Anales de la Real Academia de Doctores de España
Volumen 9, pp. 135-159, 2005

UN NUEVO MÉTODO PARA EL CÁLCULO DE LA INVERSA DE UNA MATRIZ REAL SIMÉTRICA DEFINIDA POSITIVA

FCO. JAVIER DÍAZ-LLANOS SAINZ-CALLEJA
JOSÉ LUIS VALENCIA DELFA

RESUMEN

El objetivo de este artículo es el de encontrar una fórmula general para la inversa de una matriz real cuadrada de orden p (p>1) (siendo p el número de variables explicativas en un modelo de regresión lineal múltiple), regular y triangular inferior L basándonos en la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques. De esta manera, mediante una simple multiplicación de dos matrices cuadradas de orden p, regulares y triangulares podemos obtener la inversa de una matriz real simétrica definida positiva. Mostramos tres ejemplos didácticos, el primero aplicando el proceso metodológico que proponemos en este artículo y los otros dos aplicando directamente una vez la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular a la matriz real simétrica definida positiva de orden 4.

Consideramos que esta matriz real proviene de un modelo de regresión lineal múltiple. El programa que realiza los cálculos se compone de tres funciones fundamentales creadas mediante el lenguaje matricial IML de SAS. Para cualquier información referente al programa consultese al profesor José Luis Valencia Delfa: e-mail:joseval@estad.ucm.es

INTRODUCCIÓN

Aunque es bien sabido por todos que existen números algoritmos suficientemente certificados para calcular la inversa de una matriz real simétrica definida positiva, no obstante, en este artículo vamos a mostrar un nuevo método basado en la aplicación reiterada de la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques a la matriz real cuadrada, regular y triangular inferior L y a las sub-matrices de L de orden p (p>1). Es usual que los investigadores deseen encontrar una relación lineal entre una variable a explicar y p explicativas. En la mayoría de los casos, sabemos por experiencia que p no es superior a 10. Así pues, bajo esta situación, el algoritmo que proponemos para llegar a la solución final es suficientemente rápido y eficaz. Nosotros hemos diseñado este algoritmo con el fin de implementarlo al algoritmo que nos permite calcular los coeficientes de regresión mediante el método de **regresión por etapas** (1). Resulta sorprendente que el método de **regresión por etapas (stagewise regression)** teniendo propiedades más interesantes que el método de **regresión paso a paso (stepwise regression)**, que nosotros sepamos, los paquetes de programas de Econometría comercializados aún no contienen dicho método.

Aunque el método de la **regresión por etapas** está expuesto en el libro de Bourbonnais (2) nosotros lo hemos desarrollado aún más, ilustrando cada uno de los pasos con un ejemplo (1).

MATERIAL

A partir de la matriz X —no aleatoria— de dimensiones (n, p+1) asociada a un modelo de regresión lineal múltiple construimos la matriz,

$$X^T X$$

Esta matriz es real simétrica definida positiva.

Nosotros vamos a mostrar el cálculo de su inversa en el caso de que,

$$Det\left(X^T X\right) \neq 0$$

MÉTODO

Antes de aplicar el método que proponemos es conveniente expresar

$$\left(X^T X \right)^{-1} \textit{en función de}\, \overline{x}\; y \left(\chi^T \chi \right)^{-1}$$

dado que, de esta manera, en lugar de invertir una matriz de orden p+1 se invierte una matriz de orden p.

PROCEDIMIENTO

1. Particionamos la matriz X de la siguiente manera

$$X = \left(1_n \,|\, X_1 \right)$$

donde,

$$1_n : \textit{es una matriz de dimensiones}\, (n,1)$$
$$X_1 : \textit{es una matriz de dimensiones}\, (n,p)$$

2. Múltiplicación de matrices

$$X^T X = \begin{pmatrix} 1_n^T \\ - \\ X_1^T \end{pmatrix} (1_n \mid X_1) = \begin{pmatrix} 1_n^T 1_n & 1_n^T X_1 \\ X_1^T 1_n & X_1^T X_1 \end{pmatrix}$$

3. Aplicación de la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular (anexo IV).

Operando convenientemente, llegamos sin dificultad a la fórmula general de la inversa de la matriz,

$$\left(X^T X \right)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} + \overline{x}^T \left(\chi^T \chi \right)^{-1} \overline{x} & -\overline{x}^T \left(\chi^T \chi \right)^{-1} \\ -\left(\chi^T \chi \right)^{-1} \overline{x} & \left(\chi^T \chi \right)^{-1} \end{pmatrix}$$

donde,

$\overline{x}$: es una matriz de dimensiones $(p,1)$

$$\overline{x} = \begin{pmatrix} \overline{x}_1 \\ \overline{x}_2 \\ . \\ . \\ . \\ \overline{x}_p \end{pmatrix}$$

donde los elementos de la columna de la matriz $\overline{x}$

representan las medias de las variables a explicar

en un modelo de regresión lineal múltiple.

χ : es una matriz de dimensiones (p, p)

$$\chi = X_1 - 1_n \overline{x}^T$$

donde χ representa la matriz de datos X_1

centrada por columnas.

Para encontrar la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden p, regular y triangular inferior, proponemos el esquema metodológico que desglosamos en cuatro etapas.

Primera etapa

Factorización de una matriz real simétrica definida positiva (3, 4, 5, 6, 7).

Segunda etapa

Aplicaciones sucesivas de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques a la matriz L y a las sub-matrices de L de orden p (p>1).

Tercera etapa

Factorización y determinante de una matriz real cuadrada de orden n, regular (5, 6).

Cuarta etapa

Multiplicación de matrices reales cuadradas de orden p, regulares y triangulares.

De las etapas cuatro etapas que integran la estrategia metodológica la primera, tercera y cuarta son conocidas. A título de recordatorio incluimos la primera y la tercera en los anexos I y II, respectivamente. La fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular que hemos retenido para nuestros cálculos se contempla en el anexo IV.

Dado que la cuarta etapa es inmediata, no la contemplamos en ningún anexo.

PROCEDIMIENTO

Una vez realizada la factorización de una matriz real simétrica definida positiva de orden p, tal como mostramos a continuación,

$$\chi^T \chi = L\, L^T$$

donde,

L : es una matriz cuadrada de orden p, regular y triangular inferior.

L^T : es una matriz cuadrada de orden p, regular y triangular superior.

aplicamos sucesivamente la fórmula general de inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques a la matriz L y a las correspondientes submatrices de L de orden p (p>1) hasta llegar al resultado final.

Entre las diversas formas en que puede encontrarse la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques, utilizaremos la retenida por el Grupo I (anexo IV).

Por consiguiente, para el cálculo de la inversa de L aplicamos dicha fórmula reiteradas veces hasta encontrar la fórmula general de la inversa de L. Si L es de orden p (p>1) tenemos que aplicar la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques p-1 veces a la matriz L de orden p.

Con el fin de no enmascarar con cálculos simples este artículo, omitimos los cálculos intermedios para llegar a las inversas de las matrices L de orden p (p>1) en cada una de las etapas que mostraremos a continuación.

Cuando p=1, el cálculo de

$$\left(X^T X \right)^{-1} \textit{es inmediato ya que} \left(\chi^T \chi \right)^{-1} \textit{es un escalar.}$$

En primer lugar, consideramos que p=2; es decir, que L es de orden 2.

En este caso, la matriz L de orden 2 la particionamos en bloques de la siguiente manera:

$$L = \left(\begin{array}{c|c} l_{11} & 0 \\ \hline l_{21} & l_{22} \end{array} \right)$$

Aplicando una vez la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques (anexo IV) llegamos operando, convenientemente, a la inversa de L.

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{l_{11}} & 0 \\ -\dfrac{Det\,(L_2^1)}{l_{11}\,l_{22}} & \dfrac{1}{l_{22}} \end{pmatrix}$$

donde,

$$Det\,(L_2^1)$$

es el determinante de la sub-matriz L de orden 1, cuyo elemento está situado en el punto de intersección de la fila 2 con la columna 1 de L.

En segundo lugar, consideramos que p=3, es decir, que L es de orden 3.

En este caso, la matriz L de orden 3 la particionamos en bloques de la siguiente manera,

$$L = \left(\begin{array}{c|cc} l_{11} & 0 & 0 \\ \hline l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{array}\right)$$

Aplicando en primer lugar la fórmula general de la inversa de la matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques (anexo IV) a la matriz L y en segundo lugar a la sub-matriz de L definida de la siguiente manera:

$$\left(\begin{array}{c|c} l_{22} & 0 \\ \hline l_{32} & l_{33} \end{array}\right)$$

llegamos operando, convenientemente, a la inversa de L.

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{l_{11}} & 0 & 0 \\ -\dfrac{Det\,(L_2^1)}{l_{11}\,l_{22}} & \dfrac{1}{l_{22}} & 0 \\ \dfrac{Det\,(L_{23}^{12})}{l_{11}\,l_{22}\,l_{33}} & -\dfrac{Det\,(L_3^2)}{l_{22}\,l_{33}} & \dfrac{1}{l_{33}} \end{pmatrix}$$

donde,

$$Det\,(L_2^1)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 1 cuyo elemento está situado en el punto de intersección de la fila 2 con la columna 1 de L,

$$Det\,(L_3^2)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 1 cuyo elemento está situado en el punto de intersección de la fila 3 con la columna 2 de L,

$$Det\,(L_{23}^{12})$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 2 cuyos elementos están situados en los puntos de intersección de las filas 2 y 3 con las columnas 1 y 2 de L.

En tercer lugar, consideramos que p=4, es decir, que L es de orden 4.

En este caso, la matriz L de orden 4 la particionamos en bloques de la siguiente manera,

$$L = \left(\begin{array}{c|ccc} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \hline l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{array}\right)$$

Aplicando en primer lugar la fórmula general de la inversa de la matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques (anexo IV) a la matriz L, en segundo lugar a la sub-matriz de L definida de la siguiente manera,

$$\left(\begin{array}{c|cc} l_{22} & 0 & 0 \\ \hline l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{array}\right)$$

y, en tercer lugar, a la sub-matriz de L definida de la siguiente manera,

$$\left(\begin{array}{c|c} l_{33} & 0 \\ \hline l_{43} & l_{44} \end{array}\right)$$

llegamos operando, convenientemente, a la inversa de L

$$L^{-1}=\begin{pmatrix} \dfrac{1}{l_{11}} & 0 & 0 & 0 \\ -\dfrac{Det\,(L_2^1)}{l_{11}\,l_{22}} & \dfrac{1}{l_{22}} & 0 & 0 \\ \dfrac{Det\,(L_{23}^{12})}{l_{11}\,l_{22}\,l_{33}} & -\dfrac{Det\,(L_3^2)}{l_{22}\,l_{33}} & \dfrac{1}{l_{33}} & 0 \\ -\dfrac{Det\,(L_{234}^{123})}{l_{11}\,l_{22}\,l_{33}\,l_{44}} & \dfrac{Det\,(L_{34}^{23})}{l_{22}\,l_{33}\,l_{44}} & -\dfrac{Det\,(L_4^3)}{l_{33}\,l_{44}} & \dfrac{1}{l_{44}} \end{pmatrix}$$

donde,

$$Det\,(L_2^1)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 1, cuyo elemento está situado en el punto de intersección de la fila 2 con la columna 1 de L.

$$Det\left(L_3^2\right)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 1 cuyo elemento está situado en el punto de intersección de la fila 3 con la columna 2 de L,

$$Det\left(L_4^3\right)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 1 cuyo elemento está situado en el punto de intersección de la fila 4 con la columna 3 de L,

$$Det\left(L_{23}^{12}\right)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 2 cuyos elementos están situados en los puntos de intersección de las filas 2 y 3 con las columnas 1 y 2 de L,

$$Det\left(L_{34}^{23}\right)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 2 cuyos elementos están situados en los puntos de intersección de las filas 3 y 4 con las columnas 2 y 3 de L,

$$Det\left(L_{234}^{123}\right)$$

es el determinante de la sub-matriz de L de orden 3 cuyos elementos están situados en los puntos de intersección de las filas 2,3 y 4 con las columnas 1, 2 y 3 de L.

A partir de este momento, observando la estructura de las fórmulas de las inversas ya obtenidas, estamos en condiciones de expresar la fórmula general de la inversa de la matriz cuadrada de orden p, regular y triangular inferior de la siguiente manera,

fila i, columna j

(j < i)

$$\lambda_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{Det\left(L_{j+1\ j+2\ldots i}^{j\ \ j+1\ldots i-1}\right)}{l_{jj}\, l_{j+1\, j+1} \cdots\cdots l_{ii}}$$

fila i, columna i

$$\lambda_{ii} = \frac{1}{l_{ii}}$$

Para el cálculo de los determinantes de las sub-matrices de L de orden p (p>1), aplicamos la factorización L U (anexo 2).

El número y orden de los determinantes de las sub-matrices de L cuando L es de orden 2, 3, 4, 5, 6 y 7 se contempla en el anexo III.

Mediante una simple multiplicación de matrices cuadradas de orden n, regulares y triangulares, obtenemos la inversa de la matriz real simétrica definida positiva.

$$\left(\chi^T \chi\right)^{-1} = \left(L^{-1}\right)^T L^{-1}$$

Finalmente, si deseamos obtener la inversa de la matriz real simétrica definida positiva

$$X^T X$$

tenemos que calcular:

1. $\frac{1}{n} + \overline{x}^T \left(\chi^T \chi\right)^{-1} \overline{x}$

2. $\overline{x}^T \left(\chi^T \chi\right)^{-1}$

3. $\left(\chi^T \chi\right)^{-1} \overline{x}$

1. EJEMPLO NUMÉRICO APLICANDO NUESTRO MÉTODO

En el desarrollo del ejemplo numérico realizado a mano tan sólo detallamos los pasos a seguir para llegar a la inversa de la matriz cuadrada de orden 3, regular y triangular inferior, ya que el proceso de factorización de una matriz real simétrica definida positiva y de una matriz real cuadrada de orden n, regular es conocido desde el año 1938 (3).

PROCEDIMIENTO

1. Partimos de una matriz X —no aleatoria— de dimensiones 5 × 4 asociada a un modelo de regresión lineal múltiple,

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} & x_1 & x_2 & x_3 \end{array} \\ X = & \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 5 & 6 \\ 1 & 3 & 6 & 7 \\ 1 & 4 & 7 & 10 \\ 1 & 5 & 9 & 11 \end{pmatrix} \end{array}$$

2. Construimos la matriz

$$\chi = \begin{pmatrix} -2{,}0 & -3{,}8 & -4{,}4 \\ -1{,}0 & -0{,}8 & -1{,}4 \\ 0{,}0 & 0{,}2 & -0{,}4 \\ 1{,}0 & 1{,}2 & 2{,}6 \\ 2{,}0 & 3{,}2 & 3{,}6 \end{pmatrix}$$

3. Multiplicación de matrices

$$\chi^T \chi = \begin{pmatrix} 10{,}0 & 16{,}0 & 20{,}0 \\ 16{,}0 & 26{,}8 & 32{,}4 \\ 20{,}0 & 32{,}4 & 41{,}2 \end{pmatrix}$$

Esta matriz es una matriz real simétrica definida positiva y, por lo tanto, podemos aplicar el método expuesto en este artículo.

Cálculo de la matriz cuadrada de orden 3, regular y triangular inferior: L

Como resultado de la factorización de la matriz real simétrica definida positiva (anexo I) llegamos, sin dificultad, a la matriz cuadrada de orden 3, regular y triangular inferior: L

$$L = \begin{pmatrix} \sqrt{10} & 0 & 0 \\ \frac{16}{\sqrt{10}} & 2\sqrt{\frac{3}{10}} & 0 \\ \frac{20}{\sqrt{10}} & \frac{1}{5}\sqrt{\frac{10}{3}} & \frac{4}{\sqrt{15}} \end{pmatrix}$$

Cálculo de la inversa de la matriz cuadrada de orden 3, regular y triangular inferior

Dado que se trata de invertir una matriz cuadrada de orden 3, regular y triangular inferior, tenemos que calcular tal como indicamos en la Tabla I contenida en el anexo III los siguientes determinantes,

— 2 determinantes de sub-matrices de L de orden 1.

— 1 determinante de sub-matrices de L de orden 2.

— Cálculo de 2 determinantes de sub-matrices de L de orden 1

$$Det\left(L_2^1\right) = Det\left(\frac{16}{\sqrt{15}}\right) = \frac{16}{\sqrt{16}}$$

$$Det\left(L_3^2\right) = Det\left(\frac{1}{5}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) = \frac{1}{5}\sqrt{\frac{10}{3}}$$

— Cálculo de 1 determinante de la sub-matriz de L de orden 2

$$Det\left(L_{23}^{12}\right) = Det\begin{pmatrix} \frac{16}{\sqrt{10}} & 2\sqrt{\frac{3}{10}} \\ \frac{20}{\sqrt{10}} & \frac{1}{5}\frac{\sqrt{10}}{3} \end{pmatrix} =$$

$$= Det\left[\begin{pmatrix} \frac{16}{\sqrt{10}} & 0 \\ \frac{20}{\sqrt{10}} & -\frac{11}{20}\sqrt{\frac{10}{3}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \frac{\sqrt{3}}{8} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = Det\begin{pmatrix} \frac{16}{\sqrt{10}} & 0 \\ \frac{20}{\sqrt{10}} & -\frac{11}{20}\sqrt{\frac{10}{3}} \end{pmatrix} = -\frac{44}{15}\sqrt{3}$$

Dado que ya tenemos todos los elementos que integran la inversa de la matriz real triangular inferior de orden 3, estamos en condiciones de expresar dicha matriz de la siguiente manera,

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} & 0 & 0 \\ -\frac{4}{5}\sqrt{\frac{10}{3}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{10}{3}} & 0 \\ -\frac{11}{30}\sqrt{15} & -\frac{\sqrt{15}}{12} & \frac{\sqrt{15}}{4} \end{pmatrix}$$

A partir de este momento estamos en condiciones de calcular

$$\left(\chi^T \chi\right)^{-1} = \left(L^T\right)^{-1} L^{-1}$$

$$\left(\chi^T \chi\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 4,2500 & -0,8750 & -1,3750 \\ -0,8750 & 0,9375 & -0,3125 \\ -1,3750 & -0,3125 & 0,9375 \end{pmatrix}$$

Finalmente, para obtener la inversa de la matriz nos falta por calcular los siguientes productos de matrices:

$$\frac{1}{n}+\overline{x}^{T}\left(\chi^{T}\chi\right)^{-1}\overline{x}=3$$

$$-\overline{x}^{T}\left(\chi^{T}\chi\right)^{-1}=\left(2{,}5000\ \ -0{,}5000\ \ -1{,}000\right)$$

$$-\left(\chi^{T}\chi\right)^{-1}\overline{x}=\begin{pmatrix}2{,}5000\\-0{,}5000\\-1{,}0000\end{pmatrix}$$

Por consiguiente, la inversa de la matriz real simétrica definida positiva con cuatro decimales es la que mostramos a continuación,

$$\left(X^{T}X\right)^{-1}=\begin{pmatrix}3{,}0000 & 2{,}5000 & -0{,}5000 & -1{,}0000\\2{,}5000 & 4{,}2500 & -0{,}8750 & -1{,}3750\\-0{,}5000 & -0{,}8750 & 0{,}9375 & -0{,}3125\\-1{,}0000 & -1{,}3750 & -0{,}3125 & 0{,}9375\end{pmatrix}$$

2. EJEMPLO NUMÉRICO APLICANDO DIRECTAMENTE UNA VEZ LA FÓRMULA GENERAL DE INVERSA DE UNA MATRIZ REAL CUADRADA DE ORDEN N, REGULAR PARTICIONADA EN BLOQUES A LA MATRIZ

$$X^{T}X$$

Este método se contempla en la mayoría de los libros de Álgebra.

Aplicamos la fórmula general de la inversa de una matriz cuadrada de orden n, regular (anexo IV).

PROCEDIMIENTO

1. Particionamos en bloques la matriz real simétrica definida positiva de la siguiente manera:

$$P=\begin{pmatrix}5 & 15\\15 & 55\end{pmatrix}\quad Q=\begin{pmatrix}29 & 37\\103 & 131\end{pmatrix}$$

$$R=\begin{pmatrix}29 & 103\\37 & 131\end{pmatrix}\quad S=\begin{pmatrix}195 & 247\\247 & 315\end{pmatrix}$$

2. Calculamos la inversa de la matriz P

$$P^{-1}=\begin{pmatrix} 1,1 & -0,3 \\ -0,3 & 0,1 \end{pmatrix}$$

3. Calculamos el producto de matrices

$$R\,P^{-1}\,Q=\begin{pmatrix} 193,8 & 246,6 \\ 246,6 & 313,8 \end{pmatrix}$$

4. Calculamos la diferencia de dos matrices

$$S - RP^{-1}\,Q=\begin{pmatrix} 1,2 & 0,4 \\ 0,4 & 1,2 \end{pmatrix}$$

5. Calculamos la inversa de la matriz

$$\left(S - RP^{-1}\,Q \right)^{-1}=\begin{pmatrix} 0,9375 & -0,3125 \\ -0,3125 & 0,9375 \end{pmatrix}$$

6. Calculamos el producto de matrices

$$P^{-1}\,Q\,W=\begin{pmatrix} 0,500 & 1,000 \\ 0,875 & 1,375 \end{pmatrix}$$

7. Calculamos el producto de matrices

$$W\,R\,P^{-1}=\begin{pmatrix} 0,5 & 0,875 \\ 1,0 & 1,375 \end{pmatrix}$$

8. Calculamos el producto de matrices

$$Q\,W\,R\,P^{-1}=\begin{pmatrix} 51,5 & 76,25 \\ 182,5 & 271,25 \end{pmatrix}$$

9. Calculamos la suma de matrices

$$I_s+Q\,W\,R\,P^{-1}=\begin{pmatrix} 52,5 & 76,25 \\ 182,5 & 271,25 \end{pmatrix}$$

10. Calculamos el producto de matrices

$$P^{-1}\left(I_s + Q\,W\,R\,P^{-1} \right) = \begin{pmatrix} 3,0 & 2,50 \\ 2,5 & 4,25 \end{pmatrix}$$

En estos momentos estamos en condiciones de construir la inversa de la matriz real simétrica definida positiva,

$$\left(X^T X \right)^{-1} = \begin{pmatrix} 3,0000 & 2,5000 & -0,5000 & -1,0000 \\ 2,5000 & 4,2500 & -0,8750 & -1,3750 \\ -0,5000 & -0,8750 & 0,9375 & -0,3125 \\ -1,0000 & -1,3750 & -0,3125 & 0,9375 \end{pmatrix}$$

3. EJEMPLO NUMÉRICO APLICANDO DIRECTAMENTE UNA VEZ LA FÓRMULA GENERAL DE LA INVERSA DE UNA MATRIZ REAL CUADRADA DE ORDEN N, REGULAR PARTICIONADA EN BLOQUES A LA MATRIZ

$$X^T X = \begin{pmatrix} 1_n^T 1_n & 1_n^T X_1 \\ X_1^T 1_n & X_1^T X_1 \end{pmatrix}$$

donde,

X_1 *: es una matriz de dimensiones* $(n,\ p)$

1_n *: es una matriz de dimensiones* $(n,\ 1)$

y después otra vez a la matriz

$$\chi^T \chi$$

donde,

χ *: es una matriz de dimensiones (p, p)*

$$\chi = X_1 - 1_n^T\,\overline{x}$$

$\overline{x}$ *: es una matriz de dimensiones (p, 1)*

$$\overline{x} = \begin{pmatrix} \overline{x}_1 \\ \overline{x}_2 \\ . \\ . \\ . \\ \overline{x}_p \end{pmatrix}$$

PROCEDIMIENTO

1. Encontrar la fórmula general de la inversa de la matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques de

$$X^T X \text{ en función } \bar{x} \text{ y } \left(\chi^t \chi\right)^{-1}$$

Aplicando la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular (anexo IV) a la matriz

$$X^T X$$

y operando, convenientemente, llegamos al siguiente resultado,

$$\left(X^T X\right)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} + \bar{x}^T \left(\chi^T \chi\right)^{-1} \bar{x} & -\bar{x}^T \left(\chi^T \chi\right)^{-1} \\ -\left(\chi^T \chi\right)^{-1} \bar{x} & \left(\chi^T \chi\right)^{-1} \end{pmatrix}$$

De la mera observación de esta fórmula se desprende que podemos calcular la inversa de una matriz de orden p+1 cálculando la inversa de una matriz de orden p más unas simples multiplicaciones de matrices.

PROCEDIMIENTO

1. *Cálculo de χ.*

$$\chi = \begin{pmatrix} -2{,}0 & -3{,}8 & -4{,}4 \\ -1{,}0 & -0{,}8 & -1{,}4 \\ 0{,}0 & 0{,}2 & -0{,}4 \\ 1{,}0 & 1{,}2 & 2{,}6 \\ 2{,}0 & 3{,}2 & 3{,}6 \end{pmatrix}$$

2. *Cálculo del producto de matrices : $\chi^T \chi$*

$$\chi^T \chi = \begin{pmatrix} 10{,}0 & 16{,}0 & 20{,}0 \\ 16{,}0 & 26{,}8 & 32{,}4 \\ 20{,}0 & 32{,}4 & 41{,}2 \end{pmatrix}$$

3. Particionamos en bloques la matriz real simétrica definida positiva de la siguiente manera,

$$P = 10 \qquad Q = \begin{pmatrix} 16 & 20 \end{pmatrix}$$

$$R = \begin{pmatrix} 16 \\ 20 \end{pmatrix} \qquad S = \begin{pmatrix} 26,8 & 32,4 \\ 32,4 & 41,2 \end{pmatrix}$$

4. Calculamos la inversa de la matriz P

$$P^{-1} = \frac{1}{10}$$

5. Calculamos el producto de matrices

$$R\,P^{-1}Q = \begin{pmatrix} 25,6 & 32,0 \\ 32,0 & 40,0 \end{pmatrix}$$

6. Calculamos la diferencia de dos matrices

$$\left(S - R\,P^{-1}Q\right) = \begin{pmatrix} 1,2 & 0,4 \\ 0,4 & 1,2 \end{pmatrix}$$

7. Calculamos la inversa de la matriz

$$\left(S - R\,P^{-1}Q\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 0,9375 & -0,3125 \\ -0,3125 & 0,9375 \end{pmatrix}$$

8. Calculamos el producto de matrices

$$P^{-1}Q\,W = \begin{pmatrix} 0,875 & 1,375 \end{pmatrix}$$

9. Calculamos el producto de matrices

$$W\,R\,P^{-1} = \begin{pmatrix} 0,8750 \\ 1,3750 \end{pmatrix}$$

10. Calculamos el producto de matrices

$$Q\,W\,R\,P^{-1} = 41,5$$

11. Calculamos la suma de matrices

$$I_s + Q\,W\,R\,P^{-1} = 42,5$$

12. Calculamos el producto de matrices

$$P^{-1}\left(I_s + Q\,W\,R\,P^{-1}\right) = 4,25$$

13. Calculamos el producto de matrices

$$\overline{x}^T \left(\chi^T \chi \right)^{-1} = (-2,5 \quad 0,5 \quad 1,0)$$

14. Calculamos el producto de matrices

$$\left(\chi^T \chi\right)^{-1} \overline{x} = \begin{pmatrix} -2,5 \\ 0,5 \\ 1,0 \end{pmatrix}$$

15. Calculamos la suma

$$\frac{1}{n} + \overline{x}^T \left(\chi^T \chi \right)^{-1} \overline{x} = 3$$

En estos momentos estamos en condiciones de construir la inversa de la matriz real simétrica definida positiva.

$$\left(X^T X\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 3,0000 & 2,5000 & -0,5000 & -1,000 \\ 2,5000 & 4,2500 & -0,8750 & -1,3750 \\ -0,5000 & -0,8750 & 0,9375 & -0,3125 \\ -1,0000 & -1,3750 & -0,3125 & 0,9375 \end{pmatrix}$$

CONCLUSIONES

A la vista de los tres procedimientos expuestos en este artículo para obtener la inversa de una matriz real simétrica definida positiva, es obvio que con el primer procedimiento (ejercicio 1) tenemos que hacer menos operaciones que con el segundo (ejercicio 2) y el tercero (ejercicio 3). A su vez, con el tercer procedimiento tenemos que hacer menos operaciones que con el segundo, ya que la matriz a invertir en lugar de ser de orden p+1 es de orden p. Por otra parte, hemos de indicar que si el orden de la matriz real cuadrada, regular y triangular inferior no es superior a 40, el procedimiento que proponemos en este artículo presenta resultados análogos con respecto al resto de los programas ya certificados.

Un resultado de interés es que la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden k, regular y triangular inferior que está contenida en el libro de Graybill (5) es un caso particular de la deducida por nosotros en este artículo.

ANEXO I

Factorización y determinante de una matriz real simétrica definida positiva

Si A es una matriz real simétrica definida positiva, existe —al menos— una matriz cuadrada de orden n, regular y triangular inferior L tal que,

$$A = L\, L^T$$

donde,

$$\begin{gathered} L: \textit{es una matriz cuadrada de orden n, regular y} \\ \textit{triangular inferior} \\ l_{ij} = 0 \quad \textit{para}\; i < j \end{gathered}$$

$$\begin{gathered} L^T: \textit{es una matriz cuadrada de orden n, regular y} \\ \textit{triangular superior.} \\ l_{ij} = 0 \quad \textit{para}\; i > j \end{gathered}$$

Si los elementos de la diagonal de L son todos positivos

$$l_{11} > 0$$

la factorización,

$$A = L\, L^T$$

es única.

El programa F03AEE que realiza tanto la factorización con el cálculo del determinante de la matriz real simétrica definida positiva está contenido en NAG Fortran Library.

PROCEDIMIENTO

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$\downarrow$$

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{\sqrt{a_{11}}} \quad , \; i = 2, 3, ..., n$$

$$\downarrow$$

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{k=i-1} l_{ik}^2} \; , i = 2, 3, ..., n$$

$$\downarrow$$

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{k=j-1} l_{ik}\, l_{jk} \right) \; , i > j \;\; y \;\; j = 2, 3, ...n$$

$$l_{ij} = 0, \;\; i < j \;\; y \;\; j = 2, 3, ...n$$

El determinante de A se calcula de la siguiente manera,

$$Det(A) = \left(\prod_{i=1}^{i=n} l_{ii} \right)^2$$

El programa F03AEE que realiza tanto la factorización como el cálculo del determinante de la matriz real simétrica definida positiva está contenido en NAG Fortran Library.

ANEXO II

Factorización y determinante de una matriz real cuadrada de orden n, regular

Si B es una matriz real cuadrada de orden n, regular, se puede descomponer en producto de dos matrices cuadradas de orden n, regulares y triangulares, tal como mostramos a continuación,

$$B = L\,U$$

donde,

L : es una matriz cuadrada de orden n, regular y triangular inferior

$$l_{ij} = 0 \quad \text{para } i < j$$

U : es una matriz cuadrada de orden n, regular y triangular superior con la siguiente restricción,

$$u_{ij} = 0 \quad \text{para } i > j$$

$$\text{restricción}: u_{ii} = 1 \quad \text{para } i = j, \quad i = 1, \ldots, n$$

El programa F03AFF que realiza tanto la factorización como el cálculo del determinante de una matriz real cuadrada de orden n, regular, está contenido en NAG Fortran Library.

PROCEDIMIENTO

$$l_{i1} = b_{i1} \qquad u_{1j} = \frac{b_{1j}}{b_{11}}$$

$$l_{i2} = b_{i2} - l_{i1}\,u_{12}$$

$$u_{2j} = \frac{1}{l_{22}}\left(b_{2j} - l_{21}\,u_{1j} \right)$$

$$l_{ii} = b_{ii} - \sum_{k=1}^{k=i-1} l_{ik}\,u_{ki} \dashrightarrow l_{nn}$$

$$u_{ij} = \frac{1}{l_{ii}}\; b_{ij} - \left(\sum_{k=1}^{k=i-1} l_{ik}\,u_{kj} \right)$$

$$l_{ij} = b_{ij} - \sum_{k=1}^{k=j-1} l_{ik}\,u_{kj}$$

El determinante de B se calcula de la siguiente manera,

$$Det(B) = \prod_{i=1}^{i=n} l_{ii}$$

El programa F03AFF que realiza tanto la factorización como el cálculo del determinante de una matriz real cuadrada de orden n, regular, está contenido en NAG Fortran Library.

ANEXO III

Número y orden de los determinantes de las sub-matrices de L cuando L es de orden 2, 3, 4, 5, 6 y 7

Para el cálculo de la inversa de L tenemos que calcular un conjunto de determinantes constituidos por las sub-matrices de L. El número de determinantes para calcular será función del orden de la matriz L.

A título ilustrativo hemos construido una tabla que nos indica el número de sub-matrices de L que tenemos que calcular su determinante en función del orden de la matriz L.

TABLA I

Orden de las sub-matrices de L	Orden de la matriz L					
	2	3	4	5	6	7
1	1	2	3	4	5	6
2		1	2	3	4	5
3			1	2	3	4
4				1	2	3
5					1	2
6						1

Esta tabla se interpreta de la siguiente manera.

Si la matriz L es de orden 7, hay que calcular:

— 6 determinantes de sub-matrices de L de orden 1.

— 5 determinantes de sub-matrices de L de orden 2.

— 4 determinantes de sub-matrices de L de orden 3.

— 3 determinantes de sub-matrices de L de orden 4.

— 2 determinantes de sub-matrices de L de orden 5.

— 1 determinante de la sub-matriz de L de orden 6.

Los determinantes de las sub-matrices de L de orden p ($p>1$) los calculamos haciendo uso de la factorización

$$LU$$

de una matriz real cuadrada de orden n, regular.

ANEXO IV

Diversas formas para expresar la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques

No todos los investigadores provenientes del dominio del Análisis Estadístico Multidimensional expresan la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques de la misma manera para describir los métodos estadísticos contenidos en sus libros. Entre las diversas formas en que puede encontrarse la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques, retenemos la más útil para nuestro caso concreto.

A continuación mostramos una lista de cinco grupos de investigadores que proponen diferentes formas para expresar la fórmula general de la inversa de una matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques.

Grupo I: Guerrien (8), Golberger (9), Leamer (10).

Grupo II: Audroing (11), Graybill (5), Brand y Sherlock (12).

Grupo III: Tomassone (13), Johnston (14), Anderson (15).

Grupo IV: Lebart, Morineau, Fénelon (16).

Grupo V: Chevalier, Morice, Nakache (17).

Nosotros hemos partido de la fórmula general propuesta por el Grupo I por considerarla la más útil para la ejecución de los cálculos.

La fórmula general de la inversa de la matriz real cuadrada de orden n, regular particionada en bloques que expresamos de la siguiente manera,

$$A = \begin{pmatrix} P & Q \\ R & S \end{pmatrix}$$

donde,

A: es una matriz cuadrada de orden n regular.

P: es una matriz cuadrada de orden s regular.

S: es una matriz cuadrada de orden n-s regular,

es,

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} P^{-1}\left(I_s + QWRP^{-1}\right) & -P^{-1}QW \\ -WRP^{-1} & W \end{pmatrix}$$

donde,

$$W = \left(S - RP^{-1}Q \right)^{-1}$$

Si la matriz particionada en bloques de partida adopta la forma siguiente,

$$A = \begin{pmatrix} P & 0 \\ R & S \end{pmatrix}$$

donde,

P: es un escalar

0: es una matriz de dimensiones (1 x (n-1))

R: es una matriz de dimensiones ((n-1) x1)

S: es una matriz cuadrada de orden (n-1) regular.

n: es el número de filas de la matriz A.

su inversa es

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} P^{-1} & 0 \\ -S^{-1}RP^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix}$$

BIBLIOGRAFÍA

(1) Cermeño Carrasco, C.; Díaz-Llanos Sáinz-Calleja, Fco. J. (2000). *Efecto de la eliminación progresiva de individuos atípicos en la regresión por etapa.* Anales de la Real Academia de Doctores de España. Vol. 4, pp. 267-297.

(2) Bourbonnais, R. (1998). *Économétrie*, 2.ª édition. Dunod.

(3) Banachiewicz, T. (1938). *Principes d'une nouvelle technique de la méthode des moindres carrés. Comptes-rendus mensuels des sciences mathématiques et naturelles.* Akademija umiejetnosci, krakow, Jan.

(4) Faddeeva, V. N. (1973). *Métodos de cálculo de Álgebra Lineal.* Segunda edición. Paraninfo.

(5) Graybill, F. A. (1969). *Introduction to matrix with applications in statistics.* Wadsword Publishing Company, Inc. Belmont, California.

(6) Lascaux, P., Theodor, R. (1986). *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingenieur.* Tome 1. Masson.

(7) Rivaud, J. (1978). *Algèbre Linéaire.* Librairie Vuilbert.

(8) Guerien, B. (1980). *Algèbre Linéaire pour economistes.* Economica.

(9) Golberger, A. S. (1964). *Econometric Theory.* John Wiley & Sons, Inc.

(10) Learmer, E. E. (1983). *Búsqueda de especificación. Inferencia* ad-hoc *con datos no experimentales.* Editorial Desclée de Brauwer, S. A.

(11) Audroing, J. F. (1976). *Mathématiques linéaires.* Ed. Economica.

(12) Brand, T., Sherlock, A. (1970). *Matrices. Pure and Applied.* Edward Arnold.

(13) Tomassone, R. (1980). *Quelques resultats d'analyse matricielle utilisable en analyse multidimensionnelle.* C.N.R.Z. Laboratoire de Biometrie, 78350-Jouy-en-Josas. Université Paris-Sud. Départament Mathématiques 91405-Orsay. Document 75/06. n.º math: 122.

(14) Jhonston, J. (1977). *Métodos de Econometría.* Ed. Vicens-Vives.

(15) Anderson, T. W. (1984). *An introduction to multivariable statistical analysis.* Second édition. John Wiley & Sons, Inc.

(16) Lebart, L.; Morineau, M.; Fenelon, J. P. (1979). *Traitement des données statistiques. Méthodes et programmes.* Dunod.

(17) Chevalier, A.; Morice, V., Nakache, J. P. (1981). *Exercices commentés de mathématiques pour l'analyse statistique des données.* Ed. Dunod.