Multivariat (linjär) statistisk analys

MULTIVARIATE LINEAR STATISTICAL ANALYSIS

Multivariat analys

Litteratur

Johnson, R.A. & Wichern, D.W. (1998) Applied Multivariate Statistical Analysis. Prentice Hall, Englewood Cliffs.

Datorprogram SPSS, MATLAB

Slides Via hemsidan
`http://130.235.86.72/education/undergrad/sta103_6/`

eller
`http://www.maths.lth.se/matstat/kurser/mas224/`

Schema

Datum	Innehåll	Avsnitt
5/9	Grundbegrepp, Matrisalgebra och slumpvektorer	JW1,2
7/9	Matrisalgebra och slumpvektorer	JW2
12/9	Stickprovsgeometri och slumpmässigt urval	JW3
14/9	Multivariat normalfördelning	JW4
18/9	Hotellings T^2. Envägs MANOVA	JW5,6
21/9	Flervägs MANOVA	JW6
26/9	Multivariate linjär regression	JW7
28/9	Multivariate linjär regression	JW7
29/9	Datorlaboration 1: MANOVA och MLR	
2/10	Principalkomponentanalys	JW8,9
5/10	Faktoranalys	JW9
6/10	Datorlaboration 2: PCA och Faktoranalys	
10/10	Explorativ faktoranalys	JW9
12/10	Kanonisk korrelation	JW10
13/10	Datorlaboration 3: Correspondence analys och kanonisk korrelation	
17/10	Diskriminantanalys	JW11
19/10	Klusteranalys	JW12
20/10	Datorlaboration 4: Diskriminantanalys och Klustermetoder	

Kap 1 Inledning, aspekter på multivariat analys

1.1 Inledning

Data på flera variabler=multivariat analys

Syfte med analysen:

Datareduktion
Sortering och gruppering
Undersökning av beroende mellan variabler
Prediktion
Test av hypoteser

Metodik:

Inferens om väntevärden
Inferens om kovariansstruktur
Grupperingmetoder

1.2 Tillämpningsområden

Medicin och hälsa
Sociologi
Ekonomi
Pedagogik och psykologi
Biologi och miljö
Geologi
Meteorologi
Sport

1.3 Beskrivning av data

<u>**Organisation av observationer**</u> Observationerna i ett stickprov arrangeras i en $n \times p$ matris (datamatris) X, där n är antalet experimentella enheter (storleken på stickprovet) och p är antalet variabler:

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{j1} & x_{j2} & \dots & x_{jk} & \dots & x_{jp} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} & \dots & x_{np} \end{pmatrix}$$

Ex: Följande tabell anger 6 studenters betyg i svenska, engelska, matematik och samhällskunskap.

	Svenska	Engelska	Matematik	Samhällskunskap
Anna	81	89	68	69
Bertil	73	72	75	80
Carina	53	50	59	63
David	90	88	83	82
Erika	73	59	83	92
Fredrik	73	60	79	90

Data kan uppfattas som en matris med $n = 6$ individer och $p = 4$ variabler

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 81 & 89 & 68 & 69 \\ 73 & 72 & 75 & 80 \\ 53 & 50 & 59 & 63 \\ 90 & 88 & 83 & 82 \\ 73 & 59 & 83 & 92 \\ 73 & 60 & 79 & 90 \end{pmatrix}$$

Ex Följande data utgör 6 olika huvudmått hos 34 individer.

MFB	BAM	TFH	LGAN	LTN	LTG
113.2	111.7	119.6	53.9	127.4	143.6
117.6	117.3	121.2	47.7	124.7	143.9
112.3	124.7	131.6	56.7	123.4	149.3
116.2	110.5	114.2	57.9	121.6	140.9
112.9	111.3	114.3	51.5	119.9	133.5
104.2	114.3	116.5	49.9	122.9	136.7
110.7	116.9	128.5	56.8	118.1	134.7
105.0	119.2	121.1	52.2	117.3	131.4
115.9	118.5	120.4	60.2	123.0	146.8
96.8	108.4	109.5	51.9	120.1	132.2
110.7	117.5	115.4	55.2	125.0	140.6
108.4	113.7	122.2	56.2	124.5	146.3
104.1	116.0	124.3	49.8	121.8	138.1
107.9	115.2	129.4	62.2	121.6	137.9
106.4	109.0	114.9	56.8	120.1	129.5
112.7	118.0	117.4	53.0	128.3	141.6
109.9	105.2	122.2	56.6	122.2	137.8
116.6	119.5	130.6	53.0	124.0	135.3
109.9	113.5	125.7	62.8	122.7	139.5
107.1	110.7	121.7	52.1	118.6	141.6
113.3	117.8	120.7	53.5	121.6	138.6
108.1	116.3	123.9	55.5	125.4	146.1
111.5	111.1	127.1	57.9	115.8	135.1
115.7	117.3	123.0	50.8	122.2	143.1
112.2	120.6	119.6	61.3	126.7	141.1
118.7	122.9	126.7	59.8	125.7	138.3
118.9	118.4	127.7	64.6	125.6	144.3
114.2	109.4	119.3	58.7	121.1	136.2
113.8	113.6	135.8	54.3	119.5	130.9
122.4	117.2	122.2	56.4	123.3	142.9
110.4	110.8	122.1	51.2	115.6	132.7
114.9	108.6	122.9	56.3	122.7	140.3
108.4	118.7	117.8	50.0	113.7	131.0
105.3	107.2	116.0	52.5	117.4	133.2

Förenkla. Ibland görs fler mätningar än man egentligen behöver. Vissa multivariata metoder syftar till att reducera problemet till ett problem i en lägre dimension än p. Ex Principalkomponentanalys och faktoranalys.

Klassificera. Univariata data kan lätt ordnas längs en linje och klassifieras. Multivariata observationer ordnas inte så lätt men kan ändå klassificeras med hjälp av metoder som kluster och diskriminantanalys.

Beskriva. Med detta menas både grafiska metoder och numeriska empiriska läges- och spridningsmått samt mått på samvariation.

Studera samband Vissa metoder är variableinriktade i meningen att man studerar samband mellan variabler. Finns det t ex samband mellan betyg i svenska och betyg i engelska?

Andra frågeställningar. Exempel på sådana är skattning, hypoteseprövning mm. I exemplet kan man t ex vilja undersöka om det finns skillnade i btygen mellan kvinnliga och manliga studerande.

Vektor av stickprovsmedelvärden

Givet ett stickprovsmedelvärde för en enskild variabel k

$$\bar{x}_k = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_{jk}$$

definieras

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \vdots \\ \bar{x}_p \end{pmatrix}$$

Stickprovskovariansmatris

Givet stickprovskovarianser

$$s_{ij} = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}(x_{ki}-\bar{x}_i)(x_{kj}-\bar{x}_j)$$

mellan par av variabler i och j, definieras

$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \dots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \dots & s_{pp} \end{pmatrix}.$$

s_{ii} betecknas också s_i^2.

Stickprovskorrelationsmatris

Givet stickprovskorrelationer

$$r_{ij} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}s_{jj}}}$$

mellan par av variabler i och j, definieras

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1p} \\ r_{21} & 1 & \dots & r_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{p1} & r_{p2} & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

1.5 Avstånd

Euklidiska avståndet mellan två punkter i det p-dimensionella rummet R^p, $P = (x_1, x_2, \ldots, x_p)$ och $Q = (y_1, y_2, \ldots, y_p)$:

$$d(P,Q) = \sqrt{\sum_1^p (x_i - y_i)^2}$$

Avstånd till origo ($Q = \mathbf{0} = (0,0,\ldots,0)$):

$$d(P,\mathbf{0}) = \sqrt{\sum_1^p x_i^2}$$

Viktade avstånd:

$$d(P,\mathbf{0}) = \sqrt{\sum_1^p a_{ii}x_i^2 + 2\sum_{i<j} a_{ij}x_ix_j}$$

Allmän definition: En avståndsfunktion (Ett avståndsmått) är en funktion som uppfyller

$$d(P,Q) = d(Q,P) \tag{1}$$
$$d(P,Q) > 0 \quad \text{om } P \neq Q \tag{2}$$
$$d(P,Q) = 0 \quad \text{om } P = Q \tag{3}$$
$$d(P,Q) \leq d(P,R) + d(R,Q) \tag{4}$$

(triangelolikheten)

2 Matrisalgebra och slumpvektorer

(kolumn) vektor $\boldsymbol{x}$ är en ordnad n-tippel av tal:

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_n \end{pmatrix}$$

med element x_i. (Talen x_i är i fortsättningen reella.)

Transponerad vektor eller radvektor

$$\boldsymbol{x}' = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

Multiplikation av vektor med skalär (konstant):

$$c\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} cx_1 \\ cx_2 \\ . \\ . \\ cx_n \end{pmatrix}$$

Addition av två vektorer $\boldsymbol{x}$ och $\boldsymbol{y}$:

$$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_n \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ . \\ . \\ y_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} x_1+y_1 \\ x_2+y_2 \\ . \\ . \\ x_n+y_n \end{pmatrix}$$

Längden av en vektor $\boldsymbol{x}$:

$$L_{\boldsymbol{x}}=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$$

Inre produkt (eller skalärprodukt) (eng: inner product, scalar product):

$$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}=x_1y_1+x_2y_2+\cdots+x_ny_n=\boldsymbol{y}'\boldsymbol{x}$$

Längden av $\boldsymbol{x}$ kan skrivas

$$L_{\boldsymbol{x}}=\sqrt{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}}$$

Om $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}=0$ sägs $\boldsymbol{x}$ och $\boldsymbol{y}$ vara ortogonala, vilket skrivs som $\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{y}$.

Vinkeln θ mellan två vektorer $\boldsymbol{x}$ och $\boldsymbol{y}$ definieras av

$$\cos\theta=\frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}}{L_{\boldsymbol{x}}L_{\boldsymbol{y}}}$$

Linjärt oberoende vektorer Vektorerna $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_k$ sägs vara *linjärt beorende* om det finns tal $c_1,c_2,\ldots,c_k$ som inte alla är 0, sådana att

$$\sum_{i=1}^{k}c_i\boldsymbol{x}_i=\mathbf{0}$$

Matriser

En matris är ett rektangulärt schema av (reella) tal ordnade i n rader och p kolumner.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{np} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{A}$ sägs ha dimensionerna $n \times p$ (n gånger p). Elementet a_{ij} är det tal som står i rad i och kolumn j (element (i,j)).

Transponering: Matrisen $\boldsymbol{A}'$ (eller $\boldsymbol{A}^T$) (*vilket läses* $\boldsymbol{A}$ *transponat*) är den matris vars element (i,j) är detsamma som element (j,i) i $\boldsymbol{A}$. Transponering överför rader till kolonner och vice versa.

Ex: $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}$ ger $\boldsymbol{A}' = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ -1 & 5 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$.

Addition och subtraktion: Om två matriser $\boldsymbol{A}$ och $\boldsymbol{B}$ har samma dimensioner definieras addition ($\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}$) och subtraktion ($\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}$) av matriserna genom elementvis addition resp subtraktion.

Ex: $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}$ och $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & -6 \\ 2 & -3 & 0 \end{pmatrix}$ ger

$$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 8 & 1 & -5 \\ 3 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

Multiplikation: Om $\boldsymbol{A}$ är $n \times k$ och $\boldsymbol{B}$ är $k \times p$ definieras produkten $(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})$ av matriserna som den matris $\boldsymbol{C}$ (med dimensioner $n \times p$) vars element (i, j) (c_{ij}) ges av

$$c_{ij} = \sum_{\ell=1}^{k} a_{i\ell} b_{\ell j}$$

Ex: $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$ och $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 6 \end{pmatrix}$ ger $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 26 & 39 \\ 12 & 18 \end{pmatrix}$.

Fortsättningsvis skrivs $\boldsymbol{AB}$ istället för $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}$. Matrismultiplikation är *associativ* dvs

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{BC}) = (\boldsymbol{AB})\boldsymbol{C}$$

men *inte kommutativ*

$$\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$$

Kvadratisk matris: En matris med $n = p$, dvs lika många rader som kolonner.

Ex: $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$ är kvadratisk.

Symmetrisk matris: En kvadratisk matris med element (i, j) lika med element (j, i), dvs $\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}$.

Ex: $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 5 & 1 \end{pmatrix}$ är symmetrisk.

Definition: Determinanten till en kvadratisk matris $\boldsymbol{A}$, $(k \times k)$ $|\boldsymbol{A}|$, eller det($\boldsymbol{A}$), är ett tal sådant att

$$|A| = a_{11} \quad \text{om } k = 1$$

$$|A| = \sum_{j=1}^{k} a_{1k}(-1)^{1+j}|A_{1j}|$$

där A_{1j} är den matris som erhålls om rad 1 och kolumn j stryks.

Ex: Om

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

så är det$(\boldsymbol{A}) = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}$.

Definition Rangen hos en matris (eng: rank) är antalet linjärt oberoende kolumner.

Definition En kvadratisk matris $\boldsymbol{A}$ är *icke-singulär* om ekvationssystemet $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ endast har lösningen $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$.

Räkneregler för determinanter:

1. $|\boldsymbol{A}'| = |\boldsymbol{A}|$
2. Om en rad eller en kolonn i $\boldsymbol{A}$ är noll är $|\boldsymbol{A}| = 0$
3. Om två rader eller kolonner är identiska är $|\boldsymbol{A}| = 0$
4. Om $\boldsymbol{A}$ är icke-singulär är $|\boldsymbol{A}^{-1}| = 1/|\boldsymbol{A}|$.
5. $|\boldsymbol{AB}| = |\boldsymbol{A}||\boldsymbol{B}|$
6. $|c\boldsymbol{A}| = c^k|\boldsymbol{A}|$

Definition Spåret av $\boldsymbol{A}$, kvadratisk, (eng: trace), betecknas $tr(\boldsymbol{A})$ och är summan av elementen i huvuddiagonalen i $\boldsymbol{A}$.

$$tr(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{k} a_{ii}$$

Det gäller att

$$tr(\boldsymbol{AB}) = tr(\boldsymbol{BA})$$

Diagonalmatris: En kvadratisk matris i vilken alla element utanför huvuddiagonalen är noll kallas en *diagonalmatris*.

Ex:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

Enhetsmatris En diagonalmatris med enbart ettor i huvuddiagonalen kallas *enhetsmatrisen* och betecknas $\boldsymbol{I}$. Det gäller för godtyckligt $\boldsymbol{A}$ (för vilken multiplikation är definierad) att

$$\boldsymbol{AI} = \boldsymbol{IA} = \boldsymbol{A}$$

Ex:

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

Ortogonal matris: En kvadratisk matris $\boldsymbol{A}$ sägs vara *ortogonal* om $\boldsymbol{AA'} = \boldsymbol{I}$.

Ex:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Inversmatris

Inversen till en kvadratisk matris $\boldsymbol{A}$ betecknas $\boldsymbol{A}^{-1}$ (om den existerar) och är sådan att

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$$

Om $\boldsymbol{A}$ är en diagonalmatris så existerar $\boldsymbol{A}^{-1}$.

Om $\boldsymbol{A}$ är ortogonal så existerar $\boldsymbol{A}^{-1}$.

Egenvärden och egenvektorer

En kvadratisk matris $\boldsymbol{A}$ har egenvärdet λ och egenvektorn $\boldsymbol{e}$ om

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e} = \lambda \boldsymbol{e}$$

Om $\boldsymbol{A}$ är en symmetrisk $k \times k$ matris finns k egenvärden och egenvektorer $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k$ resp $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_k$.

Om $\boldsymbol{e}$ är en egenvektor till $\boldsymbol{A}$ med egenvärde λ så är $b\boldsymbol{e}$ också en egenvektor till $\boldsymbol{A}$ med egenvärde λ.

När vi söker efter egenvektorer och motsvarande egenvärden söker vi $\boldsymbol{x}$ sådana att

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x} \quad \text{eller} \quad (\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

Om $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}$ är singulär har ekvationssystemet endast lösningen $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$.

För att det skall finnas egenvektorer måste alltså $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}$ vara singulär och således

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0$$

Denna ekvation kallas *karakteristiska ekvationen*.

Ex:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3-\lambda & 2 \\ 2 & 3-\lambda \end{pmatrix}$$

Karateristiska ekvationen blir

$$(3-\lambda)(3-\lambda) - 2 \cdot 2 = 0$$

eller

$$\lambda^2 - 6\lambda + 5 = 0$$

Denna har lösningarna

$$\lambda_1 = 5 \quad \text{och} \quad \lambda_2 = 1$$

Sök egenvektor $\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{12} \end{pmatrix}$ svarande mot λ_1:

$$3e_{11} + 2e_{12} = \lambda_1 e_{11}$$

$$2e_{11} + 3e_{12} = \lambda_1 e_{12}$$

ger

$$2e_{11} = 2e_{12}$$

$$e_{11} = e_{12}$$

Eftersom $e_{12}^2 = 1 - e_{11}^2$ så

$$e_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

*

Ex:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4-\lambda & 2 \\ 2 & 3-\lambda \end{pmatrix}$$

Karateristiska ekvationen blir

$$(4-\lambda)(3-\lambda) - 2 \cdot 2 = 0$$

eller

$$\lambda^2 - 7\lambda + 8 = 0$$

Denna har lösningarna

$$\lambda_1 = \frac{7}{2} + \frac{\sqrt{17}}{2} \quad \text{och} \quad \lambda_2 = \frac{7}{2} - \frac{\sqrt{17}}{2}$$

Sök egenvektor svarande mot λ_1:

$$4e_{11} + 2e_{12} = \lambda_1 e_{11}$$

$$2e_{11} + 3e_{12} = \lambda_1 e_{12}$$

ger

$$\frac{\sqrt{17}-1}{2} e_{11} = 2e_{12}$$

$$e_{11} = \frac{\sqrt{17}+1}{4} e_{12}$$

Eftersom $e_{12}^2 = 1 - e_{11}^2$ så

$$e_{12} = \frac{16}{34 + 2\sqrt{17}}$$

*

Om $\boldsymbol{A}$ är en symmetrisk (reell) $k \times k$ matris så är egenvektorerna hörande till olika egenvärden ortogonala.

$$\boldsymbol{a}\boldsymbol{e}_i = \lambda_i \boldsymbol{e}_i, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_j = \lambda_j \boldsymbol{e}_i$$

Symmetrin gör att $\boldsymbol{e}_i'\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{e}_j'\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_i$ så att $\boldsymbol{e}_i'\lambda_j\boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{e}_j'\lambda_i\boldsymbol{e}_i$. Om $\lambda_i \neq \lambda_j$ inträffar detta endast om $\boldsymbol{e}_j'\boldsymbol{e}_i = 0$, dvs $\boldsymbol{e}_j \perp \boldsymbol{e}_i$.

2.3 Positivt definita matriser

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i' = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}'$$

där

$$\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_k)$$

är ortogonal, dvs $\boldsymbol{P}'\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}' = \boldsymbol{I}$ och

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0 \\ . & & & \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_k \end{pmatrix}$$

är diagonal.

Uttrycket $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ kallas för en *kvadratisk form*.

Definition Om $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq 0$ för alla $\boldsymbol{x}$ sägs $\boldsymbol{A}$ vara *icke-negativt definit*. Om likhet gäller endast för $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$, så sägs $\boldsymbol{A}$ vara *positivt definit*.

Ex. $2x_1^2 + x_2^2 \geq 0$. Detta kan skrivas $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ med

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

och $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$

Om $\boldsymbol{A}$ är positivt definit så är alla egenvärden till $\boldsymbol{A}$ positiva. (Om $\boldsymbol{A}$ är icke-negativt definit gäller att alla egenvärden till $\boldsymbol{A}$ är icke negativa.)

2.4 Kvadratrotmatris

En matris $\boldsymbol{B}$ sådan att $\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}$ sägs vara en kvadratrotmatris till $\boldsymbol{A}$. Vi använder beteckningen $\boldsymbol{A}^{1/2}$ för $\boldsymbol{B}$.

Om $\boldsymbol{A}$ är positivt definit finns en sådan matris: Om $\boldsymbol{A} : k \times k$ p.d. så

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i'$$

där $\lambda_i > 0$, eller

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{P}'$$

enligt ovan.

Definiera $\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}$ genom

$$\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & \dots & 0 \\ . & & & \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{\lambda_k} \end{pmatrix}$$

och

$$\boldsymbol{A}^{1/2} = \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \boldsymbol{P}'$$

Då gäller att

$$\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \cdot \boldsymbol{\Lambda}^{1/2} = \boldsymbol{\Lambda}$$

och

$$\boldsymbol{A}^{1/2} \cdot \boldsymbol{A}^{1/2} = \boldsymbol{A}$$