MAT02035 - Modelos para dados correlacionados

Revisão de vetores, matrizes, valores esperados e variâncias

Rodrigo Citton P. dos Reis
citton.padilha@ufrgs.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Matemática e Estatística
Departamento de Estatística

Porto Alegre, 2021

Vetores e matrizes

Introdução

- Vetores e matrizes nos permitem realizar operações matemáticas comuns (por exemplo, adição, subtração e multiplicação) em uma **coleção de números**.
  - Eles também facilitam a descrição de métodos estatísticos para dados multivariados.
  - Aproveitaremos esta aula para introduzirmos algumas funções do `R` para vetores e matrizes.
- Nossa principal motivação para usá-los é a maneira concisa e compacta com as quais técnicas estatísticas para **análise de dados longitudinais** podem ser apresentadas quando expressas em termos de **vetores** e **matrizes**.

Definições e conceitos básicos

- Uma **matriz** é um arranjo retangular de elementos ordenados por linhas e colunas.

$$A = \left(\begin{array}{cccc} 2 & 7 & 11 & 5 \\ 4 & 9 & 3 & 1 \\ 13 & 8 & 2 & 6 \end{array} \right).$$

- A é uma matriz com três linhas e quatro colunas.

Definições e conceitos básicos

- O **elemento** ou **entrada** na i-ésima linha e j-ésima coluna da matriz é referido como (i, j)-ésimo elemento da matriz.
- Se denotarmos a_{ij} como o elemento da i-ésima linha e j-ésima coluna da matriz A, então

$$\begin{array}{llll} a_{11} = 2, & a_{12} = 7, & a_{13} = 11, & a_{14} = 5; \\ a_{21} = 4, & a_{22} = 9, & a_{23} = 3, & a_{24} = 1; \\ a_{31} = 13, & a_{32} = 8, & a_{33} = 2, & a_{34} = 6. \end{array}$$

Definições e conceitos básicos

- A **dimensão** de uma matriz é o número de linhas e colunas na matriz.
- Por convenção, o número de linhas é apresentado primeiro, e depois o número de colunas.
  - A matriz A é uma matriz 3×4 ("3 por 4").

Definições e conceitos básicos

- Um **vetor** é um caso especial de matriz, contendo ou uma única linha ou uma única coluna.

$$V = \left(\begin{array}{c} 2 \\ 4 \\ 9 \\ 7 \\ 3 \end{array}\right).$$

- V é um vetor (coluna) 5×1.
- A dimensão de um vetor é o seu **comprimento** (o número de elementos).
- Por fim, um **escalar** é um único elemento (um vetor com um elemento ou uma matriz 1×1).

Escalares, vetores e matrizes no R

Um escalar

- Basta criar um novo objeto com um único valor.

```
b <- 5
b
```

```
## [1] 5
```

Escalares, vetores e matrizes no `R`

Um vetor

- A forma mais simples de se criar um vetor no `R` é utilizando a função `c()` (concatenar).

`c(a, b, c, ...)`
`a, b, c, ...`   Um ou mais objetos a serem combinados em um vetor.

Escalares, vetores e matrizes no R

Um vetor

```r
V <- c(2, 4, 9, 7, 3)
V
```

```
## [1] 2 4 9 7 3
```

```r
length(V)
```

```
## [1] 5
```

Escalares, vetores e matrizes no R

Uma matriz

- Podemos pensar em uma matriz como uma combinação de p vetores, em que cada vetor tenha comprimento igual a n.
- Por serem uma combinação de vetores, cada função terá um ou mais vetores como inputs e retornará uma matriz.

Função	Descrição
`cbind()`	Combina vetores em *colunas* em uma matriz/dataframe.
`rbind()`	Combina vetores em *linhas* em uma matriz/dataframe.
`matrix()`	Cria uma matriz com o número desejado de linhas e colunas a partir de um único vetor.

Escalares, vetores e matrizes no R

Uma matriz

```
A <- matrix(data = c(2, 7, 11, 5,
                     4, 9, 3, 1,
                     13, 8, 2, 6),
            nrow = 3, byrow = TRUE)
A
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    2    7   11    5
## [2,]    4    9    3    1
## [3,]   13    8    2    6
```

```
dim(A)
```

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

Vetor resposta e matriz de covariáveis

- Exemplos de vetores e matrizes que desempenham papéis-chave na análise de dados longitudinais são o **vetor resposta**, Y, e a **matriz de covariáveis**, X.

Table 1: Dados de um indivíduo participante do estudo do Chumbo.

Chumbo no sangue	Grupo de tratamento	Semana
30.8	0	0
26.9	0	1
25.8	0	4
23.8	0	6

Vetor resposta e matriz de covariáveis

- Y denota o vetor de medidas repetidas da variável resposta, então

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30.8 \\ 26.9 \\ 25.8 \\ 23.8 \end{pmatrix}.$$

Vetor resposta e matriz de covariáveis

- X denota a matriz de covariáveis associadas ao vetor de medidas repetidas

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} \\ X_{41} & X_{42} & X_{43} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 4 \\ 1 & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

Matriz transposta

- A **transposta** é a função que troca as linhas e as colunas de uma matrix.
    - A primeira linha se torna a primeira coluna, a segunda linha se torna a segunda coluna, e assim por diante.
- Iremos denotar a transposta de uma matriz A por A' ("A linha").
    - Alguns livros denotam a transposta de A por A^T.

Matriz transposta

- Considere novamente a matriz 3×4 A

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 11 & 5 \\ 4 & 9 & 3 & 1 \\ 13 & 8 & 2 & 6 \end{pmatrix}.$$

- A matriz transposta de A é

$$A' = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 13 \\ 7 & 9 & 8 \\ 11 & 3 & 2 \\ 5 & 1 & 6 \end{pmatrix}.$$

que é uma matriz 4×3.

Matriz transposta

- Como um vetor é uma matriz com uma única linha ou única coluna, se
$$V = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 9 \\ 7 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \text{então} \quad V' = (2\ 4\ 9\ 7\ 3).$$

Matriz transposta no R

```r
A
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    2    7   11    5
## [2,]    4    9    3    1
## [3,]   13    8    2    6
```

```r
t(A)
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    2    4   13
## [2,]    7    9    8
## [3,]   11    3    2
## [4,]    5    1    6
```

Matrizes quadradas e simétricas

- Uma matriz é dita **quadrada** se esta tem o mesmo número de linhas e colunas.
- Uma matriz quadrada é **simétrica** se esta é igual à sua matriz transposta.

$$S = \left(\begin{array}{cccc} 2 & 3 & 7 & 11 \\ 3 & 9 & 1 & 2 \\ 7 & 1 & 5 & 8 \\ 11 & 2 & 8 & 4 \end{array}\right).$$

- S é uma matriz simétrica, pois a é igual à sua matriz transposta

$$S' = \left(\begin{array}{cccc} 2 & 3 & 7 & 11 \\ 3 & 9 & 1 & 2 \\ 7 & 1 & 5 & 8 \\ 11 & 2 & 8 & 4 \end{array}\right).$$

Matrizes quadradas e simétricas

```r
S <- matrix(data = c(2, 3, 7, 11,
                     3, 9, 1, 2,
                     7, 1, 5, 8,
                     11, 2, 8, 4),
            nrow = 4, ncol = 4,
            byrow = TRUE)
all.equal(S, t(S))
```

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

Matrizes quadradas e simétricas

- Exemplos de matrizes simétricas que desempenham papel importante na análise de dados longitudinais são as matrizes de **covariância** e **correlação** para as correspondentes medidas repetidas nos mesmos indivíduos.
- Por fim, uma matriz **diagonal** é um caso especial de uma matriz quadrada simétrica que tem entradas não nulas (diferentes de zero) somente para as posições da **diagonal principal**.
  - Os elementos da diagonal principal são aqueles na mesma linha e coluna (a_{ii}), da parte superior esquerda para a parte inferior direita da matriz.

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Matrizes quadradas e simétricas

- A matriz diagonal contendo apenas 1s na diagonal principal é conhecida como a matriz **identidade** e é denotada por I ou I_n, em que n denota a dimensão da matriz identidade.

$$I_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matrizes quadradas e simétricas

```r
# cria matriz diagonal
I <- diag(x = rep(1, 4))
I
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    1    0    0    0
## [2,]    0    1    0    0
## [3,]    0    0    1    0
## [4,]    0    0    0    1
```

```r
# retorna os elementos da diagonal principal da matriz
diag(x = S)
```

```
## [1] 2 9 5 4
```

Operações aritméticas

- A adição e subtração de matrizes são definidas apenas para matrizes com a mesma dimensão.
  - Matrizes devem ter o mesmo número de linhas e colunas.
- A soma de duas matrizes é obtida por adicionar os seus elementos correspondentes.

Operações aritméticas

Soma

$$\begin{pmatrix} 2 & 7 & 11 \\ 4 & 9 & 3 \\ 13 & 8 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 & 2 & 14 \\ 7 & 8 & 4 \\ 6 & 5 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2+3 & 7+2 & 11+14 \\ 4+7 & 9+8 & 3+4 \\ 13+6 & 8+5 & 2+9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 9 & 25 \\ 11 & 17 & 7 \\ 19 & 13 & 11 \end{pmatrix}.$$

Operações aritméticas

Subtração

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 2 & 7 & 11 \\ 4 & 9 & 3 \\ 13 & 8 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 & 2 & 14 \\ 7 & 8 & 4 \\ 6 & 5 & 9 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2-3 & 7-2 & 11-14 \\ 4-7 & 9-8 & 3-4 \\ 13-6 & 8-5 & 2-9 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -1 & 5 & -3 \\ -3 & 1 & -1 \\ 7 & 3 & -7 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

Operações aritméticas

```r
G <- matrix(data = c(2, 7, 11, 4, 9, 3, 13, 8, 2),
            nrow = 3, byrow = TRUE)
J <- matrix(data = c(3, 2, 14, 7, 8, 4, 6, 5, 9),
            nrow = 3, byrow = TRUE)
G + J
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    5    9   25
## [2,]   11   17    7
## [3,]   19   13   11
```

```r
G - J
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]   -1    5   -3
## [2,]   -3    1   -1
## [3,]    7    3   -7
```

Multiplicação de matriz por um escalar

- A multiplicação de uma matriz por um escalar é formada pela multiplicação de cada elemento da matriz pelo escalar

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 11 & 5 \\ 4 & 9 & 3 & 1 \\ 13 & 8 & 2 & 6 \end{pmatrix}, \quad \text{então} \quad 2A = \begin{pmatrix} 4 & 14 & 22 & 10 \\ 8 & 18 & 6 & 2 \\ 26 & 16 & 4 & 12 \end{pmatrix}.$$

Multiplicação de matriz por um escalar

```
2 * A
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    4   14   22   10
## [2,]    8   18    6    2
## [3,]   26   16    4   12
```

Multiplicação de matrizes

A multiplicação de duas matrizes A e B, denotada por AB, é definida somente se o número de colunas de A é igual ao número de linhas de B.

- Se A é uma matriz $p \times q$ e B é uma matriz $q \times r$, então o produto das duas matrizes AB é uma matriz $p \times r$.

Seja C o produto de A e B,

$$C = AB,$$

o (i, j)-ésimo elemento de C é a soma dos produtos dos correspondentes na i-ésima linha de A e j-ésima coluna de B.

- Por exemplo,

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{q} a_{ik} b_{kj} = a_{i1} b_{1j} + a_{i2} b_{2j} + \ldots + a_{iq} b_{qj}, i = 1, \ldots, p, j = 1, \ldots, r.$$

Multiplicação de matrizes

Exemplo

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 11 \\ 4 & 9 & 3 \\ 13 & 8 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} AB &= \begin{pmatrix} (2\times 1)+(7\times 3)+(11\times 2) & (2\times 2)+(7\times 1)+(11\times 4) \\ (4\times 1)+(9\times 3)+(3\times 2) & (4\times 2)+(9\times 1)+(3\times 4) \\ (13\times 1)+(8\times 3)+(2\times 2) & (13\times 2)+(8\times 1)+(2\times 4) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 45 & 55 \\ 37 & 29 \\ 41 & 42 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- Note que a ordem da multiplicação é muito importante. Se A e B são matrizes quadradas de mesma dimensão, então, em geral, AB não é igual a BA.

Multiplicação de matrizes

```
A <- matrix(data = c(2, 7, 11, 4, 9, 3, 13, 8, 2),
            nrow = 3, byrow = TRUE)
B <- matrix(data = c(1, 2, 3, 1, 2, 4),
            nrow = 3, byrow = TRUE)
A %*% B
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]   45   55
## [2,]   37   29
## [3,]   41   42
```

Multiplicação de matrizes

```r
G %*% J
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]  121  115  155
## [2,]   93   95  119
## [3,]  107  100  232
```

```r
J %*% G
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]  196  151   67
## [2,]   98  153  109
## [3,]  149  159   99
```

Multiplicação de matrizes

```r
# CUIDADO!
G * J
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    6   14  154
## [2,]   28   72   12
## [3,]   78   40   18
```

Multiplicação de matrizes

- A multiplicação de um vetor por uma matriz é uma operação particularmente importante que desempenha um papel chave na análise longitudinal.
- Seja B um vetor $p \times 1$ e X uma matriz $n \times p$.

Então, o produto

$$C = XB,$$

é um vetor $n \times 1$ com

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{p} x_{ik} b_k, i = 1, \ldots, n.$$

Multiplicação de matrizes

- Retornando ao exemplo do **chumbo no sangue**: seja Y o vetor de medidas repetidas da variável resposta, e X uma matriz de covariáveis associadas a Y,

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} \\ X_{41} & X_{42} & X_{43} \end{pmatrix}.$$

Multiplicação de matrizes

- Um modelo de regressão linear para a média de cada resposta pode ser expresso na notação de vetor e matriz como

$$\mathrm{E}(Y) = X\beta,$$

em que $E(Y)$ denota o valor esperado de Y e β é um vetor 3×1 de coeficientes de regressão,

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}.$$

Multiplicação de matrizes

Especificamente, o produto

$$\mathrm{E}(Y) = X\beta,$$

é um vetor 4×1

$$\left(\begin{array}{c} \mathrm{E}(Y_1) \\ \mathrm{E}(Y_2) \\ \mathrm{E}(Y_3) \\ \mathrm{E}(Y_4) \end{array}\right) = \left(\begin{array}{ccc} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} \\ X_{41} & X_{42} & X_{43} \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} \beta_1 X_{11} + \beta_2 X_{12} + \beta_3 X_{13} \\ \beta_1 X_{21} + \beta_2 X_{22} + \beta_3 X_{23} \\ \beta_1 X_{31} + \beta_2 X_{32} + \beta_3 X_{33} \\ \beta_1 X_{41} + \beta_2 X_{42} + \beta_3 X_{43} \end{array}\right).$$

Matriz inversa

A **inversa** de uma matriz quadrada A, denotada por A^{-1}, é definida como uma matriz quadrada cujo os elementos são tais que

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I,$$

em que I é a matriz identidade.

- **Observação:** a inversa de uma matriz nem sempre existe. A inversa de uma matriz somente existe se a matriz é **não-singular**.

Matriz inversa

- Por fim, o **determinante** de uma matriz quadrada é um escalar denotado por $|A|$.
  - Para uma matriz 2×2 A, o determinante é

$$|A| = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

- Uma propriedade interessante do determinante é que ele fornece um teste da existência da matriz inversa.
  - Se $|A| \neq 0$, então a inversa de A existe; se $|A| = 0$, então a matriz é dita ser **singular** e a inversa de A não existe.
- O determinante também tem um papel importante na definição da **distribuição normal multivariada** (determinante da matriz de covariância).

Matriz inversa

```r
# determinante de G
det(G)
```

```
## [1] -730
```

```r
# G é singular?
det(G) != 0
```

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

```r
# inversa de G
solve(G)
```

```
##             [,1]       [,2]        [,3]
## [1,]  0.008219178 -0.1013699  0.10684932
## [2,] -0.042465753  0.1904110 -0.05205479
## [3,]  0.116438356 -0.1027397  0.01369863
```

Propriedades de valores esperados e variâncias

Introdução

Seja Y uma variável aleatória que assume valores de acordo com uma função densidade se Y é contínua ou uma função massa de probabilidade se Y é discreta.

- O **valor esperado** (esperança, ou média) de Y é denotado por

$$\mu = \mathrm{E}\,(Y) = \int y dF_Y(y).$$

- A **variância** de Y, denotada por $\sigma^2 = \mathrm{Var}\,(Y)$, é uma medida de variabilidade em torno da média de Y, e definida por

$$\sigma^2 = \mathrm{Var}\,(Y) = \mathrm{E}\,\{Y - \mathrm{E}\,(Y)\}^2.$$

Introdução

- O **desvio padrão** de Y é uma medida de variabilidade expressa na unidade (de medida) original de Y, e definido como $\sigma = \sqrt{\text{Var}\,(Y)}$.
- Por fim, a covariância entre duas variáveis aleatórias, X e Y, é definida como

$$\text{Cov}\,(X, Y) = \text{E}\,[\{X - \text{E}\,(X)\}\{Y - \text{E}\,(Y)\}].$$

- A covariância é uma medida de **dependência linear** entre X e Y.
  - Se X e Y são **independentes**, então $\text{Cov}\,(X, Y) = 0$.
- Note que a covariância de uma variável com ela mesma é a variância, $\text{Cov}\,(Y, Y) = \text{Var}\,(Y)$.

Propriedades de valores esperados e variâncias

Sejam X e Y duas variáveis aleatórias (possivelmente dependentes) e a e b duas constantes. O valor esperado tem as seguintes propriedades:

1. $\mathrm{E}\left(a\right) = a$
2. $\mathrm{E}\left(bX\right) = b\mathrm{E}\left(X\right)$
3. $\mathrm{E}\left(a + bX\right) = a + b\mathrm{E}\left(X\right)$
4. $\mathrm{E}\left(aX + bY\right) = a\mathrm{E}\left(X\right) + b\mathrm{E}\left(Y\right)$
5. $\mathrm{E}\left(XY\right) \neq \mathrm{E}\left(X\right)\mathrm{E}\left(Y\right)$ (a menos que X e Y sejam **independentes**)

- Se $g(\cdot)$ é função linear, então $\mathrm{E}\left[g(Y)\right] = g(E[Y])$.

Propriedades de valores esperados e variâncias

A variância tem as seguintes propriedades:

1. $\text{Var}\,(a) = 0$
2. $\text{Var}\,(bY) = b^2\text{Var}\,(Y)$
3. $\text{Var}\,(a + bY) = b^2\text{Var}\,(Y)$
4. $\text{Var}\,(aX + bY) = a^2\text{Var}\,(X) + b^2\text{Var}\,(Y) + 2ab\text{Cov}\,(X, Y)$
5. $\text{Var}\,(aX - bY) = a^2\text{Var}\,(X) + b^2\text{Var}\,(Y) - 2ab\text{Cov}\,(X, Y)$

Propriedades de valores esperados e variâncias

Em particular, se X e Y são **dependentes**, então

$$\text{Var}\,(X+Y) = \text{Var}\,(X) + \text{Var}\,(Y) + 2\text{Cov}\,(X,Y),$$

e

$$\text{Var}\,(X-Y) = \text{Var}\,(X) + \text{Var}\,(Y) - 2\text{Cov}\,(X,Y).$$

Propriedades de valores esperados e variâncias

- Por fim, notamos que o valor esperado e a variância podem ser aplicados para um vetor aleatório. Seja Y um vetor resposta $n \times 1$ (portanto, um vetor coluna; medidas repetidas em n ocasiões distintas),

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}.$$

Propriedades de valores esperados e variâncias

Então,

$$\mathrm{E}\left(Y\right) = \begin{pmatrix} \mathrm{E}\left(Y_1\right) \\ \mathrm{E}\left(Y_2\right) \\ \vdots \\ \mathrm{E}\left(Y_n\right) \end{pmatrix},$$

e

$$\mathrm{Cov}\left(Y\right) = \begin{pmatrix} \mathrm{Var}\left(Y_1\right) & \mathrm{Cov}\left(Y_1, Y_2\right) & \dots & \mathrm{Cov}\left(Y_1, Y_n\right) \\ \mathrm{Cov}\left(Y_2, Y_1\right) & \mathrm{Var}\left(Y_2\right) & \dots & \mathrm{Cov}\left(Y_2, Y_n\right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{Cov}\left(Y_n, Y_1\right) & \mathrm{Cov}\left(Y_n, Y_2\right) & \dots & \mathrm{Var}\left(Y_n\right) \end{pmatrix}.$$

Avisos

- **Para casa:** ler o Capítulo 1 do livro "**Applied Longitudinal Analysis**". Caso já tenha lido o Cap. 1, leia o Capítulo 2.
- **Próxima aula:** Dados longitudinais: conceitos básicos.

Bons estudos!