VALORES SINGULARES DE MATRIZES UNIFORMES

Antonio Francisco Iemma
Departamento de Matemática e Estatística. Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", USP - 13.400 - Piracicaba, SP.

RESUMO

Apresenta-se um procedimento simples e direto para a obtenção de valores singulares de matrizes uniformes definidas não negativas, através do uso das matrizes de Helmert. Esse procedimento é sugerido aos professores de cursos iniciais em estatística oferecidos a alunos com pequenos conhecimentos em algebra de matrizes.

SUMMARY

IEMMA, A.F. The singular value decomposition of a uniform matrix. 1982. Ciência e Natura (4):21-26.

In this paper is presented a simple procedure for determination of singular value of uniform non negative matrices. This procedure is recommended for teachers of elementary courses in statistics to students with small basis in matrix algebra.

INTRODUÇÃO

Os valores singulares de matrizes têm sido fundamentais para a demonstração de muitos dos teoremas relacionados com a estatística. Conforme pode ser constatado em BOX (2), GRAYBILL (4), SCHEFFÉ (9) e SEARLE (10), dentre outros, uma importante aplicação dos valores singulares é feita no estudo das formas quadráticas associadas aos quadrados médios utilizados na análise de variância. Sabe-se da teoria geral, por exemplo, que sob certas condições, uma soma de quadrados do resíduo pode ser escrita como SQR = $\Sigma\ \lambda_i\ \chi^2_i\ (p)$, onde λ_i são valores singulares positivos da matriz de covariâncias V e $\chi^2_i\ (p)$ são qui-quadrados centrais com p graus de liberdade . Nesse contexto, torna-se desnecessário ressaltar a importância dos valores singulares. No entanto, sua determinação geralmente é trabalhosa e muitas vezes requer o uso de computadores. Neste artigo é apresentado um processo simples e direto de obtenção dos valores singulares de matrizes de covariâncias do tipo uniforme, através do uso das matrizes de Helmert.

DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

Segundo GEISSER (3), uma matriz uniforme de covariância, é do tipo

$$V=\begin{bmatrix} \sigma^2 & \rho\sigma^2 & --- & \rho\sigma^2 \\ \rho\sigma^2 & \sigma^2 & --- & \rho\sigma^2 \\ --- & --- & --- & --- \\ \rho\sigma^2 & \rho\sigma^2 & --- & \sigma^2 \end{bmatrix} \qquad (\alpha.1)$$

onde σ^2 e ρ são respectivamente a variância e o coeficiente de correlação constante.

Em situações experimentais a identificação das estimativas $\hat{V}$ das matrizes uniformes é feita através dos testes de homogeneidade e uniformidade como, por exemplo, aqueles de WILKS (11) e BOX(1).

Matrizes de covariâncias desse tipo são de grande utilidade, mormente nos ensaios que sugerem "split-plot", no tempo, para os quais a condição de uniformidade pode indicar a alternativa mais correta de análise dos dados, entre um procedimento univariado usual e um procedimento multivariado como a análise de perfil.

SEARLE (10), com base nas idéias de LANCASTER (7), define a matriz de Helmert, de ordem n, por:

$$H_{(n)} = \begin{bmatrix} h' \\ --- \\ H \end{bmatrix}$$

onde h' é um vetor linha de n componentes iguais a $\frac{1}{\sqrt{n}}$:

$$h' = \left[\frac{1}{\sqrt{n}}, \frac{1}{\sqrt{n}}, \ldots, \frac{1}{\sqrt{n}}\right] \qquad (\alpha.2)$$

e H é uma matriz de (n - 1) linhas e n colunas, na qual a i-ésima linha é obtida de

$$\left[\frac{1}{\sqrt{r(r+1)}} \; p'_{(r)} \; ; \; \frac{-r}{\sqrt{r(r+1)}} \; ; \; \phi_{(n-r-1)\, x\, (1)}\right] \; ; \; r=1,2, \ldots, n-1$$

sendo $p'_{(r)}$ um vetor linha com r componentes iguais a 1.

Notadamente as matrizes de Helmert são ortogonais e sustentam as propriedades necessárias para a decomposição ortogonal de matrizes definidas não negativas.

Por outro lado, um processo amplamente abordado na literatura, e que tem sido usado em alguns "pacotes" computacionais, para a obtenção de valores singulares consiste na resolução da equação característica:

$$\delta\ (\hat{V} - \lambda I) = 0 \qquad (\alpha.3)$$

onde δ é o determinante, $\hat{V}$é uma estimativa da matriz de covariâncias, λ é o vetor dos valores singulares desconhecidos e I é uma matriz identidade com as mesmas dimensões de $\hat{V}$. Esse processo pode apresentar-se inconvenientemente quando δ for de ordem elevada.

A decomposição por valores singulares pode apresentar os mesmos inconvenientes, se na obtenção da matriz ortogonal P, tal que

$$P'\ \hat{V}\ P = \text{diag}\ \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k\} \qquad (\alpha.4)$$

onde λ_j (j = 1, 2, ..., k) são os valores singulares, for usado al gum processo que envolva determinantes.

Considerando-se o estreito relacionamento existente entre as matrizes ortogonais P e as matrizes $H_{(n)}$ de Helmert, propõe-se aqui a substituição de P por $H'_{(n)}$, em (α.4), resultando:

$$H_{(n)}\ \hat{V}\ H'_{(n)} = \text{diag}\ \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k\} \qquad (\alpha.5)$$

Naturalmente a uniformidade de $\hat{V}$ garante sua simetria. Por outro lado, considerou-se neste estudo apenas o caso em que $\hat{V}$ é positiva definida.

Como as matrizes $H_{(n)}$ apresentam uma consistente lei de formação, (α.2), que depende apenas de n, então elas podem ser facilmente obtidas, tornando imediato o processo de obtenção dos valores singulares. Uma identificação mais imediata de $H_{(n)}$ pode ser feita em (α.6). Assim, efetuando-se os produtos sugeridos em (α.5) verifica-se que $\hat{V}$ tem dois valores singulares:

$$\lambda_1 = \left[1 + (n-1)\ \hat{\rho}\right] \hat{\sigma}^2 \quad \text{e} \quad \lambda_2 = (1-\hat{\rho})\hat{\sigma}^2, \ (\text{multiplicidade} = n-1) \qquad (\alpha.7)$$

Desse modo, se a matriz de covariância é do tipo uniforme tem-se aqui, dois critérios para a obtenção de seus valores singulares, através de (α.5) ou (α.7):

(α.6)

$$H_{(n)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \frac{1}{\sqrt{1.2}} & -\frac{1}{\sqrt{1.2}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2.3}} & \frac{1}{\sqrt{2.3}} & -\frac{2}{\sqrt{2.3}} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3.4}} & \frac{1}{\sqrt{3.4}} & \frac{1}{\sqrt{3.4}} & -\frac{3}{\sqrt{3.4}} & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{1}{\sqrt{(n-2)(n-1)}} & \frac{1}{\sqrt{(n-2)(n-1)}} & \frac{1}{\sqrt{(n-2)(n-1)}} & \frac{1}{\sqrt{(n-2)(n-1)}} & \cdots & -\frac{(n-2)}{\sqrt{(n-2)(n-1)}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{(n-1)(n)}} & \frac{1}{\sqrt{(n-1)(n)}} & \frac{1}{\sqrt{(n-1)(n)}} & \frac{1}{\sqrt{(n-1)(n)}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{(n-1)(n)}} & -\frac{(n-1)}{\sqrt{(n-1)(n)}} \end{bmatrix}_{(n)\times(n)}$$

APRESENTAÇÃO DE UM EXEMPLO

Seja a matriz uniforme A, de dimensão 4, onde

$$a_{ij} = \begin{cases} 2, \text{ se } i = j \\ 1, \text{ se } i \neq j \end{cases}$$

os valores singulares de A, assim definida, podem ser obtidos facilmente de (α.5):

$$H_{(4)}\ A\ H'_{(4)} = \text{diag}\ \{\lambda_1\ \lambda_2\} \Longrightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{4}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{3}{\sqrt{12}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{4}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{12}} \\ \frac{1}{\sqrt{4}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{12}} \\ \frac{1}{\sqrt{4}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{12}} \\ \frac{1}{\sqrt{4}} & 0 & 0 & -\frac{3}{\sqrt{12}} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 5,0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1,0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1,0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1,0 \end{bmatrix} = \text{diag}\ \{\lambda_1 = 5;\ \lambda_2 = 1 : (m = 3)\}$$

ou, diretamente através de (α.7)

$$\hat{\rho} = \frac{\hat{\rho}\ \hat{\sigma}^2}{\hat{\sigma}^2} = \frac{1}{2} = 0,5$$

$$\lambda_1 = \left[1 + (4-1)\ 0,5\right]\ 2 = 5,0 \quad \text{e} \quad \lambda_2 = (1-0,5)\ 2 = 1,0$$

UMA APLICAÇÃO À ESTATÍSTICA

Seja um experimento do tipo "Split-plot" no tempo, para o qual, após os testes de homogeneidade e uniformidade obteve-se a seguinte estimativa de matriz uniforme de covariâncias:

$$\hat{V} = \begin{bmatrix} 4,6380 & 2,7828 & 2,7828 & 2,7828 \\ 2,7828 & 4,6380 & 2,7828 & 2,7828 \\ 2,7828 & 2,7828 & 4,6380 & 2,7828 \\ 2,7828 & 2,7828 & 2,7828 & 4,6380 \end{bmatrix}$$

OBS: I = 2 tratamentos, J = 4 tempos, k = 6 repetições.

Sabe-se, conforme IEMMA E CAMPOS (6), dentre outros, que para experimentos desse tipo, a decomposição usual para a análise de variância é aquela que consta da Tabela I, onde f_1, f_2 e f_3 são funções não negativas dos parâmetros. Desse modo, as somas de quadrados para os resíduos (a) e (b) ficam bem determinadas, sem que se efetue a análise de variância:

$$SQ\ Res(a) = \lambda_1 = [1 + (J - 1)\ \hat{\rho}]\hat{\sigma}^2 = 12{,}9864$$

$$SQ\ Res(b) = \lambda_2 = (1 - \hat{\rho})\hat{\sigma}^2 = 1{,}8552$$

TABELA I. DECOMPOSIÇÃO USUAL PARA A ANÁLISE DE VARIÂNCIA DE EXPERIMENTOS TIPO "SPLIT-PLOT" NO TEMPO, COM MATRIZ UNIFORME DE COVARIÂNCIAS.

Variações Consideradas	G.L.	E[QM]
Tratamentos (t)	$I - 1$	$[1+(J-1)\rho]\sigma^2 + f_1$
Resíduo (a)	$I(k - 1)$	$[1+(J-1)\rho]\sigma^2$
Tempos (t')	$J - 1$	$(1 - \rho)\sigma^2 + f_2$
t x t'	$(I - 1)(J - 1)$	$(1 - \rho)\sigma^2 + f_3$
Resíduo (b)	$I(J - 1)(k - 1)$	$(1 - \rho)\sigma^2$

Desse modo, as comparações múltiplas podem ser efetuadas da simples substituição nas respectivas fórmulas, de SQ Res(a) e SQ Res(b) por λ_1 e λ_2, obtendo-se assim as variâncias desejadas.

CONCLUSÕES

A decomposição de matrizes simétricas por valores singulares, pode ser muitas vezes trabalhosa e exigir conhecimentos razoáveis sobre álgebra linear e matricial. Neste estudo verificou-se que se a matriz de interesse é do tipo uniforme, então a simples substituição das matrizes ortogonais, obtidas dos autovetores normalizados dessa matriz, pelas matrizes de Helmert constitui-se num processo imediato de obtenção dos valores singulares. Uma aplicação à estatística á apresentada, enfatizando a importância do uso dos valores singulares e do método proposto.

BIBLIOGRAFIA CITADA

1. BOX,G.E.P. A general distribuition theory for a class of likelihood criteria. *Biometrika, 36*: 317-346, 1949.
2. BOX,G.E.P. Some theorems on quadratic forms applied in the study of analysis of variance problems, II. Effects of inequality of variance and correlation between errors in a two way clas

sification. *Ann. Math. Stat, 25:* 484-498, 1954.
3. GEISSER,S. Multivariate analysis of variance for a special case. *JASA, 8:* 660-669, 1963.
4. GRAYBILL,F.A. *Theory and Application of the Linear Models*. Duxbury Press, Massachussets, 1976.
5. IEMMA,A.F. *Análise de experimentos em parcelas subdivididas com tratamentos principais dispostos em blocos incompletos balanceados*. ESALQ/USP, Piracicaba, 145 p. (Tese de Doutoramento), 1981.
6. IEMMA,A.F. e H. CAMPOS. Variância dos contrastes clássicos nos experimentos com parcelas subdivididas em blocos incompletos balanceados. *Ciência e Natura, 3*: 21-27, 1981.
7. LANCASTER,H.O. The Helmert matrices. *Am. Math. Monthly, 72*(1): 4-12, 1965.
8. RAO,C.R. *Advanced Statistical Methods in Biometric Research*. MacMillan Publishing to, New York, 1952.
9. SCHEFFÉ,H. *The Analysis of Variance*. John Wiley, New York, 1959.
10. SEARLE,S.R. *Linear Models*, John Wiley, New York, 1971.
11. WILKS,S.S. Sample criterion for testing equality of means, equality of variances, and equality of covariances in a normal multivariate distribution. *An. Mat. Stat., 17*: 257-281, 1946.

Recebido em dezembro, 1982; aceito em dezembro, 1982.