{mn} \otimes I_p)(I_n \otimes K_{mp}) = (K_{mp} \otimes I_n)(I_p \otimes K_{mn})$
4. $K_{mn,p} = K_{m,np}K_{n,pm} = K_{n,mp}K_{m,pn}$ y $K_{m,np} = K_{mn,p}K_{pm,n} = K_{mp,n}K_{nm,p}$
5. $I_{nmp} = K_{mn,p}K_{pm,n}K_{np,m} = K_{mn,p}K_{pn,m}K_{mp,n} = K_{m,np}K_{n,pm}K_{p,mn} = K_{m,np}K_{p,nm}K_{n,mp}$
6. *Cualquier producto de dos matrices de este tipo con el mismo conjunto de índices conmuta.*

1.4.1. Ejercicios

EJERCICIO 1.4 A partir de la expresión explícita de la matriz K_{nn} , demostrar que $tr[K_{nn}] = n$.

EJERCICIO 1.5 Sean $A_{m \times n}$, $B_{p \times q}$, $C_{q \times s}$, $D_{n \times t}$ y $b_{p \times 1}$. Demostrar las siguientes igualdades:

- a) $K_{pm}(A \otimes B)K_{nq} = B \otimes A$.
- b) $K_{pm}(A \otimes b) = b \otimes A$.
- c) $K_{mp}(b \otimes A) = A \otimes b$.

EJERCICIO 1.6 Sea $N_n = \frac{1}{2}[I_{n^2} + K_{nn}]$. Probar las siguientes afirmaciones:

- a) N_n es simétrica e idempotente.
- b) $rg(N_n) = tr[N_n] = \frac{1}{2}n(n+1)$
- c) $N_n K_{nn} = K_{nn} N_n = N_n$

1.5. Producto * de dos matrices

Para simplificar cálculos en las derivadas matriciales, se va a introducir un nuevo producto:

Definición 1.4. Sean $X_{m \times n}$ e $Y_{mp \times nq}$. Particionamos Y como sigue:

$$Y = \begin{pmatrix} Y_{11} & \cdots & \cdots & Y_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ Y_{m1} & \cdots & \cdots & Y_{mn} \end{pmatrix} \text{ donde } Y_{ij} \text{ es de dimensión } p \times q$$

Así, se define $X * Y = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n x_{ij} Y_{ij}$

En los dos siguientes teoremas vemos propiedades de esta operación:

Teorema 1.9. Sean $X_{m \times n}$, $Y_{mp \times nq}$, $W_{mp \times nq}$, $Z_{s \times t}$. Se cumple:

1. $(X * Y)^t = X * Y^t$
2. Si $p = q = 1$, entonces $X * Y = \text{tr}[XY^t] = \text{tr}[YX^t] = \text{tr}[X^t Y] = \text{tr}[Y^t X]$
3. $(X * Y) \otimes Z = X * (Y \otimes Z)$
4. $X * (Y + W) = X * Y + X * W$

Teorema 1.10. Sean $X_{m \times n}$, $Y_{n \times p}$, $Z_{p \times q}$:

1. $XYZ = Y * \text{Vec}(X) * \text{Vec}'(Z^t)$
2. $XYZ = Y^t * (Z \otimes I_m) K_{qm}(X \otimes I_q)$

1.5.1. Ejercicios

EJERCICIO 1.7 Sean $X_{m \times n}$, $Y_{n \times q}$. Demostrar que $Y * K_{np} = Y^t$

1.6. Operación Vech. Matrices de transición. La matriz duplicación

*****EN ESTE APARTADO HABIA ALGO MAL QUE ERA? *****

Vamos a realizar un planteamiento que nos lleve a un nuevo operador (**Vech**). Para ello, si consideramos $A_{n \times n}$, se puede ver $\text{Vech}(A)$ como el vector obtenido a partir de $\text{Vec}(A)$ eliminando los elementos de la diagonal superior de A . Por ejemplo si A es simétrica, entonces $\text{Vech}(A)$ contiene sus elementos distintos.

Es claro que se puede realizar una transformación que lleve de $\text{Vec}(A)$ a $\text{Vech}(A)$ mediante el producto por una matriz D_n . A esta matriz la llamaremos la **matriz de duplicación**.

Así se puede ver esto como un nuevo operador. Sea $A_{m \times n}$ una matriz con s elementos respetidos y/o v elementos constantes, el número de elementos matemáticamente independientes se puede calcular como sigue: $r = mn - s - v$.

Algunos ejemplos son los siguientes:

EJEMPLO 1.3: ■ Si A es simétrica, $v = 0$, $s = \frac{m(m-1)}{2}$ y por tanto $r = \frac{m(m+1)}{2}$.

- Si es antisimétrica, $v = m$, $s = \frac{m(m-1)}{2}$ y $r = \frac{m(m-1)}{2}$
- Si A es diagonal, $v = \frac{m(m-1)}{2}$, $s = 0$ y $r = m$ *****NO ME CUADRA ESO*
- Si A es una matriz de correlación, entonces $v = m$, $s = \frac{m(m-1)}{2}$ y $r = \frac{m(m-1)}{2}$

Así en estas matrices $Vech(A)$ se podría ver como el vector eliminando los elementos repetidos y/o constantes. De este modo, podemos establecer una relación entre $Vec(A)$ y $Vech(A)$, pues ordenan los elementos de la matriz A salvo excluidos. Esta relación se consigue a través de una matriz que se denomina **matriz de transición**. En el caso de matrices simétricas la conocemos como **matriz de duplicación**.

Definición 1.5. Sea $A_{m \times n}$ y r el número de elementos de A matemáticamente independientes en el sentido comentado anteriormente. Se define la matriz de transición como aquella matriz \mathbf{TR} de orden $mn \times r$ que verifique la relación $\mathbf{TR}Vech(A) = Vec(A)$.

Veamos cuál es su forma explícita en el siguiente teorema.

Teorema 1.11. Sea A una matriz simétrica de orden n . Entonces las columnas de D_n vienen dadas por $e_{(i-1)n+j} + e_{(j-1)n+i}(1 - \delta_{ij})$, $j=1, \dots, n$, $i=j, \dots, n$, donde los vectores anteriores son vectores básicos de \mathbb{R}^{n^2} y δ_{ij} representa la función delta de Kronecker.

Se comprueba fácilmente que D_n tiene rango por columnas completo y su g-inversa viene dada por $(D_n)_g = (D_n^t D_n)^{-1} D_n^t$.

Teorema 1.12. Sean $b_{n \times 1}$ y $A_{n \times n}$. Entonces se verifica

1. $K_{nn} D_n = D_n$.
2. $D_n (D_n)_g = N_n$.
3. $D_n (D_n)_g (b \otimes A) = \frac{1}{2} (b \otimes A + A \otimes b)$.
4. $D_n (D_n)_g (A \otimes A) D_n = (A \otimes A) D_n$.
5. $D_n (D_n)_g (A \otimes A) (D_n)_g^t = (A \otimes A) (D_n)_g^t$.

donde $N_n = \frac{1}{2} [I_{n^2} + K_{nn}]$.

El siguiente teorema nos proporciona las expresiones de las matrices de transición en el caso de matrices diagonales, triangulares y antisimétricas.

Teorema 1.13. Si denotamos por \mathbf{Di}_n , \mathbf{TSup}_n , \mathbf{TInf}_n y \mathbf{Ant}_n a las matrices de transición correspondientes a una matriz diagonal, triangular superior, triangular inferior y antisimétrica, respectivamente, entonces se verifica:

1. Las columnas de \mathbf{Di}_n vienen dadas por $e_{(i-1)n+i}$, $i=1, \dots, n$.
2. Las columnas de \mathbf{TSup}_n vienen dadas por $e_{(j-1)n+i}$, $j=1, \dots, n$, $i=1, \dots, j$.
3. Las columnas de \mathbf{TInf}_n vienen dadas por $e_{(j-1)n+i}$, $j=1, \dots, n$, $i=j, \dots, n$.
4. Las columnas de \mathbf{Ant}_n vienen dadas por $e_{(i-1)n+j} - e_{(j-1)n+i}(1 - \delta_{ij})$, $j=1, \dots, n-1$, $i=j+1, \dots, n$.

donde los vectores e_k son vectores básicos de \mathbb{R}^{n^2} .

Las matrices \mathbf{Di}_n , \mathbf{TSup}_n y \mathbf{TInf}_n también tienen rango por columnas completo. Además, como el producto de ellas por su traspuesta es la matriz identidad, sus g-inversas coinciden con sus traspuestas.

Los siguientes resultados serán útiles más adelante:

1. $D_n^t Vec(A) = Vech(A + A^t - diag(A))$.
2. $|D_n^-(A^{-1} \otimes A^{-1})(D_n^-)^t| = 2^{-\frac{n(n-1)}{2}} |A|^{n+1}$.

1.6.1. Ejercicios

EJERCICIO 1.8 Si A es no singular, $[(D_n)_g(A \otimes A)D_n]^{-1} = (D_n)_g(A \otimes A)^{-1}D_n$.

EJERCICIO 1.9 Si A es no singular, $[D'_n(A \otimes A)D_n]^{-1} = (D_n)_g(A \otimes A)^{-1}(D_n)_g^t$.

2. Derivación matricial.

2.1. Introducción

En este apartado se va a tratar la derivación respecto a vectores y matrices, que es muy necesaria en estadística multivariante sobre todo desde el punto de vista de la optimización. Así, permite calcular datos tales como estimador máximo verosímil, matrices de información de Fisher, o cotas tipo Crámer-Rao. Más importancia tiene todavía este tema si tenemos en cuenta que, si ya la derivación vectorial puede dar lugar a cálculos costosos, en el caso de la matricial se pueden generar un enorme número de derivadas que pueden resultar difícil de ordenar con sentido en una matriz.

Muchas son las aproximaciones que se han dado y en este caso lo que se hará es seguir una línea en la que las matrices se conviertan en vectores, mucho más fáciles de manejar. *****

2.2. Diferencial primera y jacobianos

2.2.1. Diferencial de una función vectorial

Definición 2.1. Consideramos una función vectorial $f : S \rightarrow \mathbb{R}^m$ con $S \subset \mathbb{R}^n$. Sea \mathbf{c} un punto interior de S y consideremos una bola cerrada con centro en \mathbf{c} y radio r , $B(\mathbf{c}, r)$. Sea \mathbf{u} un punto de \mathbb{R}^n tal que $\|\mathbf{u}\| \leq r$ es decir, $\mathbf{c} + \mathbf{u} \in B(\mathbf{c}, r)$.

Diremos que f es **diferenciable** en \mathbf{c} si existe una matriz real de orden $m \times n$ que depende de \mathbf{c} y no de \mathbf{u} y que cumple que $f(\mathbf{c} + \mathbf{u}) - f(\mathbf{c}) = A(\mathbf{c})\mathbf{u} + r_c(\mathbf{u})$ con $\lim_{\mathbf{u} \rightarrow 0} \frac{r_c(\mathbf{u})}{\|\mathbf{u}\|} = 0$. Además, se define la **primera diferencial** de f en el punto \mathbf{c} con incremento \mathbf{u} como: $df(\mathbf{c}; \mathbf{u}) = A(\mathbf{c})\mathbf{u}$.

Definición 2.2. Sea $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ y sea $f_i : S \rightarrow \mathbb{R}$ su i -ésima componente. Sea \mathbf{c} un punto interior de S y \mathbf{e}_j el j -ésimo vector de la base canónica de \mathbb{R}^n . Se define la **derivada parcial** de f respecto a la j -ésima coordenada como:

$$D_j f_i(\mathbf{c}) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f_i(\mathbf{c} + t\mathbf{e}_j) - f_i(\mathbf{c})}{t}, t \in \mathbb{R}$$

Teorema 2.1. (Primer teorema de identificación para funciones vectoriales)

Sea $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ diferenciable en un punto \mathbf{c} interior de S y $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$. Entonces $df(\mathbf{c}; \mathbf{u}) = (Df(\mathbf{c}))\mathbf{u}$ donde $Df(\mathbf{c})$ es una matriz $m \times n$ cuyos elementos $D_j f_i(\mathbf{c})$ son las derivadas parciales de \mathbf{f} evaluadas en \mathbf{c} y que recibe el nombre de matriz jacobiana. Recíprocamente, si $A(\mathbf{c})$ es una matriz que verifica que $df(\mathbf{c}; \mathbf{u}) = A(\mathbf{c})\mathbf{u} \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$, entonces $A(\mathbf{c}) = Df(\mathbf{c})$.

El siguiente teorema nos proporciona la regla de la cadena para funciones vectoriales.

Teorema 2.2. Sea $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ diferenciable en un punto \mathbf{c} interior de S . Sea T un subconjunto de \mathbb{R}^m tal que $f(x) \in T \forall x \in S$ y supongamos que $g : T \rightarrow \mathbb{R}^p$ es diferenciable en un punto \mathbf{b} ($\mathbf{b} = f(\mathbf{c})$) de T . Entonces la función compuesta $h : S \rightarrow \mathbb{R}^p$ definida por $h(x) = g(f(x))$, es diferenciable en \mathbf{c} y $Dh(\mathbf{c}) = Dg(\mathbf{b})Df(\mathbf{c})$.

Teorema 2.3. (Regla de invarianza de Cauchy)

En el ambiente del teorema anterior, si \mathbf{f} es diferenciable en \mathbf{c} y \mathbf{g} lo es en $\mathbf{b} = \mathbf{f}(\mathbf{c})$, entonces la

diferenciable $h = g \circ f$ es $dh(c; u) = dg(b; df(c; u))$.

2.2.2. Diferencial de una función matricial

Basta con extrapolar lo dicho en el caso vectorial usando la operación Vec .

Consideramos una función matricial $F : S \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ donde $S \subseteq \mathbb{M}_{n \times q}$. Sea C un punto interior de S , $\mathbb{B}(C; r) \subseteq S$ una bola abierta y U un punto de $\mathbb{M}_{n \times q}$ con $\|U\| < r$, por lo que $C + U$ pertenece a $\mathbb{B}(C; r)$, donde hemos considerado la norma matricial $\|U\| = (\text{tr}[U^t U])^{\frac{1}{2}}$.

Definición 2.3. En las condiciones anteriores, se dice que F es diferenciable en C si existe una matriz A de dimensiones $mp \times nq$, que dependa de C y no de U y tal que

$$\text{Vec}(F(C + U)) - \text{Vec}(F(C)) = A(C)\text{Vec}(U) + \text{Vec}(R_C(U)) \quad \text{donde} \quad \lim_{U \rightarrow 0} \frac{R_C(U)}{\|U\|} = 0$$

Se define la **matriz diferencial** de F en C con incremento U como la matriz $dF(C; U)$ de dimensiones $m \times p$ que verifique $\text{Vec}(dF(C; U)) = A(C)\text{Vec}(U)$ y a la matriz $A(C)$ se le llama la **primera derivada** de F en C .

Todas las propiedades de cálculo para las funciones matriciales se deducen de las correspondientes propiedades de las funciones vectoriales.

Tenemos los siguientes resultados análogos a los del caso vectorial:

Teorema 2.4. (Primer teorema de identificación para funciones matriciales) Sea $F : S \subseteq \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ diferenciable en un punto interior C de S . Entonces se verifica $\text{Vec}(dF(C; U)) = A(C)\text{Vec}(U) \Leftrightarrow dF(C) = A(C)$.

Teorema 2.5. (Regla de la cadena para funciones matriciales) Sea $F : S \subseteq \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ diferenciable en un punto interior C de S . Sea T un subconjunto de \mathbb{R}^n tal que $F(X) \in T, \forall X \in S$ y supongamos que $G : T \rightarrow \mathbb{M}_{r \times s}$ es diferenciable en un punto B ($B = F(C)$) de T . Entonces la función compuesta $H : S \rightarrow \mathbb{M}_{r \times s}$ definida por $H(X) = G(F(X))$ es diferenciable en C y $DH(C) = DG(B)DF(C)$.

Teorema 2.6. (Regla de invarianza de Cauchy para funciones matriciales) En las condiciones del teorema anterior, $dH(C; U) = dG(B; dF(C; U)), \forall U \in \mathbb{M}_{n \times q}$.

En el siguiente teorema se recogen algunas propiedades de las diferenciales matriciales y de las matrices jacobianas:

Teorema 2.7. Sean F y G dos funciones matriciales, A una matriz constante y $\alpha \in \mathbb{R}$.

1. Si $F(X) = A_{m \times p}$, entonces F es diferenciable. Además $dF(X) = 0$ y $DF(X) = 0$.
2. Si $G_{m \times p}$ es diferenciable, α un escalar distinto de cero y $F(X) = \alpha G(X)$, entonces F es diferenciable. Además, $dF(X) = \alpha dG(X)$ y $DF(X) = \alpha DG(X)$.
3. Si $G_{m \times p}$ es diferenciable y $F(x) = \text{Vec}(G(X))$, entonces F es diferenciable. Además se verifica $dF(X) = \text{Vec}(dG(X))$ y $DF(X) = DG(X)$.
4. Si $G_{m \times p}$ es diferenciable y $F(X) = G^t(X)$, entonces F es diferenciable. Además se verifica $dF(X) = (dG(X))^t$ y $DF(X) = K_{mp} DG(X)$.

5. Si $G_{p \times p}$ es diferenciable y $F(X) = \text{tr}[G(X)]$, entonces F es diferenciable. Además se verifica $dF(X) = \text{tr}[dG(X)]$ y $DF(X) = \text{Vec}'(I_p)DG(X)$.
6. Si $G_{m \times p}$ y $H_{m \times p}$ son diferenciables y $F(X) = (G \pm H)(X)$, entonces F es diferenciable. Además $dF(X) = dG(X) \pm dH(X)$ y $DF(X) = DG(X) \pm DH(X)$.
7. Si $G_{m \times r}$ y $H_{r \times p}$ son diferenciables y $F(X) = (GH)(X)$, entonces F es diferenciable. Además $dF(X) = dG(X)H(X) + G(X)dH(X)$ y $DF(X) = (H^t(X) \otimes I_m)DG(X) + (I_p \otimes G(X))DH(X)$.
8. Si $G_{m \times m}$ es diferenciable y $F(X) = (G(X))^{-1}$, entonces para los puntos en los que F exista se verifica que dicha función es diferenciable. Además $dF(X) = -F(X)dG(X)F(X)$ y $DF(X) = -(F^t(X) \otimes F(X))DG(X)$.
9. Dados $G_{m \times p}$ y Φ una función real, ambas diferenciables y $F(X) = \Phi(X)G(X)$, entonces $dF(X) = \Phi(X)dG(X) + G(X)d\Phi(X)$ y $DF(X) = \text{Vec}(G(X))D\Phi(X) + \Phi(X)DG(X)$.
10. Dados $G_{m \times p}$ y $H_{r \times s}$, diferenciables, si $F(X) = (G \otimes H)(X)$ entonces F es diferenciable. Además $dF(X) = [dG(X) \otimes H(X)] + [G(X) \otimes dH(X)]$ y

$$DF(X) = [I_p \otimes (K_{sm} \otimes I_r)(I_m \otimes \text{Vec}(H(X)))]DG(X) + [(I_r \otimes K_{sm})(\text{Vec}(G(X)) \otimes I_s) \otimes I_r]DH(X)$$

Así, en el caso de funciones vectoriales, se cumple que $df(X) = A(X)dX$ y por tanto $Df(X) = A(X)$, mientras que en el caso de funciones matriciales, $d\text{Vec}(F(X)) = A(X)d\text{Vec}(X)$, entonces $DF(X) = A(X)$. Así, para calcular matrices jacobianas para este tipo de funciones:

- Calculamos $dF(X)$.
- Vectorizar la expresión resultante y obtener $d\text{Vec}(F(X)) = A(X)d\text{Vec}(X)$.
- Concluir con el cálculo de $DF(X)$ que es igual a $A(X)$.

Y del colorario largo que copiamos? *****

Corolario 2.8. Sean A_{txm} , B_{pxr} y C_{sxu} matrices constantes y sean $G_{m \times p}$ y $H_{r \times s}$ dos funciones matriciales diferenciables. Si $F(X) = AG(X)BH(X)C$, entonces

$$dF(X) = AdG(X)BH(X)C + AG(X)BdH(X)C$$

$$\text{y } DF(X) = (C^t H^t(X) B^t \otimes A)DG(X) + (C^t \otimes AG(X)B)DH(X)$$

MÁS PROPIEDADES!

2.2.3. Ejercicios

EJERCICIO 2.1 Sea $h : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $h(\beta) = (y - X\beta)^t(y - X\beta)$ donde $y \in \mathbb{R}^n$ y $X \in \mathbb{M}_{n \times k}$. Haciendo uso de la regla de invarianza de Cauchy demostrar que

$$dh(c; u) = dg(y - Xc; df(c; u)) = dg(y - Xc; -Xu) = -2(y - Xc)^t Xu$$

y con ello $Dh(c) = -2(y - Xc)^t X$.

Solución: Para comenzar, tengamos en cuenta que h es composición de $f : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$ y $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, con $f(c) = (y - Xc)$ con X una matriz $n \times k$ y con $y \in \mathbb{R}^n$; y $g(X) = X^t X$, de modo que $h(x) = g(f(x)) \forall x \in \mathbb{R}^k$. Así, es claro que $dh(c; u) = dg(y - Xc; df(c; u))$. ***** Parece evidente pero no se que escribir xd*****

EJERCICIO 2.2 Sea $F(X) = AG(X)B$, donde $A_{m \times r}$ y $B_{s \times p}$ son matrices constantes y $G(X)_{r \times s}$ es una función diferenciable. Calcular $DF(C)$ a partir de la definición de diferencial matricial.

Solución:

EJERCICIO 2.3 Si $X_{n \times n}$ es una matriz simétrica y $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ es diferenciable, demostrar que $dVec(F(X)) = D_n DF(X) dVech(X)$, mientras que $dVec(F(X)) = N_n DF(X) dVec(X)$ donde $N_n = \frac{1}{2}[I_{n^2} + K_{nn}]$.

Solución:

2.3. Matrices jacobianas y derivadas matriciales

No existe una única definición para la derivada de una función de argumento matricial y esto supone un problema a la hora de usar el cálculo diferencial matricial.

Veamos las definiciones clásicas para funciones reales de argumento vectorial y vectoriales, tanto de argumento real como vectorial.

Definición 2.4. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Se define la derivada de f respecto de $x \in \mathbb{R}^n$ como el vector $1 \times n$ dado por $\frac{\partial f(x)}{\partial x^t} = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)$.

Definición 2.5. Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$. Se define la derivada de f respecto de $x \in \mathbb{R}$ como el vector $m \times 1$ dado por $\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \left(\frac{\partial f_1(x)}{\partial x}, \dots, \frac{\partial f_m(x)}{\partial x} \right)^t$.

Definición 2.6. Sea $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. Se define la derivada de f respecto de $x \in \mathbb{R}^n$ como la matriz $m \times n$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x^t} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x^t} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial x^t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Definición 2.7. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{R}$. Se define la derivada de F respecto de $X \in \mathbb{M}_{n \times q}$ como la matriz $n \times q$

$$\frac{\partial F(X)}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F(X)}{\partial x_{11}} & \dots & \dots & \frac{\partial F(X)}{\partial x_{1q}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F(X)}{\partial x_{n1}} & \dots & \dots & \frac{\partial F(X)}{\partial x_{nq}} \end{pmatrix}$$

Definición 2.8. Sea $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Se define la derivada de F respecto de $x \in \mathbb{R}$ como la matriz $m \times p$

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{11}(x)}{\partial x} & \dots & \dots & \frac{\partial F_{1p}(x)}{\partial x} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{m1}(x)}{\partial x} & \dots & \dots & \frac{\partial F_{mp}(x)}{\partial x} \end{pmatrix}$$

*****CREO que las importantes son solo las dos ultimas, quizas haya que borrar algunas de estas aunque eso se decidirá en un futuro xd *****

Existen así muchas formas de definir la derivada de una función de argumento matricial, aunque ahora vamos a mostrar dos que generalizan a las demás:

Definición 2.9. (Definición de derivada matricial según Mac Rae)

Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Se define la derivada de F respecto de $X \in \mathbb{M}_{n \times q}$ como la matriz $nm \times pq$

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{11}(x)}{\partial x} & \dots & \dots & \frac{\partial F_{1p}(x)}{\partial x} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{m1}(x)}{\partial x} & \dots & \dots & \frac{\partial F_{mp}(x)}{\partial x} \end{pmatrix}$$

Definición 2.10. (Definición de derivada matricial según Dwyer)

Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Se define la derivada de F respecto de $X \in \mathbb{M}_{n \times q}$ como la matriz $nm \times pq$

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F(x)}{\partial x_{11}} & \dots & \dots & \frac{\partial F(x)}{\partial x_{1q}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F(x)}{\partial x_{n1}} & \dots & \dots & \frac{\partial F(x)}{\partial x_{nq}} \end{pmatrix}$$

Teorema 2.9. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Entonces se verifica que $K_{nm} \frac{\partial F(x)}{\partial x} K_{pq} = \frac{\partial F(x)}{\partial x}$

Definición 2.11. (Definición de derivada matricial según Magnus y Neudecker)

Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Se define la derivada de F respecto de $X \in \mathbb{M}_{n \times q}$ como la matriz $mp \times nq$ dada por $DF(X) = \frac{\partial \text{Vec}(F(x))}{\partial \text{Vec}^t(x)}$

*****FALTAN NOTAS POR LO GENERAL *****

Podemos ahora mostrar algunas relaciones en el cálculo de matrices jacobianas a partir de derivadas matriciales y viceversa:

Teorema 2.10. Para las siguientes funciones matriciales y de variable matricial se tiene:

1. Dada $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$, $DF(X) = \frac{\partial \text{Vec}(F(x))}{\partial \text{Vec}^t(x)} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \text{Vec}(\frac{\partial F(x)}{\partial x_{ij}}) \text{Vec}^t(J_{ij})$.
2. Dada $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$, $DF(x) = \frac{\partial \text{Vec}(F(x))}{\partial x} = \text{Vec}(\frac{\partial F(x)}{\partial x})$
3. Dada $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{R}$, $DF(X) = \frac{\partial F(X)}{\partial \text{Vec}^t(X)} = \text{Vec}(\frac{\partial F(X)}{\partial X})$
4. Dada $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{R}^m$, $DF(X) = \frac{\partial F(X)}{\partial \text{Vec}^t(X)} = \sum_{l=1}^m u_l \text{Vec}^t(\frac{\partial F_l(X)}{\partial X}) = \sum_{l=1}^m u_l DF_l(X)$ con $\{u_j : j = 1, \dots, m\}$ base canónica de \mathbb{R}^m
5. Sea $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$, entonces

$$DF(x) = \frac{\partial \text{Vec}(F(X))}{\partial x^t} = \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^p \text{Vec}(E_{st}) \frac{\partial F_{st}(x)}{\partial x^t} = \sum_{s=1}^m \sum_{t=1}^p \text{Vec}(E_{st}) DF_{st}(x)$$

Veamos ahora las principales reglas de derivación según Mac Rae.

Teorema 2.11. (Propiedades de la derivada matricial según Mac Rae):

1. Sean $F, G : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Entonces $\frac{\partial (F+G)(X)}{\partial X} = \frac{\partial F(X)}{\partial X} + \frac{\partial G(X)}{\partial X}$.
2. Sean $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$, $G : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{p \times r}$. Entonces:

$$\frac{\partial (FG)(X)}{\partial X} = \frac{\partial F(X)}{\partial X} (G(X) \otimes I_q) + (F(X) \otimes I_n) \frac{\partial G(X)}{\partial X}$$

3. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times m}$, y supongamos que $F(X)$ no es singular $\forall X \in \mathbb{M}_{n \times q}$. Entonces:

$$\frac{\partial(F(X))^{-1}}{\partial X} = -[(F(X))^{-1} \otimes I_n] \frac{\partial F(X)}{\partial X} [(F(X))^{-1} \otimes I_q]$$

4. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ y $\Phi : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{R}$. Entonces:

$$\frac{\partial(\Phi F)(X)}{\partial X} = F(X) \otimes \frac{\partial \Phi(X)}{\partial X} + \Phi(X) \frac{\partial F(X)}{\partial X}$$

5. Sea $A_{m \times p}$, constante y $G : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{r \times s}$. Entonces $\frac{\partial(A \otimes G(X))}{\partial X} = A \otimes \frac{\partial G(X)}{\partial X}$

6. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ y $G : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{r \times s}$. Entonces:

$$\frac{\partial(F(X) \otimes G(X))}{\partial X} = (K_{mr} \otimes I_n)(G(X) \otimes \frac{\partial F(X)}{\partial X})(K_{sp} \otimes I_q) + F(X) \frac{\partial G(X)}{\partial X}$$

7. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ y $\Phi : \mathbb{M}_{m \times p} \rightarrow \mathbb{R}$. Entonces notando $Y = F(X)$, se verifica:

$$\frac{\partial \Phi(F(X))}{\partial X} = \frac{\partial \Phi(X)}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial X}$$

8. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$ y $G : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{ml \times pr}$. Entonces:

$$\frac{\partial(F(X) * G(X))}{\partial X} = F(X) * \frac{\partial G(X)}{\partial X} + G(X)(I_m \otimes \text{Vec}(I_l) \otimes I_n) \frac{\partial F(X)}{\partial X} (I_p \otimes \text{Vec}^t(I_r) \otimes I_q)$$

9. Sean $F, G : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Entonces $\frac{\partial(F(X) * G(X))}{\partial X} = F(X) * \frac{\partial G(X)}{\partial X} + G(X) * \frac{\partial F(X)}{\partial X}$

Teorema 2.12. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{m \times p}$. Entonces

1. $\frac{\partial F(x)}{\partial x^t} = \left(\frac{\partial F(x)}{\partial x} \right)^t$
2. $\frac{\partial (F(x))^t}{\partial x^t} = \left(\frac{\partial F(x)}{\partial x} \right)^t$

Corolario 2.13. Sean A_{txm} , B_{pxr} y C_{sxu} matrices constantes y sean $G_{m \times p}$ y $H_{r \times s}$ dos funciones de argumento matricial $X_{n \times q}$. Si $F(X) = AG(X)BH(X)C$, entonces

$$\frac{\partial F(\partial x)}{x} = (A \otimes I_n) \frac{\partial G(x)}{\partial x} (BH(\partial x)C \otimes I_q) + (AG(x)B \otimes I_n) \frac{\partial H(x)}{\partial x} (C \otimes I_q)$$

2.3.1. Ejercicios

EJERCICIO 2.4 A partir de las relaciones existentes entre la derivada matricial y la matriz jacobiana, verificar las siguientes expresiones:

- a) Sea $X_{n \times n}$ y $F(X) = \text{tr}[X]$. Entonces $DF(X) = \text{Vec}^t(I_n)$.
- b) Sea ahora $X_{n \times q}$ y $F(X) = X$. Entonces $DF(X) = I_q \otimes I_n = I_{nq}$.

EJERCICIO 2.5 Sea $X_{n \times q}$. Demostrar las siguientes igualdades:

a) $\frac{\partial X^t}{\partial X} = K_{qn}$.

b) $\frac{\partial X}{\partial X^t} = K_{nq}$.

c) $\frac{\partial X^t}{\partial X^t} = \text{Vec}(I_q)\text{Vec}^t(I_n)$.

EJERCICIO 2.6 Demostrar que si $X_{n \times n}$ es no singular entonces $\frac{\partial X^{-1}}{\partial X} = -\text{Vec}((X^{-1})^t)\text{Vec}^t(X^{-1})$.

Solución:

2.3.2. Derivadas matriciales de funciones escalares de un vector

Las principales funciones que suelen aparecer en la práctica son:

- Formas lineales: $\phi(x) = a^t x$
- Formas cuadráticas: $\phi(x) = x^t A x$

De las que se pueden sacar una serie de **propiedades**:

- $d\phi(x) = a^t dx \rightarrow D\phi(x) = \frac{\partial \phi(x)}{\partial x^t} = a^t$
- $d\phi(x) = x^t (A + A^t) dx \rightarrow D\phi(x) = \frac{\partial \phi(x)}{\partial x^t} = x^t (A + A^t)$

Y otras tomando f y g como dos funciones vectoriales del vector x :

- Si $\phi(x) = a^t f(x) \rightarrow D\phi(x) = a^t Df(x)$
- Si $\phi(x) = f(x)^t g(x) \rightarrow D\phi(x) = g(x)^t Df(x) + f(x)^t Dg(x)$
- Si $\phi(x) = x^t A f(x) \rightarrow D\phi(x) = f(x)^t A^t + x^t A Df(x)$
- Si $\phi(x) = f(x)^t A f(x) \rightarrow D\phi(x) = f(x)^t (A + A^t) Df(x)$
- Si $\phi(x) = f(x)^t A g(x) \rightarrow D\phi(x) = g(x)^t A^t Df(x) + f(x)^t A Dg(x)$
- Si $x = (x_1^t, x_2^t)^t$ y Si $\phi(x) = x_1^t A x_2 \rightarrow D\phi(x) = x^t \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^t & 0 \end{pmatrix}$

2.3.3. Derivadas matriciales de funciones escalares de matrices

*****PUEDE QUE FALTE LITERATURA EN MUCHAS PARTES XD*****

Derivadas matriciales asociadas a trazas

Teorema 2.14. Sea $F : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{p \times p}$ y $\phi(x) = \text{tr}[F(x)]$. Entonces $d\phi(x) = \text{tr}[dF(x)]$, $D\phi(x) = \text{Vec}^t(I_p)DF(x)$ y

$$\frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = I_p * \frac{\partial F(x)}{\partial x} = \sum_{l=1}^p \frac{\partial F u_l(x)}{\partial x}$$

Teorema 2.15. Sean $F_{p \times m}$, $G_{m \times p}$ dos funciones matriciales de $X_{n \times q}$. Entonces se verifica:

- $dtr[FG(x)] = tr[F(x)dG(x)] + tr[F(x)dG(x)]$
- $Dtr[(FG)(x)] = Vec^t(G^t(x))DF(x) + Vec^t(F^t(x))DG(x)$
- $\frac{\partial tr[(FG)(x)]}{\partial x} = G^t(x) * \frac{\partial F(x)}{\partial x} + F^t(x) * \frac{\partial G(x)}{\partial x}$

AQUÍ HAY OTRO COROLARIO CON MUCHAS PROPIEDADES

Derivadas matriciales asociadas a determinantes

El determinante es una función muy empleada en Estadística ya que forma parte de la verosimilitud asociada a matrices aleatorias.

Teorema 2.16. Sea una función matricial $F : S \rightarrow \mathbb{R}^{p \times p}$, $p \geq 2$, donde S es un abierto de $\mathbb{R}^{n \times p}$. Si la función F es diferenciable en S , entonces lo es también la función $|F| : S \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $|F|(X) = |F(X)|$, verificándose las relaciones $d|F|(X) = tr[F^*(X)dF(X)]$, $D|F|(X) = Vec^t(F^{*'}(X))DF(X)$ y

$$\frac{\partial |F|(X)}{\partial X} = F^{*'}(X) * \frac{\partial F(X)}{\partial X} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \left(F^{*'}(X) * \frac{\partial F(X)}{\partial x_{ij}} \right) J_{ij} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q tr \left[F^*(X) \frac{\partial F(X)}{\partial x_{ij}} \right] J_{ij}$$

donde $F^*(X)$ es la matriz adjunta de $F(X)$. En particular, en los puntos donde $rg(F(X))=p$, se verifica $d|F|(X) = |F(X)|tr[F^{-1}(X)dF(X)]$, $D|F|(X) = |F(X)|Vec^t(F^{-1'}(X))DF(X)$ y

$$\begin{aligned} \frac{\partial |F|(X)}{\partial X} &= |F(X)|F^{-1'}(X) * \frac{\partial F(X)}{\partial X} = |F(X)| \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q \left(F^{-1'}(X) * \frac{\partial F(X)}{\partial x_{ij}} \right) J_{ij} \\ &= |F(X)| \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q tr \left[F^{-1}(X) \frac{\partial F(X)}{\partial x_{ij}} \right] J_{ij} \end{aligned}$$

Por el teorema anterior se tiene:

Teorema 2.17. Sean $F_1 : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{p \times r}$ y $F_2 : \mathbb{M}_{n \times q} \rightarrow \mathbb{M}_{r \times p}$. Entonces en los puntos X en los que la función producto $F_1 F_2$ tenga determinante distinto de cero se verifica

$$d|F_1 F_2| = |F_1 F_2|tr[F_2(F_1 F_2)^{-1}dF_1 + (F_1 F_2)^{-1}F_1 dF_2]$$

$$D|F_1 F_2| = |F_1 F_2| \left[Vec^t \left((F_1 F_2)^{-1'} F_2^t \right) DF_1 + Vec^t \left(F_1^t (F_1 F_2)^{-1'} \right) DF_2 \right]$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial |F_1 F_2|}{\partial X} &= |F_1 F_2|(F_1 F_2)^{-1'} * \left(\frac{\partial F_1}{\partial X} [F_2 \otimes I_q] + [F_1 \otimes I_n] \frac{\partial F_2}{\partial X} \right) \\ &= |F_1 F_2| \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^q tr \left[F_2(F_1 F_2)^{-1} \frac{\partial F_1}{\partial x_{ij}} + (F_1 F_2)^{-1} F_1 \frac{\partial F_2}{\partial x_{ij}} \right] J_{ij} \end{aligned}$$

*****Corolarios con mil propiedades*****

2.3.4. Jacobianos de funciones vectoriales

Es habitual encontrarnos en Estadística con que un vector aleatorio $Y = (y_1, \dots, y_m)^t$ es una función lineal de otra colección de variables y queremos poder expresar la derivada de este vector respecto a las otras variables. Pueden darse dos casos:

- Consideramos un conjunto de variables y_1, \dots, y_m y supongamos que estas variables son combinaciones lineales desconocidas de otro conjunto de variables x_1, \dots, x_n , por lo que podemos expresar $y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j$ $i = 1, \dots, m$ o bien $y = f(x) = Ax$. Evidentemente, como $df(x) = Adx$ se verifica $Df(x) = A$.
- Supongamos ahora que las variables independientes sean los elementos de una matriz de variables x_{ij} en la forma $y = f(X) = Xa$. En este caso se tiene

$$df(X) = (dX)a = \text{Vec}((dX)a) = [a^t \otimes I_n]d\text{Vec}(X)$$

por lo que se desprende en este caso que $Df(X) = a^t \otimes I_n$.

2.4. Diferencial segunda y hessianos

2.4.1. Matriz hessiana para una función escalar de un vector

Definición 2.12. Sea $\Phi : S \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Consideremos c un punto interior de S donde las n^2 parciales de segundo orden $D_{kj}^2 \Phi(c)$ existan. Entonces se define la **matriz hessiana** $H\Phi(c)$ como la matriz cuadrada de orden n siguiente

$$H\Phi(c) = \begin{pmatrix} D_{11}^2 \Phi(c) & \cdots & D_{1n}^2 \Phi(c) \\ \vdots & & \vdots \\ D_{n1}^2 \Phi(c) & \cdots & D_{nn}^2 \Phi(c) \end{pmatrix}$$

2.4.2. Matriz hessiana para una función vectorial de un vector

Definición 2.13. Sea $f : S \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. Consideremos c un punto interior de S donde las mn^2 parciales de segundo orden $D_{kj}^2 f_i(c)$ existan. Entonces se define la **matriz hessiana** $Hf(c)$ como la matriz de orden $mn \times n$ siguiente

$$Hf(c) = \begin{pmatrix} Hf_1(c) \\ \vdots \\ Hf_m(c) \end{pmatrix}$$

2.4.3. Diferencial segunda de una función escalar

Definición 2.14. Consideremos una función real $\Phi : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que sea diferenciable en un punto interior c de S . Supongamos además que existe una matriz B que dependa de c y no de u y tal que verifique la relación

$$\Phi(c+u) = \Phi(c) + [D\Phi(c)]u + \frac{1}{2}u'Bu + r_c(u), \lim_{u \rightarrow 0} \frac{r_c(u)}{\|u\|^2} = 0$$

En tal caso se dice que la función Φ es dos veces diferenciable en c .

Ahora, siendo Φ una función dos veces diferenciable en un punto c interior del conjunto S , si notamos $d\Phi(x; u) = \Psi(x)$, entonces la diferencial segunda de Φ sería la diferencial de Ψ . Entonces

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^n u_j D_j \Phi(x)$$

cuyas derivadas parciales son

$$D_i \Psi(x) = \sum_{j=1}^n u_j D_{ij}^2 \Phi(x)$$

Por tanto, la primera diferencial de Φ en u sería

$$d\Psi(x; u) = \sum_{i=1}^n u_i D_i \Psi(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i u_j D_{ij}^2 \Phi(x)$$

por tanto, la diferencial segunda de Φ no es más que

$$d^2\Phi(x; u) = u' H\Phi(x) u$$

que es una forma cuadrática.

Por tanto, hemos deducido un resultado interesante sobre la identificación de diferenciales segundas que recogemos en el siguiente teorema.

Teorema 2.18 (Segundo teorema de identificación). *Sea $\Phi : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que sea dos veces diferenciable en un punto interior c de S . Sea u un vector cualquiera de \mathbb{R}^n . Entonces*

$$d^2\Phi(c; u) = u' H\Phi(c) u$$

Además, si existe una matriz B que dependa de c y no de u y tal que

$$d^2\Phi(c; u) = u' B(c) u$$

entonces,

$$H\Phi(c) = \frac{1}{2}[B(c) + B(c)^t]$$

2.4.4. Diferencial segunda de una función vectorial

Definición 2.15. *Consideremos la función $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Sea c un punto interior de S . Si f es diferenciable en alguna bola abierta $\mathbb{B}(c)$ y cada una de las derivadas parciales $D_i f_i$ es diferenciable en c , diremos que f es dos veces diferenciable en c .*

Como es natural, la diferencial segunda no puede ser otra que la diferencial de la diferencial primera.

Definición 2.16. Sea $F : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ y dos veces diferenciable en un punto interior c de S . Sea $\mathbb{B}(c)$ una bola abierta de S tal que f es diferenciable en cada punto de $\mathbb{B}(c)$ y sea la función $g(x) = df(x; u)$.

Entonces la diferencial de g en c con incremento u se llama la diferencial segunda de f en c con incremento u y la notaremos $d^2 f(c; u)$.

Desarrollando la expresión, tenemos

$$d^2 f(c; u) = \begin{pmatrix} d^2 f_1(c; u) \\ \vdots \\ d^2 f_m(c; u) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u' H f_1(c) u \\ \vdots \\ u' H f_m(c) u \end{pmatrix} = [I_m \otimes u'] \begin{pmatrix} H f_1(c) \\ \vdots \\ H f_m(c) \end{pmatrix} u$$

por tanto,

$$d^2 f(c; u) = [I_m \otimes u'] H f(c) u$$

De forma análoga al caso escalar, buscamos un teorema que nos de una identificación de la matriz hessiana con una función vectorial. Para introducirlo, necesitamos la siguiente definición

Definición 2.17. Sean A_1, \dots, A_m matrices cuadradas de orden n y sea la matriz $A = [A_1, \dots, A_m]$. Definimos la matriz de orden $mn \times n$ siguiente

$$A_v = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_m \end{pmatrix}$$

En particular, si B_1, \dots, B_m son matrices cuadradas y tenemos la matriz $B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_m \end{pmatrix}$ entonces

$B' = [B_1^t, \dots, B_m^t]$ y con ello tenemos que

$$B'_v = \begin{pmatrix} B'_1 \\ B'_2 \\ \vdots \\ B'_m \end{pmatrix}$$

Estamos ahora en condición de enunciar el teorema buscado.

Teorema 2.19 (Segundo teorema de identificación para funciones vectoriales). *Sea $f : S \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ y dos veces diferenciable en un punto c interior de S . Sea $u \in \mathbb{R}^n$. Entonces se tiene*

$$d^2 f(c; u) = [I_m \otimes u'] Hf(c) u$$

Además, si existe una matriz $B(c)$ tal que verifique

$$d^2 f(c; u) = [I_m \otimes u'] B(c) u, \forall u \in \mathbb{R}^n$$

entonces

$$Hf(c) = \frac{1}{2} [B(c) + B(c)^t_v]$$

2.4.5. Diferencial segunda de una función matricial

Definiremos la diferencial segunda de una función matricial trasladando la situación matricial a la vectorial haciendo uso de la ya estudiada operación Vec .

Dada una función $F : S \subset \mathbb{R}^{n \times q} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times p}$ se tiene asociada una función vectorial $f : \text{Vec}(S) \rightarrow \mathbb{R}^{mp}$ definida como $f(\text{Vec}(X)) = \text{Vec}(F(X))$. Por tanto, se tendría que $DF(C) = Df(\text{Vec}(C))$, por tanto, definimos la matriz hessiana asociada a F como $HF(C) = Hf(\text{Vec}(C))$.

Esta matriz se forma con los hessianos de las mp funciones de las que está formada F , así

$$HF(C) = \begin{pmatrix} HF_{11}(C) \\ \vdots \\ HF_{m1}(C) \\ \vdots \\ HF_{1p}(C) \\ \vdots \\ HF_{mp}(C) \end{pmatrix}$$

Claramente, las matrices utilizadas $HF_{st}(C)$ son de orden $nq \times nq$ y el ij -ésimo elemento de estas es la segunda derivada parcial de $F_{st}(C)$ respecto de los i -ésimo y j -ésimo elementos de $\text{Vec}(X)$ evaluados en $X = C$.

Al igual que en el resto de secciones, notando $G(X) = df(X; U)$, entonces

$$d^2F(C; U) = dG(C; U)$$

.

Utilizando la relación de la diferencial de F y f , obtenemos la relación de las diferenciales segundas

$$Vec[d^2F(C; U)] = d^2f[Vec(C); Vec(U)]$$

Por último, al igual que hemos realizado en las secciones anteriores, vemos un teorema homólogo del teorema de identificación en el caso matricial

Teorema 2.20 (Segundo teorema de identificación para funciones matriciales). *Sea $F : S \subset \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times p}$. Supongamos que la función F es dos veces diferenciable en un punto C interior de S . Entonces se verifica*

$$Vec[d^2F(C; U)] = [I_{mp} \otimes Vec^t(U)]B(C)Vec(U), \forall U \in \mathbb{R}^{n \times 1} \iff HF(C) = \frac{1}{2}[B(C) + B(C)_v^t]$$